

J.R
15/01/2018

Méthodes numériques liées à la distribution d'alumine dans
une cuve d'électrolyse d'aluminium

Thomas Hilke

12 janvier 2018

Table des matières

Notations	5
1 Introduction	7
1.1 Procédé de Hall-Héroult	7
1.2 But du travail	11
1.3 Organisation du document	11
I Transport et dissolution de particules d'alumine	13
2 Particules d'alumine dans un bain électrolytique	15
3 Populations de particules	17
II Approximation d'écoulement dans le bain électrolytique	19
4 Une méthode numérique pour le calcul de l'écoulement de Stokes	21
Bibliographie	23



Notations

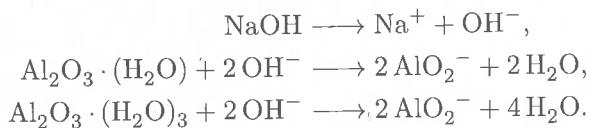
Symbol	Description
--------	-------------

Chapitre 1

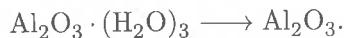
Introduction

L'aluminium est un métal léger qui figure parmi les éléments métalliques les plus abondant sur Terre, avec une proportion d'environ 8% de la masse totale de la croûte terrestre. Malgré tout il n'apparaît jamais sous forme métallique en raison de sa forte affinité avec l'oxygène, et se trouve sous forme d'oxyde d'aluminium Al_2O_3 (appelé également alumine). L'alumine est un constituant de différents minéraux, mais seul la bauxite est utilisée pour la production de l'aluminium.

La bauxite est constituée principalement par de l'oxyde d'aluminium hydraté, de silicate, d'oxyde de fer et d'impuretés en plus faibles proportions. Elle provient essentiellement d'Australie, de Chine et du Brésil. Par exemple, ces trois pays combinés ont extrait plus de 179 millions de tonnes de bauxite au cours de l'année 2014. Le procédé de Bayer permet ensuite d'isoler et purifier l'alumine de la bauxite. Après concassage et broyage du minerais, la soude caustique chaude dissout l'alumine :



Les autres composés restent insolubles, et sont éliminés par filtration. En refroidissant le filtrat, de l'hydrate d'alumine est récupéré par précipitation. Finalement, cet hydrate d'alumine est calciné pour éliminer les molécules d'eau :

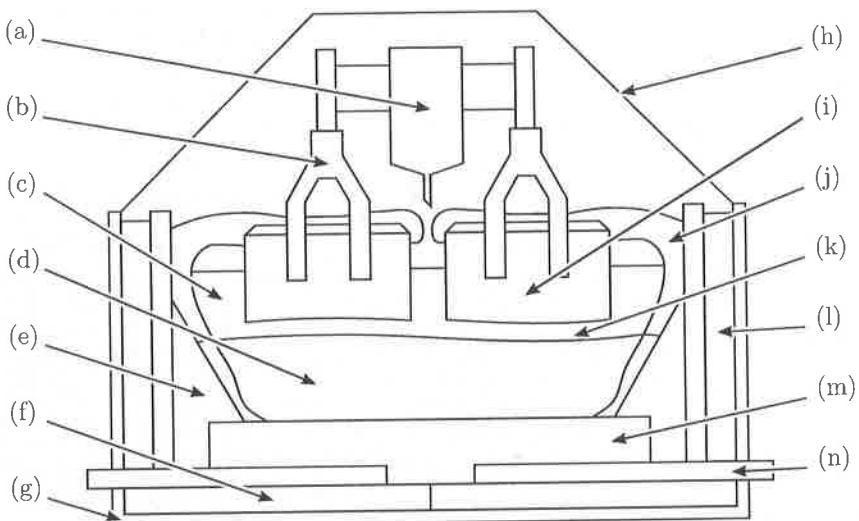


La deuxième partie du processus consiste à inverser la réaction d'oxydation pour finalement obtenir de l'aluminium sous forme métallique. C'est cet aspect du procédé, qui porte les noms de ses deux inventeurs Paul Héroult et Mark Hall, qui nous intéresse dans ce travail et que nous décrivons plus en détail dans le paragraphe qui suit.

1.1 Procédé de Hall-Héroult

On donne dans cette section un bref aperçu du procédé de Hall-Héroult. Le lecteur intéressé peut trouver de plus amples informations dans le travail de [Grj77].

Le procédé consiste à dissoudre l'oxyde d'aluminium dans un bain composé de cryolite,



- | | |
|---------------------------------------|--------------------------------------|
| (a) Injecteur de dose d'alumine | (h) Couvercle |
| (b) Broches de connections des anodes | (i) Anodes |
| (c) Bain électrolytique | (j) Talus, croûte de bain solidifiée |
| (d) Aluminium métallique liquide | (k) Interface bain-métal |
| (e) Pâte de brasquage | (l) Isolation réfractaire |
| (f) Isolation réfractaire | (m) Cathode |
| (g) Caisson | (n) Barres bus collectrices |

FIGURE 1.1 – Représentation de la structure des éléments internes d'une cuve d'électrolyse d'aluminium. *Coupe transversale.*

puis à réduire les ions d'aluminium en effectuant l'électrolyse de la solution :



Dans un cadre industriel, la réaction a lieu dans un bain électrolytique contenu dans un récipient dont une coupe verticale schématique est représentée par la figure 1.1. Le bain électrolytique, dont le rôle est de permettre la dissociation des ions Al^{3+} et O^{2-} nécessaire à la réaction d'électrolyse, est essentiellement constitué par de la cryolite ($\text{Na}_3 \cdot \text{AlF}_6$). Un nombre d'additifs sont ajoutés dans le bain afin de ramener la température de fusion de celui-ci à environ 950°C .

Le bain électrolytique est maintenu sous forme liquide *dans* un contenant constitué par une épaisseur de briques réfractaires au niveau des parois verticales et une cathode en carbone au fond. Le tout est soutenu par une structure appelée cuve. Les briques réfractaires jouent le rôle d'isolant thermique d'une part, et protègent le reste de la structure des attaques corrosives de l'électrolyte d'autre part.

(m) La réaction d'électrolyse (1.2) produit de l'aluminium métallique au niveau de la cathode. La température de fusion de l'aluminium étant de 660.3°C , le métal produit est maintenu sous forme liquide. L'aluminium métallique est immiscible dans l'électrolyte. En raison de sa densité supérieure d'environ 10% à celle de l'électrolyte, le métal forme une

nappe au fond de la cuve et recouvre la cathode. C'est le métal liquide qui joue effectivement le rôle de cathode. Le bain électrolytique et le métal forment un système à deux phases séparées par une interface libre.^{(P2) (i)}

Dans une cuve industrielle, l'anode est subdivisée en une série de blocs anodiques d'environ 1m^3 chacun. Les blocs anodiques sont typiquement rangés selon deux rangées parallèles. L'espace qui sépare les deux rangées est appelé canal central. Cette subdivision en blocs anodiques permet d'adapter individuellement la position verticale de chaque bloc, ainsi que de les remplacer individuellement sans perturber l'opération de la cuve.

on court pour
le mettre
sur la
page

L'électrolyte est alimenté en courant électrique à travers les blocs anodiques plongés dans le bain et maintenus dans la partie supérieure de celui-ci par un pont qui sert à la fois de support mécanique et de conducteur électrique. Le courant électrique traverse l'électrolyte, le métal liquide et atteint la cathode en carbone placée au fond de la cuve. Finalement, le courant est conduit en dehors de la cuve à travers des conducteurs horizontaux appelés *barres bus* placés sous la cathode. L'intensité du courant électrique qui traverse une cuve d'électrolyse industrielle peut atteindre 500kA, et jusqu'à 1MA dans les cuves les plus modernes.

Les courants électriques importants qui traversent la cuve d'électrolyse ainsi que les nombreuses cuves voisines dans une usine de production génèrent des champs d'induction magnétique importants. Le passage du courant électrique dans l'électrolyte et le métal en présence du champ d'induction magnétique engendre des forces de Lorentz qui mettent les fluides en mouvement.

Par la réaction d'électrolyse, l'alumine dissoute est transformée en aluminium métallique au niveau de l'interface avec le métal liquide, qui joue le rôle de cathode. Du côté de l'anode, l'électrolyse produit de l'oxygène, qui se récombine immédiatement avec le carbone de l'anode. Le CO_2 qui en résulte forme des bulles millimétriques qui remontent à la surface pour s'échapper. Cette production de CO_2 liée à l'oxydation du carbone provoque l'érosion des anodes au cours du temps. Régulièrement, la position verticale de chaque anode est ajustée pour compenser son érosion. Finalement, chaque anode arrivant en fin de vie doit être remplacée par une anode neuve. Ceci intervient environ une fois par jour et par cuve.

Le mouvement des fluides dans les cuves d'électrolyse est un aspect important pour plusieurs raisons, et qui a déjà fait l'objet de nombreuses études. On peut consulter par exemple les travaux de S. Pain [Pai06], Y. Safa (Safa2009), G. Steiner [Ste09] et S. Flotron [Flo13]. Le bain électrolytique est l'élément du circuit électrique qui est responsable, en raison de sa faible conductivité électrique, de l'essentiel de la production d'énergie thermique par effet Joule. Pour minimiser ces pertes d'énergie thermique, on cherche à minimiser la distance parcourue par le courant électrique entre les anodes et l'interface entre le bain et le métal. Cependant, les mouvements dans les fluides perturbent la forme de l'interface. En particulier, on cherche à tout prix à éviter que le métal entre en contact avec les anodes, et crée un court circuit. Une telle situation, qui risque de déstabiliser le système et perturber les cuves voisines, est à éviter à tout prix. Dans une cuve industrielle moderne, l'écart entre le plan anodique et l'interface, abrégée ACD¹, est de l'ordre de 20mm à 40mm.

★

pourquoi
en gars?

✗

✗

A intervalles réguliers, de l'oxyde d'aluminium sous forme de poudre solide est injecté dans le bain afin de compenser la concentration consommée par la réaction d'électrolyse (1.2). La surface du bain est protégée par une croûte de bain solidifié et de poudre

^{Supérieure}

1. ACD est l'acronyme anglais de *Anode Cathode Distance*

(a) sur la figure 1.1

d'alumine. Pour pouvoir injecter de l'alumine dans le bain, un piqueur perce cette croûte mécaniquement. Pour cette raison, l'injection d'alumine ne peut avoir lieu que de façon discontinue. La poudre est ensuite libérée par l'injecteur par doses d'environ 1kg au niveau de la surface du bain électrolytique, dans le canal central entre les deux rangées d'anodes. (cf figure 1.1)

Le bain électrolytique, maintenu au-dessus de sa température de fusion, est un milieu extrêmement corrosif, y compris pour les structures qui servent à le contenir. Pour allonger la durée de vie des cuves, on cherche à minimiser les surfaces de contact avec le bain liquide. En particulier, on essaye de maintenir une couche de bain solide le long des parois, appelée talus, pour les protéger des attaques corrosives du bain liquide. On y arrive en cherchant un équilibre thermique qui dépend du flux d'énergie au niveau des parois et de la convection de la chaleur produite dans le bain par les mouvements des fluides. Pour ces différentes raisons, une bonne compréhension et maîtrise des écoulements dans une cuve d'électrolyse est essentielle à la bonne opération de celle-ci.

Au moment de l'injection, l'alumine se trouve dans un état cristallin, à une température d'environ 350°C. Lorsque les particules d'alumine entrent en contact avec le bain, une couche de bain solidifié se forme immédiatement à la surface de celles-ci, sont convectées par l'écoulement dans le fluide et chute dans le bain sous l'action de la gravité.

Une fois la couche de bain gelé qui enveloppe les particules refondues, celles-ci se dissolvent peu à peu. Dans certaines conditions, les particules s'agglomèrent et forment des agrégats qui descendent rapidement dans le bain et atteignent l'interface. Si la taille des agrégats est suffisante, il arrive qu'ils pénètrent le métal et terminent leur course au fond de la cuve, risquant de recouvrir peu à peu la cathode et de l'isoler électriquement [GWH16].

La température du bain joue un rôle crucial au niveau du comportement de l'alumine nouvellement injectée. Pour des raisons d'économie d'énergie, le bain est maintenu aussi proche que possible de la température de fusion de la cryolite, avec des surchauffes typiques de l'ordre de 10°C ou moins. Plus cette surchauffe est faible, plus l'impact sur la dissolution de l'alumine est important. Le temps nécessaire pour refondre la couche de bain gelé à la surface des particules augmente lorsque la surchauffe diminue. Dans la limite où la surchauffe est nulle, ce temps devient infini. De plus, la réaction de dissolution de l'alumine cristalline dans le bain est un processus endothermique. Il faut alors fournir une quantité d'énergie thermique non négligeable pour dissoudre les particules. Cette énergie est disponible uniquement si la surchauffe du bain environnant est suffisante.

L'ensemble de la cuve est placée dans un caisson, dont le matériau est choisi pour ses propriétés ferromagnétiques. La présence du caisson permet d'écranter une partie du champ d'induction magnétique et réduire l'intensité de celui-ci dans les fluides. Les forces de Lorentz peuvent ainsi être contrôlées, et diminuer l'intensité des vitesses dans les fluides de la cuve [DFR98], [DFR91]. Le caisson permet également de contrôler plus finement la dissipation thermique sur les bords de la cuve et la formation des talus.

L'ensemble de la partie supérieure de la cuve est recouverte par un couvercle qui limite les dissipations thermiques, permet la collecte des émanations gazeuses potentiellement toxiques résultant de la réaction d'électrolyse, et protège les opérateurs travaillant à proximité.

Il peut exister une partie dite "description des procédés" parmi les parties de la description qui sont être étudiées.

Les références autres que celles de groupe Picasso manquent absolument !!!

les particules

*

*

constitue
l'intérêt du
travail qui
va suivre.les phénomènes sont
étudiés
numériquement
deux à la
fois.

(b) sur fig 1.1

1.2 But du travail

Comme on a pu l'apprécier ci-dessus, l'opération d'une cuve d'électrolyse d'aluminium industrielle est une tâche complexe qui nécessite de maîtriser, entre autre, la production d'énergie thermique par effet Joule et sa dissipation à l'extérieur de la cuve, les écoulements dans les fluides et la répartition de la concentration d'alumine dans le bain.

De fait, l'optimisation de l'exploitation d'une cuve d'électrolyse de Hall-Héroult, tant en terme de consommation énergétique qu'en terme de qualité de métal produit et d'impact sur l'environnement est une tâche qui fait l'objet de recherche et développements s'étalant maintenant sur plus de 100 ans.

Dans cette thèse nous nous intéresserons à la modélisation numérique de certains phénomènes physiques qui interviennent dans le fonctionnement d'une cuve d'électrolyse. La distribution de la concentration d'alumine dissoute dans le bain est un aspect important de l'opération d'une cuve d'électrolyse. Si la distribution de la concentration d'alumine n'est pas suffisamment uniforme, certaines zones seront suralimentées, tandis que d'autres seront sous-alimentées. Dans un cas comme dans l'autre, la réaction d'électrolyse ne peut pas avoir lieu correctement dans ces zones, ce qui tend à déstabiliser l'ensemble du système, péjore le rendement du système et engendre des émanations gazeuses toxiques. Nous aborderons en particulier la modélisation de l'interaction entre la température du bain électrolytique au cours du temps et la dissolution et diffusion de la poudre d'alumine.

Nous proposerons une généralisation du modèle proposé par T. Hofer [Hof11] pour prendre en compte les nouveaux effets évoqués, dans le but d'améliorer son pouvoir de prédiction.

L'état d'une cuve d'électrolyse n'est pas figé : il évolue sans cesse au fil des changements d'anodes, des variations de cadence des injecteurs, ou encore des perturbations des cuves voisines de la série. Le modèle numérique existant, introduit par G. Steiner dans son travail de thèse [Ste09] et implémenté dans le logiciel Alucell, permet d'obtenir une approximation numérique de l'état des écoulements des fluides et de la concentration d'alumine dans une cuve d'électrolyse avec un temps de calcul de l'ordre de 24 à 48h. Il est donc impossible d'utiliser ce modèle pour obtenir des informations sur l'état d'une cuve à chaque instant de sa vie, en fonction de paramètres extérieurs. Dans cette thèse nous proposerons un modèle d'écoulement de fluide et de concentration d'alumine dissoute stationnaire simplifié, qui permet d'obtenir des informations sur l'état d'une cuve dans un laps de temps bien plus court, de l'ordre de la minute.

Les opérateurs des cuves industrielles devraient alors pouvoir tirer parti des prédictions de ce modèle pour contrôler l'état des cuves et agir plus rapidement et de manière mieux informée dans les conditions d'exploitation exceptionnelles.



1.3 Organisation du document

Ce travail se divise en deux parties. Dans la partie I, on considère plusieurs effets physiques liés à la gravité et aux interactions thermiques entre les particules d'alumine et le bain environnant, que l'on exprime sous forme de modèles mathématiques. On propose ensuite une extension du modèle de transport et dissolution d'alumine, introduit dans le travail de thèse de T. Hofer [Hof11], pour tenir compte de l'effet de la gravité sur la trajectoire des particules d'alumine et de l'effet de la température du bain sur leur dissolution. Dans la partie II on s'intéresse à diminuer le coût de calcul de l'écoulement dans le

bain électrolytique et le métal liquide. On propose une méthode numérique basée sur une décomposition en harmoniques de Fourier du problème de Stokes dans la dimension verticale. On propose de plus une méthode pour approximer la distribution de concentration d'alumine dans le bain électrolytique, sans recourir au calcul d'une solution transitoire.

Le paragraphe est à revoir avec une description plus détaillée.

Ex: Le partie I de ce travail concerne plusieurs phénomènes physiques liés à la dissolution de particules d'alumine et de populations de particules d'alumine dans un bain électrolytique. Nous commençons par étudier la solidification et liquéfaction du bain électrolytique autour d'une partie d'alumine de température 80°C injectée dans un bain à 56°C . (Paragraphe I.1.2...)
Puis nous considérons ... (paragraphe I.1.3...
etc.

Première partie

Transport et dissolution de particules d'alumine

Chapitre 2

Particules d'alumine dans un bain électrolytique

Chapitre 3

Populations de particules

Deuxième partie

Approximation d'écoulement dans le bain électrolytique

Chapitre 4

Une méthode numérique pour le calcul de l'écoulement de Stokes

Bibliographie

- [DFR91] Jean DESCLOUX, Michel FLUECK et M.V. ROMERIO. “"Modelling for instabilities in Hall-Heroult cells : Mathematical and numerical aspects"”. In : (jan. 1991), p. 107–110.
- [DFR98] Jean DESCLOUX, Michel FLUECK et M.V. ROMERIO. *"A modelling of the stability of electrolysis cells"*. Jan. 1998. ISBN : 0 582 36926 6.
- [Flo13] Stéphane FLOTRON. “Simulations numériques de phénomènes MHD-thermiques avec interface libre dans l'électrolyse de l'aluminium”. In : 5738 (2013).
- [Grj77] K. GRJOTHEIM. *Aluminium Electrolysis : The Chemistry of the Hall-Héroult Process*. Aluminium-Verlag, 1977. ISBN : 9783870171292.
- [GWH16] Pierre-Yves GEAY, Barry J. WELCH et Pierre HOMSI. “Sludge in Operating Aluminium Smelting Cells”. In : *Essential Readings in Light Metals : Volume 2 Aluminum Reduction Technology*. Sous la dir. de Geoff BEARNE, Marc DUPUIS et Gary TACY. Cham : Springer International Publishing, 2016, p. 222–228. ISBN : 978-3-319-48156-2. DOI : 10.1007/978-3-319-48156-2_32.
- [Hof11] Thomas HOFER. “Numerical Simulation and Optimization of the Alumina Distribution in an Aluminium Electrolysis Pot”. Thèse de doct. 2011.
- [Pai06] Sonia PAIN. “Simulation numerique du mouvement des fluides dans une cellule de Hall-Heroult”. Thèse de doct. 2006.
- [Ste09] Gilles STEINER. “Simulation numérique de phénomènes MHD : Application à l'électrolyse de l'aluminium”. Thèse de doct. 2009.

JR

05.02.2018

Chapitre 2

Particules d'alumine dans un bain électrolytique

{chap:particules}

2.1 Introduction

{sec:particle-introduction}

Au cours de l'opération d'une cuve d'électrolyse, de l'oxyde d'aluminium doit être injecté dans le bain électrolytique afin de compenser l'alumine dissoute qui est consommée par la réaction d'électrolyse.

En raison de la faible surchauffe¹ du bain, la surface de celui-ci est recouverte, en tout temps, par une croûte solide. Cette croûte est principalement constituée par de l'électrolyte solidifié. Sa présence est désirable, elle joue le rôle d'isolant thermique, protège la structure supérieure de la cuve des éclaboussures et facilite la canalisation des émanations gazeuses.

Cependant, la présence de la croûte limite l'accès à la surface du bain, et en particulier, l'injection d'alumine nécessite la mise en place d'un mécanisme qui permette de la percer. Ces dispositifs appelés piqueurs, percent mécaniquement des ouvertures circulaires dans la croûte en plusieurs endroits et à intervalles réguliers et maintiennent des accès libres à la surface du bain.

Ces accès permettent à des injecteurs de déposer, à la surface du bain, des doses de poudre d'oxyde d'aluminium à intervalles réguliers. Cette poudre est constituée de particules grossièrement sphériques, sous forme cristalline et dont la température Θ_{Inj} se situe entre 100°C et 150°C. Le diamètre des particules est pour la plupart compris entre 20µm et 100µm. Dans une situation idéale, après leur injection dans le bain, les particules se dispersent dans celui-ci et se dissolvent peu-à-peu tout en étant transportées par l'écoulement des fluides. Cette alumine dissoute vient contribuer à la concentration d'alumine dissoute. Les conditions d'exploitation des cuves d'électrolyse modernes sont de plus en plus dépendantes d'une dissolution rapide et uniforme des particules dans l'électrolyte. Malheureusement, dans un système industriel réel, de nombreux phénomènes viennent entraver le bon déroulement de ce processus.

Par exemple, il arrive fréquemment que les points d'injections aménagés par les piqueurs se bouchent [Dio+17]. Les raisons précises pour lesquelles un accès se bouche sont encore mal comprises. Une telle situation, une fois identifiée, nécessite de prendre des mesures particulières pour permettre à l'alumine d'atteindre l'électrolyte. Ensuite, lorsqu'une

1. La surchauffe du bain électrolytique est définie comme la différence entre la température du bain et la température du liquidus Θ_{Liq} .

18 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

dose d'alumine est déposée à la surface du bain, les particules ont tendance à s'agglomérer et former de petit radeau qui flottent et se maintiennent à la surface du bain ([Das15a],[Kas+17]). Par rapport à l'alumine qui se disperse immédiatement dans le volume du bain, les particules qui constituent ces radeaux sont beaucoup plus difficile à dissoudre. De plus, lorsque ces radeaux coules ils peuvent, selon leur masse et leur taille, pénétrer dans la couche de métal et se retrouver au fond de la cuve au niveau de la cathode. Il forment alors des boues qui isolent électriquement la cathode, et provoque une usure mécanique prématuée.

Dans ce travail, nous nous intéresserons à trois aspects distincts liés au transport des particules d'alumine dans le bain électrolytique et à leur dissolution. Dans chacun des cas, nous supposerons que les particules sont suffisamment dispersées dans le fluide pour s'autoriser à considérer des particules individuelles. En particulier, on négligera toutes interaction, directes ou indirectes par l'intermédiaire du bain, entre les particules présentes dans ledit bain.

Premièrement, nous nous pencherons sur les phénomènes thermiques à proximité des particules immédiatement après leur injection, et en particulier à la formation et refonte d'une couche de bain solidifiée à la surface des particules. Tant qu'elle est présente, la couche de gel empêche la dissolution de la particule. Nous proposerons un modèle mathématique qui décrive l'évolution de la température dans une particule et dans l'électrolyte environnant, et la position du front de transition de phase. Nous utiliserons un modèle numérique pour estimer le temps nécessaire à la refonte de la couche de gel qui se forme typiquement à la surface des particules après leur injection.

Ensuite, nous nous intéresserons au rôle de la température du bain sur la capacité de dissolution des particules d'alumine. Nous proposerons un modèle qui décrive la dissolution, c'est-à-dire l'évolution du rayon d'une particule en fonction de sa surface de contact avec le bain, de la concentration et de la température locale du bain. On en dérivedra un modèle qui décrive l'évolution d'une population de particules caractérisée par leur rayon.

Finalement, nous considérerons l'effet de force de gravité sur la trajectoire des particules. Lorsque les particules d'alumine sont déposées à la surface du bain, celle-ci sont entraînées par le fluide en mouvement par le biais de forces de trainées. De plus, la force de gravité les entraîne vers le fond de la cuve. Dans son travail, T. Hofer [Hof11] a négligé l'effet de la gravité sur le transport des particules dans le bain électrolytique. Nous déterminerons dans ce travail les conditions dans lesquelles cette hypothèse se vérifie.

2.2 Formation de bain gelé

{sec:particle-freeze}

Dans cette section nous détaillons et étudions numériquement les phénomènes thermiques qui sont responsables du temps de latence préalable au début de la dissolution des grains d'alumine dans le bain électrolytique. Dans ce but, on considère un modèle de Stefan pour traiter le problème de la transition de phase dans le bain électrolytique environnant une région de bain solidifiée. Pour approcher numériquement l'évolution de la région de transition de phase autour de la particule de bain, on fera l'hypothèse d'une symétrique sphérique de la solution.

Commençons par remarquer que la chaleur spécifique $C_{p,Al}$ de l'alumine solide et sa densité ρ_{Al} conduisent à une capacité thermique massique $\rho_{Al}C_{p,Al}$ presque égale à celle du bain électrolytique $\rho_e C_{p,e}$. L'écart entre ces deux capacités thermiques étant de 32%, seulement, nous remplacerons les caractéristiques thermiques de l'alumine solide par celles

OK. bien !

*
c'est bon
d'être
négligeable!

du bain électrolytique pour simplifier le modèle de solidification et liquéfaction dudit bain autour d'une particule d'alumine solide injectée dans ce bain.

Un modèle thermique avec transition de phase On considère une particule sphérique, placée à l'origine du système de coordonnées, de température initiale $\Theta_{\text{Init}} < \Theta_{\text{Liq}}$, où Θ_{Liq} est la température du liquidus de l'électrolyte. Cette sphère est donc gelée, c'est-à-dire sous forme solide. Le reste de l'espace est occupé par le bain électrolytique à l'état liquide, au repos, et de température initiale $\Theta_{\text{Init}} > \Theta_{\text{Liq}}$.

On s'intéresse à l'évolution de la température au cours du temps dans le système formé par la particule et le bain liquide environnant. En particulier, la température de la particule étant inférieure à la température du liquidus Θ_{Liq} , le bain au voisinage de la surface de la particule va commencer par geler. Puis, la température du système s'équilibrant par diffusion thermique, cette couche de bain va peu à peu fondre. On cherche à déterminer l'évolution au cours du temps de l'épaisseur de cette couche de bain gelée.

On introduit maintenant le cadre nécessaire à l'écriture d'un modèle mathématique qui décrive l'évolution thermique de la particule et du bain.

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un domaine ouvert occupé par du bain électrolytique. On note $\Theta(t, x)$ la température de l'électrolyte au point $x \in \Omega$ et à l'instant $t > 0$.

Soient $\Omega_1(t) \subset \Omega$ le domaine occupé par l'électrolyte dans la phase solide, $\Omega_2(t) \subset \Omega$ le domaine occupé par l'électrolyte dans la phase liquide et $\Gamma(t) \subset \Omega$ la région de transition de phase définie par :

$$\Omega_1(t) = \{x \in \Omega \mid \Theta(t, x) < \Theta_{\text{Liq}}\}, \quad (2.1)$$

$$\Omega_2(t) = \{x \in \Omega \mid \Theta(t, x) > \Theta_{\text{Liq}}\}, \quad (2.2)$$

$$\Gamma(t) = \{x \in \Omega \mid \Theta(t, x) = \Theta_{\text{Liq}}\}. \quad (2.3)$$

Soit ρ_e la densité du bain que l'on suppose constante. En particulier, on suppose que la transition entre les phases solide et liquide a lieu à densité constante. Soient $C_{p,e}$, D_Θ la chaleur spécifique et le coefficient de diffusion thermique du bain, respectivement. Dans la suite, on fera l'hypothèse que les paramètres $C_{p,e}$ et D_Θ sont des fonctions de la température Θ , mais constantes dans chaque phase, c'est-à-dire que

$$C_{p,e}(\Theta) = \begin{cases} C_{p,e,1}, & \text{si } \Theta < \Theta_{\text{Liq}}, \\ C_{p,e,2}, & \text{si } \Theta > \Theta_{\text{Liq}}, \end{cases} \quad \text{et} \quad D_\Theta(\Theta) = \begin{cases} D_{\Theta,1}, & \text{si } \Theta < \Theta_{\text{Liq}}, \\ D_{\Theta,2}, & \text{si } \Theta > \Theta_{\text{Liq}}, \end{cases} \quad (2.4)$$

où $C_{p,e,1}$, $C_{p,e,2}$, $D_{\Theta,1}$, $D_{\Theta,2}$ sont des réels positifs donnés.

La température de l'électrolyte Θ satisfait une équation de la chaleur dans chaque phase :

$$\rho_e C_{p,e,1} \frac{\partial \Theta}{\partial t} - D_{\Theta,1} \Delta \Theta = 0, \quad \forall x \in \Omega_1(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \quad (2.5)$$

$$\rho_e C_{p,e,2} \frac{\partial \Theta}{\partial t} - D_{\Theta,2} \Delta \Theta = 0, \quad \forall x \in \Omega_2(t), \quad \forall t \in [0, \infty). \quad (2.6)$$

Soit ν la normale unité à l'interface Γ dirigée vers Ω_2 . Pour toute fonction $g : \Omega_1 \cap \Omega_2 \rightarrow \mathbb{R}$, on note $[g] : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ le saut de la fonction g sur l'interface Γ défini par :

$$[g](x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} g(x + \epsilon \nu) - g(x - \epsilon \nu) \quad \text{sur } \Gamma. \quad (2.7)$$

que la température est
continu, $[\Theta] = 0$, et

20 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

A l'interface $\Gamma(t)$ entre les phases liquide et solide, on suppose que la condition de Stefan est vérifiée. On note $v_\Gamma(t, x)$ la vitesse de l'interface $\Gamma(t)$. La condition de Stefan s'écrit alors :

$$[D_\Theta \nabla \Theta \cdot \nu] = -\Delta H_{sl} v_\Gamma \quad \text{sur } \Gamma(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \quad (2.8)$$

où ΔH_{sl} est l'enthalpie par unité de volume libérée lors de la transition de la phase solide à liquide du bain électrolytique.

La condition (2.8) correspond à un bilan d'énergie thermique au niveau de l'interface entre les phases. Le membre de gauche de la relation (2.8) correspond à la quantité d'énergie absorbée ou libérée par le déplacement du front de solidification, tandis que le membre de droite correspond à la somme des flux d'énergie thermique au niveau du front de solidification.

On suppose donnée une subdivision $\Gamma_N, \Gamma_D \subset \partial\Omega$ telle que $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$ et $\Gamma_N \cup \Gamma_D = \partial\Omega$, et les fonctions $\Theta_D : \Gamma_D \rightarrow \mathbb{R}$ et $\Theta_N : \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R}$. Les équations (2.5), (2.6) et (2.8) sont complétées par les conditions aux limites :

$$\begin{aligned} \Theta(t, x) &= \Theta_{Liq}, & \forall x \in \Gamma(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \\ \Theta(t, x) &= \Theta_D(x), & \forall x \in \Gamma_D(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \\ \frac{\partial \Theta}{\partial \nu}(t, x) &= \Theta_N(x), & \forall x \in \Gamma_N(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \end{aligned} \quad (2.9) \quad (2.10) \quad (2.11)$$

ainsi que par une condition initiale Θ_{Init} appropriée à $t = 0$ pour Θ .

Le problème de Stefan classique consiste à chercher une fonction $\Theta : [0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ et deux sous-domaines Ω_1, Ω_2 qui satisfassent les équations (2.1) et (2.8)-(2.11).

Le lecteur intéressé trouvera une discussion détaillée des différentes formulations des problèmes de Stefan et de leurs analyses mathématiques dans l'ouvrage de J. Hill [Hil87], ainsi que celui de L. I. Rubenstein [Rub71], par exemple.

Formulation faible du problème de Stefan On donne maintenant une forme alternative du problème de Stefan classique formé par les équations (2.5)-(2.11). Cette formulation, qu'on qualifie d'*enthalpique*, remplace le problème de frontière libre du problème de Stefan classique par un problème parabolique non-linéaire dégénéré. L'un des avantages est de ne pas avoir à suivre explicitement l'interface Γ . L'interface Γ est obtenue après calcul par un "post-processing".

Soit $f_s(\Theta)$ la fraction solide du bain électrolytique. La fraction solide est définie par :

$$f_s(\Theta) = \begin{cases} 0 & \text{si } \Theta \geq \Theta_{Liq}, \\ 1 & \text{si } \Theta < \Theta_{Liq}. \end{cases} \quad (2.12)$$

Le comportement de la fonction f_s au voisinage de Θ_{Liq} est représenté sur le graphique de gauche de la figure 2.1.

Les propriétés thermiques du bain électrolytique sont caractérisées par la relation entre la température Θ et l'enthalpie par unité de masse H qui s'exprime de la manière suivante :

$$H(\Theta) = \int_0^\Theta \rho_e C_{p,e} ds + \Delta H_{sl}(1 - f_s(\Theta)), \quad (2.13)$$

où ρ_e est la densité du bain, ΔH_{sl} est l'enthalpie de transition de phase par unité de volume, et f_s la fraction solide du bain en fonction de la température.

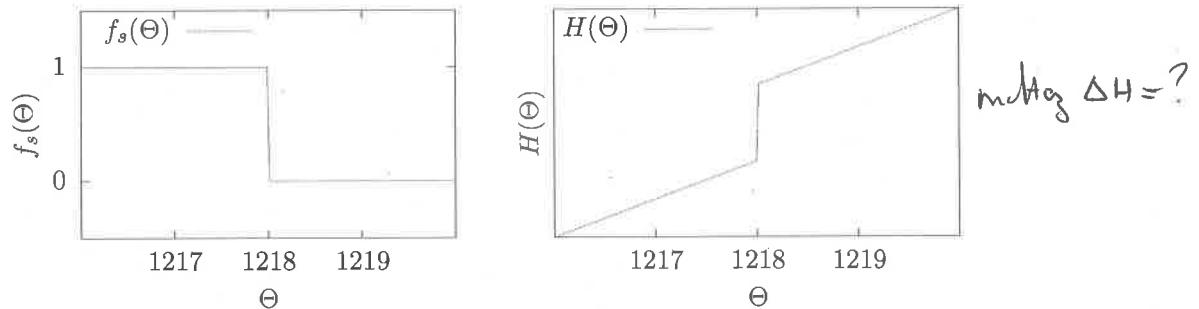


FIGURE 2.1 – Gauche : fraction solide du bain f_s en fonction de la température. Droite : Enthalpie du bain électrolytique en fonction de la température.

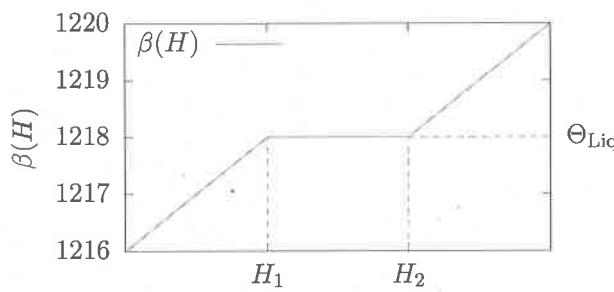


FIGURE 2.2 – Fonction $\beta(H)$. On a noté $H_1 = \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},\rho_e}$ et $H_2 = \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},\rho_e} + \Delta H_{\text{sl}}$ et $\Theta_{\text{Liq}} = 1218\text{K}$.

mettre les valeurs de H_1 et H_2 puisque nous mentionnons la valeur de Θ_{Liq} !

Le graphique de droite sur la figure 2.1 représente le comportement de la fonction $H(\Theta)$ au voisinage de la température de transition Θ_{Liq} .

Bien que la fonction H présente une discontinuité en $\Theta = \Theta_{\text{Liq}}$, elle est strictement monotone, et on peut définir une fonction $\beta(H)$ telle que $\beta(H(\Theta)) = \Theta$ pour tout Θ de la manière suivante :

$$\beta(H) = \begin{cases} \frac{H}{C_{\text{p,e},\rho_e}} & H < \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},\rho_e}, \\ \Theta_{\text{Liq}} & \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},\rho_e} < H < \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},\rho_e} + \Delta H_{\text{sl}}, \\ \frac{H - \Delta H_{\text{sl}}}{C_{\text{p,e},\rho_e}} & \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},\rho_e} + \Delta H_{\text{sl}} < H. \end{cases} \quad (2.14)$$

La fonction β est représentée sur la figure 2.2. Pour les besoins de la représentation, on a choisi ici $\Theta_{\text{Liq}} = 1218\text{K}$ et $\Delta H = ?$.

La formulation enthalpique du problème de Stefan consiste à chercher une paire de fonctions $\Theta, H : [0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ telles que :

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(\nabla \Theta) = 0, \quad \forall (t, x) \in [0, \infty) \times \Omega, \quad (2.15)$$

$$\Theta = \beta(H), \quad \forall (t, x) \in [0, \infty) \times \Omega, \quad (2.16)$$

$$\Theta = \Theta_D, \quad \forall (t, x) \in [0, \infty) \times \Gamma_D, \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \nu} = \Theta_N, \quad \forall (t, x) \in [0, \infty) \times \Gamma_N, \quad (2.18)$$

$$\Theta(0, x) = \Theta_{\text{Init}}(x), \quad \forall x \in \Gamma, \quad (2.19)$$

22 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

Les fonctions Θ_{Init} , Θ_D et Θ_N ont été définies au paragraphe précédent, et β est définie par la relation (2.14). L'équation (2.15) est à comprendre au sens faible. Plus précisément, on peut montrer que si H et Θ sont solutions faibles de (2.15)-(2.16) et si H et Θ sont suffisamment régulières dans $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$ définis par (2.1), alors Θ satisfait (2.5), (2.6) et (2.8).

avec $\Theta = 0$ sur Γ

En effet, soit $\Lambda = [0, \infty) \times \Omega$, soit

$$\Lambda_1 = \{(t, x) \in \Lambda \mid x \in \Omega_1(t), t \in [0, \infty)\}, \quad (2.20)$$

$$\Lambda_2 = \{(t, x) \in \Lambda \mid x \in \Omega_2(t), t \in [0, \infty)\}, \quad (2.21)$$

$$(2.22)$$

et soit Γ_{tx} dans l'espace-temps :

$$\Gamma_{tx} = \{(t, x) \in \Lambda \mid x \in \Gamma(t), t \in [0, \infty)\}. \quad (2.23)$$

Soit ν_{tx} la normale unité à Γ_{tx} dirigée vers Λ_2 , on note ν_t , ν_x les composantes temporelles et spatiales de ν_{tx} , i.e., $\nu_{tx} = (\nu_t, \nu_x)^t$. Soit H , Θ solutions faibles du problème de Stefan (2.15)-(2.16). On note le $v = (H, -D_\Theta \nabla \Theta)^t$. L'équation (2.15) s'écrit donc :

$$\text{Div } v = 0 \quad \text{dans } \Lambda, \quad (2.24)$$

où $\text{Div} = (\frac{\partial}{\partial t}, \nabla)$. Alors si Θ est suffisamment régulière dans $\Lambda_1 \cap \Lambda_2$, Θ est solution forte de (2.5), (2.6). De plus, on doit avoir :

$$[v \cdot \nu_{tx}] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{tx}, \quad (2.25)$$

ce qui est équivalent à (2.8) avec $\nu = \frac{\nu_x}{|\nu_x|}$ et $v_\Gamma = \frac{\nu_t}{\nu_x}$.

