

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

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

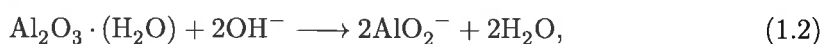
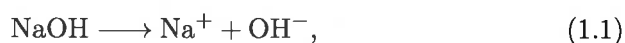
Introduction

1.1 Origine de l'aluminium

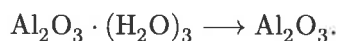
L'aluminium est un métal léger qui figure parmi les éléments métalliques les plus abondants sur Terre, avec une proportion d'environ 8% de la masse totale de la croûte terrestre. Malgré tout, il n'apparaît jamais sous forme métallique en raison de sa forte affinité avec l'oxygène, et se trouve sous forme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

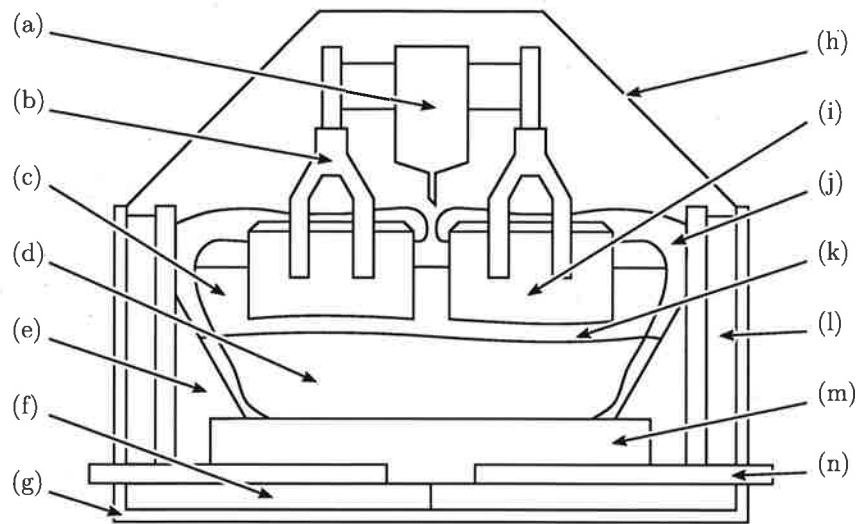
La bauxite est constituée principalement par de l'oxyde d'aluminium hydraté, de silicate, d'oxyde de fer et d'impuretés en plus faibles proportions. Elle provient essentiellement d'Australie, de Chine et du Brésil. Par exemple, ces trois pays combinés ont extrait plus de 179 millions de tonnes de bauxite 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 minerai, la soude caustique chaude dissout l'alumine :



Les autres composés restent insolubles, et sont éliminés par filtration. En refroidissant le filtrat, le 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 CO_2 qui en résulte forme des bulles millimétriques qui remontent à la surface pour s'échapper. C'est cette production de CO_2 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 points, 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 $(x_1, x_2) \in A$ où A est un ouvert de \mathbb{R}^2

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

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 parallèle 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 :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 \vec{u} :

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

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 $\tau_1 < t \leq T_{\text{End}}$, la population de particule $n_p^1(t, x, R)$ satisfait l'équation

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

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

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

où $\vec{j}(x)$ 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 prématuré. 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 :

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

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

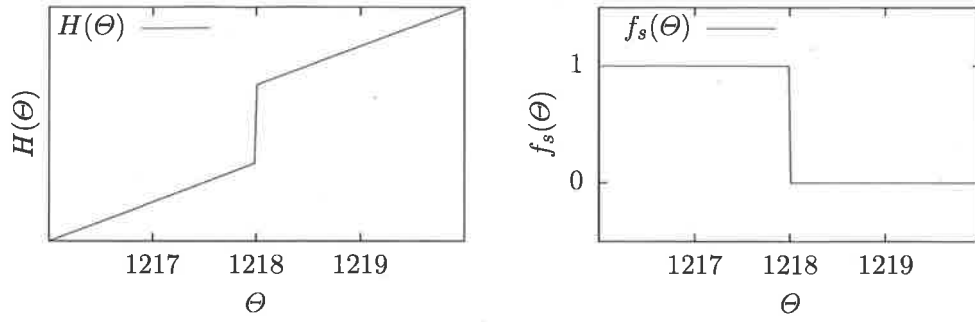


FIGURE 2.1 – Gauche : Enthalpie du bain électrolytique en fonction de la température. Droite : fonction fraction solide du bain f_s en fonction de la température.

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

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 élé va 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 :

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

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} .

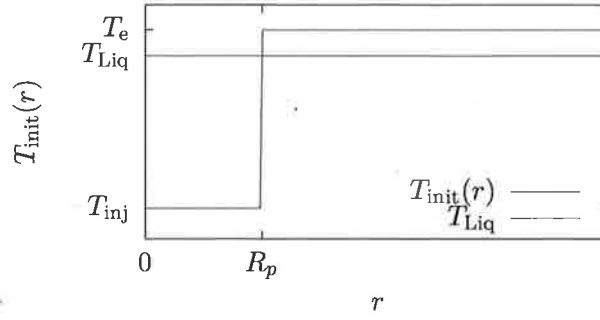


FIGURE 2.3 – Température initiale du système formé par la particule de bain gelé placée à l'origine du système de coordonnées et du bain électrolytique environnant. La température du bain est suffisante pour que celui-ci soit sous forme liquide, mais supposé au repos en tout temps.

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 :

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

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

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

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 :

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

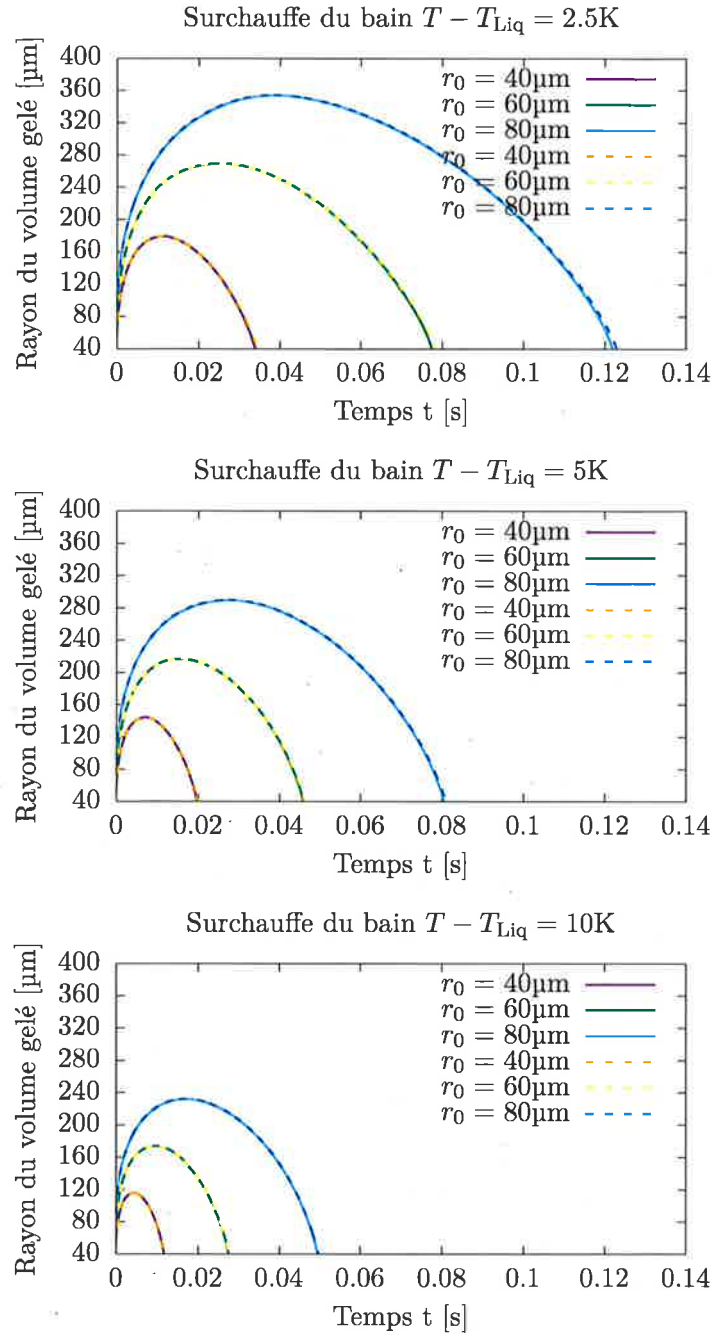


FIGURE 2.4 – Evolution du rayon de la sphère de bain gelé pour des température de surchauffe de 2.5K, 5K et 10K et des particules de rayons initiaux $r_0 = 40\mu\text{m}$, $60\mu\text{m}$ et $80\mu\text{m}$. La température initiale de la particule est $T_{\text{inj}} = 423.15\text{K}$. Dans le cas le plus défavorable où $T - T_{\text{Liq}} = 2.5\text{K}$ et $r_0 = 80\mu\text{m}$, 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

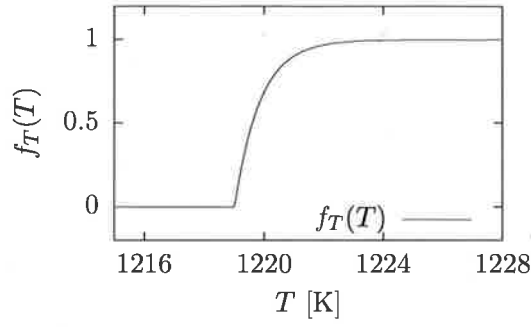


FIGURE 2.5 – Représentation de la variation de la quantité $f_T(T)$ en fonction de la température T . La fonction f_T modélise la dépendance du taux de dissolution f en fonction de la température.

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 extension 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 :

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

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

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

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

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 au 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 défini 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 le 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 :

$$\frac{c^{i+1} - c^i}{\tau} + u \nabla c^{i+1} - D_c \Delta c^{i+1} = \dot{q}_1^{i+1} + \dot{q}_2^{i+1}, \quad (2.42)$$

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

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,

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

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

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

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 discrétisation en temps conserve l'énergie thermique totale dans le bain électrolytique. Ici on a supposé $\dot{q}_1 = 0$.

2.6.4 Discrétisation 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 :

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

2.6.5 Discrétisation de l'espace des rayons

Dans ce paragraphe nous donnons les détails de la discrétisation 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'erreur de la solution numérique pour $h = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512, 1/1024, 1/2048, 1/4096$. On a choisit $\tau = O(h)$ 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 prédit 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 :

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

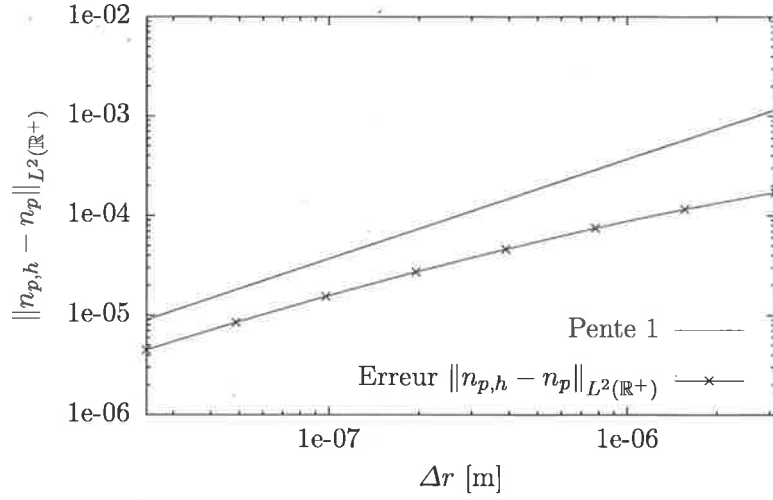


FIGURE 2.7 – Convergence de l’erreur $L^2(\mathbb{R}^+)$ la solution numérique du problème de dissolution de poudre d’alumine. On note que l’erreur se comporte comme $O(\Delta r)$ pour une taille de maille suffisamment fine.