Le lecteur intéressé par les aspects fonctionnels liés à cette équivalence peut consulter le travail de thèse de P.-A. Gremaud [GR91], ou l'ouvrage de J. Hill [Hil87].

Schéma de discréétisation en temps Pour obtenir un schéma de discréétisation en temps du problème de Stefan, on part de la formulation enthalpique (2.15)-(2.18), et on suit le travail de M. Paolini et al. [PSV88].

Soit un temps final $T > 0$, $N \in \mathbb{N}^*$ le nombre de pas de temps. Soit $\tau = T/N$ le pas de temps et $t^n = \tau n$. On note L_β la constante de Lipschitz de la fonction β :

$$L_\beta = \sup_H |\beta'(H)|. \quad (2.26)$$

Soit μ un paramètre de relaxation fixé, tel que $0 < \mu \leq 1/L_\beta$.

On note $\Theta^n(x)$ et $H^n(x)$ les approximation de $\Theta(t^n, x)$ et $H(t^n, x)$ $\forall x \in \Omega$. On suppose donnée la densité d'enthalpie initiale h^0 , et on pose $\Theta^0 = \Theta_{\text{Init}}$, $H^0 = H(\Theta_{\text{Init}})$, avec H donnée par (2.13). Pour $0 < n \leq N$, on résout successivement les équations :

$$\Theta^{n+1} - \frac{\tau}{\mu} \text{div} (D_\Theta \nabla \Theta^{n+1}) = \beta(H^n), \quad \text{dans } \Omega, \quad (2.27)$$

$$\Theta^{n+1}(x) = \Theta_D(t^{n+1}, x), \quad \forall x \in \Gamma_D, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \Theta^{n+1}}{\partial \nu}(x) = \Theta_N(t^{n+1}, x), \quad \forall x \in \Gamma_N, \quad (2.29)$$

avec la correction pour la densité d'enthalpie à chaque pas de temps :

$$H^{n+1} = H^n + \mu (\Theta^{n+1} - \beta(H^n)), \quad \text{dans } \Omega. \quad (2.30)$$

Ce schéma numérique basé sur la formule de Chernoff (2.30) a été proposé en premier par M. Paolini [PSV88]. On décrit maintenant la discréétisation en espace des équations (2.27)-(2.29).

On pourra mettre une remarque sur (2.27) =>

$$\mu \frac{\Theta^{n+1} - \beta(H^n)}{\tau} - \text{div} (D_\Theta \nabla \Theta^{n+1}) = 0 \Rightarrow \text{avec (2.30)} \quad \frac{H^{n+1} - H^n}{\tau} - \text{div} (D_\Theta \nabla \Theta^{n+1}) = 0$$

2.2. FORMATION DE BAIN GELÉ

à symétrie sphérique
23

Formulations faibles en coordonnées sphériques La formulation faible du système d'équations (2.27)-(2.29) consiste, $\forall n \leq N$, à chercher une fonction $\Theta^{n+1} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ telle que la relation :

$$\int_{\Omega} \Theta^{n+1} v \, dx + \frac{\tau}{\mu} \int_{\Omega} \nabla \Theta^{n+1} \cdot \nabla v \, dx - \int_{\Gamma_N} \Theta_N^{n+1} v \, d\sigma = \int_{\Omega} \beta(H^n) v \, dx \quad (\text{eq:weak-form-cart-coord})$$

soit vérifiée pour toute fonction test $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ à symétrie sphérique.

On tire parti de la symétrie sphérique du système formé par la particule et le bain environnant en reformulant maintenant le problème (2.31) en coordonnées sphériques.

On note d'un tilde la composante radiale d'une fonction à symétrie sphérique, c'est-à-dire que si une fonction $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ est à symétrie sphérique, alors on note $\tilde{f} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ la fonction telle que

$$\tilde{f}(r) \equiv \tilde{f}\left(\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}\right) = f(x_1, x_2, x_3) \quad \forall (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3. \quad (\text{eq:spherical-symmetry})$$

Le gradient de la fonction f en coordonnées sphériques s'écrit selon \tilde{f} :

$$\Gamma = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \quad \tilde{\nabla} \tilde{f} = \frac{d\tilde{f}}{dr} \hat{e}_r. \quad (\text{eq:spherical-gradient})$$

On se donne un réel $R_{\max} > 0$ et le domaine $\Omega = \mathcal{B}(0, R_{\max}) \subset \mathbb{R}^3$ la boule ouverte de centre 0 de rayon R_{\max} . On suppose maintenant que les données du problème de Stefan (2.15)-(2.18), i.e., les fonctions Θ_D , Θ_N ainsi que la condition initiale Θ_{Init} pour la température, sont à symétrie sphérique, c'est-à-dire qu'il existe des fonctions $\tilde{\Theta}_D$, $\tilde{\Theta}_N$ et $\tilde{\Theta}_{\text{Init}}$ telles que définies par la relation (2.32). *et ne dépendent que de r !*

Sous ces hypothèses, on cherche une solution du problème de Stefan (2.15)-(2.18) en utilisant le schéma de Chernoff (2.27)-(2.30) qui soit également à symétrie sphérique.

La subdivision du bord Γ_D , Γ_N doit également satisfaire la condition de symétrie sphérique. On distingue alors les deux seuls cas possibles : soit le bord de Dirichlet $\Gamma_D = \partial\mathcal{B}(0, R_{\max})$, soit le bord de Neumann $\Gamma_N = \partial\mathcal{B}(0, R_{\max})$.

Dans le premier cas, la formulation faible de l'équation (2.31) en coordonnées sphériques consiste à chercher une fonction $\tilde{\Theta}^{n+1} : [0, R_{\max}] \rightarrow \mathbb{R}$, $\tilde{\Theta}^{n+1}(R_{\max}) = \tilde{\Theta}_D^{n+1}$ telle que :

$$4\pi \int_0^{R_{\max}} \tilde{\Theta}^{n+1} \tilde{v} r^2 \, dr + \frac{4\pi\tau}{\mu} \int_0^{R_{\max}} \frac{d\tilde{\Theta}^{n+1}}{dr} \frac{d\tilde{v}}{dr} r^2 \, dr = 4\pi \int_0^{R_{\max}} \beta(\tilde{H}^n) \tilde{v} r^2 \, dr \quad (\text{eq:weak-form-spher-coord-dirichlet})$$

pour toute fonction $\tilde{v} : [0, R_{\max}] \rightarrow \mathbb{R}$, $\tilde{v}(R_{\max}) = 0$.

Dans le deuxième cas, la formulation faible de l'équation (2.31) en coordonnées sphériques consiste à chercher une fonction $\tilde{\Theta}^{n+1} : [0, R_{\max}] \rightarrow \mathbb{R}$, telle que :

$$4\pi \int_0^{R_{\max}} \tilde{\Theta}^{n+1} \tilde{v} r^2 \, dr + \frac{4\pi\tau}{\mu} \int_0^{R_{\max}} \frac{d\tilde{\Theta}^{n+1}}{dr} \frac{d\tilde{v}}{dr} r^2 \, dr - 4\pi \tilde{\Theta}_N^{n+1}(R_{\max}) \tilde{v}(\max) R_{\max}^2 = 4\pi \int_0^{R_{\max}} \beta(\tilde{H}^n) \tilde{v} r^2 \, dr, \quad (\text{eq:weak-form-spher-coord-neumann})$$

pour toute fonction $\tilde{v} : [0, R_{\max}] \rightarrow \mathbb{R}$. Les facteurs r^2 et 4π qui interviennent dans les intégrants de ces deux dernières formes faibles proviennent respectivement de l'élément de volume en coordonnées sphériques et de l'intégrale sur la surface de la sphère.

$4\pi r^2 dr$

24 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

Discrétisation en espace On considère une subdivision uniforme de l'intervalle $[0, R_{\max}]$, et on note δ taille des éléments de la subdivision. Pour discréteriser les problèmes faibles (2.34), (2.35) on utilise une méthode éléments finis Lagrange, continue et linéaire par morceau. Les intégrales qui interviennent dans les expressions (2.34), (2.35) sont approchées numériquement par une formule de quadrature de Gauss à 3 points sur chaque intervalle $[r_i, r_{i+1}]$.

Il fait encore des choses sur (2.30). Comment va-t-il faire ?

Un test exact du problème de Stefan à symétrie plane. On propose de valider l'implémentation du schéma numérique de discréterisation des formes faibles (2.34), (2.35) et du schéma de discréterisation en temps (2.27)-(2.30) en étudiant la convergence de l'erreur entre une solution exacte du problème de Stefan classique et son approximation numérique.

Un certain nombre de solutions exactes du problème de Stefan classique sont connues. On décrit à présent l'une d'elles, découverte en premier par J. Neumann. Cette solution a l'avantage de correspondre à une situation physique que l'on peut facilement interpréter.

Si, au lieu de définir une sphère, nous prenons une symétrie plane, i.e. \tilde{f} de (2.32) est remplacée par $\tilde{f}(x_1, x_2, x_3) = \tilde{f}(x_1)$, alors il suffit de changer de variables et de supprimer x^2 dans les intégrales figurant dans (2.34), (2.35)

On considère le problème de Stefan classique formé par les équations (2.5)-(2.6), et on fixe les données de la manière suivante. On fixe $C_{p,e}(\Theta) = 1$ et $D_\Theta(\Theta) = 1 \forall \Theta \in \mathbb{R}$, $\rho_e = 1$, $\Delta H_{sl} = 1$ et $\Theta_{Liq} = 0$. On s'intéresse à la température dans un matériau qui occupe la demi-droite positive, c'est-à-dire que $\Omega = \mathbb{R}_+$.

On choisit la condition initiale suivante pour la température Θ :

$$\Theta(0, x) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}_+, \quad (2.36)$$

et la condition aux limites de Dirichlet sur le bord $\Gamma_D = \{0\}$:

$$\Theta(t, 0) = -1, \quad \forall t > 0. \quad (2.37)$$

$$\rightarrow \lim_{x \rightarrow 0} \Theta(t, x) = 0 \quad \Theta' = \frac{d\Theta}{dx} ?$$

On note $X(t) > 0$ la position du front de solidification à l'instant t . Dans ces conditions, on peut montrer [Hil87] par un calcul algébrique que la solution des équations (2.5)-(2.8) s'écrit :

$$X(t) = \sqrt{2\gamma t},$$

$$\Theta(t, x) = -\gamma \int_{x/\sqrt{2\gamma t}}^1 \exp\left(\frac{\gamma(1-\xi^2)}{2}\right) d\xi, \quad \forall (t, x) \in [0, \infty) \times [0, X(t)], \quad (2.38)$$

$$\Theta(t, x) = 0, \quad \forall (t, x) \in [0, \infty) \times [X(t), \infty), \quad (2.39)$$

où on a noté γ la constante réelle définie comme la solution de l'équation transcendante :

$$\gamma \int_0^1 \exp\left(\frac{\gamma(1-\xi^2)}{2}\right) d\xi = 1. \quad (2.40)$$

On trouvera les détails de la dérivation de cette solution, entre autres, dans l'ouvrage de J. Hill [Hil87].

On calcule une approximation numérique de γ à l'aide d'une itération de Newton, implémentée avec le logiciel MatLAB®. On obtient

$$\gamma = 0.768955. \quad (2.42)$$

La solution (2.39)-(2.40) pour la température Θ s'écrit de manière explicite en vue de son évaluation numérique sous la forme suivante :

$$\Theta(t, x) = \begin{cases} -\exp\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}} \left(\operatorname{erf}\frac{\gamma}{2} - \operatorname{erf}\frac{x}{2\sqrt{t}}\right), & \text{si } x \leq \sqrt{2\gamma t}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.43)$$

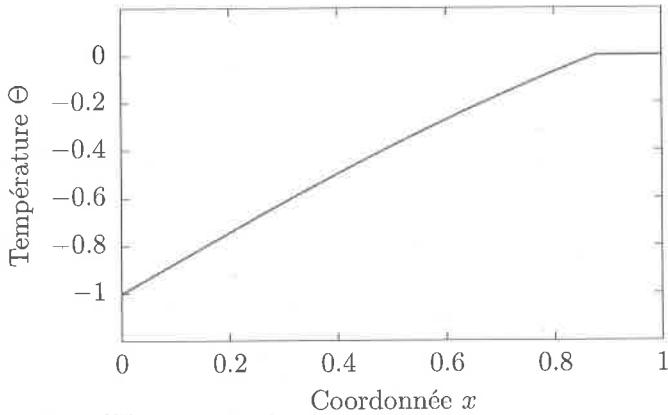


FIGURE 2.3 – Solution exacte de Neumann du problème de Stefan classique évaluée à $t = 0.5$ sur l'intervalle $[0, 1] \subset \mathbb{R}_+$.

où la fonction $\text{erf} : \mathbb{R} \rightarrow (-1, 1)$ est la fonction d'erreur standard définie par :

$$\text{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-s^2) \, ds. \quad (2.44)$$

La solution exacte (2.43) est représentée sur la figure 2.3 à l'instant $t = 0.5$, avec γ donné par la relation (2.42).

D'un point de vue physique, la solution exacte de Neumann correspond à la situation suivante. Un matériau, qui présente une transition entre les phases solide et liquide à $\Theta_{\text{Liq}} = 0$, occupe le demi espace $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 > 0\}$. Ce matériau est initialement dans l'état liquide à la température $\Theta = \Theta_{\text{Liq}}$. Au temps initial, on le met en contact sur le bord $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 = 0\}$ avec un réservoir thermique à température constante $\Theta = -1$. Au cours de l'évolution temporelle, un front de transition de phase, de liquide à solide, se propage dans le matériau. Pour des raisons de symétrie, le front de transition reste en tout temps parallèle au bord $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 = 0\}$.

On utilisera cette solution exacte dans la suite pour valider le schéma de discréttisation des équations (2.15)-(2.18), que l'on décrit maintenant.

Validation numérique Pour valider l'implémentation du schéma numérique (2.27)-(2.30), on évalue la convergence de l'erreur entre la solution exacte définie par la relation (2.43) et Θ_δ^N , l'approximation de la température à l'instant T . Remarquons que puisque la solution de Neumann correspond à un problème spatial avec une symétrie plane, on omet les facteurs r^2 dans la forme faible (2.34). On fixe $\mu = L_\beta = 1$. On choisit $\Omega = [0, 1] \subset \mathbb{R}_+$ et $T = 0.5$. On impose des conditions aux limites de Dirichlet sur le bord de Ω , i.e., $\Gamma_D = \{0, 1\}$. On se donne $\Theta_D(0) = -1$ et $\Theta_D(1) = 0$. On choisit le pas de temps τ dans l'intervalle $[3.9 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-3}]$, et $\delta = O(\tau)$.

On constate sur la figure 2.4 que l'erreur L^2 entre la solution exacte et l'approximation numérique converge vers 0, avec un ordre approximatif $O(h^{3/4})$.

Formation de gel autour d'une particule Dans cette partie, on applique la méthode numérique (2.27)-(2.29) au calcul de la formation de gel autour d'une particule de bain

(ce qui compte à mon avis, c'est l'erreur entre la solution exacte et $\beta(H^u)$) ! $\| \Theta(T, x_i) - \beta(H^u(T, x_i)) \|_{L^2(\cdot)}$? Comment calculer $H^u(T, x_i)$?

26 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

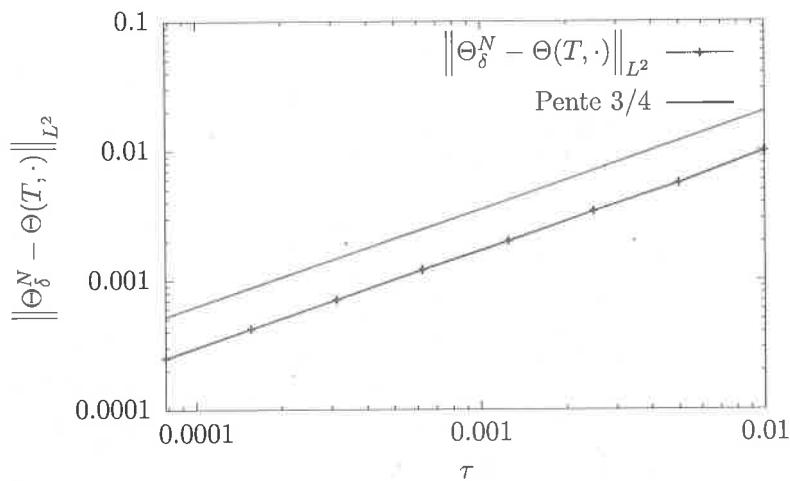


FIGURE 2.4 – Erreur L^2 entre la solution exacte de Neumann et l'approximation numérique.

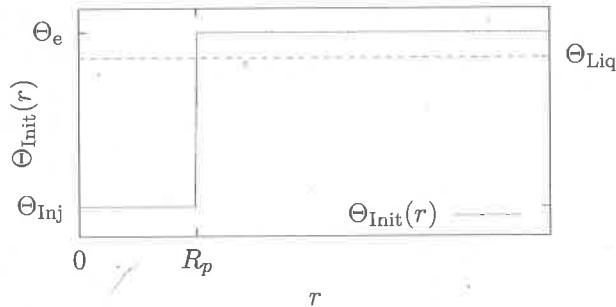
Θ_δ^N

Que vont je faire et exemple?



Mettre en P25

gelé. On donne dans le tableau 2.1 la valeur des différents paramètres physique liés aux propriétés thermiques du bain électrolytique.



couche

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10

FIGURE 2.5 -- Température initiale du système formé par la particule de bain gelé placée à l'origine du système de coordonnées, et du bain électrolytique environnant.

Un test à symétrie sphérique

Soit R_p le rayon de la particule placée à l'origine du système de coordonnées et soit $\Theta_{Inj} \in \mathbb{R}$ la température à laquelle se trouvent les particules d'alumine au moment de leur injection dans la cuve. Soit Θ_e la température du bain électrolytique. La condition initiale du système formé par la particule et le bain environnant est définie par :

$$\Theta_{Init}(r) = \begin{cases} \Theta_{Inj} & \text{si } r < R_p, \\ \Theta_e & \text{si } r \geq R_p, \end{cases} \quad \forall r \in \mathbb{R}_+. \quad (2.45)$$

{eq: initial-temperature}

La figure 2.5 représente la température initiale au voisinage de la particule. En dehors de la particule, la température du bain est suffisante pour que celui-ci soit dans la phase liquide. Cependant, on suppose que le bain liquide est au repos en tout temps.

On note R_f la distance entre l'origine et la position du front de solidification, définie par la relation :

$$\beta(\tilde{H}(t, R_f(t))) = \Theta_{Liq}. \quad (2.46)$$

TABLE 2.1 – Paramètres physiques qui interviennent dans le phénomène de formation de gel autour de particules.

(table:freeze-zone-physical-parameters)

Quantité	Valeur	Unité	Description
ρ_e	2130	kg m^{-3}	Masse volumique du bain électrolytique
$C_{p,e,1}$	1403	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Chaleur spécifique de l'électrolyte dans la phase solide
$C_{p,e,2}$	1861.3	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Chaleur spécifique de l'électrolyte dans la phase liquide
ΔH_{sl}	5.508×10^5	J kg^{-1}	Chaleur latente de transition de phase solide-liquide
Θ_{Inj}	423.15	K	Température de la particule de bain gelé au moment de l'injection
Θ_{Liq}	1223.15	K	Température du liquidus de l'électrolyte
D_Θ	2	$\text{J s}^{-1} \text{m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Conductivité thermique de l'électrolyte

L'épaisseur de la couche de bain solidifiée R_g est définie par la relation :

$$R_g(t) = R_f(t) - R_p. \quad (2.47)$$

On définit alors le temps de latence $T_{Lat}(R_p) > 0$, le temps nécessaire à ce que l'épaisseur de bain solidifié atteigne à nouveau zéro :

$$R_g(T_{Lat}) = 0 \quad (2.48)$$

On considère une particule de bain solidifié de rayon initial $R_0 = 40\mu\text{m}, 60\mu\text{m}$ et $80\mu\text{m}$. La surchauffe du bain électrolytique est définie ici comme la différence entre la température initiale du bain Θ_e et la température de liquidus Θ_{Liq} . La figure 2.6 présente l'évolution du rayon de la particule pour trois surchauffes différentes du bain électrolytique environnant.

On constate que le temps nécessaire à refondre le bain gelé diminue avec la surchauffe. De même, le temps de refonte diminue avec la taille de la particule.

La température initiale de la particule est $\Theta_{Inj} = 423.15\text{K}$. Dans le cas le plus défavorable où $\Theta_{Liq} = 2.5\text{K}$ et $r_0 = 80\mu\text{m}$, le temps nécessaire pour refondre entièrement la couche de gel est de l'ordre de 120ms.

Dans les calculs présentés ici, on a fait plusieurs hypothèses simplificatrices. On a supposé que le fluide environnant est au repos, ce qui n'est certainement pas le cas dans une cuve d'électrolyse industrielle. Les forces de Lorentz et la formation de bulles de gaz agitent les fluides, et créent des turbulences qui sont, entre autres, de l'échelle des particules [Roc16]. Une agitation de l'électrolyte au voisinage d'une particule accélère le transport de l'énergie thermique, et tend à accélérer la refonte du bain gelé.

Pour des particules d'alumine suffisamment isolées dans le bain électrolytique suite à leur injection, on conclut que les temps caractéristiques du temps de latence dû à la présence de gel à la surface des particules sont largement inférieurs à la seconde. De plus, les phénomènes précités d'agitation du fluide et de chute verticale des particules, négligés dans ce modèle, tendent à diminuer ces temps caractéristiques.

Pour ces raisons, dans la suite de ce travail on négligera la formation de gel à la surface des particules d'alumine. Cependant, selon les recommandations de V. Dassylva-Raymond

certaines mesures ?
(ou autres méthodes?)

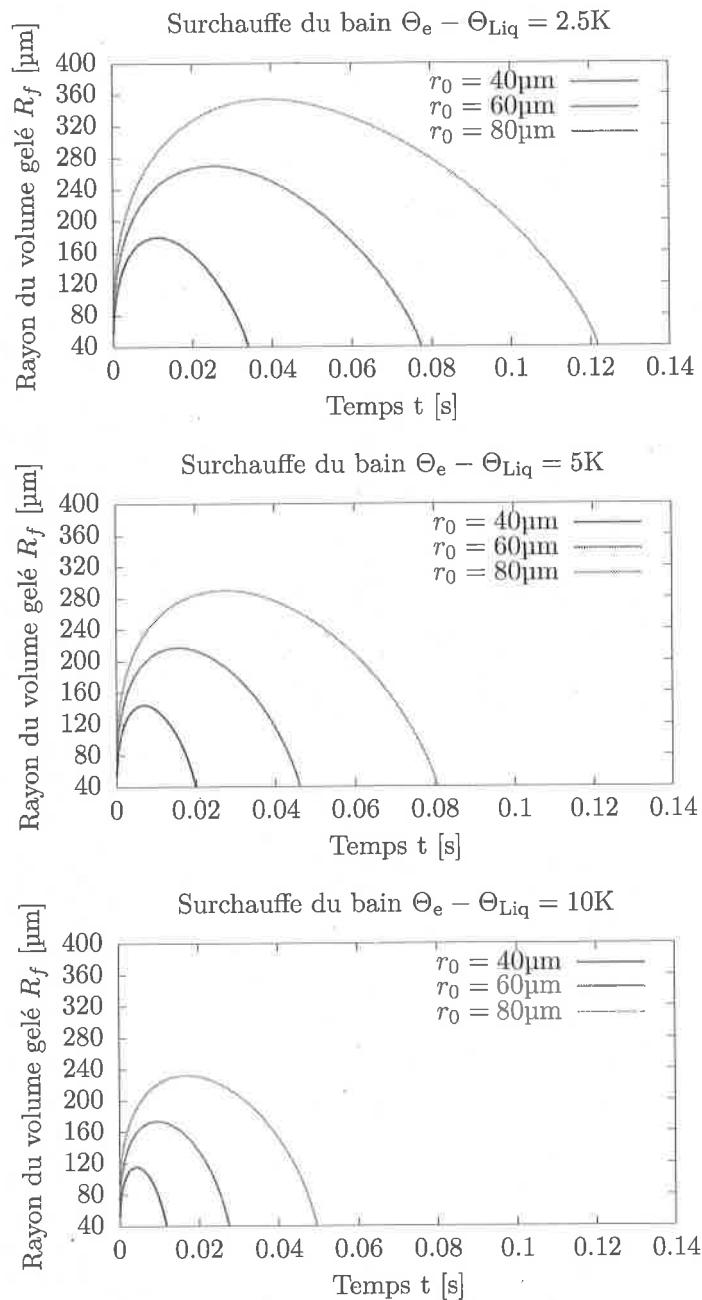


FIGURE 2.6 – Évolution du rayon de la sphère de bain gelé pour des température de surchauffe de 2.5K, 5K et 10K et des particules de rayons initiaux $r_0 = 40\text{ }\mu\text{m}, 60\text{ }\mu\text{m}$ et $80\text{ }\mu\text{m}$.

[Das15b], on choisira, dans la suite, un temps de latence pour chaque dose de particules injectées dans le bain uniforme $\overline{t}_{Lat} = 1s$, indépendante du rayon. Ce temps de latence se justifie par un effet collectif de toutes les particules d'une dose sur la température du bain environnant.

2.3 Dissolution de particule dans le bain

{sec:particle-dissolution}

2.4 Dissolution d'une population de particule

{sec:particle-population-dissolution}

2.5 Chute de particules dans le bain

{sec:particle-fall}

[Das15], nous choisissons un temps de latence pour chaque dose de particules injectées dans le bain uniforme $\Theta_{Lat} = 1s$, indépendante du rayon. Ce temps de latence se justifie par l'effet collectif de toutes les particules d'une dose sur la température du bain environnant.

2.3 Dissolution de particules dans le bain

Dans cette section, nous nous intéressons à la modélisation de la dissolution d'une unique particule d'alumine dans un bain électrolytique. On suppose que cette particule, après avoir été injectée à température Θ_{Inj} , s'est réchauffée et se trouve à la même température Θ que le bain environnant.

La problématique de la dissolution de l'alumine dans le bain d'une cuve d'électrolyse d'aluminium est un phénomène complexe. Ce sujet a déjà fait l'objet de nombreux travaux de recherche, voir par exemple [Das15], [Kva86], [GHK75], [Sol+95].

La taille initiale des particules qui forme une dose est comprise pour la plupart entre $20\mu m$ et $100\mu m$ [Fin+17]. Si les particules sont trop fines celle-ci deviennent suffisamment volatiles pour être soufflées loin du trou d'injection par les gaz s'en échappant. Si elles atteignent malgré tout l'électrolyte, celui-ci a du mal à les mouiller et à permettre leur dissolution. A l'inverse, des particules trop grandes sont trop longues à dissoudre et risquent de sédimenter au fond de la cuve.

Les particules d'alumine sont le résultat de l'agglomération de micro-cristaux et peuvent présenter une porosité importante, jusqu'à 75%. Cette porosité joue un rôle sur la capacité du bain à mouiller la surface de la particule et à permettre sa dissolution.

L'oxyde d'aluminium a une forte affinité avec l'eau [Pat01]. Lorsque les particules entrent en contact avec l'électrolyte en fusion, le gaz qui résulte de la désorption des molécules d'eau crée une forte agitation qui favorise la dispersion et la dissolution des particules. Par exemple, Haverkamp et al. [HWM94] ont montré que le temps de dissolution des particules d'alumine hydratées peut être jusqu'à 40% plus faible par rapport à des particules sèches. La formation d'agrégats et de radeaux est également réduite.

La dissolution de l'oxyde d'aluminium dans l'électrolyte est une réaction endothermique. La vitesse de cette réaction dépend de la chimie du bain, i.e., des concentrations respectives des différentes espèces qui le constituent et de la surchauffe du bain à proximité de la particule. Au niveau microscopique, deux mécanismes entrent en compétition au voisinage de la surface de la particule d'alumine. Il y a d'une part la réaction de dissolution elle-même qui consiste à détacher une molécule d' Al_2O_3 et à former différents complexes avec les ions AlF_6^{3-} [Hau95], [Kva86], et d'autre part le mécanisme de diffusion moléculaire qui transporte l'alumine dissoute loin de la particule. La diffusion moléculaire est essentielle pour maintenir la concentration à la surface de la particule inférieure à la concentration de saturation c_{Sat} et permettre la réaction de dissolution. Clairement, si la concentration est saturée dans l'ensemble du bain, la dissolution ne peut pas avoir lieu. La réaction de dissolution étant elle-même endothermique, elle est contrôlée par la disponibilité d'énergie sous forme thermique à proximité de la particule, i.e., de la surchauffe du bain.

Dans cette section, on propose un modèle qui décrive la vitesse de dissolution d'une unique particule d'alumine dans le bain d'une cuve d'électrolyse d'aluminium, basé sur le travail de thèse de T. Hofer [Hof11].

On fait l'hypothèse que les conditions d'exploitation de la cuve d'électrolyse varient peu

28 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

au cours du temps, c'est-à-dire que la concentration des différentes espèces chimiques sont constantes au cours du temps, à l'exception de la concentration d'alumine. On suppose que la concentration d'alumine reste dans un intervalle qui permette de négliger les variations de la température du liquidus Θ_{Liq} [SSS97]. De même, on suppose des variations de températures suffisamment faible pour se permettre de négliger son influence sur la concentration de saturation de l'alumine c_{Sat} .

Enfin, on négligera la possible hydratation de l'alumine qui constitue la particule et son influence sur sa dissolution puisqu'en pratique celle-ci est généralement maintenue inférieure à 1% et que son effet est principalement d'aider à la dispersion des particules [Fin+17].

On suppose que cette particule est une sphère parfaite, non poreuse, et qu'elle est complètement mouillée par le bain, i.e., que la totalité de sa surface soit en contact avec de l'électrolyte. Dans le travail [Hof11], la vitesse de dissolution d'une particule est une fonction f qui décrit la variation de son rayon r et qui dépend d'une part de son rayon actuel r , et d'autre part de la concentration locale c . Dans le présent travail, nous considérerons en plus l'influence de la température locale de l'électrolyte Θ sur sa vitesse de dissolution, c'est-à-dire que

$$\frac{dr}{dt} = f(r, c, \Theta). \quad (2.49)$$

On propose d'écrire la fonction f comme

$$f(r, c, \Theta) = -\frac{\kappa(c, \Theta)}{r}, \quad (2.50)$$

où κ est le taux de dissolution qui modélise les aspects liés à la réaction de dissolution uniquement. Le facteur $1/r$ est lié à la géométrie sphérique de la particule et à l'hypothèse que la diffusion de la concentration contrôle la dissolution, comme l'ont montré Wang et Flanagan [WF99].

On suppose que la concentration de saturation c_{Sat} est donnée, de même que la température du liquidus Θ_{Liq} . Clairement, le taux de dissolution κ doit être maximal lorsque $c = 0$, et s'annuler lorsque l'électrolyte est saturé en alumine, i.e., lorsque $c = c_{\text{Sat}}$. De même, lorsque le bain se trouve à la température du liquidus Θ_{Liq} , il n'y a pas d'énergie thermique à disposition pour la réaction de dissolution, et donc κ doit s'annuler si $\Theta = \Theta_{\text{Liq}}$. A l'inverse, κ doit être maximal lorsque $\Theta \gg \Theta_{\text{Liq}}$.

Motivé par ces dernières considérations, on propose la forme suivante pour l'expression du taux de dissolution :

$$\kappa(c, \Theta) = \begin{cases} K \frac{c_{\text{Sat}} - c}{c_{\text{Sat}}} \left(1 - \exp \left(-\frac{\Theta - \Theta_{\text{Liq}}}{\Theta_{\text{Crit}} - \Theta_{\text{Liq}}} \right) \right) & \text{si } \Theta \geq \Theta_{\text{Crit}} \text{ et } 0 \leq c \leq c_{\text{Sat}}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.51)$$

où $K > 0$ et $\Theta_{\text{Crit}} > \Theta_{\text{Liq}}$ sont deux paramètres du modèle. Le taux de dissolution limite K est tel que

$$\lim_{\Theta \rightarrow \infty} \kappa(0, \Theta) = K. \quad (2.52)$$

Le paramètre Θ_{Crit} caractérise l'intervalle dans lequel la température a une influence sur la vitesse de dissolution. La figure 2.7 illustre la relation entre le taux de dissolution et la température dans le cas où la concentration locale $c = 0$ et le taux de dissolution limite $K = 1$.

(1) La vitesse de dissolution est définie comme étant la variation du rayon de la particule en fonction du temps de dissolution.

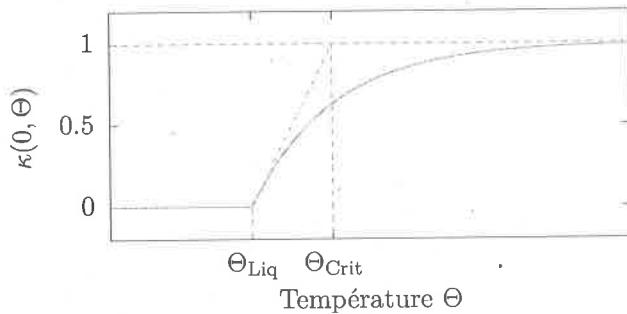


FIGURE 2.7 – Relation entre la température Θ et le taux de dissolution κ lorsque $c = 0$ et que le taux de dissolution limite $K = 1$. En vert sont les traits de construction, et donnent une interprétation du paramètre Θ_{Crit} .

La vitesse de dissolution f décrite ci-dessus forme la base qui permet la description de l'évolution d'une population constituée de particules de tailles différentes dans un bain électrolytique, et qui fait l'objet de la section suivante.

2.4 Dissolution d'une population de particules

Selon la distribution de tailles des particules d'alumine, une dose de 1kg contient typiquement entre 10^9 et 10^{12} particules. Il n'est donc pas envisageable de suivre individuellement l'évolution de chacune d'elles dans le bain. On adopte une approche statistique [Hof11] et on décrit l'ensemble des particules présentes dans le bain par l'intermédiaire d'une distribution continue. On note $n_p(t, r) dr$ le nombre de particules dont le rayon est compris dans l'intervalle $[r, r + dr]$ à l'instant t . On suppose que cette population n_p se dissout selon l'équation

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (f(r, c, \Theta) n_p) = 0 \quad \text{si } r > 0, t > 0, \quad (2.53)$$

$$n_p(0, r) = n_{p,0}(r) \quad \text{si } r > 0, \quad (2.54)$$

où la vitesse de dissolution f est donnée par l'expression (2.50) et $n_{p,0}$ est une distribution de particules initiale donnée.

Supposons maintenant que c et Θ sont des constantes données. Alors $\kappa(c, \Theta)$ est un réel fixé, et on omettra d'indiquer ses arguments dans la suite, lorsqu'il n'y a pas de risque d'ambiguïté. Dans ces conditions, on peut trouver une solution du système d'équations l'équation (2.53)-(2.54) sous forme analytique par la méthode des caractéristiques.

Considérons tout d'abord une particule individuelle de rayon initiale r_0 . Son rayon varie au cours du temps selon l'équation (2.49) que l'on réécrit en explicitant le membre de droite :

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{\kappa}{r}, \quad \text{si } t > 0,$$

$$r(0) = r_0.$$

Amelioration (2.3)

à modifier
en fonction
de l'éplace
de paragraphe

Dans le plan (t, r) on fixe un point (E, \bar{r}) avec $E > 0, \bar{r} > 0$, et on veut déterminer $n_p(E, \bar{r})$ à partir de $n_{p,0}(r)$ par la méthode des caractéristiques ~~correcte~~ ^{retracée}.

30 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

Ainsi, en notant $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$ on obtient :

$$\begin{aligned} r\dot{r} &= -\kappa, \\ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} r^2 &= -\kappa, \\ r^2 &= -2\kappa t + r_0^2, \\ r(t) &= \sqrt{r_0^2 - 2\kappa t}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Si $\bar{t} = \frac{r_0^2}{2\kappa}$ on obtient $r(\bar{t}) = 0$. La particule de rayon r_0 sera dissoute après un temps $\bar{t} = \frac{r_0^2}{2\kappa}$.

Revenons maintenant à l'équation pour la population de particule n_p . On a :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial n_p}{\partial r} + \frac{\kappa}{r^2} n_p = 0. \quad (2.56)$$

Si, dans le plan (t, r) on fixe $t = \bar{t} > 0, r = \bar{r} > 0$, l'équation de la courbe caractéristique $R_{(\bar{t}, \bar{r})}$ qui passe par (\bar{t}, \bar{r}) est donnée par

$$\frac{d}{dt} R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t) = -\frac{\kappa}{R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t)}.$$

Ainsi $R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t) = \sqrt{\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t})}$, en vertu de (2.55). Notons $N_p(t) = n_p(t, R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t))$ la valeur de n_p sur cette caractéristique. En dérivant par rapport à t et en utilisant (2.56) on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} N_p(t) &= \frac{\partial n_p}{\partial t}(t, R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t)) + \frac{\partial}{\partial r} n_p(t, R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t)) \frac{d}{dt} R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t) \\ &= \frac{\partial n_p}{\partial t}(r, R_{(\bar{t}, \bar{r})}) - \frac{\kappa}{R_{(\bar{t}, \bar{r})}} \frac{\partial}{\partial r} n_p(t, R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t)) \\ &= -\frac{\kappa}{R_{(\bar{t}, \bar{r})}^2(t)} N_p(t). \end{aligned}$$

Ainsi

$$\frac{1}{N_p(t)} \frac{d}{dt} N_p(t) = -\frac{\kappa}{R_{(\bar{t}, \bar{r})}^2(t)}$$

qui implique que

$$\frac{d}{dt} \ln(N_p(t)) = -\frac{\kappa}{(\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t}))}.$$

En intégrant on obtient

$$\ln(N_p(t)) = \frac{1}{2} \ln(\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t})) + D$$

et donc $N_p(t) = (\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t}))^{1/2} \exp(D)$. Si $t = 0$, on a :

$$N_p(0) = \exp(D) \sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}} = n_{p,0}(R(0)) = n_{p,0}(\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}})$$

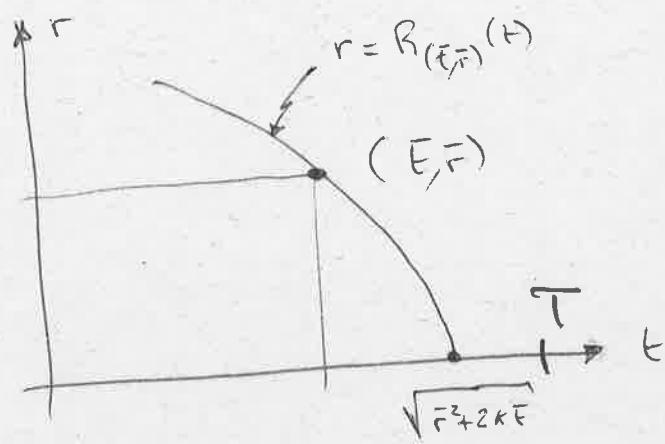
$R(0)$?