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 discrétisation 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 laquelle 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 cet accroissement est détecté, on sait que la concentration est inférieure à la concentration optimale, ce qui indique qu'il faut débiter 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 défini sur Ω_e et tangent au bord $\partial\Omega_e$ qui correspond à la vitesse d'écoulement 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 propriétés 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 vitesses 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 supérieure 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_I 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 constitués par deux tourbillons horizontaux ou plus qui s'étendent sur toute la largeur 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

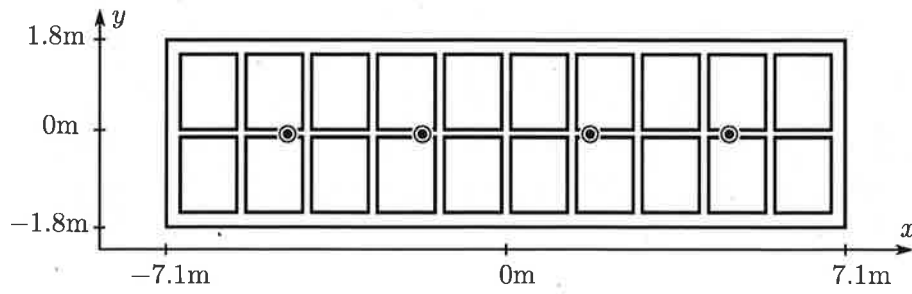


FIGURE 2.13 – Vue supérieure schématisée des blocs anodique et de la surface du bain électrolytique. Les positions des 4 piqueurs/injecteurs est symbolisée par les marques circulaires. Le plan anodique est constitué de 2 rangées de 10 anodes chacune.

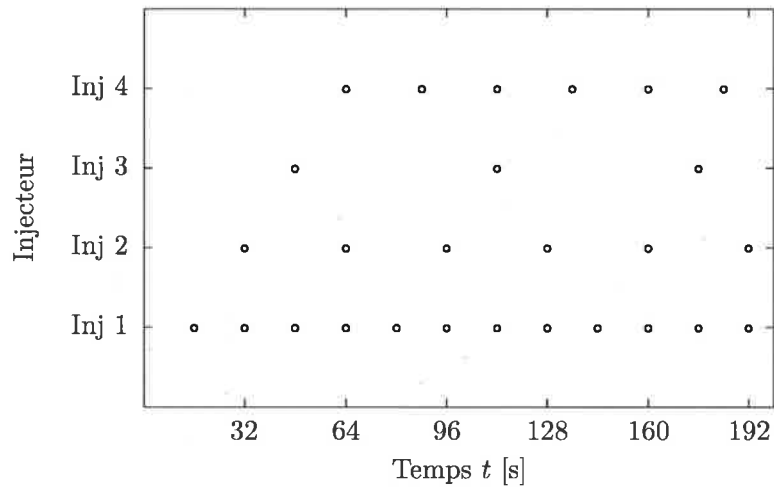


FIGURE 2.14 – Cadencement des 4 injecteurs d'une cuve AP32 dans le phase initiale. Chaque cercle correspond à un événement d'injection de l'un des quatres injecteurs. Plusieurs injections peuvent avoir lieu simultanément. Après la phase initiale de 64s, la série temporelle de l'ensemble des événement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

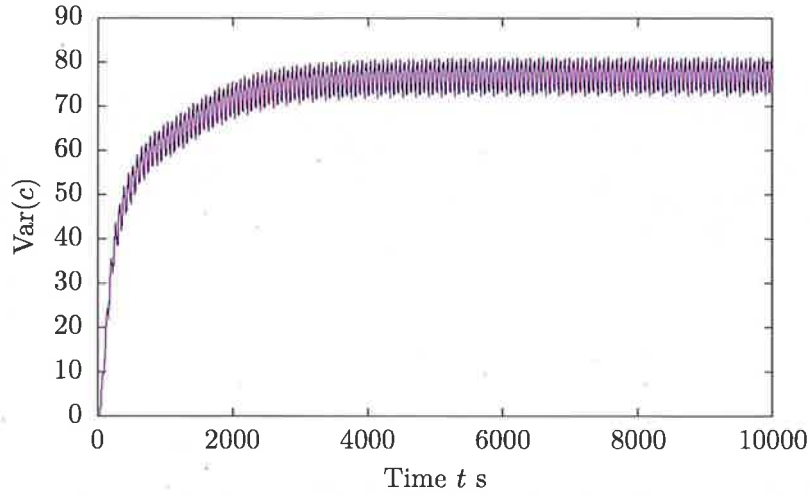


FIGURE 2.16 – Evolution de la variance de la solution au cours de la simulation. Les petites oscillations qu'on peut observer autour de la moyenne sont liées aux injections d'alumine.

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 $T_{\text{Lat}} = 1\text{s}, 2\text{s}, 5\text{s}$ 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 a 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 ralentie 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 répartir 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 maximum diminuent 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 $T_{\text{Sur}} = 10\text{K}$, le champ de concentration est en tout point similaire au champ c avec une dissolution indépendante de T présenté par la

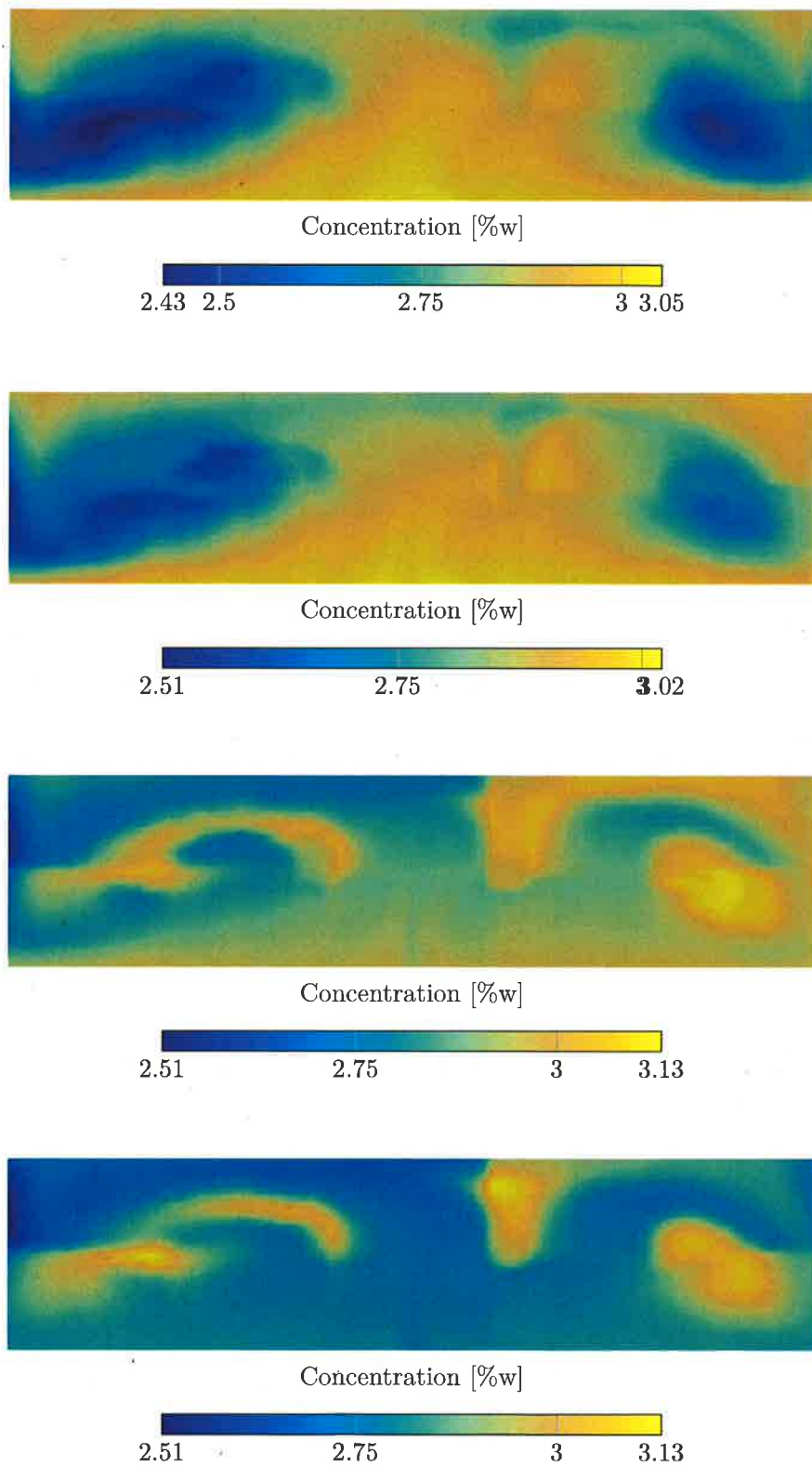


FIGURE 2.18 – Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32 après convergence vers la solution périodique. De haut en bas, on a choisit une température de surchauffe $T_{\text{Sur}} = 1\text{K}, 2\text{K}, 5\text{K}$ et 10K .

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'Archimède, 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.

3.2. Modèle physique microscopique

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 densités 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 trainée 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

$$w = \frac{2}{3} \frac{(\rho_{al} - \rho_e)}{\mu} r^2 + O(r^3) \quad \text{si } r \rightarrow 0 \quad d=2r$$

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 :

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

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

$$(3.16)$$

On suppose que la particule se trouve initialement au repos et à l'origine du système de coordonnées, 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 $T = 10s$ pour des particules de rayon initial $r_0 = 100\mu m$. 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 choisit 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 $200\mu m$ 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 180µm atteignent l'interface bain-métal.

Bien qu'il existe peu de données expérimentales à ce niveau, il est raisonnable de penser qu'une particule qui atteint 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 traînée 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'adjoindre 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 :

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

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

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

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 discrétisation 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 discrétisation 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 $v = u + w$.

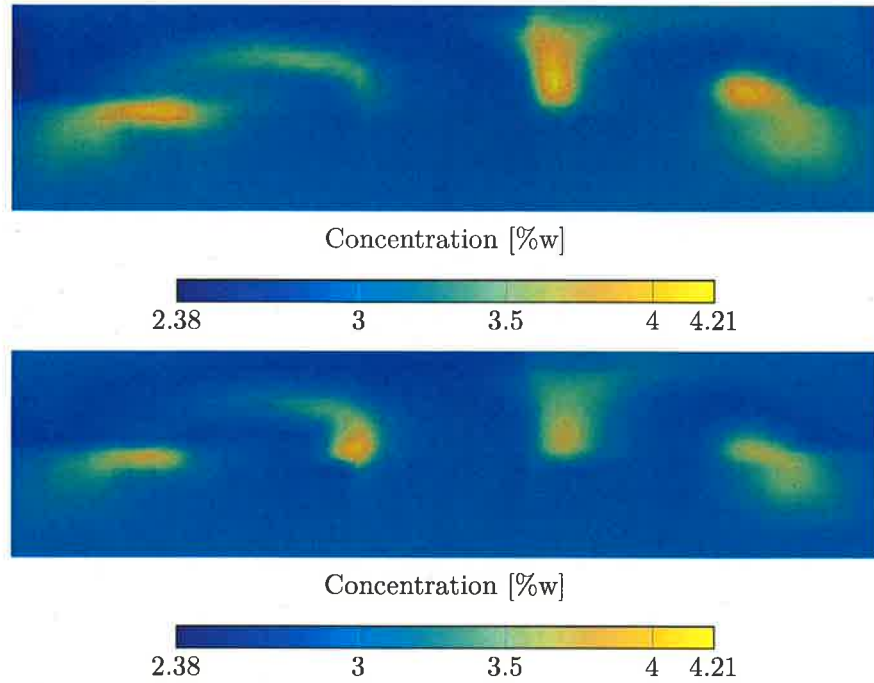


FIGURE 3.3 – Champ de concentration d'alumine dissoute dans l'ACD de la cuve AP32 à $t = 10\,000\text{s}$, de sorte à ce que la solution aie convergé vers la solution périodique. En haut : champ de concentration de référence sans sédimentation de particules. En bas : champ de concentration avec sédimentation 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],~~ *gras? →* ~~[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,~~ *due aux* 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 *modifier* ~~jouer sur~~ les cadences d'injection de chaque injecteur. Malheureusement, il ne disposent pour l'heure d'aucun outil qui leur permette de déterminer comment adapter ~~les cadences~~ *ces* 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 : *modifie* ~~en spécifiant~~ la conductivité des différentes anodes *depend de* pour refléter leur âge, *ce qui* 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. *Malheureusement, ce calcul* Cette information est à l'heure actuelle trop coûteuse en temps pour déterminer la distribution d'alumine dissoute *ne peut pas* en temps réel, *et donc* ainsi que pour déterminer le cadencement des injecteurs qui optimise la répartition de l'alumine dissoute dans le bain. *ne peut pas non plus être obtenu 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

rapidement

épaisseur $h \rightarrow \varepsilon$ confusion avec u_h !