Ainsi $\exp(D) = \frac{n_{p,0}(\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}})}{\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}}}$ et

$$N_p(t) = \frac{n_{p,0}(\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}})}{\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}}} (\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t}))^{1/2}.$$

Clairement $N_p(\bar{t}) = n_p(\bar{t}, \bar{r})$ et donc

$$n_p(\bar{t}, \bar{r}) = \bar{r} \frac{n_{p,0}(\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}})}{\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\bar{t}}}. \quad (2.57)$$



Remarque 1. La solution (2.57) est exacte pour autant que le taux de dissolution κ soit constant sur l'intervalle de temps $[0, T]$. Cependant, si κ est constant sur le sous-intervalle $[\bar{t} - \Delta t, \bar{t}]$ et que la distribution de particules n_p est connue au temps $\bar{t} - \Delta t$, alors on exprime facilement n_p au temps \bar{t} en fonction de n_p au temps $\bar{t} - \Delta t$.

En effet, supposons connu $n_p(\bar{t} - \Delta t, r)$ $\forall r$. Nous avons ainsi

$$R_{(\bar{t}, \bar{r})}(\bar{t} - \Delta t) = \sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t}.$$

Puisque $N_p(t) = C (\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t}))^{1/2}$, alors

$$N_p(\bar{t} - \Delta t) = C (\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t)^{1/2} = n_p(\bar{t} - \Delta t, \sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t}).$$

Ainsi

$$C = \frac{n_p(\bar{t} - \Delta t, \sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t})}{(\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t)^{1/2}}$$

et donc

$$N(t) = \underbrace{\frac{n_p(\bar{t} - \Delta t, \sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t})}{(\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t)^{1/2}}}_{\sqrt{-(-)^{1/2}}} (\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t}))^{1/2}.$$

Puisque $N(\bar{t}) = n_p(\bar{t}, \bar{r})$, on obtient

$$n_p(\bar{t}, \bar{r}) = \bar{r} \frac{n_p(\bar{t} - \Delta t, \sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t})}{\sqrt{\bar{r}^2 + 2\kappa\Delta t}}.$$

$\sqrt{-(-)^{1/2}}$

Approximation numérique Pour discréteriser l'équation (2.53) on procède comme dans Hofer [Hof11] et on utilise une méthode de caractéristique [PP89]. *précédemment écrite !*

Soit $T > 0$ le temps final et soit $N \in \mathbb{N}^*$ le nombre de pas de temps. Soient $\Delta t = T/N$ et $t_n = n\tau$, $n = 0, 1, \dots, N$ une subdivision uniforme de $[0, T]$. De plus on suppose donnée une suite de nombres $\kappa^n \geq 0$, $n = 0, 1, \dots, N - 1$. Le nombre κ^n est la valeur du taux de dissolution sur l'intervalle de temps $[t^n, t^{n+1}]$.

Soit $R_{\max} > 0$ et $M \in \mathbb{N}^*$ le nombre de subdivisions de l'intervalle $[0, R_{\max}]$. Soient $\Delta r = R_{\max}/M$ et $r_j = j\Delta r$ une subdivision de $[0, R_{\max}]$.

Pour que le problème soit bien posé sur le domaine $(0, R_{\max})$ et puisque la vitesse de dissolution f est négative, on considère en plus la condition limite sur le bord entrant $r = R_{\max}$:

$$n_p(t, R_{\max}) = 0, \quad \forall t \in [0, T].$$

Notons $n_{p,j}^n$ l'approximation de $n_p(t_n, r_j)$ que l'on suppose connue pour $j = 1, 2, \dots, M$. Les valeurs $n_{p,j}^{n+1}$ sont calculées de la manière suivante. On utilise κ^n comme taux de dissolution sur l'intervalle de temps $[t^n, t^{n+1}]$. Soit $R_j^n = \sqrt{r_j^n + 2\kappa^n\Delta t}$ la position à l'instant t_n de la caractéristique passant par le point (t_{n+1}, r_j) . Soit $s_j^n \in \mathbb{N}$ l'indice tel que $r_{s_j^n} < R_j^n \leq r_{s_j^n+1}$. Alors en utilisant le résultat de la remarque 1 on pose pour $j = 1, \dots, M - 1$

$$n_{p,j}^{n+1} = \begin{cases} \left(\frac{r_{s_j^n+1} - R_j^n}{\Delta r} n_{p,s_j^n}^n + \frac{R_j^n - r_{s_j^n}}{\Delta r} n_{p,s_j^n+1}^n \right) \frac{r_j}{\sqrt{r_j^n + 2\kappa^n\Delta t}}, & \text{si } s_j < M, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.58)$$

[Pour obtenir une approximation de $n_p(t_n, R_j^n)$ on interpole linéairement les valeurs de $n_{p,s_j^n}^n$ et $n_{p,s_j^n+1}^n$. Ainsi en utilisant

Validation numérique On propose maintenant de valider l'implémentation du schéma numérique (2.58) en étudiant la convergence de l'erreur entre une solution exacte et son approximation numérique.

On fixe $R_{\text{Max}} = 100 \mu\text{m}$, $T = 5\text{s}$ et le taux de dissolution $\kappa^n = 0.5 \times 10^{-9}$ pour tout n tel que $0 \leq n \leq N - 1$. On choisit la distribution de particules initiale

$$n_{p,0}(r) = \exp \left(1 - \frac{1}{1 - \frac{16}{R_{\text{Max}}^2} \left(r - \frac{R_{\text{Max}}^2}{2} \right)} \right). \quad (2.59)$$

Alors la solution exact $n_p(t, r)$ est donnée par l'expression (2.57). On note e_{n_p} l'erreur $L^2(0, R_{\text{Max}})$ entre la solution exacte et l'interpolant de Lagrange de l'approximation $n_{p,j}^N$ sur la subdivision $\{r_j\}_{j=0}^M$. La figure 2.8 illustre la solution et l'approximation numérique à différents instants. La figure 2.9 présente l'erreur e_{n_p} pour $\Delta r = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512, 1/1024, 1/2048$ et $1/4096$. On a choisi $\Delta t = \alpha(\Delta r)$ de sorte que $\tau = 2.92 \times 10^{-2}$ lorsque $\Delta r = 1/32$. L'erreur est comparée à une droite de pente 1. On conclut que l'erreur de l'approximation numérique est un $O(\Delta r)$.

La section suivante tient lieu de conclusion ce chapitre, et discute de la sédimentation des particules d'alumine dans le bain sous l'action de la force de gravité.

2.5 Chute de particules dans le bain

Retirer une vraie conclusion !?

$$2.92 \cdot 10^{-2} = \alpha \cdot \frac{1}{32}$$

$$\Rightarrow \alpha = 32 \cdot 2.92 \cdot 10^{-2} = 0.96$$

doit être le
page 33

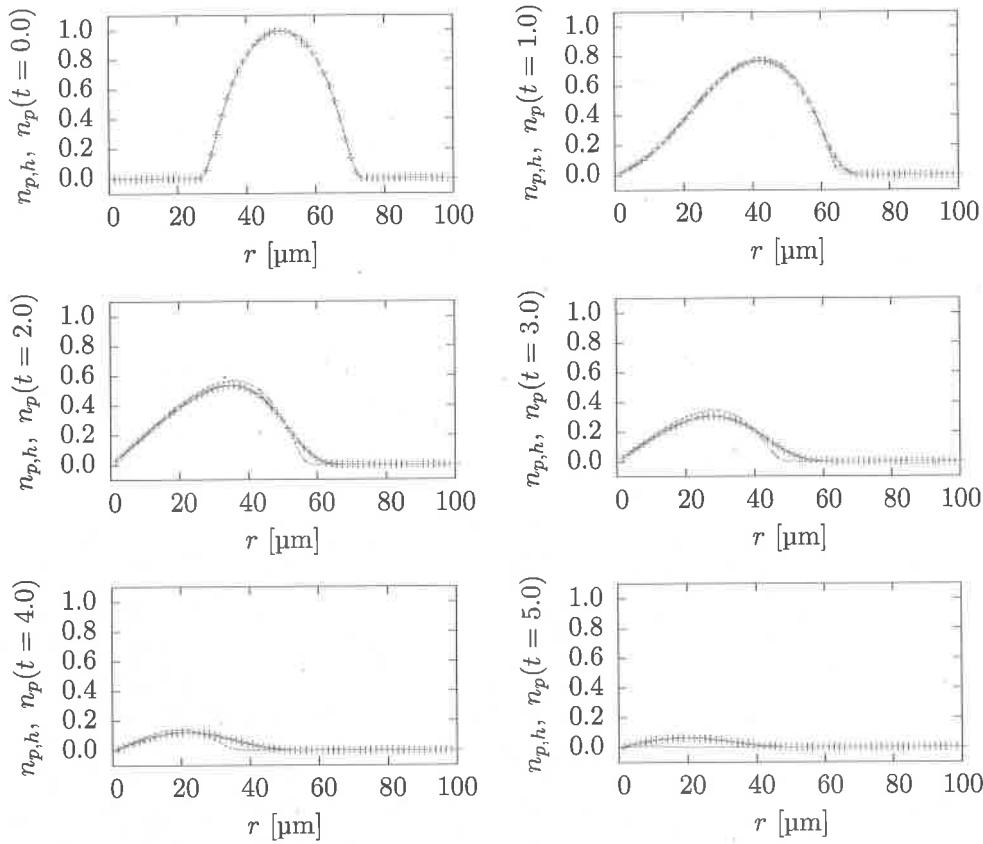


FIGURE 2.8 – Solution exacte n_p et approximation numérique avec $\Delta r = 1/64$, $\Delta t = 1.46 \times 10^{-2}$ à différents temps. La condition initiale est donnée par (2.59.). En vert : solution exacte. En violet : approximation numérique.

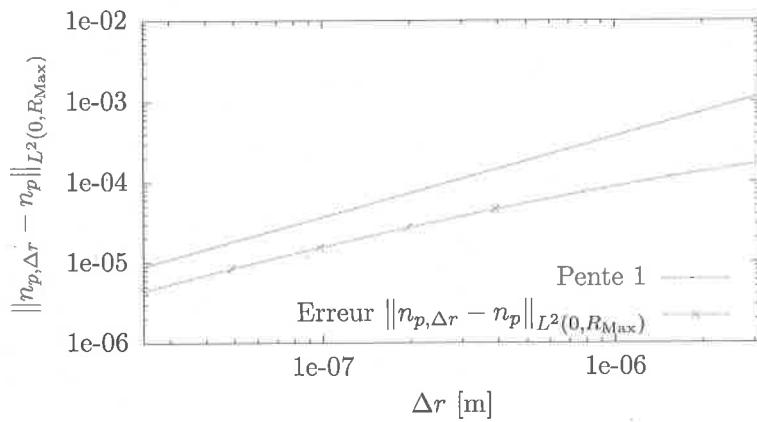


FIGURE 2.9 – Convergence de l'erreur $L^2(0, R_{\text{Max}})$ entre $n_p(T, .)$ et l'interpolant de Lagrange des approximations $n_{p,j}^N$ aux noeuds r_j . Le pas de temps est choisi tel que $\Delta t = O(\Delta r)$.

$\propto \Delta r$

*

Validation numérique On propose maintenant de valider l'implémentation du schéma numérique (2.59) en étudiant la convergence de l'erreur entre une solution exacte et son approximation numérique.

On fixe $R_{\text{Max}} = 100\mu\text{m}$, $T = 5\text{s}$ et le taux de dissolution $\kappa^n = 0.5 \times 10^{-9}$ pour tout n tel que $0 \leq n \leq N - 1$. On choisit la distribution de particules initiale

$$n_{p,0}(r) = \exp \left(1 - \frac{1}{1 - \frac{16}{R_{\text{Max}}^2} \left(r - \frac{R_{\text{Max}}^2}{2} \right)} \right). \quad (2.60)$$

Alors la solution exacte $n_p(t, r)$ est donnée par l'expression (2.58). On note $n_{p,\Delta r}^N$ la reconstruction continue linéaire par morceau des valeurs $n_{p,j}^N$ sur la subdivision $\{r_j\}_{j=0}^M$, c'est-à-dire que

$$n_{p,\Delta r}^N(r) = n_{p,j}^N + \frac{r - r_j}{\Delta r} \left(n_{p,j+1}^N - n_{p,j}^N \right) \quad \text{si } r \in [r_j, r_{j+1}]. \quad (2.61)$$

On considère l'erreur $L^2(0, R_{\text{Max}})$ entre la solution exacte $n_p(T, .)$ et $n_{p,\Delta r}$. La figure 2.8 illustre la solution et l'approximation numérique à différents instants. La figure 2.9 présente l'erreur $\|n_p(T, .) - n_{p,\Delta r}^N\|_{L^2(0, R_{\text{Max}})}$ pour $\Delta r = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512, 1/1024, 1/2048$ et $1/4096$. On a choisi $\Delta t = \alpha \Delta r$ avec $\alpha = 0.934$. L'erreur est comparée à une droite de pente 1. On constate que l'erreur de l'approximation numérique est un $O(\Delta r)$.

La section suivante tient lieu de conclusion de ce chapitre, et discute de la sédimentation des particules d'alumine dans le bain sous l'action de la force de gravité.

2.5 Chute de particules dans le bain

La densité de l'alumine ρ_{Al} qui constitue les particules est de 3960kg m^{-3} soit environ deux fois supérieure à celle du bain électrolytique ρ_e , qui est de 2130kg m^{-3} . Une particule d'alumine placée dans un bain électrolytique animé par un écoulement stationnaire subit ainsi l'effet de trois forces distinctes. D'une part, cette particule est entraînée dans le fluide par l'intermédiaire d'une force de traînée F_D . Cette force est opposée à la vitesse relative de la particule par rapport au fluide. D'autre part, cette particule est entraînée vers le fond de la cuve par la force de gravité F_g , à laquelle s'oppose la force d'Archimède F_A .

Dans cette section, nous nous proposons d'évaluer l'importance des forces de gravité et d'Archimède devant la force de traînée. Dans ce but, on considère une particule d'alumine sphérique de rayon initial r_0 placée dans un bain électrolytique au repos. On suppose que la température du bain Θ et la concentration d'alumine c sont maintenues constantes au cours du temps. On suppose de plus que le mouvement du fluide autour de la particule n'influence pas sa dissolution. Alors, la variation du rayon r de la particule au cours du temps est décrite par l'équation (2.55). Comme on l'a vu dans la section 2.4, le rayon à l'instant t est donné par

$$r(t) = \sqrt{r_0^2 - 2\kappa t}, \quad (2.62)$$

où κ est le taux de dissolution, constant au cours du temps. Clairement pour

$$T = \frac{r_0^2}{2\kappa} \quad (2.63)$$

on obtient $r(T) = 0$, i.e., la particule est complètement dissoute au temps T .

34 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

On modélise la particule d'alumine, supposée non poreuse, par un point matériel de volume $V(t) = \frac{4}{3}\pi r^3(t)$. On travaille dans le référentiel de la Terre, et on suppose qu'elle se déplace verticalement dans ce référentiel. On note $x(t) \in \mathbb{R}$ sa position selon un système de coordonnées vertical à l'instant $t \in [0, T]$ et $\dot{x}(t) = \frac{dx}{dt}(t)$ sa vitesse. La particule étant sphérique, on propose d'approximer la force de traînée par la loi de Stokes. Si v est la vitesse de la particule par rapport au fluide, lui-même au repos dans le référentiel, on a

$$F_D(r, v) = -6\pi\mu rv.$$

Ici on a noté μ la viscosité dynamique de l'électrolyte. Il est connu que cette approximation est valide pour autant que le nombre de Reynolds de l'écoulement R_e soit suffisamment faible, i.e., $R_e \lesssim 1$. On montrera a posteriori que cette condition est en général satisfaite pour des particules d'alumine qui sont typiquement injectées dans le bain électrolytique.

Les forces de gravité F_g et d'Archimède F_A en fonction du rayon r de la particule sont données respectivement par

$$\text{m/s} \quad F_g(r) = \cancel{\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_{Al} g} \quad \text{et} \quad F_A(r) = \underline{\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_e g}$$

où $g = 9.81$ est l'accélération de la gravité.

L'équation du mouvement de la particule s'obtient à l'aide de la deuxième loi de Newton qui lie la somme des forces à l'impulsion $p = m\dot{x}$:

$$\frac{dp}{dt}(t) = F_D(r(t), \dot{x}(t)) + F_g(r(t)) + F_A(r(t)),$$

soit

$$\frac{d}{dt}(\rho_{Al}V(t)x(t)) = \frac{4}{3}\pi r^3(t)(\rho_e - \rho_{Al})g - 6\pi\mu r(t)\dot{x}(t). \quad (2.64)$$

On suppose que la particule se trouve initialement en $x(0) = 0$ avec une vitesse $\dot{x}(0) = v_0$.

En utilisant la relation (2.62), nous avons

$$\frac{d}{dt}V(t) = -4\pi\kappa r(t). \quad (2.65)$$

En remplaçant (2.65) dans l'égalité (2.64), en tenant compte du fait que $V(t) = \frac{4}{3}\pi r^3(t)$, puis en divisant par $\pi r(t)$ nous obtenons

$$\rho_{Al}\frac{4}{3}r^2(t)\frac{d^2}{dx^2}x(t) = g(\rho_{Al} - \rho_e)\frac{4}{3}r^2(t) - (6\mu - 4\rho_{Al}\kappa)\frac{dx}{dt}. \quad (2.66)$$

En utilisant (2.62), (2.62) et en intégrant l'équation (2.66) sur l'intervalle de temps $[0, T]$, nous obtenons

$$(6\mu - 4\rho_{Al}\kappa)x(T) = g(\rho_{Al} - \rho_e)\frac{r_0^4}{3\kappa} - \rho_{Al}\frac{4}{3}\int_0^T(r_0^2 - 2\kappa t)\frac{d^2}{dt^2}x(t)dt. \quad (2.67)$$

En intégrant le dernier terme de l'équation (2.67) par partie, nous obtenons finalement la profondeur terminale de la particule au moment de sa dissolution complète

$$x(T) = \frac{g(\rho_e - \rho_{Al})}{\kappa(18\mu - 4\rho_{Al}\kappa)}r_0^4 + \frac{4\rho_{Al}v_0}{18\mu - 4\rho_{Al}\kappa}r_0^2. \quad (2.68)$$

mettre une ligne de détails

La valeur des paramètres physiques qui correspondent à une particule d'alumine dans un bain et qui interviennent dans l'équation (2.68) sont synthétisées dans le tableau 2.2.

TABLE 2.2 – Paramètres physiques qui interviennent dans la chute d'une particule d'alumine dans un bain électrolytique.

Quantité	Valeur	Unités	Description
ρ_e	2130	kg m^{-3}	Masse volumique du bain électrolytique
ρ_{Al}	3960	kg m^{-3}	Masse volumique de l'oxyde d'aluminium
g	9.81	m s^{-2}	Accélération de la gravité terrestre
κ	0.5×10^{-9}	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Taux de dissolution de l'alumine
μ	2×10^{-3}	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$	Viscosité dynamique du bain électrolytique

TABLE 2.3 – Profondeur terminale de la particule dans le bain électrolytique en fonction des conditions initiales r_0 [μm], v_0 [m s^{-1}] et de la viscosité dynamique μ [$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$].

	$\mu = 2 \times 10^{-3}$	$\mu = 1 \times 10^{-2}$	$\mu = 1 \times 10^{-1}$	$\mu = 1$
$v_0 = 0$				
$r_0 = 40$	2.553778e-03	5.106657e-04	5.106454e-05	5.106434e-06
$r_0 = 60$	1.292850e-02	2.585245e-03	2.585143e-04	2.585132e-05
$r_0 = 80$	4.086045e-02	8.170651e-03	8.170327e-04	8.170295e-05
$v_0 = 2$				
$r_0 = 40$	3.962088e-03	7.922781e-04	7.922467e-05	7.922435e-06
$r_0 = 60$	1.609720e-02	3.218873e-03	3.218745e-04	3.218733e-05
$r_0 = 80$	4.649368e-02	9.297100e-03	9.296732e-04	9.296695e-05
$v_0 = 3$				
$r_0 = 40$	4.666243e-03	9.330843e-04	9.330473e-05	9.330436e-06
$r_0 = 60$	1.768155e-02	3.535687e-03	3.535547e-04	3.535533e-05
$r_0 = 80$	4.931030e-02	9.860325e-03	9.859935e-04	9.859896e-05

Contrairement à l'hypothèse admise ici, le bain d'une cuve d'électrolyse est animé par une forte agitation. Ces turbulences correspondent à une viscosité équivalente μ qui caractérise l'écoulement moyen au cours du temps. Dans le bain d'une installation industrielle, cette viscosité turbulente est typiquement de l'ordre de $1 \text{ kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ou plus, et domine donc largement la viscosité physique du fluide. Pour cette raison nous considérons des viscosités dans l'intervalle $[2 \times 10^{-3}, 1]$.

Les doses de particules d'alumine ne sont en général pas délicatement déposées à la surface du bain ; les particules sont lâchées depuis une hauteur qui varie entre 20cm et 40cm par rapport à la surface du bain. On modélise cette condition à l'aide de la vitesse initiale v_0 . La vitesse verticale atteinte par une masse en chute libre dans le champ de pesanteur terrestre sur une hauteur L et initialement au repos est donnée par l'expression $\sqrt{2gL}$. Par conséquent nous considérerons des vitesses initiales v_0 entre 0 et 3 m s^{-1} .

Le tableau 2.3 présente la profondeur terminale de la particule d'alumine donnée par la relation (2.68) en fonction des conditions initiales r_0 , v_0 et la viscosité dynamique du fluide μ . Lorsque $\mu = 2 \times 10^{-3}$, c'est-à-dire que la particule est placée dans un fluide immobile, une profondeur maximale de 20 cm environ est atteinte lorsque $r_0 = 80 \mu\text{m}$ et avec une

Remarquons que ρ_{Al}^2 est négligeable par rapport à ρ_e même si $\mu = 2 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m s}$. Ainsi la formule peut être approchée sans problème par

36 CHAPITRE 2. PARTICULES D'ALUMINE DANS UN BAIN ÉLECTROLYTIQUE

vitesse initiale $v_0 = 3 \text{ m s}^{-1}$. La profondeur maximale lorsque le rayon initial est inférieur à $60 \mu\text{m}$ est systématiquement inférieure à 1 cm.

80

Si on suppose maintenant que le fluide est turbulent, la viscosité effective de l'écoulement moyen est supérieure à la viscosité physique du bain. Cette situation correspond aux trois dernières colonnes à droite du tableau 2.3. Dans ce cas, on constate que la profondeur maximale est systématiquement de l'ordre de 1mm, ou inférieure.

Le bain électrolytique d'une cuve n'est jamais au repos, en particulier dans les canaux où le fluide est agité par les bulles de gaz qui résultent de l'électrolyse et qui remontent à la surface du bain. Dans la suite de ce travail, nous ferons l'hypothèse que l'injection des doses de particules d'alumine ne perturbe pas l'écoulement du bain. Dans ce cadre, nous négligerons l'effet de la force de gravité sur la trajectoire des particules.

Nous concluons cette section par trois remarques qui traitent premièrement de la validité de la loi de Stokes pour la force de traînée, deuxièmement de l'importance de la vitesse initiale de la particule sur la profondeur terminale de la particule, et troisièmement du temps caractéristique pour qu'une particule soit emportée par un fluide en mouvement laminaire.

Remarque 2. En considérant la relation (2.68), on peut évaluer l'effet de la vitesse initiale de la particule sur sa position terminale. Les contributions des deux termes à droite de l'égalité (2.68) sont identiques lorsque la vitesse initiale est telle que

$$v_0 = \frac{g}{4\kappa} \frac{\rho_{\text{Al}} - \rho_e}{\rho_{\text{Al}}} r_0^2.$$

Pour une particule de rayon initial $r_0 = 80 \mu\text{m}$, cette vitesse initiale est de $v_0 = 14.5 \text{ m s}^{-1}$, ce qui correspond à une hauteur de chute libre d'environ 10 m. On conclut que, dans une cuve d'électrolyse industrielle typique, la vitesse initiale des particules suffisamment dispersées qui pénètrent dans le bain est négligeable sur leur profondeur de pénétration.

Remarque 3. Le nombre de Reynolds d'une sphère de rayon r en mouvement rectiligne uniforme dans un fluide au repos est donné par

$$R_e = \frac{2\rho_e vr}{\mu}$$

où v est sa vitesse relative au fluide.

En supposant r fixé, l'équation du mouvement d'une particule dans le fluide s'écrit

$$\rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 \ddot{x}(t) = \frac{4}{3} \pi r^3 (\rho_e - \rho_{\text{Al}}) g - 6\pi\mu r \dot{x}(t). \quad (2.69)$$

On obtient la vitesse limite de chute de la particule v_L en remplaçant dans (2.69) \dot{x} par v_L et en posant $\ddot{x} = 0$. En résolvant pour v_L on obtient

$$(v_L \text{ est nulle}) \quad v_L = \frac{2g(\rho_e - \rho_{\text{Al}})}{9\mu} r^2. \quad (\text{Sae} - \text{Se})$$

Le nombre de Reynolds associé à cet écoulement s'écrit comme

$$R_e = \frac{4}{9} \frac{g \rho_e (\rho_e - \rho_{\text{Al}})}{\mu^2} r^3.$$

En reprenant les conditions considérées dans le tableau 2.3 et les paramètres du tableau 2.2, on obtient un nombre de Reynolds maximal pour $\mu = 2 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ et $r_0 = 80 \mu\text{m}$, soit $R_e \approx 2.2$. Ce résultat justifie l'utilisation de la loi de Stokes pour modéliser la force de traînée de la particule.

(Invers prop
à μ , prop
à r_0^3 si $v_0 = 0$)

etc)

OK mais
on ne
niglige pas
la force de
gravité
ce qui
montre
que les
paragraphes
en haut
doit venir
après
ces
remarques

(2.70)
A retenir
par la suite

Remarque 4. L'équation du mouvement d'une particule d'alumine de rayon r_0 supposé constant au cours du temps s'écrit

en négligeant la force de gravité ($\rho_{Al} = \rho_e$) ?

$$\rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r_0^3 \ddot{x}(t) = -6\pi\mu r_0 \dot{x}(t),$$

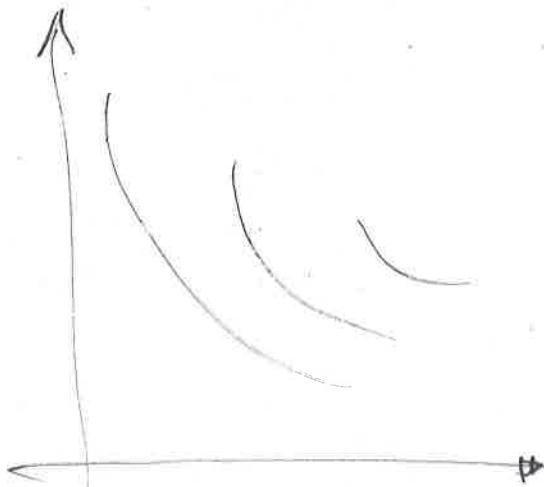
et on considère les conditions initiales $x(0) = 0$ et $\dot{x}(0) = v_0$. On peut intégrer cette équation exactement, et on obtient la vitesse de la particule au cours du temps

$$\dot{x}(t) = v_0 \exp\left(-\frac{9\mu}{2\rho_{Al}r_0^2} t\right).$$

*

La vitesse approche zéro sur une échelle de temps données par $\frac{2\rho_{Al}r_0^2}{9\mu}$, c'est-à-dire environ 2.8×10^{-3} s pour une particule de rayon $r_0 = 80 \mu\text{m}$ et dans un fluide au repos, i.e., avec $\mu = 2 \times 10^{-3}$. Autrement dit, le temps nécessaire à une particule pour être entraînée et transportée par un fluide à la même vitesse que celui-ci est négligeable devant les temps caractéristiques des autres phénomènes qui prennent place dans la cuve et que l'on s'intéresse à modéliser. Cette observation permet de justifier l'approximation qui sera faite dans le chapitre 3, où on supposera que les particules suivent exactement les lignes de courant de l'écoulement.

*de même
deux-té*



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 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 prématurée. + perte 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 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 définie comme la partie de la surface des anodes faisant face vers le bas, en direction de 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 [DFR98a], [Sne85] ou encore [MR96].

Le métal liquide ayant une conductivité supérieure à celle du bain électrolytique ([WPT92], [Afp03]), le contact entre les anodes et la nappe de métal crée un court-circuit. Les courts-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 le 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 .

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 les 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 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 c et la température du bain Θ . Dans la section 3.3 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

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 . On note T le temps final. 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 au lieu $x \in \Omega$.

à l'endroit

étainé
sur le bord
de la cuve
c'est pas le
nouvelle
unité

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 terminale 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 terminale de chute (2.70) 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

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

stationnaire
Remarque :
Si $\mu = 10^{-3}$ $\Rightarrow w \sim 1 \text{ cm/s}$
(3.2)
Si $\mu = 1$ $\Rightarrow w \sim 10 \mu\text{m/s}$

en vertu de (2.70). 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 ?*

de nombreux

Populations de particules Dans une cuve industrielle, de l'alumine en poudre doit être injectées à intervalles réguliers dans le bain. Nous modélisons ces injections sous la forme d'une série d'événements instantanés, successifs dans le temps. Soient K le nombre total d'injections, et un ensemble de K réels τ_k tels que $0 \leq \tau_k < T \forall k$, les instants auxquels surviennent chaque injection. Soient 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 taille et en espace 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 $x \in \Omega$ 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 fait l'objet d'une discussion dans la section 2.2. Chaque population de particules n_p^k , $k = 1, 2, \dots, K$ satisfait $r \in \Omega$, $r \in \mathbb{R}_+$.

($x, x + dx$)

soit

*
*
où les τ_k
représentent

4

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

$$n_p^k(t, x, r) = 0,$$

$$n_p^k(\tau_k, x, r) = S_k(x, r),$$

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

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

{eq:population-pre-injection}

$$0 \leq t \leq \tau_k \quad (3.3)$$

(3.4)

{eq:population-transport}

$$\tau_k < t \leq \tau_k + \Theta_{Lat}, \quad (3.5)$$

{eq:population-dissolution}

$$\tau_k + \Theta_{Lat} < t \leq T. \quad (3.6)$$

où l'opérateur $\nabla = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}, \partial_{x_3})^\top$. La vitesse de dissolution f qui intervient dans l'équation (3.6) a déjà été définie dans la section 2.3 par l'expression (2.50). Les équations (3.5) et (3.6) sont complétées par une condition de bord entrant. Plus précisément, soit Γ^- la partie du bord définie par

$\stackrel{\Delta \Omega \text{ de } \Omega}{\Gamma^- = \{x \in \partial\Omega \mid \nu \cdot (u + w) < 0\}}$ ou comment $\tilde{n} \approx 0$? $\tilde{n} = \vec{n}$?

{eq:np-bc}

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)

Question?

La densité totale de particules $n_p(t, x, r)$ au temps $t \in [0, T]$, à l'emplacement $x \in \Omega$ en fonction de r

$$n_p(t, x, r) = \sum_{k=1}^K n_p^k(t, x, r), \quad \forall t \in [0, T], x \in \Omega \text{ et } r > 0. \quad (3.9)$$

Les conditions initiales de l'éq (3.6) sont celles obtenues de (55) au $t = \tau_k + \Theta_{Lat}$.

Remarque 5. 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 consommée par la réaction d'électrolyse. Si I est le courant électrique total imposé traversant la cuve, le débit total d'alumine dissoute consommée M en mol s^{-1} est proportionnel à I , et écrit

$$M = \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} \quad (3.10)$$

où $F = 96\,485.33 \text{ C mol}^{-1}$ est la constante de Faraday et $[\text{Al}_2\text{O}_3] = 0.102 \text{ kg mol}^{-1}$ la masse molaire de l'alumine. 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.

source négative
= disponibilité

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 source de la concentration d'alumine \dot{q}_1 associé à la consommation par la réaction d'électrolyse

$$\dot{q}_1(x) = -\frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} \frac{|j(x)|}{\int_{\Omega} |j(x)| \, dx} \quad (3.11)$$

de sorte à avoir la consommation totale sur Ω

$$\int_{\Omega} \dot{q}_1(x) \, dx = -M. \quad \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} \quad (3.12)$$

(1) Consommation d'alumine dissoute signifie que la molécule d' Al_2O_3 a été dissoute selon la réaction $\text{Al}_2\text{O}_3 \rightarrow 2\text{Al}^{6+} + \frac{3}{2}\text{O}_2^{6-}$?

$$\bar{k}(t) = \max_{1 \leq k \leq K} \{ k : \tau_k + \Theta_{\text{Lat}} < t \}$$

3.2. MODÈLE DE TRANSPORT ET DISSOLUTION D'ALUMINE

45

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 \dot{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 $\bar{k}(t)$ le plus grand entier tel que $\tau_{\bar{k}} + \Theta_{\text{Lat}} < t$. Alors on définit

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

L'ensemble des indices $\{k\}_{k=1}^{\bar{k}(t)}$ 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 concentration c doit satisfaire l'équation

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t, x) + u(x) \cdot \nabla c(t, x) - D_c(x) \Delta c(t, x) = \dot{q}_1(x) + \dot{q}_2(t, x), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T). \quad (3.14)$$

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

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

Termes source de la température du bain 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 $\Theta_{\text{Inj}} < \Theta$. De l'énergie thermique est prélevée dans le bain pour rétablir l'équilibre thermique entre le bain 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

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

où δ est une masse de Dirac. Dans (3.16), Θ_{Init} est ..., $C_{p,\text{Al}}$ et S_k sont, rappelle-le

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

$$p_2(t, x) = -\Delta H_{\text{Diss}} \dot{q}_2(t, x), \quad (3.17)$$

où ΔH_{Diss} est l'enthalpie molaire nécessaire à la dissolution de l'alumine. On rappelle que $\dot{q}_2(t, .)$ est le débit molaire par unité de volume d'alumine dissoute à l'instant t .

Et troisièmement, la résistivité électrique de l'électrolyte engendre provoque 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

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

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

*D'où venir
après (3.16)*

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. La diffusion est due à la diffusion thermique au niveau moléculaire, et à une diffusion liée aux turbulences de l'écoulement. 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

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t}(t, x) + u(x) \cdot \nabla \Theta - D_\Theta(x) \Delta \Theta(t, x) = \frac{1}{\rho_e C_{p,e}} \sum_{n=1}^3 p_n(t, x), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T). \quad \text{(eq:temperatu)} \quad (3.19)$$

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

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

Remarque 7: cf. la page précédente.

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 (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

{sec:populations-discretisation}

3.4 Dissolution de poudre d'alumine dans une cuve industrielle

{sec:populations-industriel}

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
Eqv (3.3), (3.4), ...
de

*

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 discréteriser les équations (3.21) à (3.25) par une méthode de splitting en temps de la façon suivante. Soit l'intervalle 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 $n_p^k(t_n, \dots)$, $n_{p,n}$ une approximation de $n_p(t_n, \dots)$, c_n une approximation de $c(t_n, \dots)$ et Θ_n une approximation de $\Theta(t_n, \dots)$. 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

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

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

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

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

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

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 $q_{2,n+1}$, $p_{i,n+1}$, $i = 1, 2$.

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

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!)

$$q_{2,n+1}(x) = -\frac{1}{\Delta t} \sum_{\substack{1 \leq k \leq K \\ q^k < n+1}} \int_0^\infty \frac{\rho_{\text{Al}}}{[\text{Al}_2\text{O}_3]} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k(x) - \bar{n}_{p,n+1}^k(x)) \, dr, \quad x \in \Omega. \quad (3.35)$$

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 $t_{q^k} < t_n$.

Discrétisation des sources 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

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

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 $q_{2,n+1}$:

$$p_{2,n+1} = -[\text{Al}_2\text{O}_3] \Delta H_{\text{Diss}} q_{2,n+1}. \quad (3.38)$$

L'équation (3.32) est discrétisée 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 stabilisés 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 :

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

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

$$C_{n+1} = [\text{Al}_2\text{O}_3] \int_{\Omega} c_n \, dx. \quad (3.40)$$

Notez $\int_{S_0} \dots \int_{S_0}$

à la ligne SUPL

47

3.3. DISCRÉTISATION EN TEMPS

Finalement on définit

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

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

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 :

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

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 (3.41). En intégrant les expressions (3.30), (3.31) 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

$$\xrightarrow{+ w = 0 \text{ par hypothèse}} \int_{\Omega} \bar{n}_{p,n+1}^k dx = \int_{\Omega} n_{p,n}^k dx. \quad (3.43)$$

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

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

je fais croire 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 $\operatorname{div} u = 0$ dans Ω , et que $u \cdot \nu = 0$ et $\frac{\partial c_n}{\partial \nu} = 0$ sur $\partial\Omega$, on obtient

$$[\text{Al}_2\text{O}_3] \int_{\Omega} c_{n+1} dx - [\text{Al}_2\text{O}_3] \int_{\Omega} c_n dx = \frac{\Delta t I [\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} \quad ? \quad \text{OK}$$

$$\sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1} - n_{p,n}) dr dx,$$

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

On a $\operatorname{div} w(r) = 0$. De plus $S \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1} - n_{p,n}) dr dx = 0$.

$S \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1} - n_{p,n}) dr dx = 0$ si dissolution complète à l'instant de $n+1$.

et ainsi par (3.40),

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

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

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

Par récurrence sur n on obtient

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

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

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

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

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

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

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

A nouveau par récurrence sur n on obtient

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

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 valables 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.