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 ^{cher} chaque harmonique de la ^{décomposition} série de Fourier. Dans la section ?? nous validerons l'implémentation du schéma ainsi obtenu ^{et on} en étudiant la

apport à une solution exacte non triviale. Finalement, dans on cette méthode au cas industriel d'une cuve d'électrolyse dans les fluides, et évalu^{er} les propriétés de cette méthode. par une discussion des différentes hypothèses nécessaire pour

Le problème de Stokes harmonique

est borné Λ de bord $\partial\Lambda$. Soit $h > 0$ un nombre réel donné, on

^{de \mathbb{R}^2} correspondant à la dimension verticale d'une cuve.
bondant à une simplification géométrique de la cuve d'électrolyse :

$$\{(x_1, x_2, x_3) \mid (x_1, x_2) \in \Lambda, x_3 \in (0, h)\}. \quad (4.1)$$

Le domaine Ω est occupé par un fluide incompressible de viscosité μ et des 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 suite 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 $\Lambda \times \{h\}$:

$$u(x_1, x_2, x_3) = 0 \text{ si } (x_1, x_2) \in \partial\Lambda \text{ et } x_3 \in (0, h), \quad (4.4)$$

$$u_3(x_1, x_2, x_3) = 0 \text{ si } (x_1, x_2) \in \Lambda \text{ et } x_3 \in \{0, h\}, x_3 = 0 \text{ ou } x_3 = h. \quad (4.5)$$

Non! $\frac{\partial u_1}{\partial x_3} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = 0$!

$$\frac{\partial u_3}{\partial x_3}(x_1, x_2, x_3) = 0 \text{ si } (x_1, x_2) \in \Lambda \text{ et } x_3 \in \{0, h\} = 0 \text{ ou } x_3 = h. \quad (4.6)$$

Noter que p est définie à une constante près.

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 $\Omega^+ = \{(x_1, x_2, x_3) \mid (x_1, x_2) \in \Lambda, x_3 \in (-h, h)\}$, 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 $k=0$:

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{1,0} + \frac{\partial p_0}{\partial x_1} = f_{1,0}, \quad (4.19)$$

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{2,0} + \frac{\partial p_0}{\partial x_2} = f_{2,0}, \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial u_{1,0}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,0}}{\partial x_2} = 0, \quad (4.21)$$

et pour $k = 1, 2, 3, \dots$:

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{1,k} + \mu \left(\frac{\pi k}{h}\right)^2 u_{1,k} + \frac{\partial p_k}{\partial x_1} = f_{1,k}, \quad (4.22)$$

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{2,k} + \mu \left(\frac{\pi k}{h}\right)^2 u_{2,k} + \frac{\partial p_k}{\partial x_2} = f_{2,k}, \quad (4.23)$$

$$-\mu \Delta_{x_1, x_2} u_{3,k} + \mu \left(\frac{\pi k}{h}\right)^2 u_{3,k} - \frac{\pi k}{h} p_k = f_{3,k}, \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial u_{1,k}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k}}{\partial x_2} + \frac{\pi k}{h} u_{3,k} = 0. \quad (4.25)$$

Les problèmes ci-dessus sont 2D car toutes les inconnues ne dépendent que de x_1 et x_2 .
à résoudre dans $\Lambda \subset \mathbb{R}^2$

Naturellement ils nécessitent des conditions limites d'adhérence sur $\partial\Lambda$:

$$\begin{aligned} u_{1,0} &= u_{2,0} = 0 \text{ sur } \partial\Lambda \\ u_{1,k} &= u_{2,k} = u_{3,k} = 0 \text{ sur } \partial\Lambda, \quad k=1, 2, 3 \end{aligned} \quad (4.26)$$

4.2. Formulation du problème de Stokes harmonique

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_1 \cdot \nabla v_1 + \beta_k^2 u_1 v_1) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \int_{\Lambda} f_{1,k} v dx_1 dx_2, \quad \forall v_1 \in H_0^1(\Lambda), \quad (4.36)$$

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_2 \cdot \nabla v_2 + \beta_k^2 u_2 v_2) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = \int_{\Lambda} f_{2,k} v dx_1 dx_2, \quad \forall v_2 \in H_0^1(\Lambda), \quad (4.37)$$

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) q dx_1 dx_2 + \beta_k \int_{\Lambda} g q dx_1 dx_2 = 0, \quad \forall q \in L_0^2(\Lambda). \quad (4.38)$$

Il est bien connu que la condition :

$$\inf_{q \in L_0^2(\Lambda)} \sup_{v \in H_0^1(\Lambda)} \frac{\int_{\Lambda} q \operatorname{div}(v) dx_1 dx_2}{\|q\|_{L_0^2} \|v\|_{H_0^1}} > 0 \quad (4.39)$$

$\|q\|_{L_0^2} = \|q\|_{L^2}$

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 :

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u \cdot \nabla v + \beta_k^2 u v) dx_1 dx_2 = \beta_k \int_{\Lambda} p v dx_1 dx_2 + \int_{\Lambda} f_{3,k} v dx_1 dx_2, \quad \forall v \in H_0^1(\Lambda). \quad (4.41)$$

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 :

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla w \cdot \nabla v + \beta_k^2 w v) dx_1 dx_2 = \beta_k \int_{\Lambda} v dx_1 dx_2, \quad \forall v \in H_0^1(\Lambda). \quad (4.44)$$

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 (??) 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) sera modifiée comme il suit :

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_{1,k}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k}}{\partial x_2} + \beta u_{3,k} \right) q \, dx_1 dx_2 + \varepsilon h^2 \int_{\Lambda} (\beta^2 p_k q + \nabla p_k \cdot \nabla q) \, dx_1 dx_2 = 0. \quad (4.54)$$

Le terme $\beta^2 p_k$ ci-dessus est justifié par le fait que β est le paramètre de stabilisation, d'après (4.16).

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 limites $u(x_1, x_2) = 0$ sur $\partial \Omega \times [0, h]$

Remarque : μ constant a soldé (4.2)-(4.6)?

$$\begin{aligned} u_3(x_1, x_2, x_3) &= 0 & \text{sur } \{0, h\} \\ \mu_{13} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) &= 0 & \text{sur } \{0, h\} \\ \mu_{23} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) &= 0 & \text{sur } \{0, h\} \end{aligned}$$

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

(E(u))_{ij}
 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 $\Lambda = \{(x_1, x_2) \mid 0 < x_1 < L_1, 0 < x_2 < L_2\}$. *utile?*

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 met l'indice k

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 :

$$b(u, q) = \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \cancel{\frac{\partial u_3}{\partial x_3}} \right) q \, dx_1 dx_2, \quad (4.80)$$

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 :

$$\begin{aligned} a(u, v) - b(v, p) &= \int_{\Lambda} f \cdot v \, dx_1 dx_2, \quad \forall v \in V, \\ b(u, q) &= 0, \quad \forall q \in Y. \end{aligned} \quad (4.81)$$

dans (4.64)

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 dem de prop! peut donc être supprimée! \square

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, q le terme source correspondant à la consommation d'alumine dissoute par la *quelle eq pour séq?*

4.3 Discrétisation par une méthode d'éléments finis ^{de \mathbb{R}^2}

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 :

$$V_h = \{v \in C^0(\Lambda) \mid v|_K \in \mathbb{P}_1(K) \forall K \in \tau_h\}, \quad (4.89)$$

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 :

$$B_h = \{v \in C^0(\Lambda) \mid v|_K \in \mathbb{P}_1 \oplus B_K \forall K \in \tau_h\} \cap H_0^1(\Lambda) \quad (4.91)$$

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 $B_{\hat{K}}$ est engendré par la fonction bulle $\hat{\phi}_B$:

$$\hat{\phi}_B(x_1, x_2) = 27 \lambda_1^2(x_1, x_2) \lambda_2(x_1, x_2) \lambda_3(x_1, x_2), \quad (4.92)$$

les $\lambda_i^k, i=1,2,3$, 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 :

$$Q^n = \{(v_1, \dots, v_n) \mid v_i \in Q, \forall i=1, \dots, n\}. \quad (4.93)$$

notation 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

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 :

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_{1,k,h} \cdot \nabla v_{1,h} + \beta^2 u_{1,k,h} v_{1,h}) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p_{k,h}^0 \frac{\partial v_{1,h}}{\partial x_1} dx_1 dx_2 = \int_{\Lambda} f_{1,k,h} v_{1,h} dx_1 dx_2,$$

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_{1,k,h}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k,h}}{\partial x_2} \right) q_h - \beta_k \int_{\Lambda} (p_{k,h} + C) v_{3,h} = \int_{\Lambda} f \cdot v_h \quad (4.100)$$

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_{2,k,h} \cdot \nabla v_{2,h} + \beta^2 u_{2,k,h} v_{2,h}) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} p_{k,h}^0 \frac{\partial v_{2,h}}{\partial x_2} dx_1 dx_2 = \int_{\Lambda} f_{2,k,h} v_{2,h} dx_1 dx_2,$$

$$\int_{\Lambda} u_{3,h} = 0 \quad (4.101)$$

$$\mu \int_{\Lambda} (\nabla u_{3,k,h} \cdot \nabla v_{3,h} + \beta^2 u_{3,k,h} v_{3,h}) dx_1 dx_2 - \int_{\Lambda} (p_{k,h}^0 + C) v_{3,h} dx_1 dx_2 = \int_{\Lambda} f_{3,k,h} v_{3,h} dx_1 dx_2, \quad (4.102)$$

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial u_{1,k,h}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2,k,h}}{\partial x_2} \right) q_h dx_1 dx_2 + \beta \int_{\Lambda} u_{3,k,h} q_h dx_1 dx_2 = 0, \quad (4.103)$$

$$\int_{\Lambda} u_{3,k,h} dx_1 dx_2 = 0. \quad (4.104)$$

pour tout $(v_{1,h}, v_{2,h}, v_{3,h}, q_h) \in (V_h \cap H_0^1(\Omega))^3 \times (V_h \cap L_0^2(\Omega))$
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 :

$$\int_{\Lambda} p_{k,h}^0 dx_1 dx_2 = 0 \quad (4.105)$$

et en ajoutant un multiplicateur de Lagrange λ . Par exemple, le problème (4.106) devient :

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Lambda} \nabla u_h : \nabla v_h dx_1 dx_2 + \int_{\Lambda} p_h \operatorname{div}(v_h) dx_1 dx_2 &= \int_{\Lambda} f \cdot v_h dx_1 dx_2, \\ \int_{\Lambda} q_h \operatorname{div}(u_h) dx_1 dx_2 + \lambda \int_{\Lambda} q_h dx_1 dx_2 &= 0. \end{aligned} \quad (4.106)$$

$$\int_{\Lambda} p_h dx_1 dx_2 = 0$$

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 sparse.

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 ^{sur chaque nœud u} comme un élément de V_h sur un maillage tétraédrique.

En général, il est clair que $f_{i,k} \in L^2(\Lambda)$. Cependant, pour des raisons d'implémentations

ici remarque p83 : la forme de Stokes $\varepsilon \sum_k h_k^2 \dots$ dans (??) est justifiée par le fait que, d'après (4.16), $\Delta p = \Delta_{x_1 x_1} p_0 + \sum_k (\Delta_{x_1 x_1} p_k - \beta_k^2 p_k) \cos(\beta_k x_3)$.

définies par :

$$u_1(x_1, x_2, x_3) = u_2(x_1, x_2, x_3) = (x_1^2 - 1)(x_2^2 - 1) \left(x_3^3 - \frac{3}{2}hx_3^2 + \frac{1}{4}h^3 \right), \quad (4.109)$$

$$u_3(x_1, x_2, x_3) = \left(-4x_1(x_1^2 - 1)(x_2^2 - 1)^2 - 4x_2(x_2^2 - 1)(x_1^2 - 1)^2 \right) \cdot \left(\frac{1}{4}x_3^4 - \frac{1}{2}hx_3^3 + \frac{1}{4}h^3x_3 \right), \quad (4.110)$$

$$p(x_1, x_2, x_3) = x_1^3 + x_2^4 + x_3^5 \quad (4.111)$$

la suite ici !

?