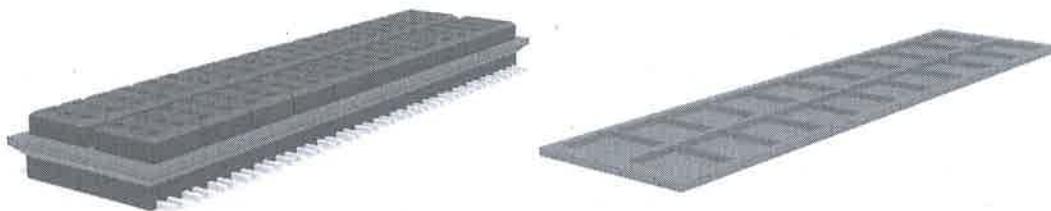
La section suivant traite de l'application de ce modèle numérique à une cuve d'électrolyse d'aluminium industrielle.

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 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



(a) Éléments à proximité des fluides

(b) Bain électrolytique

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).

Auvent cette figure, on devrait pouvoir mettre une figure de l'AP32 numérisée

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 $I = 320\,000 \text{ A}$, 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 $2577 \text{ kg par jour d'aluminium métallique}$, i.e., un peu plus qu' 1 m^3 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 O_2 . Cet oxygène réagit immédiatement avec le carbone de l'anode pour former du CO_2 . 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 anodes 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

(x) Production de CO_2 ; oxygène brûl. avec C.

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE 51

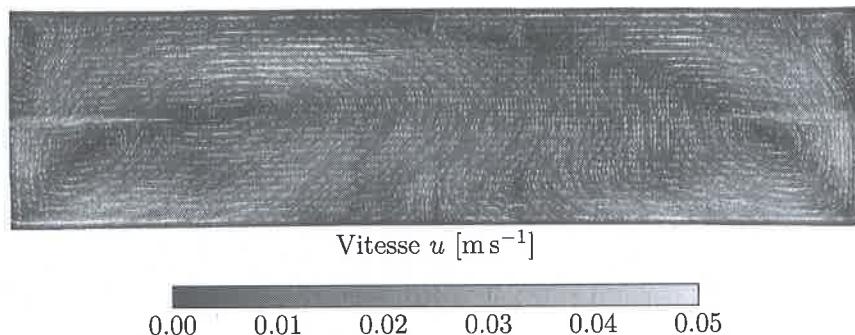


FIGURE 3.2 – Champ de vitesse u dans le bain électrolytique d'une cuve AP32 restreint sur une surface placée à mi-hauteur de l'ACD, vue depuis dessus. Cette situation correspond à un état d'opération standard.

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 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.

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.

peuvent

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-physics stationnaire proposé par S. Steiner [Ste09], J. Rochat [Roc16] déjà 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 avals. Les vitesses maximales de l'écoulement

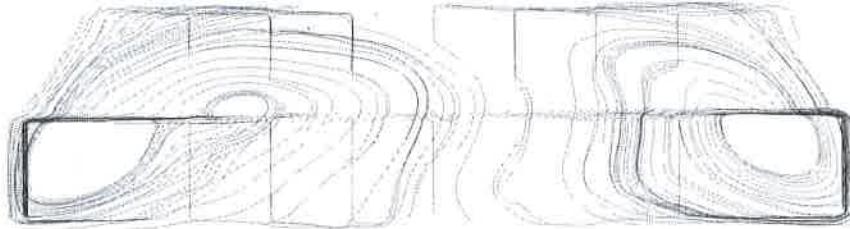


FIGURE 3.3 – Lignes de courant correspondant au champ de vitesse représenté sur la figure 3.2. Les lignes de courant prennent leur origine le long du canal central.

(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 volontiers 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 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 réelle, 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 s'échappe par le métal, les parois latérales de la cuve, les anodes, la surface du bain et par le CO_2 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

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

c'est-à-dire que

$$\frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{\text{Al}} S^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx. \quad (3.51)$$

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.

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 forme des densités

répartition

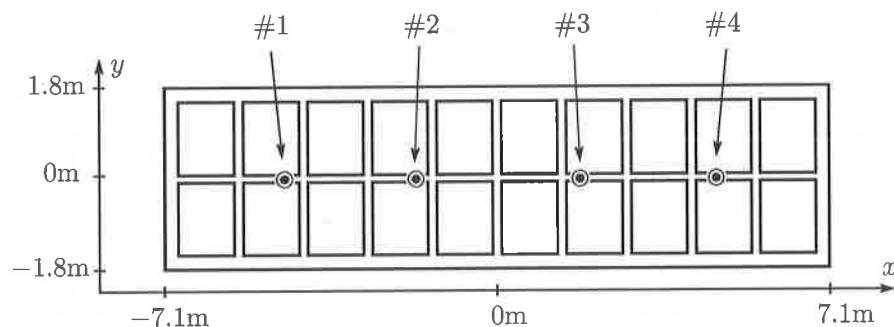


FIGURE 3.4 – Vue schématique de la partie supérieure du bain électrolytique. Les blocs rectangulaires représentent l'emplacement des anodes, tandis que les cercles indiqués par les flèches et numérotés marquent l'emplacement des injecteurs disposés le long du canal central.

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

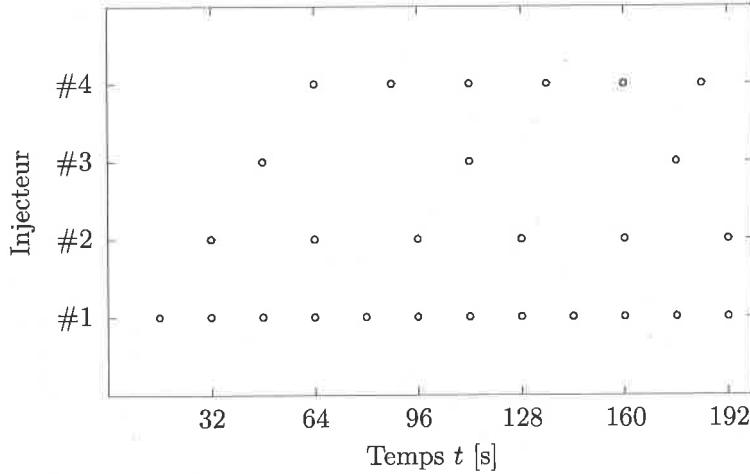


FIGURE 3.5 – Temps d'injections des différents injecteurs de la cuve AP32. Chaque cercle représente une injection. Chaque ligne correspond à l'un des 4 injecteurs.

de particules initiales S^k est décrite dans [Hof11]. Plus précisément, la forme spatiale de chaque S^k est une fonction lisse à support compact centrée autour du point d'injection de l'injecteur correspondant. La distribution en rayon initial est approximée par une loi log-normale basée sur des mesures expérimentales. Puisque le rapport des périodes d'injection des 4 injecteurs sont des nombres rationnels, on peut définir une période globale liée à l'ensemble des 4 injecteurs. Étant données les périodes d'injections reportées dans le tableau 3.1, le cycle d'injection global est périodique après une transition initiale de 64s, avec une période de 192s. 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 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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho_e C_{p,e} \int_{\Omega} (\Theta_{n+1} - \Theta_0) dx}{t_{n+1}} = 0, \quad (3.52)$$

ce qui correspond à la condition :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} \int_{\Omega} j \cdot j dx &= C_{p,Al} (\Theta_{Init} - \Theta_{Inj}) \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k dr dx \\ &\quad p^{k+1} \leq n+1 \\ &\quad + \Delta H_{Diss} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_{m=0}^n \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,m+1}^k - n_{p,m}^k) dr dx \end{aligned} \quad (3.53)$$

en considérant (3.50). Le premier terme du membre de droite de (3.53) est égal à

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

en vertu de (3.51). Pour que le deuxième terme du membre de droite de (3.53) converge, il est suffisant que chaque population $k \geq 1$ se dissolve en un temps fini donné quelque soit

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE 55

k . Plus précisément, les populations n_p^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

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

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 (3.53) se réduit à

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

Ainsi finalement,

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

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

$$\sigma = \frac{\int_{\Omega} j \cdot j dx}{(C_{p,\text{Al}} (\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \oplus \Delta H_{\text{Diss}}) \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F}}. \quad (3.54)$$

Je n'ai pas compris!

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 déformation 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 deux réels D^M , D^T pour tout $x \in \Omega$ de la manière suivante :

Les unités sont à voir !

$$D_{\Theta}(x) = D_c(x) = D^M + D^T \left(2 \sum_{i,j} \mathcal{E}_{ij}(x) \mathcal{E}_{ij}(x) \right)^{1/2}, \quad (3.55)$$

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

$$\mathcal{E}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.56)$$

$$[D_{\Theta}] = \frac{W}{\text{K.m}}$$

$$[D_c] = \frac{m^2}{s}$$

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

Voir tableau

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 (3.27). 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 atteint un état stationnaire périodique lié à la période du cycle d'injection après un temps

TABLE 3.2 – Paramètres physiques et paramètres liés à la cuve AP32 qui interviennent dans le transport et la dissolution de poudre d'alumine.

Quantité	Valeur	Unités	Description
ρ_e	2130	kg m^{-3}	Masse volumique du bain électrolytique
ρ_{Al}	3960	kg m^{-3}	Masse volumique de l'oxyde d'aluminium
$C_{p,e}$	2945	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Chaleur spécifique du bain électrolytique liquide
$C_{p,\text{Al}}$	1200	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Chaleur spécifique de l'oxyde d'aluminium
g	9.81	m s^{-2}	Accélération de la gravité terrestre
I	320 000	A	Courant électrique total
F	96 485.33	C mol^{-1}	Constante de Faraday
η_F	0.945	[]	Rendement de Faraday de l'électrolyse
$[\text{Al}_2\text{O}_3]$	0.102	kg mol^{-1}	Masse molaire de l'oxyde d'aluminium
Θ_{Init}	1223	K	Température initiale du bain électrolytique
Θ_{Inj}	423	K	Température d'injection des particules d'alumine
Θ_{Liq}	1218	K	Température du liquidus du bain électrolytique
Θ_{Crit}	1218.86	K	Température critique de dissolution dans le bain électrolytique
K	0.5×10^{-9}	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Taux de dissolution des particules d'alumine
ΔH_{Diss}	5.3×10^5	J kg^{-1}	Enthalpie de dissolution de l'oxyde d'aluminium
σ	≈ 900	S m^{-1}	Conductivité électrique du bain électrolytique
D^M	5×10^{-4}	m s^{-1}	Diffusivité moléculaire dans le bain
D^T	5×10^{-4}	m s^{-1}	Diffusivité turbulente dans le bain) A voir avec le qui prendra !
μ	2×10^{-3}	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$	Viscosité laminaire du bain électrolytique
c_{Sat}	1689.7	mol m^{-3}	Concentration de saturation de l'alumine dissoute
$c_{\text{Sat},\%w}$	7.8	w%	Concentration de saturation de l'alumine dissoute
c_{Init}	635.3	mol m^{-3}	Concentration initiale de l'alumine dissoute
$c_{\text{Init},\%w}$	3.0	w%	Concentration initiale de l'alumine dissoute

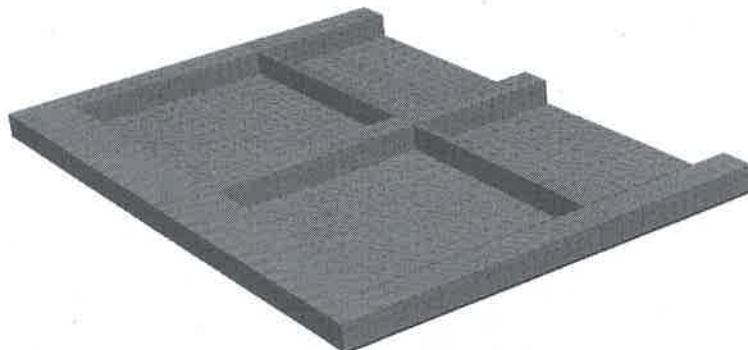


FIGURE 3.6 – Aperçu du maillage du domaine occupé par le bain électrolytique dans la cuve AP32.

d'une partie

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 stationnaire 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 stationnaire 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 :

$$c(0, x) = c_{\text{Init}}, \quad \forall x \in \Omega,$$

$$\Theta(0, x) = \Theta_{\text{Init}}, \quad \forall x \in \Omega,$$

où c_{Init} , Θ_{Init} sont donnés dans le Table 3.2. Remarquons que Le paramètre Θ_{Init} est reporté dans la table 3.2. 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]. On peut voir sur la figure 3.6 un aperçu du maillage de Ω qui correspond à l'une des extrémités de la cuve. Le maillage est fortement anisotrope, avec des rapports d'aspect d'environ 25 dans l'ACD. Le diamètre des mailles est compris entre 38cm (aux extrémités de la cuve) et 9cm (dans l'ACD et les canaux). Le maillage comporte 282 240 éléments tétraédriques. On choisit le nombre de discréétisation des rayons des particules $M = 5$ et $\Delta r = 40 \mu\text{m}$. Enfin on fixe $\Delta t = 1 \text{ s}$ et $T = 10 000 \text{ s}$, le temps auquel on veut évaluer la concentration.

CHAPITRE 3. POPULATIONS DE PARTICULES

58

Chaque hypothèse doit occuper une ligne désosée

- les particules d'alumine ne chute pas dans le bain, i.e. ($w = 0$) pour lequel les particules commencent à se dissoudre instantanément, c'est-à-dire que $\Theta_{\text{Lat}} = 0$, et pour lequel la vitesse de dissolution ne dépend pas de température du bain Θ . Plus précisément, la vitesse de dissolution définie par (2.51) est remplacée par

$$\kappa(c, \Theta) = \begin{cases} K \frac{c_{\text{Sat}} - c}{c_{\text{Sat}}} & \text{si } 0 \leq c \leq c_{\text{Sat}}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.57)$$

Cette situation est équivalente à supposer que la température du bain Θ reste largement supérieure à la température critique Θ_{Crit} au cours du calcul, de sorte à ce que le terme exponentiel dans (2.51) soit proche de zéro.

Un des objectifs recherchés par les opérateurs de cuve industrielles est de minimiser les écarts de concentration autour de la concentration d'alumine dissoute optimale. Pour évaluer le champ de concentration par rapport à cet objectif, nous proposons de représenter la variance du champ de concentration c dans Ω au cours du temps définie par :

$$\text{Var}_c(t) = \sqrt{\int_{\Omega} (c(t, x) - \bar{c}(t))^2 dx}, \quad (3.58)$$

où \bar{c} est la moyenne de c sur Ω ; *c'est-à-dire*

$$\bar{c}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} c(t, x) dx. \quad (3.59)$$

Il

et $|\Omega|$ est le volume de Ω . Clairement, la situation idéale où la concentration d'alumine est uniforme dans tout l'électrolyte correspond à une variance de c nulle. A l'inverse, plus c s'écarte de sa valeur moyenne, plus sa variance est importante.

La valeur de Var_c au cours du temps offre un moyen d'évaluer si le système a atteint l'état stationnaire périodique recherché. Bien entendu ce n'est qu'une condition nécessaire, la variance d'une fonction stationnaire est elle-même stationnaire, mais l'inverse n'est pas nécessairement vrai. En pratique on prend soin de vérifier que la différence en norme L^2 à deux instants successifs séparés par la période du cycle d'injection global P est inférieure à 1%. Pour tous les calculs présentés dans cette partie, la solution satisfait ce critère pour $T = 10\,000$ s.

La figure 3.7 représente l'évolution de la variance de la concentration au cours du temps. On remarque une phase initiale lorsque $t \in [0, 500]$, au cours de laquelle la variance croît rapidement. Cette croissance ralenti quand la concentration approche de l'état stationnaire, et à partir de $t \approx 4500$ s nous pouvons considérer que la concentration est dans un état stationnaire et périodique. Les fluctuations de Var_c que l'on peut observer sur la figure 3.7 sont dues aux injections de poudre d'alumine dans le bain. Immédiatement après l'injection, la dissolution 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 stationnaire 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%.

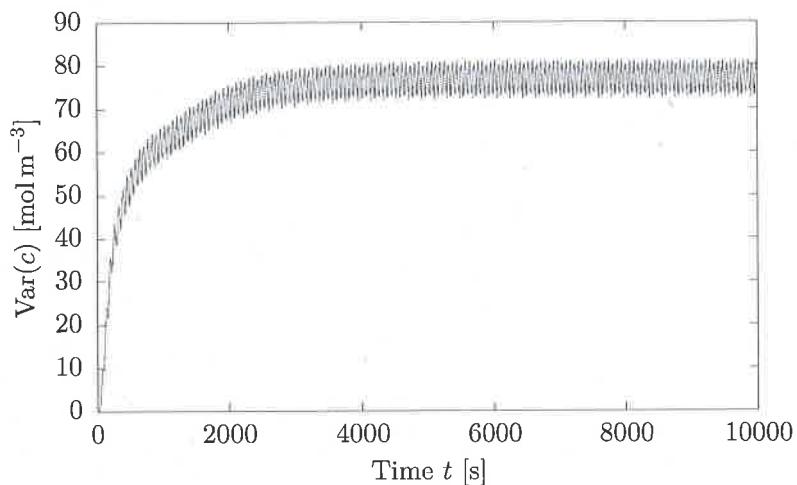


FIGURE 3.7 – Évolution de Var_c au cours du temps sur l'intervalle $[0, T]$ dans le bain électrolytique de la cuve AP32 lorsque la température n'est pas prise en compte dans la vitesse de dissolution des particules.

Puisque, lorsque l'état stationnaire 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.

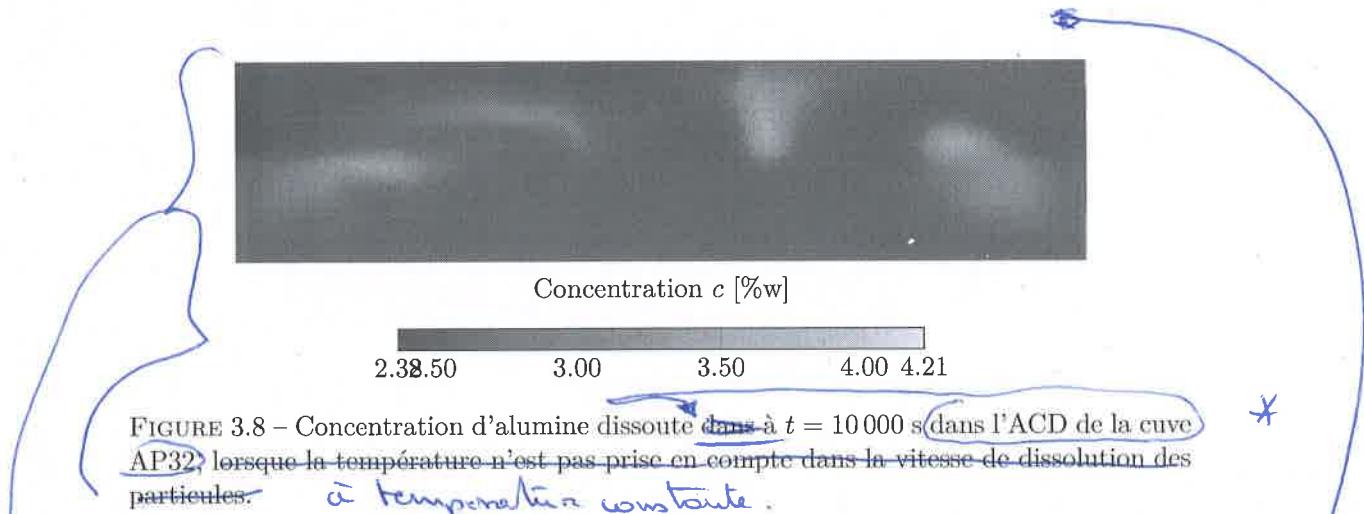


FIGURE 3.8 – Concentration d'alumine dissoute ~~dans~~ à $t = 10\ 000$ s dans l'ACD de la cuve AP32 lorsque la température n'est pas prise en compte dans la vitesse de dissolution des particules. à température constante.

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, 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 isolés. La région centrale en amont des points d'injections est remarquablement uniforme avec une concentration proche de 3 %w. (voir figure 3.2)

Nous consacrons maintenant le reste de cette partie au modèle de transport et dissolution d'alumine qui dépend de la température du bain dans le bain de la cuve AP32, et l'on étudie l'influence des nouveaux paramètres que ce modèle introduit, en particulier le temps de latence Θ_{Lat} , la température initial du bain Θ_{Init} , la température critique Θ_{Crit} et la vitesse de chute des particules dans le bain w .

le temps et le temps d'introduction

Sensibilité par rapport au temps de latence Nous avons montré dans le paragraphe 2.2 que le temps de latence qui précède le début de la dissolution d'une particule lâchée dans le bain d'une cuve d'électrolyse est de l'ordre de 1×10^{-1} s. Ce temps caractéristique est négligeable devant le temps de dissolution qui est au minimum de 10 s pour le choix de paramètres reportés dans la table 3.2.

Cependant, lors de l'injection d'une dose d'alumine typique, les particules ne peuvent plus être suffisamment dispersées pour que les hypothèses du modèle introduit dans la section 2.2 soient satisfaites, et c'est l'effet collectif de l'ensemble des particules qui prédomine. Selon [Das15], toutes les particules d'une dose subissent un temps de latence de l'ordre de 1 s quel que soit leur taille.

Nous proposons maintenant de déterminer si la distribution de concentration dans le bain électrolytique est sensible au temps de latence de dissolution des particules lors de leur injection. Dans ce but, nous présentons les résultats de 4 calculs du champ de concentration d'alumine dissoute c dans le bain électrolytique de la cuve AP32 avec le modèle de transport et dissolution de particules en fonction de la température du bain, avec les paramètres reportés dans la table 3.2 à l'exception du temps de latence Θ_{Lat} pour lequel nous fixons successivement $\Theta_{Lat} = 1, 2, 5$ et 10 secondes.

La figure 3.9 présente la distribution de concentration d'alumine dissoute dans l'ACD de la cuve AP32 à $T = 10\ 000$ s pour les différentes valeurs de Θ_{Lat} croissantes de haut en bas.

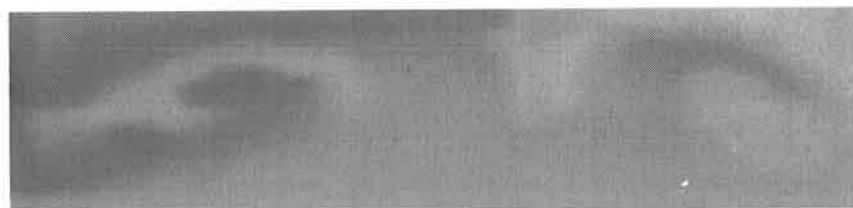
Les quatre champs de concentration présentés sur la figure 3.9 sont très similaires. Les maximums et les minimums de la concentration d'alumine sont atteints sont les mêmes et apparaissent aux mêmes endroits. On remarque malgré tout de petites modifications de la distribution d'alumine dissoute au voisinage des points d'injection. On observe par exemple autour du point d'injection #2 que la concentration est plus diffuse lorsque Θ_{Lat} croît.

Nous nous intéressons maintenant à l'effet de la température initiale du bain sur la distribution de la concentration d'alumine dissoute.

Sensibilité par rapport à la surchauffe initiale du bain La vitesse de dissolution des particules dans l'électrolyte (2.50) dépend de la température locale de celui-ci. Comme

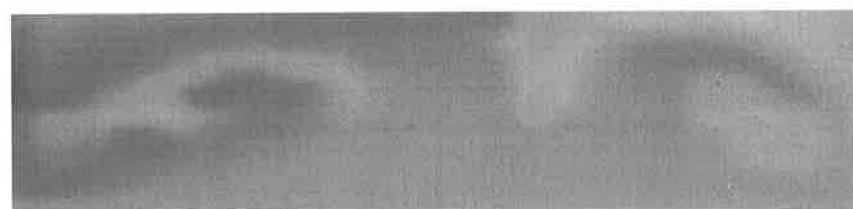
Amélioré sur le haut de la page 62 !

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE 61



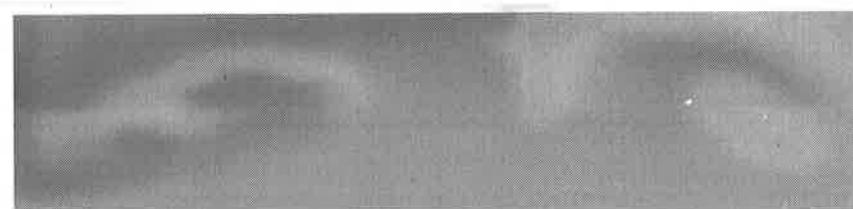
Concentration [%w]

2.54 2.75 3.08



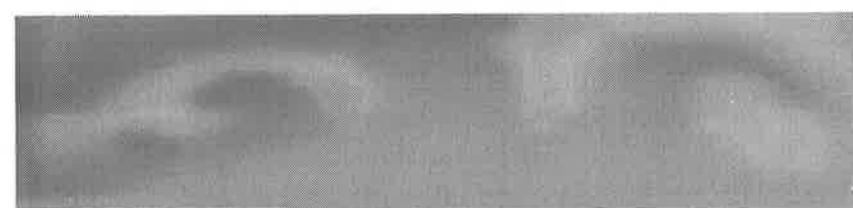
Concentration [%w]

2.54 2.75 3 3.09



Concentration [%w]

2.54 2.75 3 3.09



Concentration [%w]

2.54 2.75 3 3.09

FIGURE 3.9 – Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32 à $t = 10\,000$ second. De haut en bas, le temps de latence de dissolution $T_{\text{Lat}} = 1\text{s}, 2\text{s}, 5\text{s}$ et 10s .

*

précisé plus haut dans cette section, sous l'hypothèse que chaque dose de particules se dissout entièrement en un temps fini, le terme source d'énergie par effet Joule est construit de sorte à maintenir une quantité d'énergie thermique constante en moyenne dans le temps. En l'absence de transition de phase dans l'électrolyte, cela signifie que la température moyenne au cours du temps de celui-ci est maintenue constante. Par conséquent, une température initiale du bain Θ_{Init} plus élevée résulte en une température Θ dans l'état stationnaire périodique plus élevée en moyenne au cours d'une période du cycle d'injection global.

Nous proposons d'évaluer la sensibilité de la dissolution d'alumine dans le bain électrolytique en fonction de la température de celui-ci en faisant varier la température initiale du bain. On note Θ_{Sur} la température de surchauffe initiale du bain au-dessus de sa température de liquidus :

$$\Theta_{\text{Sur}} = \Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Liq}}. \quad (3.60)$$

La figure 3.10 présente la distribution de la concentration d'alumine dissoute c dans l'ACD de la cuve AP32 issue de quatre calculs, pour lesquels les paramètres sont reportés dans la table 3.2, à l'exception de la température initiale du bain Θ_{Init} . La température initiale du bain est fixée à $\Theta_{\text{Init}} = \Theta_{\text{Liq}} + \Theta_{\text{Sur}}$ avec $\Theta_{\text{Sur}} = 1, 2, 5$ et 10 kelvin.

Mettre une référence à la section qui précède!

*

+

*

*

Les champs de concentration sur la figure 3.10 correspondent de haut en bas à des températures de surchauffe Θ_{Sur} croissante. On remarque en particulier sur le dernier champ de concentration de cette figure, qui correspond à $\Theta_{\text{Sur}} = 10$ K, la similarité avec la solution de référence illustrée sur la figure 3.8 pour laquelle la température ne joue pas de rôle dans la dissolution des particules. Les valeurs maximales atteintes par la concentration d'alumine dissoute sont cependant plus faibles.

Le premier champ de concentration de la figure 3.10 correspond à une température de surchauffe $\Theta_{\text{Sur}} = 1$ K et s'écarte significativement de la solution de référence. La concentration d'alumine dissoute est homogène au point de ne plus pouvoir distinguer la position des injecteurs.

de la Figure 3.8

La dissolution des particules d'alumine dépend d'une part du fait que la température de l'électrolyte dans leur voisinage doit être supérieure à la température du liquidus Θ_{Liq} , et d'autre part de la taille de la région de transition entre le régime de dissolution contrôlé par la diffusion de l'énergie thermique et le régime de dissolution contrôlé par la diffusion de l'alumine dissoute à proximité de la surface des particules. La transition entre ces deux régimes est contrôlée par le paramètre Θ_{Crit} . Dans le paragraphe suivant nous proposons d'évaluer la distribution de concentration dans le bain électrolytique en fonction du paramètre Θ_{Crit} .

Question: Si Θ_{Sur} est petit, ou doit pouvoir moins injecter de poudre non?

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE 63

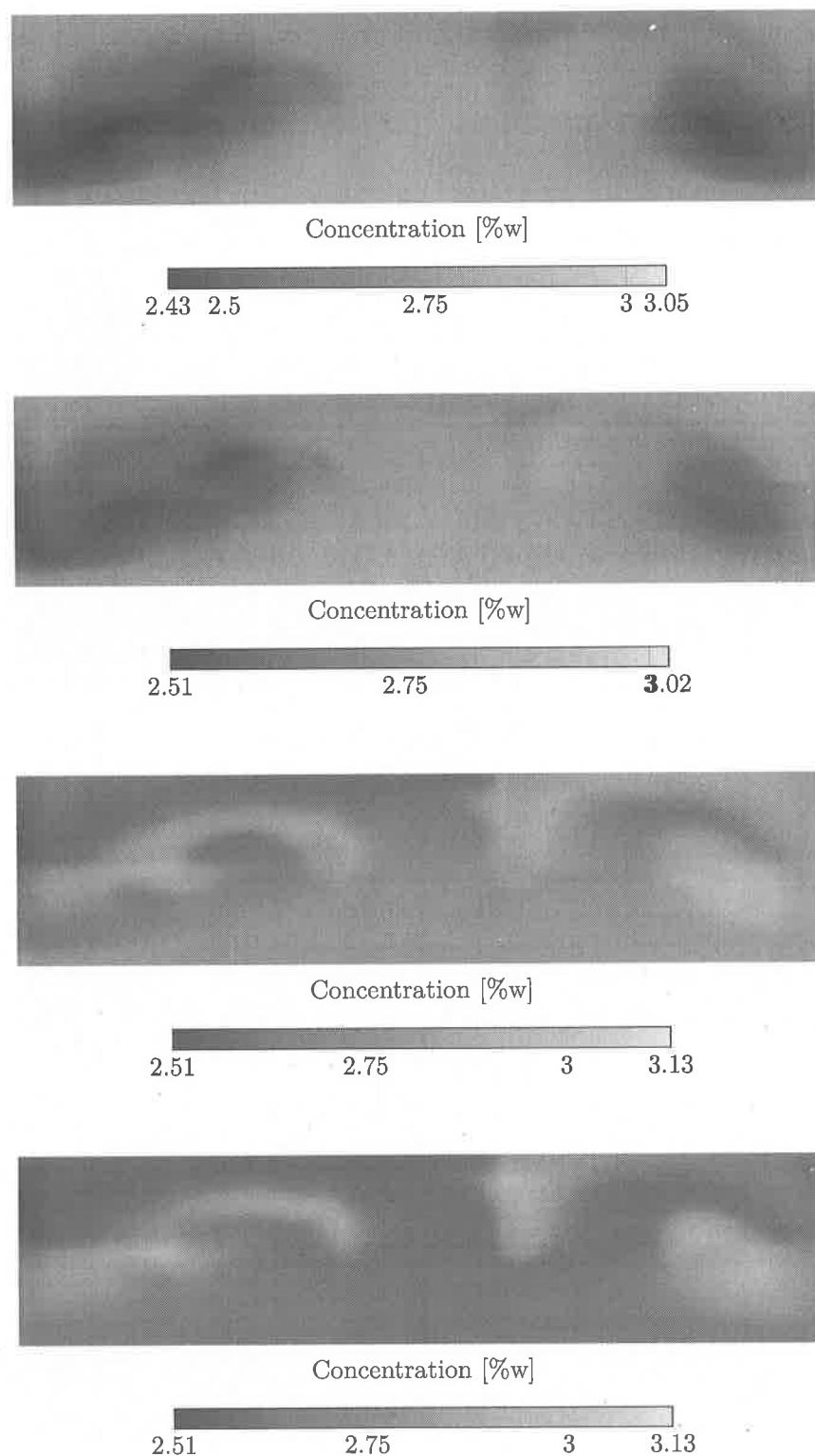


FIGURE 3.10 – Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32 à $t = 10\,000$ s. De haut en bas, la température de surchauffe initiale est $\Theta_{\text{Sur}} = .1, 2, 5$ et 10 .

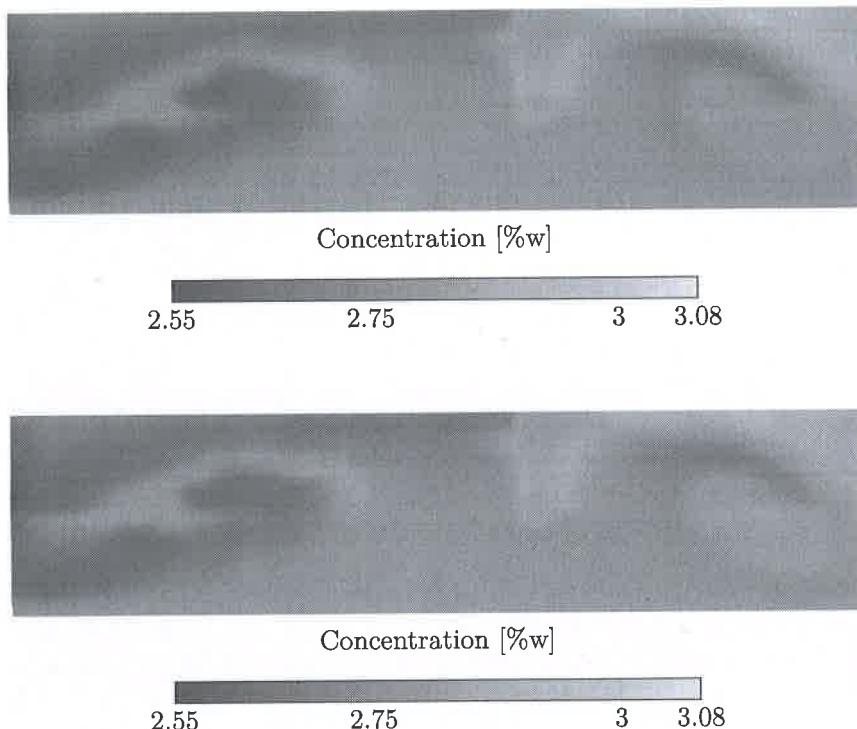


FIGURE 3.11 – Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32 à $t = 10\ 000$ s. En haut, $T_{\text{Crit}} = T_{\text{Liq}}$. En bas, $T_{\text{Crit}} = T_{\text{Liq}} + 0.86$ K.

Sensibilité par rapport à la température critique de transition Dans la limite où $\Theta_{\text{Crit}} - \Theta_{\text{Liq}}$ devient grand, on voit facilement dans l'expression (2.51) que le taux de dissolution des particules, et donc leur vitesse de dissolution, devient nulle dans l'intervalle de température que le bain électrolytique peut raisonnablement admettre. Par conséquent, si la valeur de $\Theta_{\text{Crit}} - \Theta_{\text{Liq}}$ est trop élevée, le temps dissolution des particules peut devenir arbitrairement long, ce qui n'est pas réaliste dans le cas d'une cuve d'électrolyse d'aluminium industrielle.

A l'inverse, en prenant la limite $\Theta_{\text{Crit}} \rightarrow \Theta_{\text{Liq}}$, le taux de dissolution (2.51) s'écrit :

$$\kappa(c, \Theta) = \begin{cases} K \frac{c_{\text{Sat}} - c}{c_{\text{Sat}}} & \text{si } \Theta \geq \Theta_{\text{Liq}} \text{ et } 0 \leq c \leq c_{\text{Sat}}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.61)$$

En d'autres termes, la dissolution des particules est contrôlée uniquement par la concentration locale c si $\Theta \geq \Theta_{\text{Liq}}$, et ne se dissolvent pas sinon.

Nous présentons maintenant la distribution de concentration d'alumine dissoute dans le bain de la cuve AP32 dans l'état stationnaire périodique résultant de deux calculs. Comme précédemment, l'ensemble des paramètres du modèle de transport et dissolution est reporté dans la table 3.2. Pour le premier calcul on fixe $\Theta_{\text{Crit}} = \Theta_{\text{Liq}}$, et le taux de dissolution est donné par (3.61). Pour le deuxième calcul on fixe $\Theta_{\text{Crit}} = \Theta_{\text{Liq}} + 0.86$ K.

La figure ?? présente la concentration d'alumine dans l'ACD de la cuve AP32 à $t = 10\ 000$ s, lorsque l'état stationnaire périodique est atteint. Le premier champ de concentration correspond au cas où $\Theta_{\text{Crit}} = \Theta_{\text{Liq}}$, tandis que le deuxième champ de concentration

8

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE 65

correspond au cas où $\Theta_{\text{Crit}} = \Theta_{\text{Liq}} + 0.86$ K. Même si l'on parvient à observer de petites variations entre ces deux solutions, en particulier dans le coin aval droite et autour du point d'injection #4, ces deux champs de concentration sont indistinguables l'un de l'autre.

Finalement, nous nous penchons sur l'effet de la chute gravitationnelle des particules d'alumine sur le champ de concentration d'alumine dissoute.

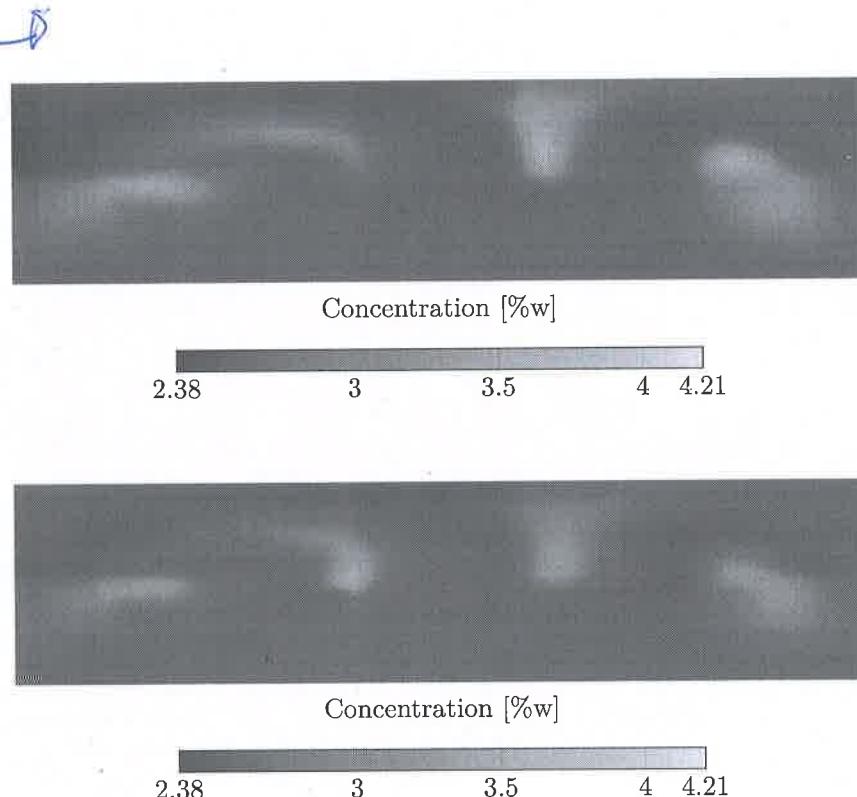


FIGURE 3.12 – Champ de concentration d'alumine dissoute dans l'ACD de la cuve AP32 à $t = 10\ 000$ s. En haut, dissolution des particules sans chute gravitationnelle dans le bain. En bas, dissolution des particules avec chute gravitationnelle dans le bain.