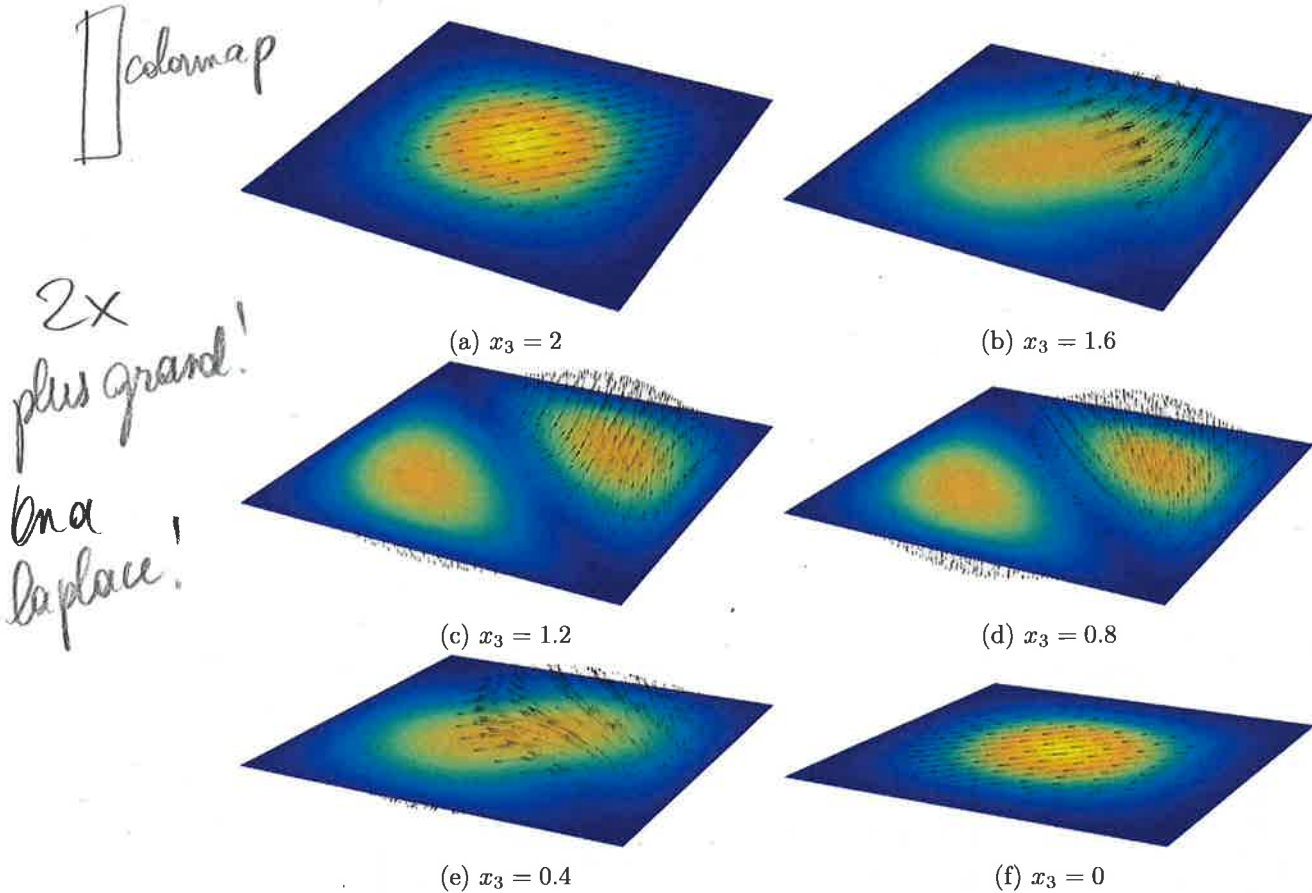


FIGURE 4.1 – Représentation de la solution exacte (4.109)-(4.111) du problème de Stokes (4.2). La solution est représentée sur 6 plans horizontaux espacés régulièrement entre $x_3 = 0$ et $x_3 = 2$. L'échelle de couleur correspond à l'amplitude de u , tandis que les flèches indiquent la direction de u .

définie par :

$$e_h^{\text{SF}} = \frac{\|u - u_h^{\text{SF}}\|_{L^2(\Omega)}}{\|u\|_{L^2(\Omega)}}, \quad (4.115)$$

où 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 (dénote SF dans la suite) avec un schéma numérique basé sur une méthode d'éléments finis sur un maillage tétraédrique classique (dénote 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.

$$e_h^{\text{S3D}} = \frac{\|u - u_h^{\text{S3D}}\|_{L^2(\Omega)}}{\|u\|_{L^2(\Omega)}}. \quad (4.116)$$

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 A et du rapport d'aspect h du domaine Ω . *longue $K=20$*

ε	$R(\eta)=0.25$	$\eta = 0.125$	$\eta = 0.0625$	$\eta = 0.03125$	$\eta = 0.015625$
$h=2$	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 h du domaine Ω . *$K=20$
 $h=2/64$*

ε	$h=0.020$	$h=0.055$	$h=0.154$	$h=0.430$	$h=1.198$
e_h^{SF}	0.1121×10^{-4}	0.8356×10^{-4}	0.2478×10^{-3}	0.4944×10^{-3}	0.1225×10^{-2}
e_h^{S3D}	0.1426×10^{-2}	0.1351×10^{-2}	0.1175×10^{-2}	0.9317×10^{-3}	0.6221×10^{-3}

Comparaison des erreurs e_h^{SF} et e_h^{S3D}

la précision des calculs SF et $S3D$ est la même.

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 fixées à 64, quelque soit le rapport d'aspect du domaine Ω . Les systèmes linéaires sont résolus avec la méthode GMRES préconditionnée par $Il_u(2)$. 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 4.3 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.

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.

Conclusions? 97

4.5. Application à l'écoulement d'une cuve d'électrolyse

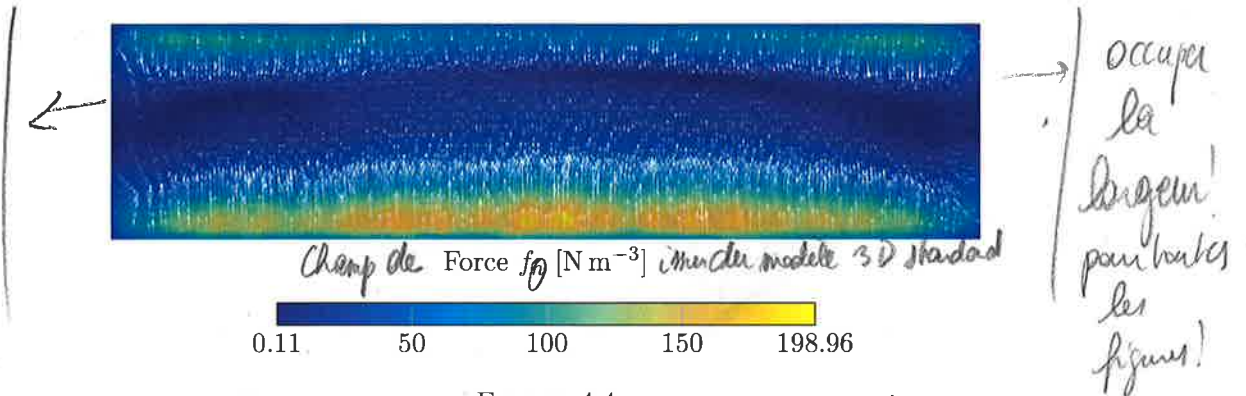


FIGURE 4.4

le parallélépipède rectangulaire 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 défini 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 $\Omega \subset \Omega_f$. 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 :

$$f(x) = f_h|_{\Omega}(x), \quad j(x) = j_h|_{\Omega}(x), \quad B(x) = B_h|_{\Omega}(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (4.118)$$

comment calculer f dans (4.55) ?