Effet de la vitesse de chute des particules sur leur dissolution Nous avons déterminé, dans la section 2.5, vitesse de chute et la profondeur maximale atteinte dans le fluide ~~des~~ particules soumis à la gravité et à une force de traînée de Stokes. Dans le cas le plus favorable, les particules de plus grande taille peuvent chuter de plusieurs centimètres dans le bain électrolytique avant de se dissoudre complètement. *S'agit-il de la viscosité?*

Dans ce dernier paragraphe, nous proposons de comparer deux calculs qui illustrent l'effet de la chute des particules dans le bain sur la concentration d'alumine dissoute dans celui-ci.

Pour le premier calcul, qui joue le rôle de point de référence, les paramètres sont reportés dans la table 3.2 et nous annulons l'accélération de la gravité $g = 0$, ce qui donne lieu à une vitesse de chute strictement nulle, soit $w(r) = 0$ pour tout $r > 0$. De plus, l'injection des doses d'alumine a lieu dans le canal central comme indiqué sur la figure 3.5, au niveau de l'ACD.

Pour le deuxième calcul la valeur de g est restaurée, telle que donnée dans la table 3.2 et la vitesse de chute des particules est donnée par l'expression 3.2. Cependant, les points d'injections sont déplacés verticalement vers le haut du canal.

Nous avons montré dans la section 2.5 que les profondeurs maximales atteintes par les particules lorsque la viscosité du fluide est supérieure ou égale à $1 \times 10^{-2} \text{ kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ sont de l'ordre du millimètre. Or, la taille verticale des mailles dans les canaux ne permet pas de capturer des effets de cette amplitude. Pour cette raison, nous choisissons pour le paramètre de viscosité μ , qui intervient dans la définition (3.2), la viscosité laminaire du fluide, soit $\mu = 2 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$. Cette valeur de la viscosité donne lieu à des profondeurs de chute maximale de particule dans le bain de l'ordre de quelques centimètres.

La figure 3.12 représente les champs de concentration dans l'ACD de la cuve AP32 obtenus par ces deux calculs, évalué à $t = 10\,000 \text{ s}$, lorsque l'état stationnaire périodique est atteint.

C'est
dissoutable !

**

On remarque quelques différences entre les deux solutions, essentiellement au niveau des points d'injection. Les valeurs maximales de la concentration d'alumine dissoute à proximité des points d'injection #1, #3 et #4 sont plus grandes lorsque lorsque la chute des particules est négligée. On constate l'effet inverse pour l'injecteur #2 : la concentration d'alumine dissoute sous cet injecteur atteint un maximum local plus marqué lorsque la chute des particules est pris en compte. Dans le reste du bain, la distribution de concentration est similaire entre les deux calculs.

Nous concluons cette partie par une discussion de ces résultats.

3.5 Discussion et conclusion

laquelle

?

Dans cette partie, nous avons proposé un modèle de transport et dissolution des particules d'alumine dans le bain électrolytique d'une cuve d'électrolyse d'aluminium. La dissolution des particules dépend de leur taille, de la concentration d'alumine dissoute dans leur voisinage, et de la température du bain électrolytique. Nous avons proposé un schéma numérique pour approcher la densité de particules n_p , concentration d'alumine dissoute c et la température de l'électrolyte Θ dans le bain électrolytique basé sur un splitting en temps des différentes équations, et une méthode élément fini Lagrange continue, linéaire par morceau décrite dans [Hof11] pour la discrétisation en espace. Nous avons ensuite appliqué ce modèle au cas de la cuve industrielle AP32 et calculé la distribution du champ de concentration c dans le bain électrolytique jusqu'à ce que le système atteigne un état stationnaire périodique. Nous avons évalué le comportement de cette distribution de concentration stationnaire en fonction des nouveaux paramètres introduits par ce modèle par rapport au travail de T. Hofer [Hof11].

X

Tout d'abord, nous avons montré que le temps de latence de dissolution des particules a un impact négligeable sur la distribution de concentration. La vitesse de l'écoulement dans le bain aux points d'injection est de l'ordre de $2 \text{ à } 3 \text{ cm s}^{-1}$. Dans le cas le plus extrême, c'est-à-dire lorsque $\Theta_{\text{Lat}} = 10 \text{ s}$, les particules sont transportées sur une distance maximale de 20 à 30 cm avant de commencer à se dissoudre, ce qui correspond à environ 2% de la longueur de la cuve. Dans la mesure où un tel temps de latence surestime certainement celui des particules dispersées dans le bain d'une cuve d'électrolyse, on peut raisonnablement négliger l'effet d'un tel phénomène dans le cadre du modèle proposé dans cette section et poser $\Theta_{\text{Lat}} = 0$, ce qui réduit la complexité de l'implémentation du modèle et le temps de calcul nécessaire.

Remarquons enfin qu'ici nous avons supposé que l'ensemble des particules qui constituent une dose d'alumine pénètrent et se dispersent dans le bain électrolytique. Dans une cuve industrielle, il peut arriver qu'une partie des particules s'agglomèrent après être entrées en contact avec le bain, et forment ce qu'on appelle des agrégats [Das15]. Ces agrégats mettent un temps, assimilé à un temps de latence, nettement plus long à se dissoudre et par conséquent peuvent être transportés par l'écoulement du bain sur des distances bien plus grandes. La description de la formation de ces agrégats et leur déplacement dans le bain, la modélisation des phénomènes thermochimiques qui ont lieu en leur sein et la dissolution des particules qui les constituent est un sujet complexe qui sort du cadre de ce travail, et nous laissons à d'autres le loisir de l'aborde. **NON**

Nous nous sommes ensuite intéressés à la dissolution des particules dans le bain électrolytique en fonction de sa température de surchauffe Θ_{Sur} . C'est très certainement le paramètre le plus important du modèle de transport et dissolution d'alumine, qu'il faut choisir avec soin. Il est clair que si la température du bain Θ est proche de la température de liquidus Θ_{Liq} , une petite perturbation est suffisante pour Θ soit inférieure à Θ_{Liq} . Une telle perturbation intervient lorsque des particules d'alumine extraient l'énergie thermique du bain pour se réchauffer et se dissoudre. Dans une telle situation, la dissolution est fortement ralentie, et les particules sont transportées sur de longues distances, typiquement plusieurs mètres avant de se dissoudre complètement. Les particules peuvent alors déposer de la masse sous forme d'alumine dissoute dans une plus grande région, ce qui contribue à influencer et modifier significativement la distribution de l'alumine dissoute dans le bain électrolytique. A l'inverse, plus la température de surchauffe du bain est élevée, i.e., plus la température du bain s'écarte de la température du liquidus, plus la perturbation nécessaire à ce que la température du bain passe en-dessous de Θ_{Liq} est importante. A partir d'une certaine limite, l'énergie nécessaire à réchauffer et dissoudre une dose d'alumine ne constitue plus une perturbation suffisante. Dans ce cas, la température ne joue essentiellement plus de rôle dans la dissolution des particules d'alumine. Cette constatation rejoint les observations faites sur des cuves industrielles. En effet, lorsque la température de surchauffe est grande, les doses d'alumine se dissolvent plus facilement que lorsque la surchauffe est faible. La difficulté est de trouver un équilibre pour que l'alumine se dissolve suffisamment vite pour que la concentration dans le bain soit contrôlable, tout en maintenant une surchauffe aussi faible que possible pour minimiser les pertes énergétiques.

Au niveau microscopique, la réaction de dissolution des particules est contrôlée par deux mécanismes. Pour que la dissolution puisse avoir lieu, il faut d'une part que la concentration d'alumine dissoute à proximité de la particule soit inférieure à la concentration de saturation. Il faut d'autre part fournir de l'énergie à la réaction qui est endothermique. Le paramètre Θ_{Crit} contrôle la taille de la région de transition entre ces deux régimes : lorsque la température est largement supérieure à Θ_{Crit} , la vitesse de dissolution est essentiellement contrôlée par la valeur de la concentration c à proximité de la particule. Nous avons évalué la sensibilité de la distribution de concentration d'alumine dissoute dans le bain par rapport au paramètre Θ_{Crit} . Clairement, une valeur arbitrairement grande pour Θ_{Crit} bloque complètement la dissolution des particules. En revanche, lorsque Θ_{Crit} est compris dans l'intervalle $[\Theta_{\text{Liq}}, \Theta_{\text{Liq}} + 0.86]$, la distribution de concentration est insensible à la valeur précise de Θ_{Crit} . Le rôle essentiel de la température dans ce cas-là est de bloquer la dissolution des particules lorsque la température Θ est inférieure à Θ_{Liq} .

Finalement, nous avons étudié l'effet de la chute gravitationnelle des particules dans le bain sur la distribution de la concentration d'alumine dissoute. La chute des particules apportent des variations notables de la concentration uniquement autour des points d'injection, qui sont de toute manière soumis à des fluctuations importantes, due aux injections qui interviennent à intervalles réguliers au cours du cycle global d'injection. De

Sa dépend beaucoup de ça !

plus, les vitesses de chute des particules sont très certainement surestimées dans notre modèle. L'écoulement dans le canal central, dans lequel ont lieu les injections de particules, est turbulent. Cet écoulement turbulent se traduit par une viscosité effective ressentie par les particules qui est certainement supérieure à la viscosité laminaire de l'électrolyte. Les profondeurs maximales atteintes par les particules dans ce cas sont alors de l'ordre du millimètre ou inférieure. En suivant les mêmes arguments qui nous ont conduits à ne pas considérer de temps de latence, nous pouvons raisonnablement négliger la chute des particules dans le bain électrolytique et son effet sur la distribution de la concentration de l'alumine.

laquelle

Dans cette partie, nous avons supposé que la température de liquidus de l'électrolyte Θ_{Liq} ne dépend pas de la chimie du bain, et en particulier de la concentration d'alumine dissoute, que la concentration de saturation de l'alumine dissoute ne dépend ni de la chimie du bain ni de la température de celui-ci, et finalement que l'enthalpie de dissolution ΔH_{Diss} ainsi que la vitesse de dissolution K de dépendent pas de la chimie du bain. Ces hypothèses sont valides pour autant que le système s'écarte peu des conditions d'exploitations idéales. Ce n'est bien entendu pas le cas lorsqu'on considère une cuve d'électrolyse industrielle qui subit de nombreuses perturbations et peut traverser des phases d'instabilité. Un sujet de recherche futur consiste à prendre en compte ces différentes dépendances dans le modèle de transport et dissolution d'alumine dans le bain électrolytique.

OK

?

Re critique principale: Tous nos résultats sont très
descriptifs et peu quantifiés!

Méthodes numériques liées à la distribution d'alumine dans une cuve d'électrolyse de l'aluminium

Thomas Foetisch

4 janvier 2018

Table des matières

Notations	8
1 Introduction	11
1.1 Origine de l'aluminium	11
1.2 Procédé de Hall-Héroult	12
1.3 Modèle d'écoulement	16
1.3.1 Modèle de viscosité des fluides	18
1.4 Modèle de transport et dissolution de poudre d'alumine	19
1.4.1 Populations de particules	20
1.4.2 Injection des particules	23
1.4.3 Fonction de dissolution	24
1.4.4 Concentration d'alumine dissoute	25
1.4.5 Dissolution des particules	25
1.5 But du travail	26
1.6 Organisation du document	27
2 Dissolution de l'alumine	29
2.1 Introduction	29
2.2 Formation de gel et temps de latence	30
2.2.1 Résultats numériques	34
2.3 Réaction endothermique et taux de dissolution	34
2.4 Modèle de température du bain	37
2.4.1 Termes source de la température	37
2.5 Modèle de dissolution en fonction de la température	39
2.6 Modèle numérique	40
2.6.1 Discrétisation en temps	40
2.6.2 Discrétisation du terme source \dot{q}_2	41

4.2.4	Formulation avec viscosité tensorielle variable	83
4.2.5	Existence et unicité de la solution	85
4.2.6	Un modèle de transport et diffusion d'alumine	87
4.3	Discrétisation	89
4.3.1	Discrétisation en espace par une méthode d'élément finis pour le mode fondamental	89
4.3.2	Discrétisation en espace par une méthode d'éléments finis pour les harmoniques	90
4.3.3	Quadrature pour les coefficients de Fourier de la force	91
4.3.4	Reconstruction de la solution	92
4.4	Validation du modèle numérique	92
4.4.1	Une solution exacte polynomiale non triviale	92
4.4.2	Convergence de l'erreur	94
4.5	Application à l'écoulement d'une cuve d'électrolyse	98
4.5.1	Désactivation d'anodes	100
4.6	Discussion	102
 Bibliographie		 107
 Appendices		 109
 A Méthode éléments finis \mathbb{P}_1 pour le problème de convection-diffusion		 111
 B Solidification de bain à proximité d'une particule		 113
B.1	Formulation du problème de Stefan	113
B.2	Formulation faible avec une symétrie cartésienne ou sphérique	115
B.3	Solution exacte de Neumann	116
B.4	Discrétisation en temps et en espace	117
B.5	Validation numérique	118
 C Constantes physiques		 119

Table des matières

Symbol	Description
T_{Liq}	Température du liquidus du bain électrolytique.
T_{Crit}	Température critique de transition entre le régime de dissolution contrôlé par la diffusion de température et le régime de dissolution contrôlé par la diffusion moléculaire de l'alumine.
$\delta_{i,j}$	Symbol de Kronecker.
$T_{\text{Lat}}(R, T_e)$	Temps de latence avant le début de la dissolution des particules suite à l'injection dans le bain.
ΔH_{Diss}	Enthalpie latente de transition du bain électrolytique entre les phases solides et liquides.

Chapitre 1

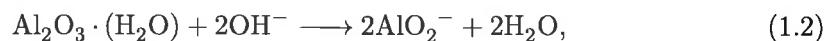
Introduction

1.1 Origine de l'aluminium

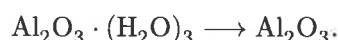
L'aluminium est un métal léger qui figure parmi les éléments métalliques les plus abondant sur Terre, avec une proportion d'environ 8% de la masse totale de la croûte terrestre. Malgré tout il n'apparaît jamais sous forme métallique en raison de sa forte affinité avec l'oxygène, et se trouve sous forme d'oxyde d'aluminium Al_2O_3 (appelé également alumine). L'alumine est un constituant de différents minéraux, mais seul la bauxite est utilisée pour la production de l'aluminium.

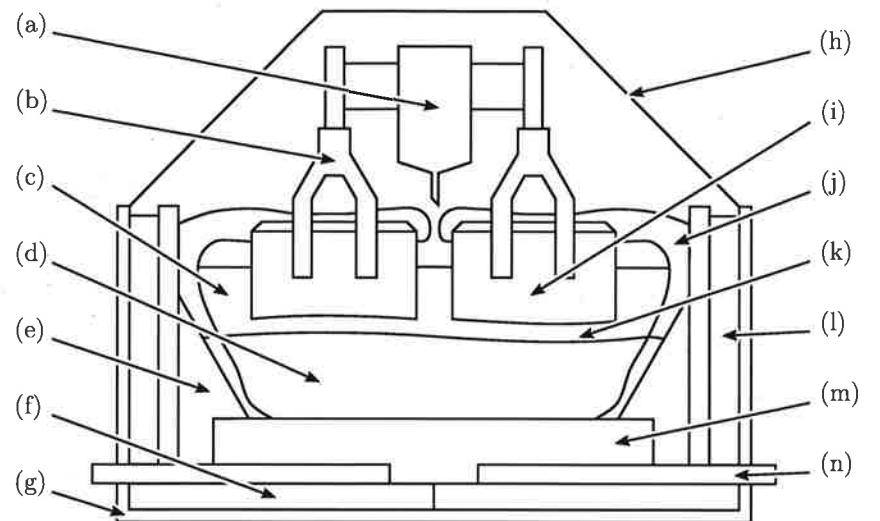
La bauxite est constituée principalement par de l'oxyde d'aluminium hydraté, de silicate, d'oxyde de fer et d'impuretés en plus faibles proportions. Elle provient essentiellement d'Australie, de Chine et du Brésil. Par exemple, ces trois pays combinés ont extrait plus de 179 millions de tonnes de bauxite au cours de l'année 2014 [www.mineralinfo.fr].

Le procédé de Bayer permet ensuite d'isoler et purifier l'alumine de la bauxite. Après concassage et broyage du minéral, la soude caustique chaude dissout l'alumine :



Les autres composés restent insolubles, et sont éliminés par filtration. En refroidissant le filtrat, de l'hydrate d'alumine est récupéré par précipitation. Finalement, cet hydrate d'alumine est calciné pour éliminer les molécules d'eau :





- | | |
|--------------------------------------|--------------------------------------|
| (a) Injecteur de dose d'alumine | (h) Couvercle |
| (b) Broches de connection des anodes | (i) Anodes |
| (c) Bain électrolytique | (j) Talus, croûte de bain solidifiée |
| (d) Aluminium métallique liquide | (k) Interface bain-métal |
| (e) Pâte de brasquage | (l) Isolation réfractaire |
| (f) Isolation réfractaire | (m) Cathode |
| (g) Caisson | (n) Busbar collectrice |

FIGURE 1.1 – Représentation de la structure des éléments internes d'une cuve d'électrolyse d'aluminium. Vue de coupe.

de densité assure que, dans un champ de gravité vertical, l'interface soit essentiellement horizontale.

Le bain électrolytique présente une densité volumique légèrement plus faible d'environ 10% que celle de l'aluminium métallique, ce qui lui permet de surnager sur celui-ci. Dans le bain sont maintenues deux rangées d'anodes faites de carbone également. Le courant électrique provient des anodes et traverse le bain pour atteindre l'interface avec le métal liquide pour être finalement collecté par la cathode. Cette épaisseur de bain dans lequel a lieu la réaction d'électrolyse est appelée ACD². Dans une cuve industrielle moderne, l'ACD est de l'ordre de 20[mm] à 40[mm]. Le bain ayant une faible conductivité, on cherche à diminuer au maximum cette distance, afin de minimiser les pertes énergétiques par effet Joule. Le procédé d'électrolyse étant continu, il faut remplacer régulièrement l'alumine dissoute consommée par l'électrolyse. Une série d'injecteurs alimentent le bain en oxyde d'aluminium sous forme de fine poudre solide. La surface du bain est protégée par une croûte de bain solidifié et de poudre d'alumine. Pour cette raison, les injecteurs doivent

2. Acronyme anglais de *Anode-Cathode Distance*.

Par la réaction d'électrolyse, l'alumine dissoute est transformée en aluminium métallique au niveau de l'interface avec le métal liquide, qui joue le rôle de cathode. Du côté de l'anode, l'électrolyse produit de l'oxygène, qui se recombine immédiatement avec le carbone de l'anode. Le CO₂ qui en résulte forment des bulles millimétriques qui remontent à la surface pour s'échapper. C'est cette production de CO₂ qui provoque l'érosion des anodes.

Le courant qui traverse une cuve industrielle peut atteindre 500000 [A] dans les installations les plus modernes. Un tel courant crée à proximité des conducteurs des champs d'induction électromagnétique importants. En particulier, le bain et le métal liquide étant conducteurs, des forces de Lorentz importantes résultent du passage du courant à travers les fluides, et les mettent en mouvement. L'écoulement des fluides dans la cuve est un aspect important du procédé d'électrolyse pour plusieurs raisons. Tout d'abord le mouvement des fluides permet d'accélérer la dissipation de la chaleur produite par effet joule. Une distribution de température uniforme permet d'abaisser la température moyenne d'opération de la cuve, et de diminuer la consommation énergétique. La formation de talus stables, portions de bain gelé en périphérie de la cuve, permet de protéger les parois de celle-ci de la corrosion par le bain, et d'en prolonger la durée de vie. Enfin, l'alimentation en poudre d'alumine ne pouvant avoir lieu qu'en un nombre restreint de point, une bonne répartition de la concentration d'alumine dissoute dépend du brassage dû à l'écoulement dans le bain.

Pour les raisons évoquées ci-dessus, il est essentiel de maintenir les fluides en mouvement dans une cuve d'électrolyse de Hall-Héroult. Cependant, de tels mouvements sont aussi la source de difficultés d'exploitation. Le bain électrolytique est l'élément du système qui présente la conductivité électrique la plus basse. Pour des raisons d'économie d'énergie, on cherche à diminuer au maximum la distance entre le plan anodique et la surface de l'aluminium liquide, pour réduire les pertes par effet joule. Les écoulements dans les fluides perturbent et déforment l'interface libre bain-métal, au risque que ce dernier entre en contact avec les anodes provoquant un court-circuit. Une telle situation, qui risque de déstabiliser le système et perturber les cuves voisines, est à éviter à tout prix.

De fait, l'optimisation de l'exploitation d'une cuve d'électrolyse de Hall-Héroult, tant en terme de consommation énergétique qu'en terme de qualité de métal produit et d'impact sur l'environnement est une tâche complexe, dont les développements s'étalent maintenant sur plus de 100 ans.

Dans cette thèse nous nous intéresserons à la modélisation numérique des phénomènes physiques évoqués. La distribution de la concentration d'alumine dissoute dans le bain

forment deux phases distinctes. L'interface entre les deux fluides $\Gamma_I = \bar{\Omega}_e \cap \bar{\Omega}_m$ est paramétrée par une fonction $h(t, x_1, x_2)$, $t \in \mathbb{R}^+$ et $(x_1, x_2) \in \Lambda$ où Λ est un ouvert de \mathbb{R}^2

$$\Gamma_I(t) = \{(x_1, x_2, h(t, x_1, x_2)) \in \mathbb{R}^3 \mid (t, x_1, x_2) \in [0, \infty[\times \Lambda, \Lambda \subset \mathbb{R}^2\}. \quad (1.6)$$

On note $\vec{n} : \Gamma_I \rightarrow \mathbb{R}^3$ le vecteur normal unitaire en tout point de l'interface, dirigé vers Ω_e .

Le bord du domaine $\Gamma = \partial\Omega$ est partitionné en deux sous-domaines : $\Gamma = \bar{\Gamma}_D \cup \bar{\Gamma}_R$ tels que $\Gamma_D \cap \Gamma_R = \emptyset$. L'ensemble Γ_D correspond à la partie du bord sur laquelle sont appliquées des conditions de Dirichlet, tandis que Γ_R correspond à la partie du bord sur laquelle sont appliquées des conditions de Robin.

Le tenseur des contraintes dans le fluide est défini par :

$$\sigma(\vec{u}) = \tau(\vec{u}) - pI_{3 \times 3}, \quad (1.7)$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses et $I_{3 \times 3}$ est le tenseur identité. Les fluides sont supposés newtoniens, et le tenseur des contraintes visqueuses s'écrit en fonction de la partie symétrique du tenseur des déformations et de la viscosité dynamique :

$$\tau = 2\mu \varepsilon(\vec{u}), \quad (1.8)$$

avec $\varepsilon(\vec{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + (\vec{u})^t)$ le tenseur de déformation. Le choix du paramètre μ fait l'objet du paragraphe 1.3.1

Les deux fluides étant immiscibles, l'écoulement sur l'interface doit être parallel à celle-ci pour éviter toute inter-pénétration d'un fluide dans l'autre :

$$\vec{u}(t, \vec{x}) \cdot \vec{n}(t, \vec{x}) = 0, \quad \forall (t, \vec{x}) \in [0, \infty[\times \Gamma_I. \quad (1.9)$$

Ici on note $[g]_{\Gamma_I} = g|_{\Omega_e} - g|_{\Omega_m}$ le saut de la quantité g sur l'interface entre les deux fluides. Les fluides étant visqueux, il ne peut y avoir de discontinuité du champ de vitesse à l'interface :

$$[\vec{u}]_{\Gamma_I} = 0, \quad \forall (t, \vec{x}) \in [0, \infty[\times \Gamma_I. \quad (1.10)$$

Finalement l'interface doit se trouver dans un état d'équilibre mécanique, c'est-à-dire que le saut des forces $\sigma \vec{n}$ doit s'annuler à l'interface :

$$[\sigma \vec{n}]_{\Gamma_I} = 0, \quad \forall (t, \vec{x}) \in [0, \infty[\times \Gamma_I. \quad (1.11)$$

pression à l'aide d'un noyau de convolution en temps et en espace G :

$$\bar{u}(t, \vec{x}) = (G * u)(t, \vec{x}), \quad \bar{p}(t, \vec{x}) = (G * p)(t, \vec{x}). \quad (1.14)$$

Ici G est un filtre passe bas dont la coupure est de l'ordre de grandeur de la résolution spatiale de la méthode numérique. En filtrant les équations de Navier-Stokes (1.13) on obtient

$$\rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \rho \operatorname{div}(\bar{u} \cdot \bar{u}) = -\nabla \bar{p} + 2\mu \operatorname{div} \varepsilon(\bar{u}), \quad (1.15)$$

$$\operatorname{div} \bar{u} = 0.$$

Le terme $\rho \operatorname{div}(\bar{u} \cdot \bar{u})$ se réécrit

$$\rho \operatorname{div}(\bar{u} \cdot \bar{u}) = \rho \operatorname{div}(\bar{u} \cdot \bar{u}) + \rho \operatorname{div} \tilde{\sigma}; \quad (1.16)$$

relation qui définit le tenseur $\tilde{\sigma}$. On utilise le modèle de longueur de mélange de Smagorinski [Smagorinski,] qui consiste à poser

$$\tilde{\sigma} = \mu_T \delta^2 \left(\sum_{i,j=1}^3 |\varepsilon(\bar{u})_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \varepsilon(\bar{u}), \quad (1.17)$$

où la constante $\mu_T > 0$ est un paramètre du modèle et $\delta > 0$ une longueur caractéristique de l'écoulement. Ceci revient à chercher la solution du système d'équations de Navier-Stokes (1.13) et de Γ_I en considérant la viscosité μ comme une fonction de la vitesse \bar{u} :

$$\mu(\bar{u}) = \mu_L + \mu_T \delta^2 \left(\sum_{i,j=1}^3 |\varepsilon(\bar{u})_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.18)$$

avec μ_L la viscosité dynamique du fluide. Le détail du modèle d'écoulement et de sa résolution numérique est présenté dans [Ste09], et une présentation complète des différents modèles de turbulence et de leur application au procédé de l'électrolyse de l'aluminium se trouve dans [Rochat, 2016].

1.4 Modèle de transport et dissolution de poudre d'alumine

Dans cette section on rappelle dans un premier temps et par commodité, la formulation mathématique du modèle de transport et dissolution de poudre d'alumine proposé par [Hof11], sur lequel le présent travail se base. Dans un deuxième temps on mentionnera les

particule au cours du temps à l'endroit $x \in \Omega_e$, on a

$$\dot{R}(t) = f(c(t, x), R(t)). \quad (1.19)$$

Une discussion de la construction d'une telle fonction se trouve dans la section 1.4.3. En particulier, nous présenterons une généralisation de cette expression pour prendre en compte la température locale du bain sous la forme suivante :

$$\dot{R}(t) = f(c(t, x), R(t), T(t, x)), \quad (1.20)$$

où T est la température locale du bain.

La température des particules injectées est bien inférieure à celle de l'électrolyte. En raison de cette différence de température, une couche de bain solidifiée se forme à la surface des particules immédiatement après injection. Les particules ne se dissolvent pas tant que cette couche n'est pas entièrement résorbée. On note cet intervalle de temps entre l'injection d'une particule et le début du processus de dissolution T_{Lat} . Dans [Hof11], T_{Lat} est supposé donné et indépendant de la taille des particules. Dans le présent travail, nous relaxerons cette hypothèse, et nous discuterons de la forme de ce temps de latence et de son impact sur les prédictions du modèle dans le chapitre 2.

Supposons d'abord l'injection d'une unique population de particules d'alumine à $t = \tau_1$. On note $S_1(x, R)$ la répartition initiale de particules résultant de cette injection. On considère alors une unique population $n_p^1(t, x, R)$ identiquement nulle pour tout temps t précédent l'injection :

$$n_p^1(t, x, R) = 0, \quad \forall 0 < t < \tau_1. \quad (1.21)$$

Ensuite, pour tout temps succédant l'injection $\tau_1 < t \leq T_{End}$, la population de particule $n_p^1(t, x, R)$ satisfait l'équation

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_p^1}{\partial t}(t, x, R) + \vec{u} \cdot \nabla_x n_p^1(t, x, R) \\ + \frac{\partial}{\partial R} \left(H(t - (\tau_1 + T_{Lat})) f(c, R) n_p^1(t, x, R) \right) = 0, \end{aligned} \quad (1.22)$$

avec la condition initiale

$$n_p^1(\tau_1, x, R) = S_1(\vec{x}, R), \quad \forall (\vec{x}, R) \in \Omega_e \times \mathbb{R}^+. \quad (1.23)$$

1.4. Modèle de transport et dissolution de poudre d'alumine

On note alors $n_p(t, x, R)$ l'ensemble des particules qui se dissolvent :

$$n_p(t, x, R) = \sum_{k \in K_{\text{Diss}}(t)} n_p^k(t, x, R), \quad (1.30)$$

et $n_{\text{Lat}}(t, x, R)$ l'ensemble des particules qui sont en latence :

$$n_{\text{Lat}}(t, x, R) = \sum_{k \in K_{\text{Lat}}(t)} n_p^k(t, x, R). \quad (1.31)$$

Le nombre total de particules en dissolution et en latence dans le bain au temps t est donné par $n_p(t, x, R) + n_{\text{Lat}}(t, x, R)$.

1.4.2 Injection des particules

On suppose donné un ensemble de couples

$$\{(\tau_k, S_k)\}_{k=1}^K \quad (1.32)$$

où $\tau_k \in \mathbb{R}$ correspond à l'instant de l'injection k , et $S_k : \Omega_e \times [0, \mathbb{R}^+] \rightarrow \mathbb{R}$ la distribution du nombre de particules en espace et en rayon de l'injection k . On note

$$M_{S,k} = \int_0^\infty dR \int_{\Omega_e} dx \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi R^3 S_k(x, R) \quad (1.33)$$

la masse d'alumine correspondant à l'injection k .

Pour que la distribution de la concentration d'alumine dissoute dans le bain tende vers une solution périodique, il est suffisant que les injections soient périodiques. On suppose qu'il existe $p_{\text{Inj}} \in \mathbb{N}^*$ et une période T_{Inj} tel que

$$\tau_{k+p_{\text{Inj}}} = \tau_k + T_{\text{Inj}} \quad \text{et} \quad S_k = S_{k+p_{\text{Inj}}}, \quad \forall 1 \leq k \leq K - p_{\text{Inj}}. \quad (1.34)$$

La quantité moyenne de particules d'alumine injectée au cours du temps doit compenser la masse d'alumine dissoute consommée par la réaction d'électrolyse. Le débit de masse d'alumine consommée par l'électrolyse est donné par

$$C_m = \frac{IM}{6F}, \quad (1.35)$$

où I est l'intensité du courant total traversant la cuve, M la masse molaire de l'alumine et

1.4. Modèle de transport et dissolution de poudre d'alumine

Nous discuterons au chapitre 2 de la forme précise que prend la nouvelle fonction f_T .

1.4.4 Concentration d'alumine dissoute

Soit $c : [0, T_{\text{End}}] \times \Omega_e \rightarrow \mathbb{R}_+$ la concentration d'alumine dissoute dans le bain en tous temps. La concentration d'alumine est d'une part transportée par le champ \vec{u} , et d'autre part diffusée localement par le mouvement Brownien moléculaire, représenté par un paramètre $D_c \in \mathbb{R}_+$. La production locale d'alumine dissoute est due à la dissolution des particules d'alumine représentée par le terme \dot{q}_1 , alors que sa disparition est due à la consommation par la réaction d'électrolyse, représentée par le terme \dot{q}_2 . L'équation correspondante est l'équation de convection-diffusion

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t, x) + \vec{u} \cdot \nabla c(t, x) - D_c \Delta c(t, x) = \dot{q}_1(t, x) + \dot{q}_2(t, x), \quad (1.41)$$

avec les conditions de bord de Neumann homogène

$$\frac{\partial c}{\partial \vec{n}}(t, x) = 0 \quad \forall (t, x) \in [0, T_{\text{End}}] \times \partial \Omega_e, \quad (1.42)$$

et les conditions initiales

$$c(0, x) = c_0(x); \quad \forall x \in \Omega_e, \quad (1.43)$$

La forme des termes \dot{q}_1 et \dot{q}_2 est détaillée dans la section 1.4.5 ci-dessous.

1.4.5 Dissolution des particules

Les termes source de la concentration d'alumine dissoute c sont dus à la dissolution des particules d'alumine n_p d'une part, et d'autre part à la consommation d'alumine dissoute par la réaction d'électrolyse dans le bain.

Le débit d'alumine issu des particules qui se dissolvent est donné par

$$\dot{q}_1(t, x) = -4\pi \frac{\rho_{\text{Al}}}{M} \int_0^\infty n_p(t, x, R) f(c(t, x), R) R^2 \, dR, \quad (1.44)$$

où ρ_{Al} est la densité de l'alumine et n_p est donné par (1.30).

L'alumine dissoute consommée par la réaction d'électrolyse est donnée par

$$\dot{q}_2(t, x) = -\frac{|\tilde{j}(x)|}{6F|\Omega_e|}, \quad (1.45)$$

où $\tilde{j}(x)$ est la densité de courant locale et F la constante de Faraday..

faible pour que la réaction d'électrolyse puisse avoir lieu, et c'est l'électrolyte qui réagit en produisant typiquement des gaz fluorés. Si le bain est sur-alimenté, le rendement Faraday de l'électrolyse diminue rapidement. De plus, dans un cas comme dans l'autre, les anodes subissent une usure anormale et développent des défauts caractéristiques qui nécessitent un remplacement prématué. Il est clair que maintenir une concentration uniforme d'alumine dissoute dans le bain électrolytique est essentiel au bon fonctionnement d'une cuve. Dans ces situations, un modèle numérique qui fournit une information en temps réel sur l'état de la cuve est bénéfique pour les opérateurs, qui peuvent alors agir immédiatement en conséquence pour corriger les écarts, et ramener le système dans l'état optimal.

1.6 Organisation du document

Ce travail se divise en trois parties. Dans le chapitre 2, on considère plusieurs effets physiques liés aux interactions thermiques entre les particules d'alumine et le bain environnant, que l'on formule sous forme de modèles mathématique. On propose ensuite une extension du modèle de transport et dissolution d'alumine introduit dans la section 1.4 pour tenir compte de l'influence de la température du bain sur la dynamique de dissolution. Dans le chapitre 3 on s'intéresse à la trajectoire des particules d'alumine après injection sous l'effet des forces de gravité. On introduit un modèle physique de trajectoire des particules d'alumine dans la partie fluide du bain électrolytique, afin de motiver une extension du modèle décrit dans la section 1.4. Finalement, dans le chapitre 4, on s'intéresse à la réduction du coût en temps du calcul des écoulements fluide dans le bain électrolytique et le métal d'une cuve d'électrolyse d'aluminium en proposant une méthode numérique basée sur une décomposition en harmoniques de Fourier du problème de Stokes dans la dimension verticale. On propose de plus une méthode pour approximer la distribution de concentration d'alumine dans le bain électrolytique sans recourir à une solution transitoire.

Chapitre 2

Dissolution de l'alumine

2.1 Introduction

Le transport et la dissolution des particules d'alumine dans le bain électrolytique succédant l'injection d'une dose dépend de plusieurs facteurs. Dans le travail de [Hofer, 2011], on fait l'hypothèse que la dynamique de dissolution des particules d'alumine dépend de la concentration locale d'alumine dissoute, ainsi que du rayon desdites particules. On rappelle ici le système d'équations (1.25) que satisfont l'ensemble des populations de particules $\{n_p^k\}_{k=1}^K$. Pour tout $1 \leq k \leq K$ et $t > \tau_k$:

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial t}(t, x, R) + \vec{u} \cdot \nabla_x n_p^k(t, x, R) + \frac{\partial}{\partial R} \left(H(t - (\tau_k + T_{\text{Lat}})) f(c, R) n_p^k(t, x, R) \right) = 0, \quad (2.1)$$

avec des conditions de Neumann homogènes sur tout $\partial\Omega_e$, et les conditions initiales :

$$n_p^k(\tau_k, 0, r) = S_k(x, r), \quad x \in \Omega_e, r \in \mathbb{R}^+. \quad (2.2)$$

La vitesse de dissolution d'une particule donnée, appelé taux de dissolution instantané, est modélisé par la fonction f . Dans le modèle proposé par [Hofer, 2011] le taux de dissolution dépend de la concentration locale d'alumine dans le bain électrolytique et du rayon de la particule. Dans ce travail, nous proposons de prendre en compte, en plus de ces deux paramètres, la température locale du bain.

Comme évoqué dans le chapitre 1.4, la température du système peut modifier de façon significative la dynamique de dissolution des particules d'alumine pour deux raisons. Premièrement, lors de l'injection des particules d'alumine dans le bain, celle-ci se trouvent à une température bien inférieure à celle du bain. L'action combinée de cette différence de température importante et de la faible surchauffe du bain a pour effet de former une couche

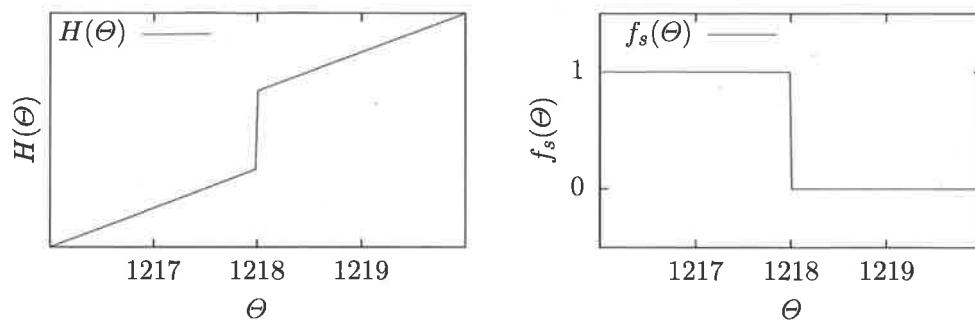


FIGURE 2.1 – Gauche : Enthalpie du bain électrolytique en fonction de la température. Droite : fonction fraction solide du bain f_s en fonction de la température.

On considère une sphère de bain, placée à l'origine du système de coordonnées, de température initiale $T_{\text{inj}} < T_{\text{Liq}}$. Cette sphère est donc gelée. Le reste de l'espace est occupé par le bain électrolytique au repos et de température initiale $T_e > T_{\text{Liq}}$.

On s'intéresse à l'évolution de la température au cours du temps dans le système formé par la sphère de bain gelé et le bain liquide environnant. En particulier, la température de la particule étant inférieure à la température du liquidus T_{Liq} , le bain au voisinage de la surface de la particule va commencer par geler. Puis, la température du système s'équilibrant par diffusion thermique, cette couche de bain éléva peu à peu fondre et se résorber. On cherche à déterminer l'évolution au cours du temps de l'épaisseur de cette couche de bain gelé.

Soit R_p la rayon de la particule placée à l'origine du système de coordonnées, C_p la chaleur spécifique du bain et D_T le coefficient de diffusion thermique du bain.

Le bain électrolytique est caractérisé par la relation entre la température Θ et l'enthalpie H qui s'exprime de la manière suivante :

$$H(\Theta) = \int_0^\Theta \rho_e C_p(s) ds + \Delta H_{\text{sl}} (1 - f_s(\Theta)), \quad (2.4)$$

où ρ_e est la densité du bain, ΔH_{sl} l'enthalpie de la transition entre la phase solide et liquide, et f_s la fraction solide du bain en fonction de la température. Dans la suite, on fera l'hypothèse que les paramètres C_p et D_T sont supposés constants, et en particulier indépendants de la température. Ce choix se justifie par le fait que ces valeurs varient peu sur l'intervalle de température qui nous intéresse, et on peut se contenter de considérer une valeur moyenne sur cette intervalle.

La figure 2.1 représente le comportement de la fonction $H(\Theta)$ au voisinage de la température de transition T_{Liq} .

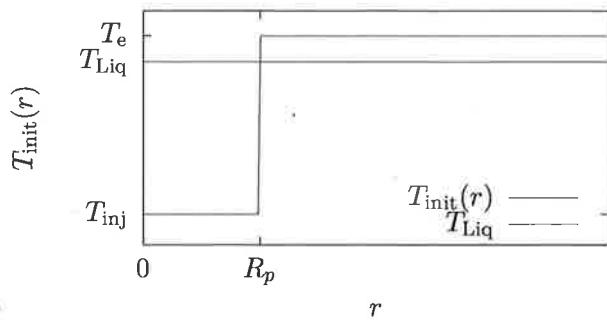


FIGURE 2.3 – Température initiale du système formé par la particule de bain gelé placée à l'origine du système de coordonnées et du bain électrolytique environnant. La température du bain est suffisante pour que celui-ci soit sous forme liquide, mais supposé au repos en tout temps.

l'espace. La densité d'enthalpie h est solution du problème suivant :

$$\frac{\partial h}{\partial t}(t, x) - \operatorname{div}(D_T \nabla \theta(t, x)) = 0, \quad \forall (t, x) \in [0, \infty[\times \mathbb{R}^3, \quad (2.8)$$

$$\theta(t, x) = \beta(h(t, x)), \quad \forall (t, x) \in [0, \infty[\times \mathbb{R}^3, \quad (2.9)$$

$$h(0, x) = \beta(T_{\text{init}}), \quad \forall x \in \mathbb{R}^3. \quad (2.10)$$

Selon l'hypothèse de symétrie sphérique des données et de la solution du problème (2.8), on définit la fonction $\tilde{h}(t, r)$, la densité d'enthalpie à distance r de l'origine. Le problème (2.8) se réécrit alors pour l'inconnue \tilde{h} sous la forme :

$$\frac{\partial \tilde{h}}{\partial t}(t, r) - D_T \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) = 0, \quad (2.11)$$

$$\Theta(t, r) = \beta(H(t, r)), \quad (2.12)$$

$$\Theta(0, r) = \Theta_0, \quad \forall r > 0, \quad (2.13)$$

En tirant parti de la symétrie sphérique du système, l'équation (2.8) est réduite à un problème transitoire unidimensionnel. L'équation (2.8) est un problème de Stephan, que l'on discrétise selon le schéma de Chernoff décrit dans [Safa, 2009].

On note R_t la distance à l'origine du front de solidification, définie par la relation :

$$\beta(h(t, R_t(t))) = T_{\text{Liq}}. \quad (2.14)$$

L'épaisseur de la couche de bain solidifiée R_g est définie par :

$$R_g(t) = R_t(t) - R_p, \quad (2.15)$$

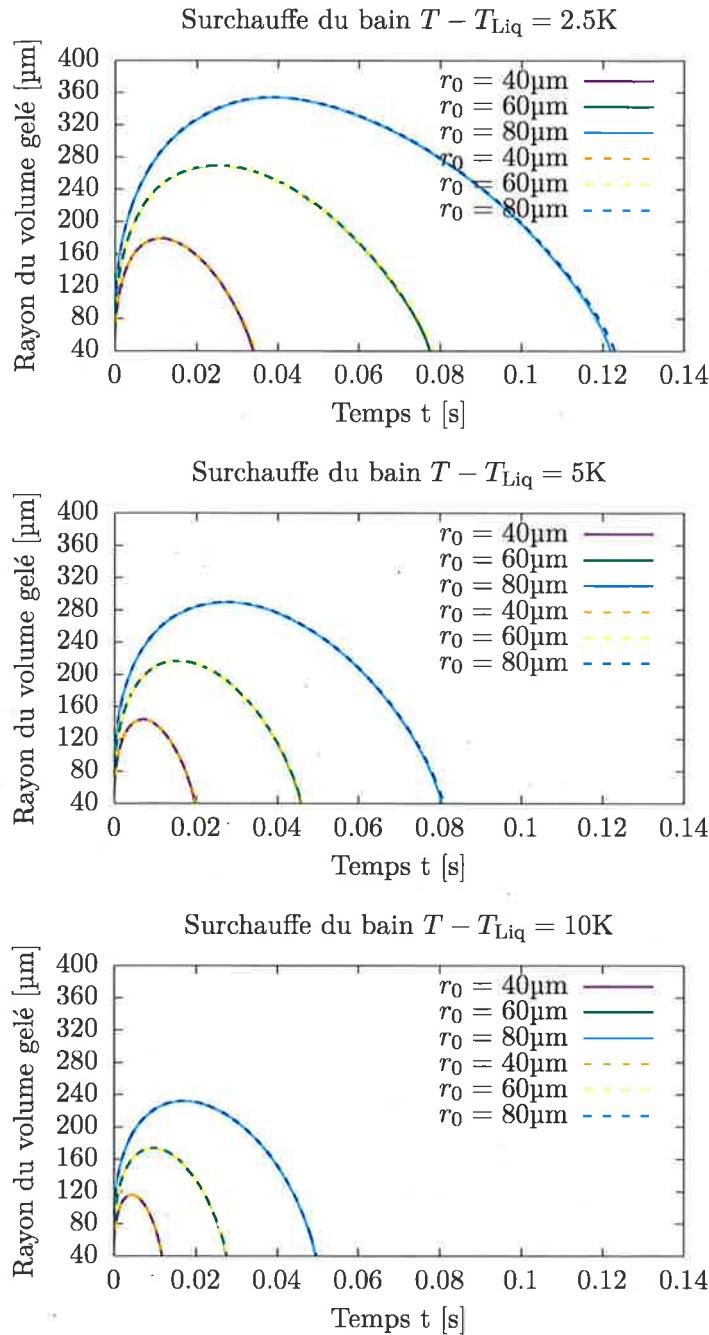


FIGURE 2.4 – Evolution du rayon de la sphère de bain gelé pour des température de surchauffe de 2.5K , 5K et 10K et des particules de rayons initiaux $r_0 = 40\text{μm}$, 60μm et 80μm . La température initiale de la particule est $T_{\text{inj}} = 423.15\text{K}$. Dans le cas le plus défavorable où $T - T_{\text{Liq}} = 2.5\text{K}$ et $r_0 = 80\text{μm}$, le temps nécessaire pour refondre entièrement la couche de gel est de l'ordre de 120ms.

dissolution sera faible.

Lorsque la dissolution est endothermique et qu'elle a lieu dans un fluide dont la température est proche de la température du liquidus T_{Liq} , un phénomène similaire a

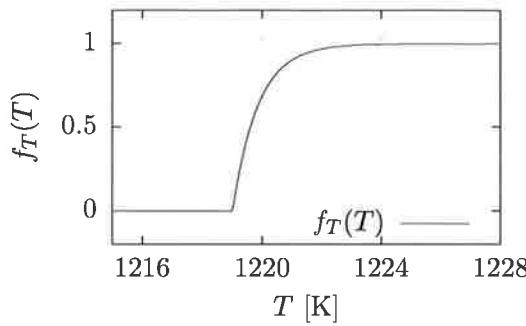


FIGURE 2.5 – Représentation de la variation de la quantité $f_T(T)$ en fonction de la température T . La fonction f_T modélise la dépendance du taux de dissolution f en fonction de la température.

2.4 Modèle de température du bain

Nous avons vu comment définir le temps de latence T_{Lat} avant le début de la dissolution dans la section 2.2, et le taux de dissolution $f(c, R, T)$ généralisé à l'équation (2.18) pour prendre en compte la température locale du bain.

Dans ce paragraphe nous décrivons une extention du modèle de [Hofer, 2011] décrit au chapitre 1. Soit $T : [0, T_{\text{End}}] \times \Omega_e$ la température dans le bain en tout temps. Soit D_T la diffusivité thermique du bain. On fait l'hypothèse que le bain est thermiquement isolé du reste de la cuve. La fonction température satisfait l'équation suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial T(t, x)}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T(t, x) - D_T \Delta u(t, x) = P_{\text{Heating}}(t, x) + P_{\text{Diss}}(t, x) + P_{\text{Joule}}(t, x), \\ T(0, x) = T_{\text{init}}(x) \end{cases} \quad (2.19)$$

avec des conditions de bord de Neumann homogènes

$$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}(t, x) = 0, \quad \forall t, x \in [0, T_{\text{End}}] \times \partial \Omega_e. \quad (2.20)$$

Les trois termes sources qui apparaissent dans le membre de droite de l'équation (2.19) sont décrits dans le paragraphe qui suit.

2.4.1 Termes source de la température

Le premier terme source est lié à la puissance nécessaire à fournir pour réchauffer les particules d'alumine au moment où celles-ci entrent en contact avec le bain. Cette puissance est proportionnelle au débit de masse des particules injectées dans le bain $S(t, x)$ [$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$] et à la différence entre la température du bain et celle des particules, notée

2.5 Modèle de dissolution en fonction de la température

Le modèle de transport et dissolution de particules d'alumine en fonction de la température du bain électrolytique correspond au système formé par les équations (1.25), (1.41) et (2.19), que nous répétons ci-dessous :

$$n_p^k(t, x, R) = 0, \forall 0 < t < \tau_k, \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_p^k}{\partial t}(t, x, R) + \vec{u} \cdot \nabla_x n_p^k(t, x, R) \\ + \frac{\partial}{\partial R} \left(H(t, (\tau_k + T_{\text{Lat}}(R))) f(c, R, T) n_p^k(t, x, R) \right) = 0, \forall \tau_k < t \leq T_{\text{End}}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t, x) + \vec{u} \cdot \nabla c(t, x) - D_c \Delta c(t, x) = \dot{q}_1(t, x) + \dot{q}_2(t, x), \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial T(t, x)}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T(t, x) - D_T \Delta u(t, x) = P_{\text{Heating}}(t, x) + P_{\text{Diss}}(t, x) + P_{\text{Joule}}(t, x), \quad (2.30)$$

où les inconnues sont les fonctions n_p^k , c et T .

Dans ce chapitre, on choisit un champ de convection stationnaire \vec{u} calculé au préalable selon les équations (1.13). Les trois équations forme un système couplé d'équations aux dérivées partielles non-linéaires. Un premier couplage intervient explicitement entre les populations de particules $\{n_p^k\}_{k=1}^K$ et la température T dans l'équation (2.28), par l'intermédiaire du terme modélisant la dissolution des particules. Un deuxième couplage intervient entre la concentration c , $\{n_p^k\}_{k=1}^K$ et T dans le terme source $\dot{q}_1(t, x)$ de l'équation (2.29). La forme de ce terme source proposé par [Hofer, 2011] a été définie par l'équation (1.44). Dans ce chapitre nous utiliserons la forme suivante pour le terme source $\dot{q}_1(t, x)$:

$$\dot{q}_1(t, x) = -4\pi \frac{\rho_{\text{Al}}}{M} \int_0^\infty H(t, (\tau_k + T_{\text{Lat}}(R))) f(c(t, x), R, T(t, x)) n_p(t, x, R) R^2 dR. \quad (2.31)$$

Un troisième couplage est introduit par le terme source P_{Diss} , définis par l'équation (2.23). Comme détaillé au paragraphe précédent, le terme P_{Heating} est lui-même défini en fonction du terme $\dot{q}_1(t, x)$, faisant intervenir les inconnues n_p^k et c .

Le système d'équations (2.27)–(2.30) est complété par des conditions de bords de

Pour chacune des populations $k = 1, 2, \dots, K$ on pose :

$$n_p^{k,i}(x, R) = 0, \quad \forall i \text{ tel que } 0 \leq t_i < \tau_k \quad (2.38)$$

$$n_p^{k,i}(x, R) = S(x, R), \quad \text{si } i \text{ est tel que } t_{i-1} < \tau_k \leq t_i. \quad (2.39)$$

Ensuite, $\forall i$ tel que $t_i + \tau \geq \tau_k$, et $\forall k = 1, 2, \dots, K$:

$$\frac{n_p^{k,i+1/2} - n_p^{k,i}}{\tau} + u \nabla n_p^{k,i+1/2} = 0, \quad (2.40)$$

$$\frac{n_p^{k,i+1} - n_p^{k,i+1/2}}{\tau} + \frac{\partial}{\partial R} \left(H(t_{i+1}, \tau_k + T_{\text{Lat}}(R)) f(c^i, R, T^i) n_k^{p,i+1} \right) = 0. \quad (2.41)$$

pour tout $x \in \Omega_e$. Pour la concentration d'alumine dissoute c^i et la température T^i on pose :

$$\frac{c^{i+1} - c^i}{\tau} + u \nabla c^{i+1} - D_c \Delta c^{i+1} = q_1^{i+1} + q_2^{i+1}, \quad (2.42)$$

$$\frac{T^{i+1} - T^i}{\tau} + u \nabla T^{i+1} - D_T \Delta T^{i+1} = P_{\text{Heat}}^{i+1} + P_{\text{Diss}}^{i+1} + P_{\text{Joule}}^{i+1}, \quad (2.43)$$

pour tout $x \in \Omega_e$ et $\forall i = 1, 2, \dots, M$. Bien entendu, on suppose c^0 et T^0 donnés.

2.6.2 Discrétisation du terme source \dot{q}_2

Comme indiqué dans la section 1.4.5, le terme source de la concentration \dot{q}_2 sert à transférer la masse de poudre d'alumine dissoute au cours du temps dans la concentration d'alumine c . Il est fortement souhaitable que la masse d'alumine dans le système formé par les champs $n_{p,k}$ et c soit globalement exactement conservée au cours du temps par le schéma de discrétisation.

Numériquement, il n'est pas avantageux de discrétiser le terme \dot{q}_2 tel que définit par l'équation (1.45), puisque la discrétisation de l'intégrale selon r mène nécessairement à des erreurs numériques.

A la place, on tire profit du splitting des deux opérateurs de l'équation (2.28). En effet,

$$\int_{\Omega_e} \int_0^\infty (n_p^{i+1/2} - n_p^i) \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi R^3 dR dx \quad (2.44)$$

est la masse de poudre de particule libérée dans le bain électrolytique lié au terme de dissolution de (2.41) entre le pas de temps $t_{i+1/2}$ et t_{i+1} . On pose alors

$$\dot{q}_2^{i+1}(x) = \int_0^\infty (n_p^{i+1/2} - n_p^i) \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi R^3 dR, \quad (2.45)$$

convection \vec{u} est supposé à divergence nulle et tangentiel au bord de Ω_e . Ainsi, on obtient :

$$\rho_b C_{p,b} \int_{\Omega_e} T^{i+1} dx = \int_{\Omega_e} \rho_b C_{p,b} T^x dx - \delta T \rho_{Al} C_{p,Al} \int_{\Omega_e} \int_0^\infty \frac{4}{3} \pi R^3 S_k(x, R) dR dx, \quad (2.52)$$

ce qui montre bien que notre schéma de discréétisation en temps conserve l'énergie thermique totale dans le bain électrolytique. Ici on a supposé $\dot{q}_1 = 0$.

2.6.4 Discréétisation du terme source P_{Diss}

Le terme source P_{Diss} tient compte de l'énergie thermique nécessaire pour dissoudre les particules d'alumine. Comme pour le terme \dot{q}_2 dont nous avons discuté au paragraphe précédent, il est souhaitable de garantir globalement la conservation exacte de l'énergie thermique contenue dans le bain électrolytique, et pour cette raison, on opte pour une approche similaire à celle décrite dans le paragraphe 2.6.2. Puisque le terme P_{Diss} est proportionnel à la masse de poudre d'alumine dissoute entre les pas de temps t_i et t_{i+1} , on utilise à nouveau la relation (2.44), et on écrit :

$$P_{Diss}^{i+1}(x) = -\Delta H_{Diss} \dot{q}_2^{i+1}. \quad (2.53)$$

2.6.5 Discréétisation de l'espace des rayons

Dans ce paragraphe nous donnons les détails de la discréétisation de l'espace des rayons des particules et de l'équation (2.41). Pour des raisons de clarté et de lisibilité, nous considérons une formulation abstraite pour lequel nous proposons un schéma numérique basé sur une méthode de caractéristiques. En fin de paragraphe nous faisons le lien avec la formulation du problème de dissolution de poudre d'alumine.

Soient $a_0 : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ et $v : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ deux fonctions données. On cherche la fonction $a : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ telle que :

$$\frac{\partial a}{\partial t}(t, r) + \frac{\partial}{\partial r}(v(r)a(t, r)) = 0, \quad \forall t > 0, r \in \mathbb{R}^+, \quad (2.54)$$

$$a(0, r) = a_0(r), \quad \forall r \in \mathbb{R}^+. \quad (2.55)$$

On définit la fonction v par :

$$v(r) = \frac{-\nu}{r}, \quad \forall r > 0, \quad (2.56)$$

où $\nu > 0$ est un nombre réel donné. Soit $R(t; t_s, r)$ la fonction caractéristique d'origine r

Puisque par définition on a :

$$a(t_{i+1}; R(t_{i+1}; t_{i+1}, r_n)) = a(t_{i+1}; r_n), \quad (2.65)$$

l'approximation a_n^{i+1} est donnée par :

$$a_n^{i+1} = \frac{R(t_{i+1}; t_{i+1}, r_n)}{R(t_i; t_{i+1}, r)} a(t_i, R(t_i; t_{i+1}, r_n)). \quad (2.66)$$

Bien entendu, $R(t_i; t_{i+1}, r_n)$ ne correspond en général pas à l'un des points de discrétisation r_n . Etant donné a_n^i , $n = 0, \dots, N_r$ et $r \in \mathbb{R}$, on choisit de d'approximer la valeur de $a(t_i, r)$ par interpolation linéaire de la manière suivante. Si $r_0 < r_1 < \dots < r_{N_r}$, on note $a_{\Delta r}^i$ la fonction continue linéaire par morceau sur l'intervalle $[r_0, r_{N_r}]$ et que l'on prolonge sur tout \mathbb{R} de la manière suivante :

$$a_{\Delta r}^i(r) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{N_r} a_n^i \phi_n(r) & \text{si } r \in [r_0, r_{N_r}], \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.67)$$

où les fonctions $\phi_m : [r_0, r_{N_r}] \rightarrow \mathbb{R}$ sont les fonctions linéaires par morceau telles que :

$$\phi_m(r_n) = \delta_{m,n}, \quad \forall 0 \leq m, n \leq N_r. \quad (2.68)$$

On remarquera que la fonction $a_{\Delta r}^i$ est continue partout sauf en général aux points r_0 et r_{N_r} . Finalement, on écrit pour $0 < n < N_r$ et $i > 0$:

$$a_n^{i+1} = \frac{R(t_{i+1}; t_{i+1}, r_n)}{R(t_i; t_{i+1}, r)} a_{\Delta r}^i(R(t_i; t_{i+1}, r_n)) \quad (2.69)$$

Puisque la fonction caractéristique R est donnée exactement par l'expression (2.59), l'expression (2.69) permet de calculer explicitement l'approximation a_n^{i+1} .

On remarque que si $\tau = T_{\text{End}}$, et que $a(0, r)$ est donnée $\forall r$, alors l'expression (2.69) donne une approximation de la solution $a(T_{\text{End}}, r)$ d'ordre $O(h^2)$ en un pas de temps.

Au temps $t_{i+1/2}$, le schéma numérique pour approximer la solution de l'équation (2.41) au temps t_{i+1} s'obtient en substituant la vitesse v dans l'équation (2.57) par :

$$H(t_{i+1}, \tau_k + T_{\text{Lat}}) f(c^i, r, T^i), \quad (2.70)$$

avec $K = 0.5e - 9$ choisit tel que $R(T_{\text{end}}; 0, r_{\text{max}}) = 0$. Ce choix permet d'obtenir une forme exacte pour les caractéristiques $R(t; t_s, r)$ comme montré dans la section 2.6.5, et la solution exacte s'exprime alors :

$$n_p(t, r) = n_p(R(-t; t, r)). \quad (2.75)$$

On fixe $r_{\text{max}} = 100\mu\text{m}$, $T_{\text{end}} = 5\text{s}$ et on calcule l'erreur $L^2[0, r_{\text{max}}]$ entre la solution numérique et la solution exacte à $t = T_{\text{end}}$:

$$e_{n_p} = \|n_p(T_{\text{end}} - n_{p,h}(T_{\text{end}}))\|_{L^2[r, r_{\text{max}}]}. \quad (2.76)$$

Puisque les trajectoires caractéristiques sont intégrées exactement, l'erreur de la solution provient de l'interpolation de Lagrange sur la grille, et l'erreur est donc en $O\left(\frac{h^2}{\tau}\right) = O(h)$ pour autant que $\tau = O(h)$.

La condition initiale n_p^0 est donnée par :

$$n_p^0(r) = \exp\left(1 - \frac{1}{1 - \frac{16}{r_{\text{max}}^2} \left(r - \frac{r_{\text{max}}}{2}\right)^2}\right) \quad (2.77)$$

La figure 2.6 montre la solution exacte et la solution numérique à différents temps. La figure 2.7 montre l'erreure de la solution numérique pour $h = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512, 1/1024, 1/2048, 1/4096$. On a choisi $\tau = O(h)$ de sorte que $\tau = 2.92 \times 10^{-2}$ lorsque $h = 1/32$. On constate que l'erreur de la solution numérique est en $O(h)$, comme prédict par la théorie.

2.7.2 Solution numérique des problèmes de convection-diffusion

Afin de valider l'implémentation du schéma éléments finis d'advection-diffusion correspondant au système formé par les équations (2.40)–(2.43), on propose de vérifier l'ordre de convergence de l'erreur de la solution numérique par rapport à une solution exacte. Soit le domaine $\Omega = [0, 1]^3 \subset \mathbb{R}^3$, $T_{\text{end}} = 5\text{s}$ et le champ de convection $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ donné par

$$\vec{u}(t, x_1, x_2, x_3) = \frac{\pi}{2}(-x_2, x_1, 0)^T. \quad (2.78)$$

Soit $\vec{n} : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ le vecteur unité normal au bord du domaine Ω . On note Γ_- la partie du bord entrant définie par :

$$\Gamma_- = \{x \in \partial\Omega \mid \vec{n} \cdot \vec{u} > 0\} \quad (2.79)$$

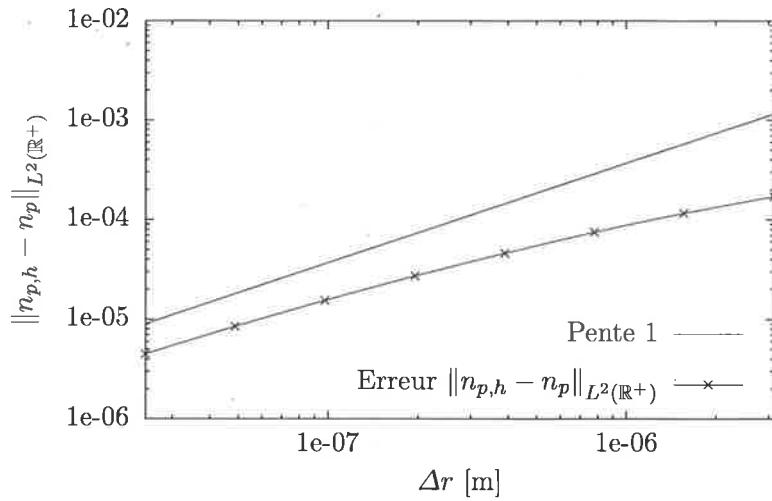


FIGURE 2.7 – Convergence de l’erreur $L^2(\mathbb{R}^+)$ la solution numérique du problème de dissolution de poudre d’alumine. On note que l’erreur se comporte comme $O(\Delta r)$ pour une taille de maille suffisemment fine.

où y est substitué respectivement par n_p , c et T et les données u , D et $y^0(x)$ par leur valeur associée.

On se donne la condition initiale y^0 :

$$y^0 = \begin{cases} \exp\left(1 - \frac{1}{1 - 10 \|\vec{x} - (0.5, 0.75, 0.5)^T\|^2}\right) & \text{si } \|\vec{x} - (0.5, 0.75, 0.5)^T\|^2 < \frac{1}{10} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.84)$$

La solution numérique est obtenue avec le schéma numérique évoqué dans la section 2.6, et dont le détail de la formulation variationnelle est donné dans l’annexe A. En particulier, le coefficient δ_K qui intervient dans le terme de stabilisation SUPG de la discréétisation en espace des problèmes d’advection-diffusion (2.81) est fixé à 1.

La figure 2.8 montre les lignes de niveau de la condition initiales y^0 et de la solution numérique à $t = T_{\text{end}}$ sur le plan $\{(x_1, x_2, 0.5)\} \subset \mathbb{R}^3$. La figure 2.9 montre le comportement de l’erreur de la solution numérique en fonction de h et τ , avec $h = 1/16, 1/32, 1/64, 1/128$ et $\tau = 1/64, 1/181, 1/512, 1/1449$. On constate que l’erreur de la solution numérique vérifie l’ordre de convergence optimal du schéma $O(h^{3/2} + \tau)$.

2.8.1 Schéma d'injection et périodicité de la solution

En pratique, le schéma d'injection n'est pas périodique. Pour que le rendement de la réaction d'électrolyse soit optimal, il est essentiel de maintenir la concentration d'alumine dissoute aussi proche que possible d'une concentration optimale donnée. Il semble naturel d'estimer la quantité d'alumine en solution dans le bain en moyenne au cours du temps en effectuant un bilan de masse. Malheureusement, différentes sources d'erreurs viennent grever l'estimation du bilan : la masse injectée n'est pas connue exactement, et il n'est pas garanti que l'ensemble des particules se retrouvent dans le bain électrolytique. Une partie des particules peuvent s'agglutiner à proximité du trou du piqueur, ou se retrouver emprisonnées dans la croûte. Une partie des particules peuvent terminer leur course dans le métal liquide, auquel cas elles ne se dissolvent pas, et formeront des boues ou seront évaluées lors d'une opération de vidange. Le rendement Faraday de la réaction d'électrolyse constitue une inconnue supplémentaire qu'il est également difficile d'estimer.

La méthode qui permet de mesurer de façon indirecte la concentration d'alumine dissoute dans le bain utilise le fait que la résistivité électrique de celui-ci dépend fortement de la concentration, et atteint un minimum lorsque la concentration est minimale.

Le schéma d'injection alterne entre une phase de sous-alimentation et sur-alimentation en alumine, pendant lesquelles les doses sont maintenues constantes et injectées périodiquement. Dans la phase de sous-alimentation, les doses sont réduites. Le bilan de masse étant négatif, la concentration d'alumine dissoute diminue peu à peu. L'effet inverse est recherché dans la phase de sur-alimentation.

On garantit de maintenir la concentration d'alumine au voisinage de la concentration optimale en procédant de la manière suivante. On mesure les variations de la résistivité électrique du bain au cours du temps. Durant une phase de sous-alimentation, la résistivité électrique commence par décroître jusqu'au moment où la concentration passe en dessous de la concentration optimale, puis recommence à croître. Lorsque cette accroissement est détectée, on sait que la concentration est inférieure à la concentration optimale, ce qui indique qu'il faut débuter une phase de sur-alimentation. On procède de la même façon dans la phase de sur-alimentation pour détecter le moment opportun pour passer à une nouvelle phase de sous-alimentation, et ainsi de suite.

Cette approche, bien que réalisable, n'est pas nécessaire dans le cadre du modèle de transport et dissolution d'alumine proposé dans ce travail. En effet, par définition d'une simulation, la masse d'alumine est connue exactement en tout temps. De plus, les phénomènes qui rendent l'établissement d'un bilan de masse dans un système réel ne sont

2.8.3 Calcul du champ de vitesse dans les fluides

Le champ de vitesse stationnaire dans le bain électrolytique et le métal liquide est calculé selon le modèle présenté dans la partie 1.3. Le résultat de ce calcul est le domaine occupé par le bain électrolytique Ω_e , ainsi qu'un champ de vitesse u_h définit sur Ω_e et tangent au bord $\partial\Omega_e$ qui correspond à la vitesse découlement du fluide dans le bain. Le champ de vitesse u_h admet différentes conditions de bord sur différentes parties de $\partial\Omega_e$ que l'on mentionne brièvement ici.

La réaction d'électrolyse du côté de l'anode produit de l'oxygène O_2 qui se recombine avec les atomes de carbone de l'anode elle-même pour former des molécules de CO_2 . Ce CO_2 coalesce pour former des bulles qui adhèrent partiellement aux anodes, et sont évacuées au fur et à mesure vers les canaux et finalement la surface du bain par l'écoulement des fluides. D'un point de vue macroscopique, cette production de bulles au niveau des anodes altère les propriété d'adhérence entre le fluide et la surface des anodes, en particulier sur leur face inférieure. Pour prendre en compte ce phénomène qui a un impact important sur l'amplitude des vitesse dans le bain électrolytique, on adopte des conditions de glissement partiel, dites de Robin pour le champ de vitesse u sur les parties du bord $\partial\Omega_e$ qui correspondent aux anodes.

La partie supérieur du canal central, des canaux latéraux et du pourtour de la cuve sont typiquement, dans une cuve industrielle, des surfaces libres avec l'air. Dans le modèle présenté dans la section 1.3, la géométrie de cette partie du bord est supposée strictement plane, mais on adopte tout de même des conditions de glissement total, dites de Navier.

Finalement, sur le reste du bord qui correspond à la cathode et aux parois latérales on choisit des conditions d'adhérence totales, de même qu'à l'interface Γ_l entre le métal liquide et le bain électrolytique où on impose la continuité de la vitesse des fluides, exprimée par la relation (1.10)

La figure 2.11 donne un aperçu du champ de vitesse sur une surface horizontale placée entre l'interface bain-métal et le bas des anodes. Du à la géométrie typique très aplatie du volume occupée par le bain électrolytique, les écoulements sont généralement constitué par deux tourbillons horizontaux ou plus qui s'étendent sur toute la largeur de du bain.

2.8.4 Conditions initiales et données du problème

Par un calcul transitoire du problème de transport et dissolution d'alumine proposé dans la section 2.5, on cherche à identifier une solution périodique en temps vers laquelle la solution transitoire converge. On suppose que la solution périodique recherchée ne dépend

2.8. Transport et dissolution d'alumine dans un cas industriel

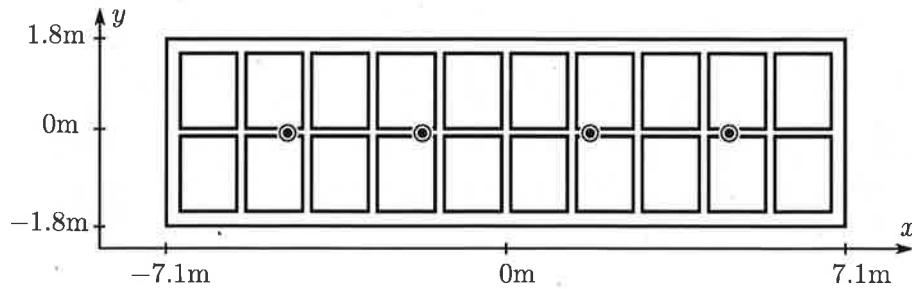


FIGURE 2.13 – Vue supérieure schématique des blocs anodique et de la surface du bain électrolytique. Les positions des 4 piqueurs/injecteurs est symbolisée par les marques circulaires. Le plan anodique est constitué de 2 rangées de 10 anodes chacune.

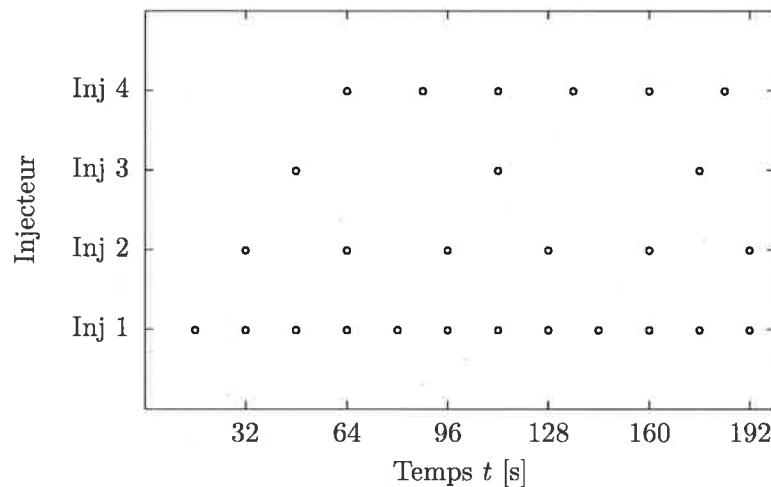


FIGURE 2.14 – Cadencement des 4 injecteurs d'une cuve AP32 dans le phase initiale. Chaque cercle correspond à un événement d'injection de l'un des quatres injecteurs. Plusieurs injections peuvent avoir lieu simultanément. Après la phase initiale de 64s, la série temporelle de l'ensemble des événements est périodique de période $P = 192$ s.

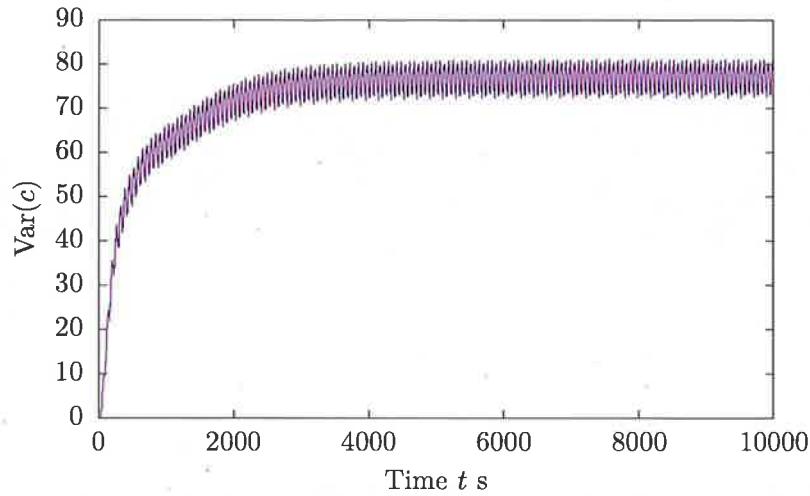


FIGURE 2.16 – Evolution de la variance de la solution au cours de la simulation. Les petites oscillations qu'on peut observer autour de la moyenne sont liées aux injections d'alumine.

Sur la figure 2.16 on montre l'évolution de la variance du champ de concentration définie par :

$$\text{Var}_t(c) = \sqrt{\int_{\Omega_e} (c(t, x) - \bar{c}(t))^2 dx}. \quad (2.86)$$

La variance du champ de concentration donne une indication au niveau de la convergence vers la solution périodique. En effet, il est clair que si c est périodique en temps, alors $\text{Var}(c)$ est également périodique. D'autre part, la variance du champ de concentration donne une indication de la qualité de la distribution de l'alumine dans la cuve. Dans l'idéal, on cherche à obtenir une concentration d'alumine dissoute uniforme dans tout le bain, ce qui correspond à une variance nulle. En pratique, on comparera différentes prédictions du modèle pour la concentration en comparant leur variance respective, ainsi que leur moyenne.

2.8.6 Sensibilité par rapport au modèle de dépendance

La dépendance de la vitesse de dissolution en fonction de la température est donnée par la relation (2.17), par l'intermédiaire de deux paramètres réels T_{Liq} et T_{Crit} . Dans la limite où $T_{\text{Crit}} \rightarrow T_{\text{Liq}}$, l'expression (2.17) tend vers la fonction de Heaviside :

$$f_T(T) = H(T - T_{\text{Liq}}). \quad (2.87)$$

La figure 2.17 compare le champ de concentration obtenu après convergence vers la solution stationnaire pour les deux cas $T_{\text{Crit}} = T_{\text{Liq}}$ et $T_{\text{Crit}} > T_{\text{Liq}}$.

2.8.8 Sensibilité par rapport au temps de latence de dissolution

La température du bain intervient dans le modèle de transport et dissolution d'alumine par l'intermédiaire du paramètre T_{Lat} , discuté en détail dans la section 2.2. Dans cette partie, on étudie l'influence du choix du temps de latence T_{Lat} sur le champ de concentration après convergence vers la solution périodique. La figure 2.19 compare les champs de concentration c obtenu avec les temps de latence $T_{Lat} = 1\text{s}, 2\text{s}, 5\text{s}$ et 10s .

2.9 Discussion

Dans la partie 2.8 nous avons appliqué le schéma de transport et dissolution d'alumine dépendant de la température du bain dans le cadre d'une donnée associée à la cuve d'électrolyse industrielle AP32. Nous avons étudié le comportement du champ de concentration après convergence vers une solution périodique, en fonction des nouveaux paramètres introduits par ce modèle. En particulier nous avons présenté des études de sensibilité du champ de concentration c par rapport à la température critique T_{Crit} , la température de surchauffe du bain électrolytique au-dessus de la température du liquidus, et le temps de latence des particules d'alumine avant le début de leur dissolution, T_{Lat} .

On constate de façon générale que la prise en compte de la température pour la dissolution des particules d'alumine à tendance à réduire l'écart entre les maximum et les minimum de c . On peut constater cet effet en comparant par exemple les différentes échelles entre les figures 2.15 et 2.17. Lorsque l'on tient compte de T dans la dissolution des particules d'alumine, la dissolution est nécessairement ralenti par rapport au cas où la température est ignorée. Ceci permet aux particules de se déplacer dans le bain électrolytique sur de plus grandes distances, et ainsi de mieux repartir la masse d'alumine dissoute qu'elle libère au cours de leur dissolution. Cet argument est supporté par le fait que, toujours en comparant les échelles des figures 2.15 et 2.17, les minimum de c sont essentiellement les mêmes, tandis que les minimum diminue d'environ 36%. Les maximum de c correspondent aux points d'injection de la poudre d'alumine, ce qui signifie que leur contribution comme source du champ de concentration c est plus dispersée dans l'espace lorsque T intervient dans la vitesse de dissolution des particules.

On fait une constatation importante en observant la sensibilité du champ de concentration par rapport à la température de surchauffe T_{Sur} présentées à la figure 2.18. Lorsque la surchauffe est importante, par exemple $T_{Sur} = 10\text{K}$, le champ de concentration est en tout point similaire au champ c avec une dissolution indépendante de T présenté par la

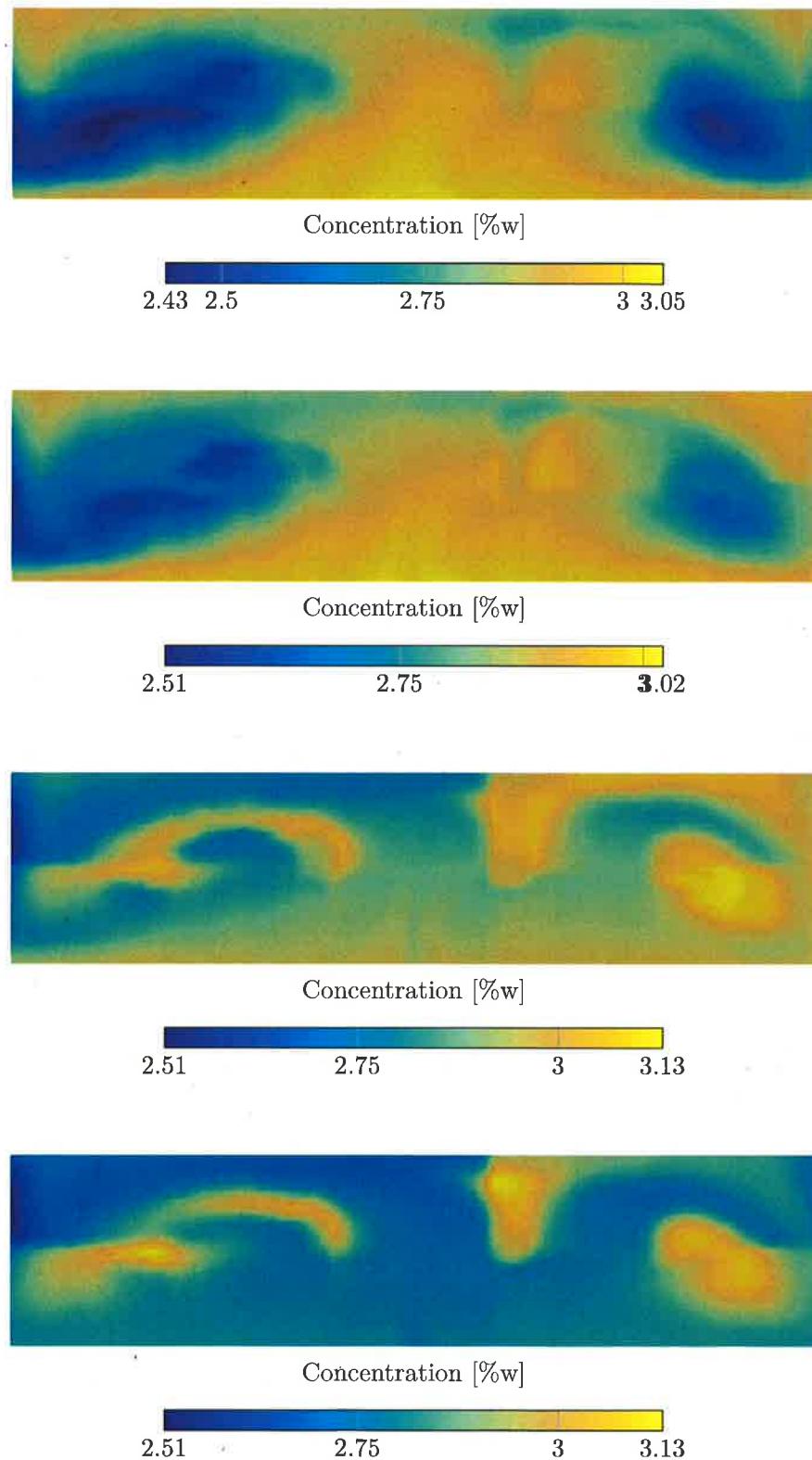


FIGURE 2.18 – Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32 après convergence vers la solution périodique. De haut en bas, on a choisi une température de surchauffe $T_{\text{Sur}} = 1\text{K}, 2\text{K}, 5\text{K}$ et 10K .

Chapitre 3

Sédimentation de l'alumine

3.1 Introduction

L'oxyde d'aluminium sous sa forme cristalline α présente une densité volumique environ deux fois supérieure à la densité volumique du bain électrolytique. Dans ces conditions, une particule d'alumine placée dans un bain électrolytique subit d'une part des forces dues à sa vitesse relative au fluide environnant, et d'autre part les forces d'Archimède et de gravité, dont la résultante est non-nulle.

Le modèle proposé dans [hofer2011] néglige les force de gravité et d'Archimète, en faisant l'hypothèse que les particules suivent exactement les lignes de courant de l'écoulement du fluide.

Dans ce chapitre, nous proposons une généralisation du modèle de transport et dissolution d'alumine présenté dans [hofer2011] et introduit au chapitre 1 pour prendre en compte l'effet de la force de gravité sur la trajectoire des particules d'alumine dans le bain électrolytique.

Dans la section 3.2 un modèle physique de la dynamique d'une particule isolée dans un fluide est introduit afin de déterminer la validité de certaines approximations nécessaire à la formulation macroscopique de la sédimentation des particules. Une formulation macroscopique qui entre dans le cadre du modèle de transport et dissolution d'alumine présenté au chapitre 1 est détaillé dans la section 3.3. Dans la section 3.4 nous présentons le schéma numérique adopté pour résoudre le système d'équations aux dérivées partielles introduit dans la section 3.3. Finalement, les sections 3.5 et 3.6 sont consacrées respectivement à la présentations des résultats numériques appliqués à une cuve d'électrolyse industrielle et à la discussion de ces résultats.

Pour vérifier que l'usage de la loi de Stokes est approprié, on peut exprimer R_e en fonction du rayon de la particule en substituant \dot{x} dans la relation (3.2) par w donné par (3.5). On obtient :

$$R_e = \frac{9}{4} \frac{\rho_e (\rho_{al} - \rho_e) g}{\mu^2} r^3. \quad (3.6)$$

Dans la situation d'une particule d'alumine placée dans un bain électrolytique, pour que la condition (3.3) soit satisfaite, il est nécessaire que $r \leq 61\mu\text{m}$.

Une proportion non négligeable des particules injectées dans une cuve d'électrolyse comportent un rayon égal ou supérieur à cette limite, ce qui nous mène à considérer une généralisation de la loi de Stokes.

Dans le paragraphe qui suit nous détaillerons une façon de dériver une expression analytique pour la force de trainée à partir d'un résultat proposé initialement par [FC04], qui soit valide pour les tailles de particules qui nous concernent. Nous donnerons ensuite une forme complète du modèle microscopique de sédimentation de particules sphériques dans le paragraphe 3.2.2.

3.2.1 Force de trainée

Dans leur travail, [FC04] s'intéressent à la sédimentation de particules solides, dont la taille s'étale entre 0.062mm et 4.8mm, dans le cadre du transport fluvial de sédiment en suspension. On note $d = 2r$ le diamètre d'une particule, $\nu = \mu/\rho_e$ la viscosité cinématique du fluide et R la différence relative des densité de la particule et du fluide :

$$R = \frac{\rho_{al} - \rho_e}{\rho_e}. \quad (3.7)$$

L'expression proposée par [FC04] pour la vitesse terminale de sédimentation d'une particule s'écrit :

$$w = \frac{Rgd^2}{C_1\nu + \sqrt{\frac{3}{4}C_2Rgd^3}}, \quad (3.8)$$

où les deux constantes sont fixées à $C_1 = 18$ et $C_2 = 0.4$ lorsqu'on considère des sphères lisses. Dans la limite où $d \rightarrow 0$, cette expression se réduit à l'équation (3.5).

Cependant, pour écrire l'équation du mouvement de la particule, nous avons besoin de la force de traînée F_D qui correspond à la vitesse de sédimentation (3.8).

L'idée est la suivante. Par définition de la vitesse limite de sédimentation, on a en

$$w = \frac{2}{3} \frac{(\rho_{al} - \rho_e)}{\mu} r^2 + O(r^3) \text{ si } r \rightarrow \infty$$

65
d=21

et dirigé vers le haut. On note $x(t)$ la coordonnée verticale de la particule en fonction du temps $t \in [0, T]$, le long de l'axe $O\hat{x}$.

Dans ce système de coordonnées, l'équation du mouvement de la particule s'écrit :

$$m(t)\ddot{x}(t) = F_g(r(t)) + F_A(r(t)) - F_D(r(t), \dot{x}(t)) \quad (3.14)$$

$$\Rightarrow m(t)\ddot{x}(t) = -g(\rho_{Al} - \rho_e)V(r(t)) \cancel{+} F_D(r(t), \dot{x}(t)) \quad (3.15)$$

$$(3.16)$$

On suppose que la particule se trouve initialement au repos et à l'origine du système de coordonnée, soit :

$$x(0) = \dot{x}(0) = 0. \quad (3.17)$$

L'équation (3.14) accompagnée des conditions initiales (3.17) forme un problème de Cauchy que l'on résoud numériquement à l'aide de l'algorithme `ode45` implémenté dans le logiciel Octave4.2. La section qui suit présente des résultats numériques obtenu avec ce modèle.

3.2.3 Trajectoires de particules

Dans cette section, nous présentons quelques solutions du problème différentiel formé par les équations (3.14), (3.17) dans le cadre de particule d'alumine placées dans un bain électrolytique.

On se donne le temps final de dissolution $T = 10\text{s}$ pour des particules de rayon initial $r_0 = 100\mu\text{m}$. En supposant que la vitesse de dissolution \dot{r} satisfait la relation :

$$\dot{r}(t) = -\frac{\kappa}{r(t)}, \quad (3.18)$$

$$r(0) = r_0, \quad (3.19)$$

la fonction $r(t)$ peut s'exprimer exactement :

$$r(t) = \sqrt{r_0^2 - 2\kappa t}, \quad (3.20)$$

avec κ choisi tel que $r(T) = 0$. L'évolution du rayon d'une particule est représenté sur la figure 3.1.

Les différentes constantes physiques, du bain électrolytique et de l'alumine sont répertoriées dans l'annexe C. Un ensemble de trajectoires pour des particules de tailles initiales $r_0 = 120, 140, 160, 180$ et $200\mu\text{m}$ est présenté sur la figure 3.2.

On constate que selon ce modèle, au regard de la distribution en rayon des particules qui sont injectées dans une cuve, une partie de ces particules ont la possibilité de parcourir des distances qui sont de l'ordre de la profondeur d'un bain d'électrolyse. Si on suppose que le bain d'une cuve d'électrolyse présente une profondeur de 15cm au niveau du canal central, on déduit de la figure 3.2 que toutes les particules dont le rayon est supérieur à environ 180 μm atteignent l'interface bain-métal.

Bien qu'il existe peu de données expérimentale à ce niveau, il est raisonnable de penser qu'une particule qui atteind l'interface bain-métal n'a pas suffisamment d'énergie pour traverser cette interface et pénétrer dans l'aluminium liquide. Ces particules piégées par l'interface continuent à se déplacer sur l'interface, jusqu'à dissolution complète.

D'un point de vue de la concentration d'alumine, la chute des particules dans le bain sur des distances importantes permet de déposer de la masse dans une région qui est très différente de la zone qui est utilisée pour l'injection.

En particulier, pour autant qu'on considère l'injection des particules au niveau du sommet du canal central, les particules d'alumine vont déposer de la masse dans une région qui s'étend entre la surface et la projection verticale de la zone d'injection sur l'interface. On peut raisonnablement penser que l'effet de la chute des particules a un effet important sur la distribution de l'alumine dans la cuve.

En observant la figure 3.2b, on remarque que la phase d'accélération initiale des particules a lieu sur un intervalle de temps de l'ordre de 15ms et qui intervient sur des profondeurs de l'ordre de 1mm. Cette phase d'accélération correspond à un régime où les forces de gravité F_g et d'Archimède F_A dominent par rapport à la force de trainée F_D :

$$F_D(r, \dot{x}) \ll F_g(r) + F_A(r). \quad (3.21)$$

Une fois que cette phase est terminée, le reste de la trajectoire est caractérisé par le fait que la force de traînée F_D compense quasiment F_g et F_A :

$$F_D(r, \dot{x}) \approx F_g(r) + F_A(r). \quad (3.22)$$

Cette constatation permet de réduire le modèle dynamique de la particule à un modèle purement cinématique. Dans la section suivante, on décrit le modèle cinématique sur lequel se base le reste de ce chapitre.

Bien entendu, le champ de vitesse v ne satisfait pas la condition :

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.28)$$

sur le bord $\partial\Omega_e$. Par conséquent il est nécessaire d'ajointre à l'équation (3.27) des conditions de bord de Dirichlet sur la partie du bord $\Gamma_- \subset \partial\Omega_e$ définie par :

$$\Gamma_- = \{x \in \partial\Omega_e \mid \exists r > 0 \text{ telle que } \vec{v}(x, r) \cdot \vec{n}(x) < 0\}, \quad (3.29)$$

où n est la normale extérieure à $\partial\Omega_e$. On note que prendre en compte la sédimentation d'une population de particule dans un fluide en mouvement consiste au niveau de la modélisation à ajouter une composante à la vitesse de l'opérateur de transport, et à ajouter une conditions de bord nécessaire pour obtenir un problème bien posé. Nous sommes maintenant en mesure d'écrire le système d'équations pour les inconnues n_p et c . Pour ce faire, on reprend les équations (1.25) et (1.41) avec leur conditions initiales associées. Le nouveau système d'équation s'écrit :

$$n_p^k(t, x, r) = 0, \quad \forall 0 < t < \tau_k, \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial t} + (\vec{u} + w\hat{e}_3) \cdot \nabla n_p + \frac{\partial}{\partial r} \left(H(\bar{t} - (\tau_k + T_{Lat})) f(c, r) n_p^k \right) = 0, \quad \forall 0 < t < \tau_k, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c - D_c \Delta c = 0, \quad \forall t > 0. \quad (3.32)$$

De plus, on a les conditions de bord suivantes pour n_p et c . On rappelle les conditions de bord pour la concentration c par soucis de lisibilité :

$$n_p = 0 \text{ sur } \Gamma_-, \quad \frac{\partial c}{\partial \vec{n}} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_e. \quad (3.33)$$

Dans la section suivante on donne les détails de la discréétisation en temps et en espace des équations (3.30)-(3.32).

3.4 Modèle numérique

Le schéma éléments finis introduit dans le travail de [Hof11] et qu'on réutilise pour la discréétisation en espace des équations (2.40),(2.42) et (2.43) à été développé pour que l'approximation numérique satisfasse certaines propriétés de conservation. Malheureusement, cette formulation repose fondamentalement sur le fait que le champ de vitesse d'alors u satisfait la condition (3.28), ce qui n'est plus le cas avec la vitesse de convection $v = u + w$.

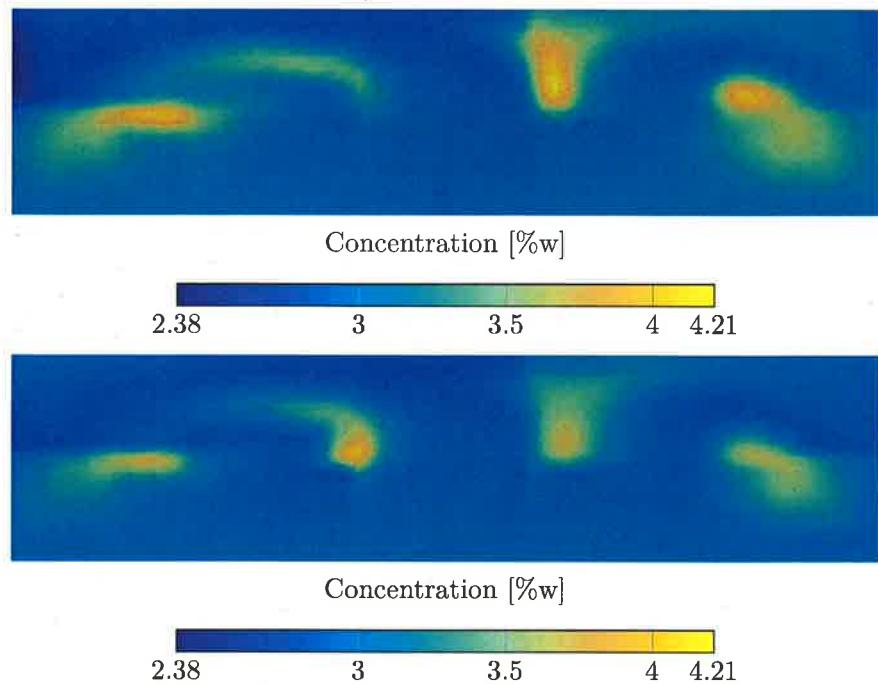


FIGURE 3.3 – Champ de concentration d’alumine dissoute dans l’ACD de la cuve AP32 à $t = 10\,000\text{s}$, de sorte à ce que la solution aie convergé vers la solution périodique. En haut : champ de concentration de référence sans sédimentation de particules. En bas : champ de concentration avec sédimentation de particules.

La vitesse v dans l’expression (3.26) introduit une composante verticale dont l’amplitude maximale atteint environ 10cm s^{-1} pour les particules de plus grand diamètre. Le maillage du bain électrolytique est très anisotrope, avec des rapport d’aspect pouvant atteindre 25. Pour que le schéma numérique satisfasse une condition CFL, il faut que le pas de temps soit diminué d’un facteur comparable lorsque la sédimentation des particules est prise en compte. En pratique, le choix $\tau = 0.05\text{s}$ fournit un résultat satisfaisant.

La figure 3.3 permet d’évaluer la différence entre les champs de concentration avec ou sans sédimentation de particules.

3.6 Discussion et conclusion

Dans la section 3.5 nous avons présenté le résultat d’un calcul de transport et dissolution d’alumine avec sédimentation des particules dans le bain au cours de leur dissolution. On peut constater sur la figure 3.3 que les modifications du champ de concentration apportées par la sédimentation de particules est petite, et tout au plus localisée à proximité des points d’injection.

Chapitre 4

Modèle d'écoulements fluide dans une couche mince

4.1 Introduction

Comme annoncé dans le chapitre 1, une cuve d'électrolyse typique dans une halle de production n'est jamais dans un état stationnaire, ~~tels que les modèles proposés par [Ste09, Flotron2012] le prédit~~. La cause majeure pour laquelle ces cuves se trouvent dans un état de déséquilibre constant est ~~les changements d'anodes en fin de vie~~, qui interviennent environ toutes les 24 heures.

Cet état de déséquilibre entraîne d'importantes variations des écoulements des fluides dans la cuve, et ces variations ont un impact non négligeable sur la ~~répartition~~ de l'alumine dissoute dans le bain électrolytique. Pour palier à ces variations de répartition d'alumine, les opérateurs peuvent jouer sur les cadences ~~de~~ d'injection de chaque injecteur. Malheureusement, il ne disposent pour l'heure d'aucun outil qui leur permette de déterminer comment adapter les cadences ~~à~~ en fonction de l'état extérieur de la cuve.

Le modèle de dissolution et transport d'alumine proposé par [Hof11] offre un début de réponse : en spécifiant la conductivité des différentes anodes pour refléter leur ~~âge~~, on obtient après exécution du code ~~le~~ un champ de vitesse dans le bain électrolytique et dans l'aluminium liquide, ainsi que la distribution d'alumine dissoute. Cette information est à l'heure actuelle trop coûteuse en temps pour déterminer la distribution d'alumine dissoute en temps réel, ainsi que pour déterminer le cadencement des injecteurs qui optimise la répartition de l'alumine dissoute dans le bain. ~~ne peut pas être obtenue en temps réel.~~

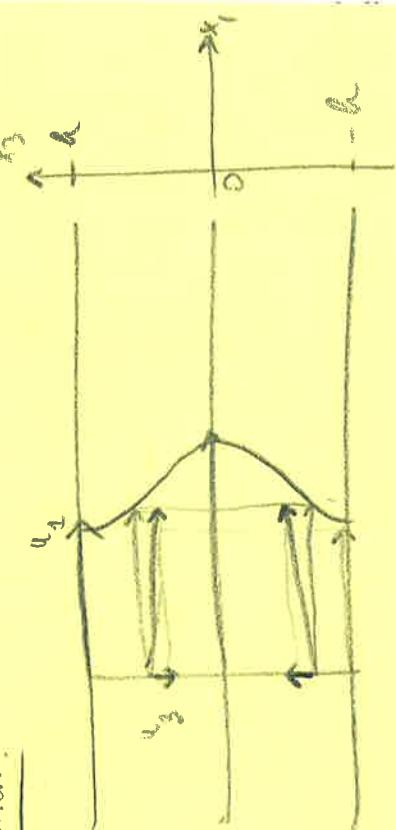
Dans ce chapitre nous proposons une méthode pour calculer le champ de vitesse dans les fluides d'une cuve d'électrolyse pour un coût en temps bien plus faible qu'avec les

épaisseur $h \rightarrow E$ confusion avec u_3 !

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

la direction verticale, puis nous proposerons dans la section ?? une méthode numérique de type élément fini pour approximer chaque harmonique de la série de Fourier. Dans la section ?? nous validrons l'implémentation du schéma ainsi obtenu en étudiant la

apport à une solution exacte non triviale. Finalement, dans cette méthode au cas industriel d'une cuve d'électrolyse s dans les fluides, et évaluer les propriétés de cette méthode par une discussion des différentes hypothèses nécessaire pour cela.



Domaine :

u problème de Stokes harmonique

et borné de bord $\partial\Lambda$. Soit $h > 0$ un nombre réel donné, on peut faire une simplification géométrique de la cuve d'électrolyse : $(x_1, x_2, x_3) \in \Lambda, x_3 \in (0, h)\}$. $\Lambda \times (0, h)$

Le domaine Ω est occupé par un fluide incompressible de viscosité μ , de forces $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, la vitesse $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ et la pression p le système d'équation de Stokes :

$$-\operatorname{div}(\mu \nabla u) + \nabla p = f, \quad (4.2)$$

$$\operatorname{div} u = 0. \quad (4.3)$$

Dans la note on

On note $u = (u_1, u_2, u_3)$ et $f = (f_1, f_2, f_3)$. De plus, la vitesse du fluide doit satisfaire des conditions aux limites d'adhérence sur $\Lambda \times (0, h)$ et des conditions de glissement total sur $\Lambda \times \{0\}$ et $\Lambda \times \{h\}$.

les faces horizontales

$$u(x_1, x_2, x_3) = 0 \text{ si } (x_1, x_2) \in \partial\Lambda \text{ et } x_3 \in (0, h), \quad (4.4)$$

Nom : $\frac{\partial u_1}{\partial x_3} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = 0$! $u_3(x_1, x_2, x_3) = 0 \text{ si } (x_1, x_2) \in \Lambda \text{ et } x_3 \in [0, h], x_3 = 0 \text{ ou } x_3 = h$ (4.5)

Noter que p est donc une constante pris.

$$\left(\frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right)(x_1, x_2, x_3) = 0 \text{ si } (x_1, x_2) \in \Lambda \text{ et } x_3 \in [0, h], = 0 \text{ au } x_3 = h \quad (4.6)$$

4.2.1 Décomposition en séries de Fourier

Pour résoudre le système d'équation (4.2), on exprime les inconnues sous forme de séries de Fourier dans la direction x_3 .

Soit le domaine $\Omega^+ = \{(x_1, x_2, x_3) \mid (x_1, x_2) \in \Lambda, x_3 \in (-h, h)\}$, et on définit les

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

x_3 s'écrivent :

$$U_i(x_1, x_2, x_3) = u_{i,0}(x_1, x_2) + \sum_{k>0} u_{i,k}(x_1, x_2) \cos\left(\frac{2\pi k}{T} x_3\right), \quad i = 1, 2, \quad (4.14)$$

$$U_3(x_1, x_2, x_3) = \sum_{k>0} u_{3,k}(x_1, x_2) \sin\left(\frac{2\pi k}{T} x_3\right), \quad (4.15)$$

$$P(x_1, x_2, x_3) = p_0(x_1, x_2) + \sum_{k>0} p_k(x_1, x_2) \cos\left(\frac{2\pi k}{T} x_3\right), \quad (4.16)$$

$$F_i(x_1, x_2, x_3) = f_{i,0}(x_1, x_2) + \sum_{k>0} f_{i,k}(x_1, x_2) \cos\left(\frac{2\pi k}{T} x_3\right), \quad i = 1, 2, \quad (4.17)$$

$$F_3(x_1, x_2, x_3) = \sum_{k>0} f_{3,k}(x_1, x_2) \sin\left(\frac{2\pi k}{T} x_3\right). \quad (4.18)$$

En identifiant les différents modes, on obtient avec $T=2\pi$ pour $k \in \mathcal{O}$:

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{1,0} + \frac{\partial p_0}{\partial x_1} = f_{1,0}, \quad (4.19)$$

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{2,0} + \frac{\partial p_0}{\partial x_2} = f_{2,0}, \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial u_{1,0}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,0}}{\partial x_2} = 0, \quad (4.21)$$

et pour $k = 1, 2, 3, \dots$:

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{1,k} + \mu \left(\frac{\pi k}{h}\right)^2 u_{1,k} + \frac{\partial p_k}{\partial x_1} = f_{1,k}, \quad (4.22)$$

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{2,k} + \mu \left(\frac{\pi k}{h}\right)^2 u_{2,k} + \frac{\partial p_k}{\partial x_2} = f_{2,k}, \quad (4.23)$$

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{3,k} + \mu \left(\frac{\pi k}{h}\right)^2 u_{3,k} - \frac{\pi k}{h} p_k = f_{3,k}, \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial u_{1,k}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k}}{\partial x_2} + \frac{\pi k}{h} u_{3,k} = 0. \quad (4.25)$$

à résoudre dans $\Lambda \subset \mathbb{R}^2$

Les problèmes ci-dessus sont 2D car toutes les inconnues ne dépendent que de x_1 et x_2 .

Naturellement ils nécessitent des conditions limites d'adhérence sur $\partial\Lambda$:

$$u_{1,0} = u_{2,0} = 0 \text{ sur } \partial\Lambda, \quad u_{1,k} = u_{2,k} = u_{3,k} = 0 \text{ sur } \partial\Lambda, \quad k = 1, 2, 3 \quad (4.26)$$

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_1 \cdot \nabla v_1 + \beta^2 u_1 v_1) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \int_{\Lambda} f_{1,k} v dx_1 dx_2, \quad \forall v_1 \in H_0^1(\Lambda), \quad (4.36)$$

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_2 \cdot \nabla v_2 + \beta^2 u_2 v_2) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = \int_{\Lambda} f_{2,k} v dx_1 dx_2, \quad \forall v_2 \in H_0^1(\Lambda), \quad (4.37)$$

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) q dx_1 dx_2 + \beta \int_{\Lambda} g q dx_1 dx_2 = 0, \quad \forall q \in L_0^2(\Lambda). \quad (4.38)$$

Il est bien connu que la condition :

$$\inf_{q \in L_0^2(\Lambda)} \sup_{v \in H_0^1(\Lambda)} \frac{\int_{\Lambda} q \operatorname{div}(v) dx_1 dx_2}{\|q\|_{L_0^2} \|v\|_{H_0^1}} > 0 \quad (4.39) \quad \|q\|_{L_0^2} = \|q\|_{L^2}$$

est vraie et qu'elle implique que le problème (4.36)-(4.37) admet une solution unique (u_1, u_2, p) qui dépend bien évidemment de g . De plus on a :

$$\|u_1\|_{H_0^1} + \|u_2\|_{H_0^1} + \|p\|_{L_0^2} \leq K (\|f_{1,k}\|_{L^2} + \|f_{2,k}\|_{L^2} + \|g\|_{L^2}) \quad (4.40)$$

où ici K est une constante indépendante de g qui sera une constante générique dans la suite.

Soit maintenant $u \in H_0^1(\Lambda)$ qui satisfait :

$$\textcircled{u} \int_{\Lambda} (\nabla u \cdot \nabla v + \beta^2 u v) dx_1 dx_2 = \beta \int_{\Lambda} p v dx_1 dx_2 + \int_{\Lambda} f_{3,k} v dx_1 dx_2, \quad \forall v \in H_0^1(\Lambda). \quad (4.41)$$

Clairement, u existe et est unique. Ici encore u dépend de g puisque p en dépend. On aura :

$$\|u\|_{H_0^1} \leq K (\|p\|_{L_0^2} + \|f_{3,k}\|_{H_0^1}) \quad (4.42)$$

et avec (4.40) :

$$\|u\|_{H_0^1} \leq K (\|f_{1,k}\|_{L_0^2} + \|f_{2,k}\|_{L_0^2} + \|f_{3,k}\|_{L_0^2} + \|g\|_{L_0^2}) \quad (4.43)$$

Soit encore $w \in H_0^1(\Lambda)$, indépendant de g , qui satisfait :

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla w \cdot \nabla v + \beta^2 w v) dx_1 dx_2 = \beta \int_{\Lambda} v dx_1 dx_2, \quad \forall v \in H_0^1(\Lambda). \quad (4.44)$$

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

est instable sauf si on modifie l'équation (??) par :

$$\operatorname{div}(u) = \varepsilon h^2 \Delta p, \quad (4.51)$$

où h est un paramètre de finesse du maillage et ε est un nombre positif donné. Dans notre cas, si on calcule $\Delta P(x_1, x_2, x_3)$ et si on note Δ_{x_1, x_2} l'opérateur de Laplace en deux dimensions, alors :

$$\Delta P = \Delta_{x_1, x_2} p_0(x_1, x_2) + \sum_{k>0} (\Delta_{x_1, x_2} p_k - \beta^2 p_k) \cos(\beta x_3), \quad (4.52)$$

On ajoute dans l'équation (??) un terme de stabilisation :

et l'équation (??) stabilisée devient :

$$\frac{\partial u_{1,k}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k}}{\partial x_2} + \beta u_{3,k} = \varepsilon h^2 (\Delta_{x_1, x_2} p_k - \beta^2 p_k). \quad (4.53)$$

On ajoute dans l'équation (4.34) un terme de stabilisation

En conséquence, l'équation (4.34) sera modifiée comme il suit :

$$\int_A \left(\frac{\partial u_{1,k}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k}}{\partial x_2} + \beta u_{3,k} \right) q \, dx_1 dx_2 + \varepsilon h^2 \int_A (\beta^2 p_k q + \nabla p_k \cdot \nabla q) \, dx_1 dx_2 = 0. \quad (4.54)$$

le terme $\beta^2 p_k$ ci-dessus est justifié par le paramètre de stabilisation

4.2.4 Formulation avec viscosité tensorielle variable

Considérons maintenant un problème de Stokes avec une viscosité *a priori* tensorielle et variable $\mu_{i,j}$, i. e. on cherche u et p qui vérifient :

$$-\operatorname{div}(2\mu \otimes \epsilon(u)) + \nabla p = f, \quad \text{dans } \Omega, \quad (4.55)$$

$$\operatorname{div}(u) = 0, \quad \text{dans } \Omega, \quad (4.56)$$

où

$$[\mu \otimes \epsilon(u)]_{i,j} = \frac{1}{2} \mu_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad 1 \leq i, j \leq 3. \quad (4.57)$$

On fait, de plus, l'hypothèse que μ est un tenseur symétrique indépendant de x_3 , i. e. :

$$u_{i,j}(x_1, x_2) = \mu_{j,i}(x_1, x_2), \quad 1 \leq i, j \leq 3. \quad (4.58)$$

Conditions limiter $u(x_1, x_2, x_3) = 0$ sur $\Gamma \times [0, h]$

Remarque : je constate u s'adapte (4.2)-(4.6) !

$$\begin{aligned} u_{3,3} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) &= 0 \\ \mu_{1,3} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) &= 0 \end{aligned}$$

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

~~consiste à chercher~~
Remarque 3. Le mode fondamental s'obtient en prenant $\beta = 0$, i. e. en cherchant $u \in H_0^1(\Lambda)^2$, $p \in L_0^2(\Lambda)$, tels que pour tout $v \in H_0^1(\Lambda)^2$ et $q \in L_0^2(\Lambda)$:

$$\int_{\Lambda} 2\tilde{\mu} \otimes \tilde{E}(u) : \tilde{E}(v) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) dx_1 dx_2 = \int_{\Lambda} f \cdot v dx_1 dx_2, \quad (4.68)$$

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) q dx_1 dx_2 = 0, \quad (4.69)$$

avec :

$$\tilde{E}(u) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & 2\frac{\partial u_2}{\partial x_2} \end{bmatrix} \quad (4.70)$$

et :

$$\tilde{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_{1,1} & \mu_{1,2} \\ \mu_{2,1} & \mu_{2,2} \end{bmatrix}. \quad (4.71)$$

On trouvera ci-dessous une démonstration plus simple que celle faite pour démontrer la proposition 1 de la section 4.2.2.

4.2.5 Existence et unicité de la solution

Tout d'abord on gardera les notations introduites dans (4.62) et (4.70) pour $E(u)$ et $\tilde{E}(u)$ respectivement. D'autre part on note toujours $|E(u)|^2 = \sum_{i,j=0}^3 E_{i,j}^2(u)$ et $|\tilde{E}(u)|^2 = \sum_{i,j=0}^2 \tilde{E}_{i,j}^2(u)$. Pour simplifier, on supposera que le domaine Λ est un rectangle de dimensions L_1, L_2 , c'est-à-dire $\Lambda = \{(x_1, x_2) \mid 0 < x_1 < L_1, 0 < x_2 < L_2\}$.

En collaboration avec JR

Lemme 1. Sous l'hypothèse $\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \beta u_3 = 0$, on a la relation :

$$\int_{\Lambda} |E(u)|^2 dx_1 dx_2 = \int_{\Lambda} \left(|\tilde{E}(u)|^2 + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right)^2 + \beta^2 u_1^2 + \beta^2 u_2^2 \right) \right) dx_1 dx_2. \quad (4.72)$$

On montre l'indication

Démonstration. Le calcul de $|E(u)|^2$ donne :

$$|E(u)|^2 = |\tilde{E}(u)|^2 + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right)^2 + \beta^2 u_1^2 + \beta^2 u_2^2 \right) - \beta u_1 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} - \beta u_2 \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \beta^2 u_3. \quad (4.73)$$

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

Définissons encore la forme bilinéaire continue $b : V \times Y \rightarrow \mathbb{R}$, par :

$$b(u, q) = \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \cancel{\beta u_3} \right) q \, dx_1 dx_2, \quad (4.80)$$

où ici $Y = L_0^2(\Lambda)$.

Il est facile de voir que le problème (4.64)-(4.66) est équivalent au problème de chercher $(u, p) \in V \times Y$ tel que :

$$\begin{aligned} a(u, v) - b(v, p) &= \int_{\Lambda} f \cdot v \, dx_1 dx_2, \quad \forall v \in V, \\ \text{dans (4.64)} \quad b(u, q) &= 0, \quad \forall q \in Y. \end{aligned} \quad (4.81)$$

La constante C peut s'obtenir a posteriori en considérant (4.64)-(4.66) avec les fonctions tests $v = (0, 0, s)$ où $s \in H_0^1(\Lambda)$ est dans l'orthogonal de $H_{0,0}^1(\Lambda)$.

Pour démontrer la proposition 2, il suffit de vérifier que la forme $a(., .)$ est coercive sur V_0 , où $V_0 = \{v \in V \mid b(v, q) = 0 \ \forall q \in Y\}$, et que la condition classique inf-sup sur la forme bilinéaire b est satisfaite.

Le lemme 2 avec l'hypothèse (4.78) montrent bien que a est coercive sur V_0 . D'autre part en utilisant l'inégalité concernant la condition inf-sup dans \mathbb{R}^2 on a si $q \in L_0^2(\Lambda)$:

$$\begin{aligned} \sup_{\|v\|_{H_0^1}=1} b(v, q) &\geq \sup_{\|(v_1, v_2, 0)\|_{H_0^1}} b(v, q) \\ &= \sup_{\|(v_1, v_2, 0)\|_{H_0^1}} \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) q \, dx_1 dx_2 \\ &\geq \delta \|q\|_{L_0^2}, \end{aligned} \quad (4.82)$$

où $\delta > 0$. Ainsi on a prouvé la proposition 2. *la démonstration peut donc être un peu plus simple* □

4.2.6 Un modèle de transport et diffusion d'alumine

L'objectif ultime étant d'obtenir une approximation de la concentration d'alumine dans la cuve, on propose un modèle de transport et diffusion d'alumine dissoute dans le domaine Ω .

On suppose donné un champ de convection stationnaire $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, qui correspond à l'écoulement des fluides dans le domaine Ω . Le champ u est typiquement calculé à l'aide d'un schéma numérique introduit dans la section 4.3.

Soit S le terme source de la concentration d'alumine dissoute correspondant à l'injection de particules, \dot{q} le terme source correspondant à la consommation d'alumine dissoute par la

4.3 Discrétisation par une méthode d'éléments finis

Soit $h > 0$ et soit τ_h une triangulation du domaine Λ telle que $\text{diam}(K) \leq h, \forall K \in \tau_h$.
On introduit maintenant l'espace éléments finis V_h , défini par :

$$V_h = \left\{ v \in C^0(\Lambda) \mid v|_K \in \mathbb{P}_1(K) \quad \forall K \in \tau_h \right\}, \quad (4.89)$$

ainsi que son homologue qui correspond aux conditions limites de Dirichlet sur le bord $\partial\Lambda$:

$$V_{0,h} = V_h \cap L_0^2(\Lambda). \quad (4.90)$$

Dans le cadre de la discrétisation par une méthode éléments finis des problèmes de Stokes, il convient de considérer, de plus, un espace enrichi par une fonction bulle :

$$B_h = \left\{ v \in C^0(\Lambda) \mid v|_K \in \mathbb{P}_1 \oplus B_K \quad \forall K \in \tau_h \right\} \cap H_0^1(\Lambda)^2 \quad (4.91)$$

où B_K est un espace unidimensionnel défini de la manière suivante sur le triangle de référence \hat{K} . On note $\lambda_i : \hat{K} \rightarrow \mathbb{R}, i=1,2,3$ les trois fonctions barycentrique de \hat{K} . Alors, l'espace B_K est engendré par la fonction bulle $\hat{\phi}_B$.

$$\hat{\phi}_B(x_1, x_2) = 27\lambda_1(x_1, x_2)\lambda_2(x_1, x_2)\lambda_3(x_1, x_2), \quad (4.92)$$

les $\lambda_i, i=1,2,3$, étant les trois fonctions barycentriques de K .

De plus, afin d'alléger les notation, si Q est espace fonctionnel, on notera Q^n l'espace :

$$Q^n = \{(v_1, \dots, v_n) \mid v_i \in Q, \forall i=1, \dots, n\}. \quad (4.93)$$

rotation déjà utilisée!

4.3.1 Discrétisation en espace par une méthode d'élément finis pour le mode fondamental

La formulation faible du système d'équations (4.19)-(4.21) correspond au problème suivant. On cherche les fonctions $(u, p) \in (H_0^1(\Lambda))^2 \otimes L_0^2(\Lambda)$ telles que pour tout $(v, q) \in (H_0^1(\Lambda))^2 \otimes L_0^2(\Lambda)$ les équations suivantes soient vérifiées :

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Lambda} \nabla u : \nabla v \, dx_1 dx_2 + \int_{\Lambda} p \operatorname{div}(v) \, dx_1 dx_2 &= \int_{\Lambda} f \cdot v \, dx_1 dx_2, \\ \int_{\Lambda} q \operatorname{div}(u) \, dx_1 dx_2 &= 0. \end{aligned} \quad (4.94)$$

La formulation faible (4.94) est discrétisée avec une méthode de Galerkin. Le problème (4.94) discrétisé correspond à chercher les fonctions $(u_h, p_h) \in B_h^2 \otimes V_{0,h}$ telles que les

4.3. Discrétisation

chercher les fonctions $(u_{1,k,h}, u_{2,k,h}, u_{3,k,h}, p_{k,h}^0) \in (V_h)^3 \times V_{0,h}$ telles que :

$$\mu \int_A (\nabla u_{1,k,h} : \nabla v_{1,h} + \beta^2 u_{1,k,h} v_{1,h}) dx_1 dx_2 - \int_A p_{k,h}^0 \frac{\partial v_{1,h}}{\partial x_1} dx_1 dx_2 = \int_A f_{1,k} v_{1,h} dx_1 dx_2,$$

$$\begin{aligned} & \int_A (\nabla u_{2,k,h} : \nabla v_{2,h} + \beta^2 u_{2,k,h} v_{2,h}) dx_1 dx_2 - \int_A p_{k,h}^0 \frac{\partial v_{2,h}}{\partial x_2} dx_1 dx_2 = \int_A f_{2,k} v_{2,h} dx_1 dx_2, \\ & \int_A (\nabla u_{3,k,h} : \nabla v_{3,h} + \beta^2 u_{3,k,h} v_{3,h}) dx_1 dx_2 - \int_A p_{k,h}^0 \frac{\partial v_{3,h}}{\partial x_2} dx_1 dx_2 = \int_A f_{3,k} v_{3,h} dx_1 dx_2, \end{aligned} \quad (4.100)$$

$$\int_A u_{3,h} = 0 \quad (4.101)$$

$$\mu \int_A (\nabla u_{1,k,h} : \nabla v_{1,h} + \beta^2 u_{1,k,h} v_{1,h}) dx_1 dx_2 - \int_A (p_{k,h}^0 + C) dx_1 dx_2 = \int_A f_{1,k} v_{1,h} dx_1 dx_2, \quad (4.102)$$

$$\int_A \left(\frac{\partial u_{1,k,h}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k,h}}{\partial x_2} \right) q_h dx_1 dx_2 + \beta \int_A u_{3,k,h} q_h dx_1 dx_2 = 0, \quad (4.103)$$

$$\int_A u_{3,k,h} dx_1 dx_2 = 0. \quad (4.104)$$

pour huit $(v_{1,h}, v_{2,h}, v_{3,h}, q_h) \in (V_h \cap H^1(\Omega))^3 \times V_{0,h}$

Remarque 6. Les formulations (4.106), (4.99), font intervenir l'espace éléments finis à moyenne nulle $V_{0,h}$. En pratique, on relaxera cette contrainte, et on cherchera les fonctions p_h^0 et $p_{k,h}^0$ dans V_h , et en ajoutant à la formulation correspondante l'équation :

$$\int_A p_{k,h}^0 dx_1 dx_2 = 0 \quad (4.105)$$

et en ajoutant un multiplicateur de Lagrange λ . Par exemple, le problème (4.106) devient :

$$\begin{aligned} & \mu \int_A \nabla u_h : \nabla v_h dx_1 dx_2 + \int_A p_h \operatorname{div}(v_h) dx_1 dx_2 = \int_A f \cdot v_h dx_1 dx_2, \\ & \int_A q_h \operatorname{div}(u_h) dx_1 dx_2 + \lambda \int_A q_h dx_1 dx_2 = 0. \end{aligned} \quad (4.106)$$

et on cherche $\lambda \in \mathbb{R}$, $u_h \in (B_h)^2$ et $p_h \in V_h$.

Ce choix évite de devoir construire les fonctions de bases de $V_{0,h}$ et garanti que les matrices correspondantes aux formes bilinéaires soient sparses.

4.3.3 Quadrature pour les coefficients de Fourier de la force

En général, la force f qui intervient dans le membre de droite de l'équation de Stokes (4.2) n'est pas connue de façon analytique. Dans le cas industriel que nous considérerons dans la section 4.5, la force sera donnée comme un élément de V_h sur un maillage tétraédrique.

En général, il est clair que $f_{i,k} \in L^2(\Omega)$. Cependant, pour des raisons d'implémentations

ici remarque p83 de forme de Stokes $\mathcal{E} \in \mathbb{R}^2$... dans ??) 91
est justifiée par le fait que, d'après (4.16), $\Delta P = \Delta_{x_1 x_2} p_0 + \frac{1}{\epsilon} (\Delta_{x_1 x_2} \beta_{12} - \beta_{12}^2) \operatorname{car}(\beta_{12})$,

4.4. Validation du modèle numérique

définies par :

$$u_1(x_1, x_2, x_3) = u_2(x_1, x_2, x_3) = \left(x_1^2 - 1 \right) \left(x_2^2 - 1 \right) \\ \left(x_3^3 - \frac{3}{2} h x_3^2 + \frac{1}{4} h^3 \right), \quad (4.109)$$

$$u_3(x_1, x_2, x_3) = \left(-4x_1 \left(x_1^2 - 1 \right) \left(x_2^2 - 1 \right)^2 - 4x_2 \left(x_2^2 - 1 \right) \left(x_1^2 - 1 \right)^2 \right) \\ \cdot \left(\frac{1}{4} x_3^4 - \frac{1}{2} h x_3^3 + \frac{1}{4} h^3 x_3 \right), \quad (4.110)$$

$$p(x_1, x_2, x_3) = x_1^3 + x_2^4 + x_3^5 \quad (4.111)$$

la suite ici !

?

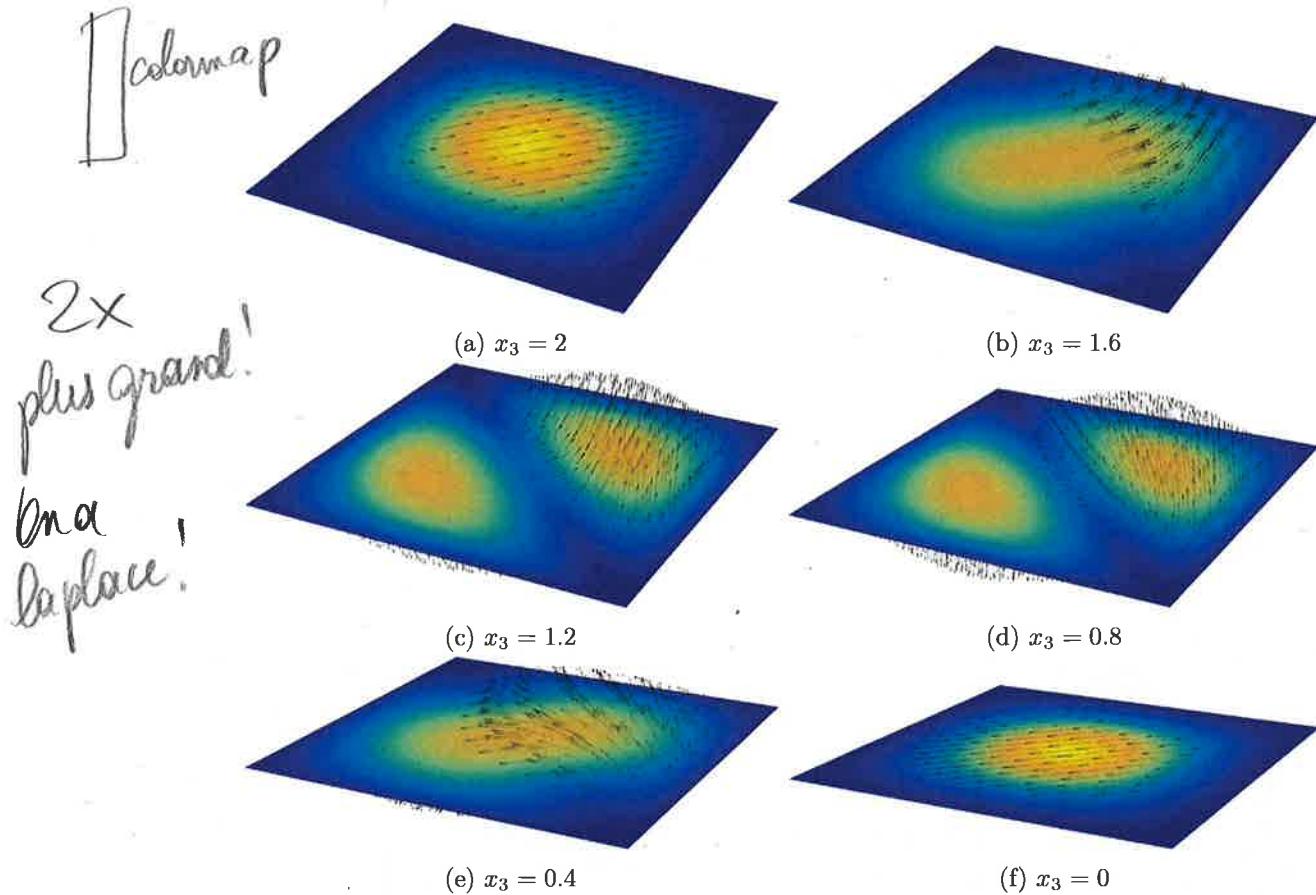


FIGURE 4.1 – Représentation de la solution exacte (4.109)-(4.111) du problème de Stokes (4.2). La solution est représentée sur 6 plans horizontaux espacés régulièrement entre $x_3 = 0$ et $x_3 = 2$. L'échelle de couleur correspond à l'amplitude de u , tandis que les flèches indique la direction de u .

définie par :

$$e_h^{\text{SF}} = \frac{\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}}{\|u\|_{L^2(\Omega)}}, \quad (4.115)$$

où \underline{u} est le champ de vecteur donné par (4.109)-(4.110). On cherchera également à comparer le schéma numérique introduit dans la section 4.3 (noté SF dans la suite) avec un schéma numérique basé sur une méthode d'éléments finis sur un maillage tétraédrique classique (noté S3D dans la suite). Le lecteur intéressé trouvera les détails d'une telle formulation dans l'annexe ??, ainsi que, par exemple, dans [QV08]. On note u_h^{S3D} l'approximation de u obtenue avec une méthode éléments finis sur un maillage en tétraèdres, et l'erreur e_h^{S3D} associée. *(On note*

Stokes Fourier
la solution
de (4.15)-(4.16)
obtenue à
l'aide

P1 helle - P1

$$e_h^{\text{S3D}} = \frac{\|u - u_h^{\text{S3D}}\|_{L^2(\Omega)}}{\|u\|_{L^2(\Omega)}}. \quad (4.116)$$

4.4. Validation du modèle numérique

TABLE 4.2 – Erreur e_h^{SF} entre la solution exacte et la série de Fourier tronquée à l'ordre $K = 20$, en fonction de la finesse du maillage du domaine Ω et du rapport d'aspect κ du domaine Ω . lorsque $K = 20$

κ	$R(\eta) = 0.25$	$\eta = 0.125$	$\eta = 0.0625$	$\eta = 0.03125$	$\eta = 0.015625$
$h = 2$	0.9765×10^{-1}	0.2611×10^{-1}	0.6698×10^{-2}	0.1688×10^{-2}	0.4232×10^{-3}
$h = 0.2$	0.4184×10^{-2}	0.2342×10^{-2}	0.9966×10^{-3}	0.2962×10^{-3}	0.7794×10^{-4}
$h = 0.02$	0.3977×10^{-4}	0.1166×10^{-4}	0.9187×10^{-5}	0.1121×10^{-4}	0.1210×10^{-4}

ne converge plus !

TABLE 4.3 – Erreurs e_h^{SF} et e_h^{S3D} en fonction du rapport d'aspect κ du domaine Ω .

$K=20$
 $\kappa=2/4$

$\kappa = 0.020$	$h = 0.055$	$h = 0.154$	$h = 0.430$	$h = 1.198$
e_h^{SF}	0.1121×10^{-4}	0.8356×10^{-4}	0.2478×10^{-3}	0.4944×10^{-3}
e_h^{S3D}	0.1426×10^{-2}	0.1351×10^{-2}	0.1175×10^{-2}	0.9317×10^{-3}

Comparaison des erreurs e_h^{SF} et e_h^{S3D}

la précision des calculs SF et S3D.

On s'intéresse maintenant à comparer le schéma numérique classique pour approximer la solution du problème de Stokes (4.2), qui consiste en une méthode d'éléments finis sur un maillage tétraédrique du domaine Ω , et le schéma numérique basé sur une décomposition en harmonique proposé dans la section 4.2. Ici on a tronqué la série de Fourier à l'ordre $K = 20$. Le nombre de mailles dans les directions x_1 , x_2 et x_3 sont fixée à 64, quelque soit le rapport d'aspect du domaine Ω . Les systèmes linéaires sont résolu avec la méthode GMRES préconditionnée par Ilu(2). Le critère d'arrêt de l'itération de GMRES est :

$$\frac{\|Ax^n - b\|_{l^2}}{\|Ax^0 - b\|_{l^2}} \leq 1 \times 10^{-10}, \quad (4.117)$$

où A est la matrice éléments finis préconditionnée, b le membre de droite, et x^n les itérations successives de l'algorithme GMRES.

Le tableau 4.4 donne la valeur des erreurs pour différents rapports d'aspect h du domaine Ω . La figure 4.3 représente les mêmes données sous forme graphique.

doit et $h=2/4$

ça il fallait l'écrire au obtient SF ? et une ?

Conclusion ?

Finalement, on compare les performances des deux schémas numériques. Le tableau donne le temps CPU pour chaque schéma, ainsi que le nombre d'itération de l'algorithme GMRES pour résoudre le système linéaire dans le cas du schéma S3D.

Conclusion ? 97

4.5. Application à l'écoulement d'une cuve d'électrolyse

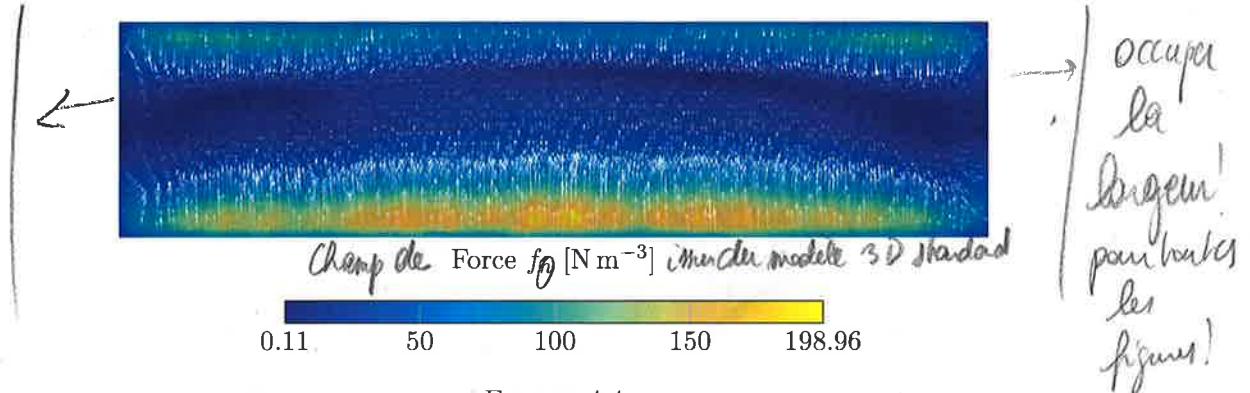


FIGURE 4.4

le parallélépipède recharge Ω défini par 4.1 est contenu dans la partie fluide de la cuve

dans la section 1.3, de même que le champ de force f_h définit sur Ω_f , la densité de courant électrique j_h et le champ d'induction électromagnétique B_h . C'est le champ de force f_h qui est responsable du mouvement des fluides dans la cuve.

On se fixe un domaine Ω parallélépipédique tel que $\Omega \subset \Omega_h$. En pratique, on choisira un parallélépipède rectangle aligné sur le système de coordonnées de taille maximale. En particulier, dans notre cas $h = 0.18$, $L_1 = 13.80$ et $L_2 = 3.26$. On considère finalement les restrictions f, j, B des différents champs f_h, j_h et B_h au domaine Ω .

du champ de force $f = j \times B$ correspondant aux forces de Lorentz calculées.

$$f(x) = f_h|_{\Omega}(x), \quad j(x) = j_h|_{\Omega}(x), \quad B(x) = B_h|_{\Omega}(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (4.118)$$

La figure 4.4 représente l'intensité et la direction du champ de force f_h sur un plan placé à mi-hauteur entre les anodes et la cathode.

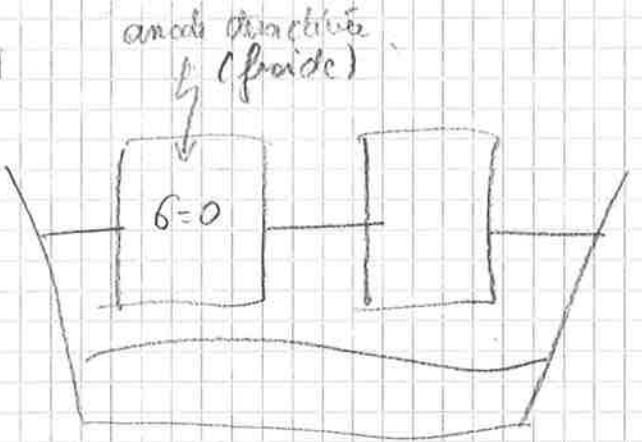
En utilisant le champ de force $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, le schéma numérique SF permet de calculer une approximation u_h de l'écoulement des fluides dans le domaine Ω . On rappelle que le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ s'écrit en fonction du domaine $\Lambda \subset \mathbb{R}^2$ et de $h > 0$ tel que décrit dans (4.2) :

$$\Omega = \Lambda \times (0, h). \quad (4.119)$$

De plus, Λ est choisi de telle sorte à ce que le domaine $\Lambda \times \{0\} \subset \mathbb{R}^3$ corresponde à l'interface entre le métal liquide et la cathode. On choisit une triangulation pour Λ de sorte à ce que la taille des mailles correspondent à celle de Ω_h . La solution u_h donnée par (4.108) est représentée par la figure ?? sur une surface horizontale placée en $x_3 = h/2$.

En utilisant le modèle de transport et diffusion d'alumine dissoute décrit dans la section 4.2.6, on obtient un champ de concentration stationnaire $c : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. La moyenne \bar{c} est fixée à $3[\%w]$, identique à la concentration d'alumine dissoute initiale dans le modèle de transport et dissolution décrit dans le chapitre 2. La figure 4.6 représente la concentration

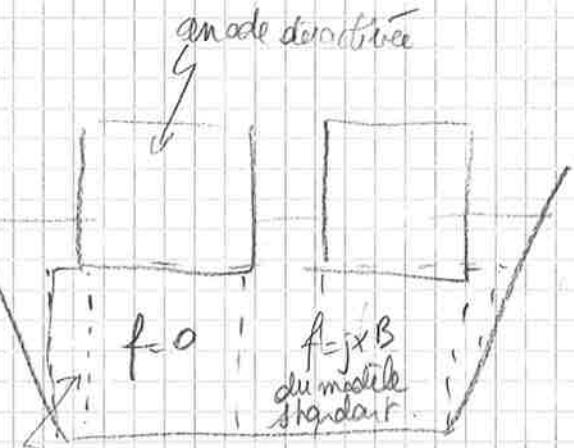
Que valent I, M, F dans (4.87)? 99



$$j = G(B + \alpha B) \quad f = j \times B$$

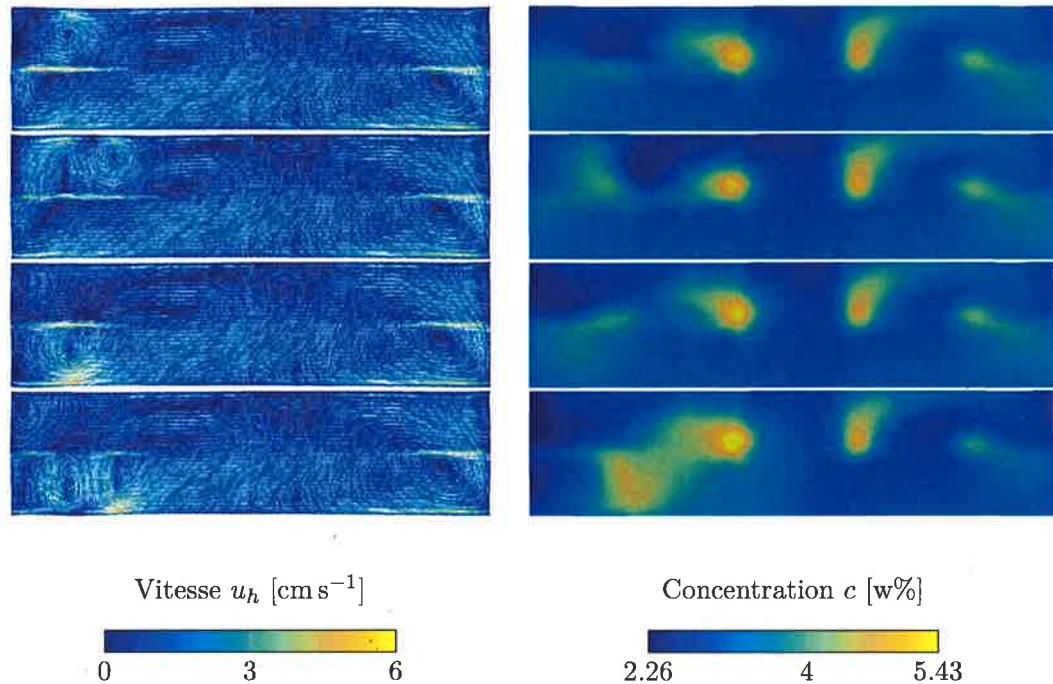
déactivation d'anode pour le modèle alucell standard

4.6 bis



domaine de calcul $\Omega: \Lambda \times (0, \varepsilon)$

déactivation d'anode pour le modèle Spikes-Toupin



(a) Champ de vitesse stationnaire u dans l'ACD de la cuve AP32.
 (b) Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32.

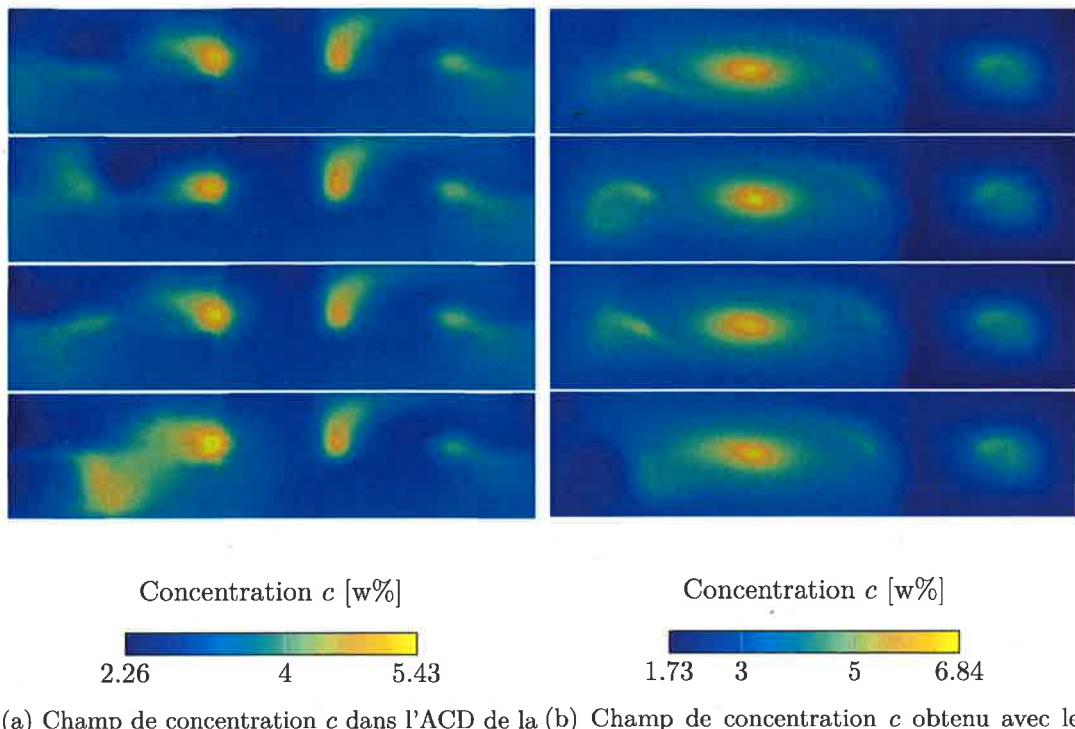
FIGURE 4.7 – Champs de vitesse stationnaire u dans l'ACD de la cuve AP32 pour différentes configurations du plan anodique. Les anodes désactivées sont respectivement, de haut en bas les anodes (1, 1), (1, 2), (2, 1) et (2, 2). Sur la droite, on a les champs de concentration d'alumine dissoute dans l'ACD de la cuve AP32, correspondant aux différents champs de vitesse.

On trouve sur la même figure les champs de concentration d'alumine associées.

Pour évaluer l'effet des approximations introduites par le modèle SF par rapport au modèle F3D, on compare les champs de vitesse u_h obtenu avec le modèle SF en utilisant le champ de force f calculé avec le modèle F3D. Sur la figure 4.8 on peut comparer les champs de vitesse u et u_h obtenu avec l'un ou l'autre des modèles dans l'ACD ou dans le domaine Ω .

L'objectif final est de calculer le champs de concentration d'alumine dans le bain électrolytique. Sur la figure 4.9, on compare les champs de concentration c obtenus avec le modèle F3D et le champ de concentration stationnaire dans le domaine Ω avec le modèle SF.

L'objectif du modèle étant d'obtenir une approximation du champ de vitesse et du champ de concentration à moindre coût, on veut éviter à tout prix de devoir utiliser le modèle F3D pour obtenir le champ de force en fonction de la configuration du plan anodique. A la place, on effectue un calcul de la force que l'on note f^0 avec le modèle F3D



(a) Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32.
(b) Champ de concentration c obtenu avec le schéma numérique SF sur une surface à mi-hauteur du domaine Ω .

FIGURE 4.9 – Champ de concentration obtenu avec le modèle F3D (**gauche**) dans les différentes configurations anodiques, et la concentration d'alumine stationnaire obtenue avec le modèle SF (**droite**).

parcourir tout le domaine. Ensuite, on approxime le domaine occupé par les fluides par un parallélépipède, ce qui empêche en particulier de modéliser l'effet de la présence des canaux entre les anodes. Le modèle SF impose de considérer des conditions de bord de glissement parfait sur les faces qui correspondent à la cathode et au plan anodique. Cette approximation est probablement moins crue qu'il n'y paraît au niveau des anodes. En effet, la formation de bulles à la surface de celle-ci en raison de la réaction d'électrolyse forme une couche intermédiaire qui joue le rôle de lubrifiant entre le fluide et la surface des anodes. Seules les parois verticales admettent des conditions d'adhérence totale. En pratique, on est alors forcés d'augmenter de manière artificielle la viscosité du fluide afin de retrouver des vitesses maximales similaires aux vitesses observées dans le modèle F3D. On peut constater la conséquence de cette observation sur la figure 4.8, où on remarque l'absence de petites structures dans l'écoulement dans la colonne de droite en comparaison à la colonne de gauche de cette même figure.

Bibliographie

- [FC04] R. I. FERGUSON et M. CHURCH. « A simple universal equation for grain settling velocity ». In : *Journal of Sedimentary Research* 74.6 (2004), p. 933-937. ISSN : 1527-1404. DOI : 10.1306/051204740933.
- [Flo13] Stéphane FLOTRON. « Simulations numériques de phénomènes MHD-thermiques avec interface libre dans l'électrolyse de l'aluminium ». In : 5738 (2013).
- [Hof11] Thomas HOFER. « Numerical Simulation and Optimization of the Alumina Distribution in an Aluminium Electrolysis Pot ». Thèse de doct. 2011.
- [PSV88] M PAOLINI, G SACCHI et Claudio VERDI. « Finite element approximations of singular parabolic problems ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 26.9 (1988), p. 1989-2007.
- [QV08] Alfio M. QUARTERONI et Alberto VALLI. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. 1st ed. 1994. 2nd printing. Springer Publishing Company, Incorporated, 2008. ISBN : 3540852670, 9783540852674.
- [Roc16] Jonathan ROCHAT. « Approximation numérique des écoulements turbulents dans des cuves d'électrolyse de l'aluminium ». Thèse de doct. 2016.
- [Ste09] Gilles STEINER. « Simulation numérique de phénomènes MHD : Application à l'électrolyse de l'aluminium ». Thèse de doct. 2009.

Appendices

Annexe A

Méthode éléments finis \mathbb{P}_1 pour le problème de convection-diffusion

Le splitting du système d'équation (2.27)-(2.30) nécessite de résoudre pour les inconnues n_p , c et T une équation d'advection-diffusion en espace. Dans cette partie on formule une discréétisation en espace générale, que l'on utilise pour chacune des trois équations mentionnées.

Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^3 , $T_{\text{end}} > 0$ et $D > 0$ es reéls. Soit $\vec{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ un champ d'advection que l'on suppose à divergence nulle, et tel que :

$$\vec{u}(x) \cdot \vec{n}(x) = 0 \quad x \in \partial\Omega. \quad (\text{A.1})$$

Ici on a noté \vec{n} la normale extérieure au bord du domaine Ω . Soit encore $S_y \in L^2([0, T_{\text{end}}] \times \Omega)$ un terme source et $y_0 \in H^1(\Omega)$ un condition initiale.

Le problème consiste à trouver la fonction $y : [0, T_{\text{end}}] \times \Omega$ solution de l'équation :

$$\frac{\partial y}{\partial t}(t, x) + \vec{u} \cdot \nabla y(t, x) - D \Delta y(t, x) = S_y(t, x), \quad t \in [0, T_{\text{end}}], \quad x \in \Omega, \quad (\text{A.2})$$

$$y(0, x) = y_0(x), \quad x \in \Omega. \quad (\text{A.3})$$

On choisit V_h l'espace élément finit donné par :

$$V_h = \left\{ v \in C^0(\Omega) | v|_K \in \mathbb{P}_1(K) \quad \forall K \in \tau_h \right\}, \quad (\text{A.4})$$

l'espace des continues linéaires par morceau sur le maillage τ_h de Ω . Soit $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N+1} = T_{\text{end}}$ une partition régulière de l'intervalle $[0, T_{\text{end}}]$. On note $\tau = t_{i+1} - t_i$, $\forall i = 0, \dots, N$.

Annexe B

Solidification de bain à proximité d'une particule

Dans cette section on introduit le problème et la modélisation de la solidification et refonte d'une couche bain électrolytique à proximité de la surface d'une particule d'alumine. Dans la partie B.1 nous présentons les formulations fortes et faibles du problème de Stefan classique dans \mathbb{R}^N . Dans les partie B.2 nous nous intéresserons au cas de symétrie cartésienne et sphérique, ainsi que les formulations faibles associées. Dans la partie B.3 nous présenterons une solution exacte au problème de stefan unidimensionnel introduite par Neumann, qui servira pour le test de convergence de l'erreur de la solution numérique obtenu avec le schéma numérique qui sera introduit dans la partie B.4. Finalement, dans la partie B.5 nous présenterons quelques propriétés de convergence du schéma numérique, ainsi que ainsi que quelques solutions qui présente un intérêt particulier dans le cadre de la formation de gel à proximité d'une particule d'alumine.

B.1 Formulation du problème de Stefan

Il faut presenter le probleme par etape. La premiere approche est de considerer un materiau qui occupe un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2$ ou 3), qui subit une transition de phase solide-liquide (fusion ou solidification) au voisinage de la température T_f , et dont les propriétés sont $(C_{p,1}, C_{p,2}, \kappa_1, \kappa_2)$ supposées constantes dans chaque phase. On fait l'hypothèse que la température de transition de phase T_f est constante. De plus, on suppose que la densité du matériau est constante que l'on note ρ , indépendante de son état et en particulier de la température. Soit $\lambda > 0$ la chaleur latente de fusion du materiau.

Soit $T > 0$. On note $\Theta : [0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ la température du matériau au cours du

B.2. Formulation faible avec une symétrie cartésienne ou sphérique

l'interface Γ . En particulier, si on note Θ_i le prolongement par continuité de $\Theta|_{\Omega_i}$ dans $\overline{\Omega}_i$, alors :

$$[\kappa \nabla \Theta] \equiv \kappa_1 \nabla \Theta_1 - \kappa_2 \nabla \Theta_2, \quad x \in \Gamma(t), \quad 0 < t < T. \quad (\text{B.9})$$

B.2 Formulation faible avec une symétrie cartésienne ou sphérique

Soit $\beta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ la fonction définie par :

$$\beta(\Theta) = \begin{cases} T_f + \kappa_1 \Theta C_{p,1}, & \Theta < T_f \\ T_f, & T_f \leq \Theta < T_f + \lambda \\ T_f + \kappa_2 (\Theta - \lambda) C_{p,2} & \lambda \leq \Theta \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

On définit également l'enthalpie local du matériau par :

$$u(\Theta) = \int_{T_f}^{\Theta} \rho C_p(s) ds + \rho \lambda \eta(\Theta) \quad (\text{B.11})$$

où on a écrit :

$$C_p(\Theta) = \begin{cases} C_{p,1}, & \Theta < T_f \\ C_{p,2}, & \Theta \geq T_f \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

et la fonction η correspond à la fraction solide :

$$\eta(\Theta) = \begin{cases} 0, & \Theta < T_f \\ 1, & \Theta \geq T_f \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

Dans la suite on notera $u(t, x) \equiv u(\Theta(t, x))$. Alors on peut montrer que chercher une solution Θ du système d'équations (B.3)-(B.5)-(B.8) est équivalent à chercher une solution u au problème suivant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta f(u), \quad x \in \Omega, \quad 0 < t < T \quad (\text{B.14})$$

avec les conditions de bord :

$$u = \beta(g_D), \quad x \in \Gamma_D(t), \quad 0 < t < T, \quad (\text{B.15})$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \beta(g_N), \quad x \in \Gamma_N(t), \quad 0 < t < T, \quad (\text{B.16})$$

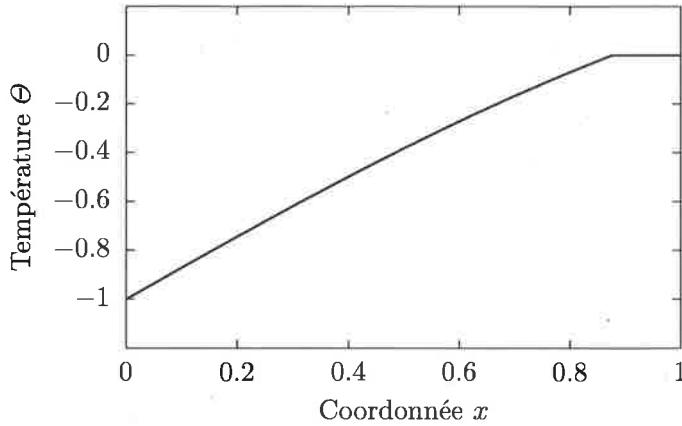


FIGURE B.1 – Solution exacte de Neumann à l'instant $t = 0.5$, restreinte à l'intervalle $[0, 1]$.

On obtient facilement une approximation numérique pour γ par une itération de Newton, à l'aide de MatLAB par exemple. On obtient :

$$\gamma = 0.768\,955\,338\,463\,582. \quad (\text{B.25})$$

Cette solution peut être réécrite de manière plus explicite en vue de son évaluation numérique sous la forme suivante :

$$T(t, x) = \begin{cases} -\exp\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}} \left(\operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{x}{2\gamma t}}\right) \right), & \text{si } x \leq \sqrt{2\gamma t} \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

où la fonction $\operatorname{erf} : \mathbb{R} \rightarrow (-1, 1)$ est la fonction d'erreur standard définie par :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt. \quad (\text{B.27})$$

La solution exacte est représentée à la figure B.1 à l'instant $t = 0.5$.

B.4 Discrétisation en temps et en espace

Pour obtenir un schéma de discrétisation, on utilise la formulation forte du problème de Stefan (B.14), et on suit le travail de [PSV88] pour obtenir la discrétisation en temps. Soit $T_{\text{End}} > 0$, et $N \in \mathbb{N}^*$ le nombre de pas de temps, et $\tau = T_{\text{End}}/N$. Soit $0 < \mu \leq 1/L_\beta$ un réel fixé. On pose $U^0 = u^0$ et $\Theta^0 = \beta(u^0)$. Pour $0 < n \leq N$, on résoud les équations

Annexe C

Constantes physiques

Symbol	Valeur	Unité	Description
ρ_{Al}	3960	kg m^{-3}	Masse volumique des particules d'alumine
ρ_e	2130	kg m^{-3}	Masse volumique du bain électrolytique
M	0.102	kg mol^{-1}	Masse molaire de l'alumine
F	96 485	C mol^{-1}	Constante de Faraday
μ	2×10^{-3}	Pas	Viscosité dynamique du bain électrolytique ou du métal liquide
ρ_m	2270	kg m^{-3}	Densité de l'aluminium liquide
g	9.81	m s^{-2}	Accélération de la gravité
$C_{p,\text{Al}}$	880 ¹	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Chaleur spécifique de l'oxyde d'aluminium dans la phase cristalline α .
$[Al]$	26.98g	Masse molaire de l'aluminium	

1. Source : <http://accuratus.com/alumox.html>