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 $A \subset \mathbb{R}^2$ et de $h > 0$ tel que décrit dans (4.2) :

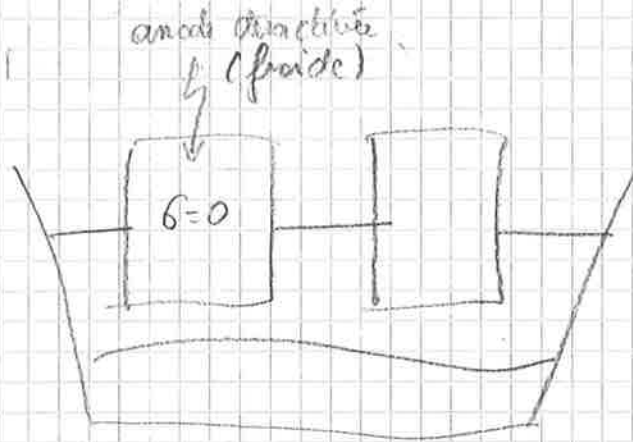
$$\Omega = A \times (0, h). \quad (4.119)$$

De plus, A est choisit de telle sorte à ce que le domaine $A \times \{0\} \subset \mathbb{R}^3$ corresponde à l'interface entre le métal liquide et la cathode. On choisit une triangulation pour A 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 $x_3 = h/2$.

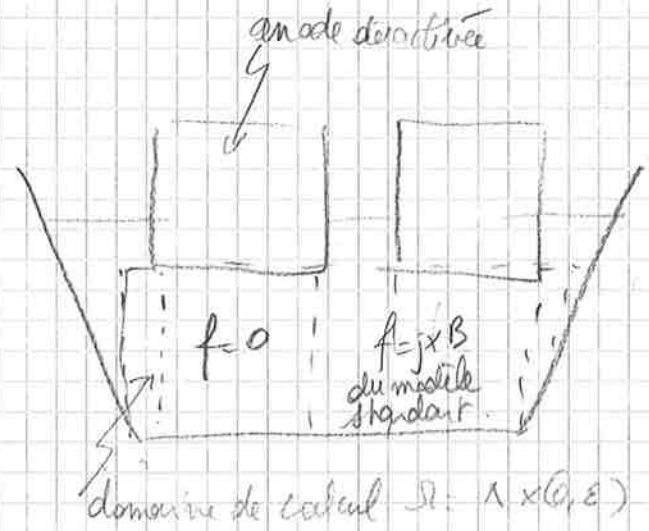
En utilisant le modèle de transport et diffusion d'alumine dissoute décrit dans la section 4.2.6, on obtient un champ de concentration stationnaire $c : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. La moyenne \bar{c} est fixée à 3[%w], identique à la concentration d'alumine dissoute initiales dans le modèle de transport et dissolution décrit dans le chapitre 2. La figure 4.6 représente la concentration

des deux calculs (Stokes-Fourier et méthode 3D) sont comparables, voir h = ??

Qu'en valent I, n, F dans (4.87)?

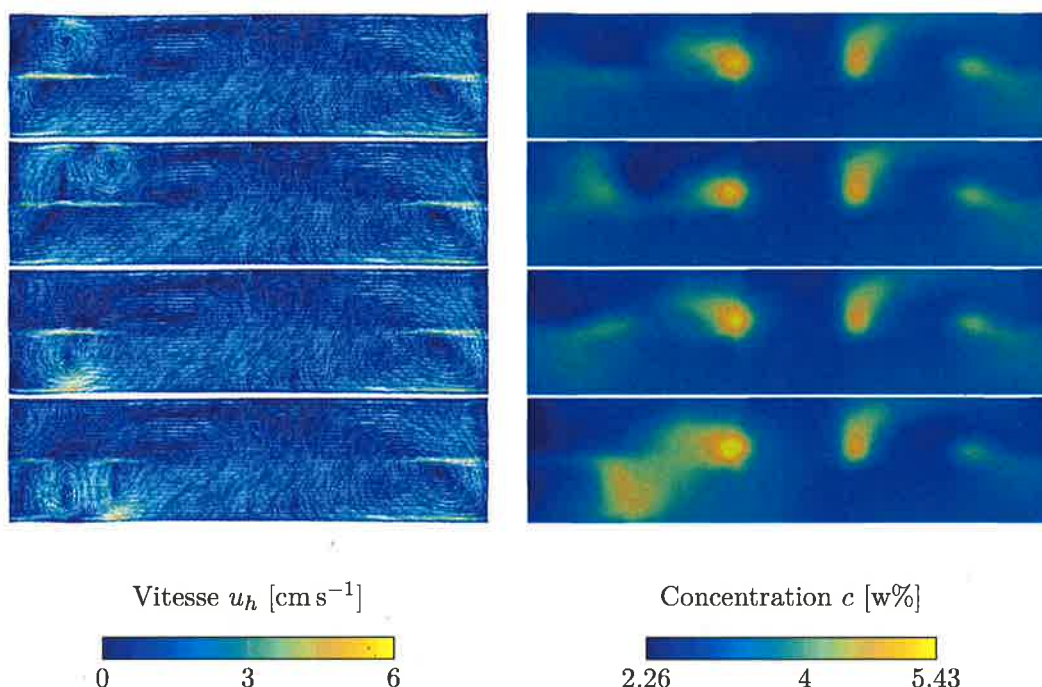


$\vec{j} = \sigma(\nabla H \times B)$ $f = j \times B$
 $\text{div } \vec{j} = 0$
 désactivation d'anode pour le
 modèle alucell standard



désactivation d'anode pour
 le modèle Stokes-Fourier

4.6 bis



(a) Champ de vitesse stationnaire u dans l'ACD (b) Champ de concentration c dans l'ACD de la cuve AP32.

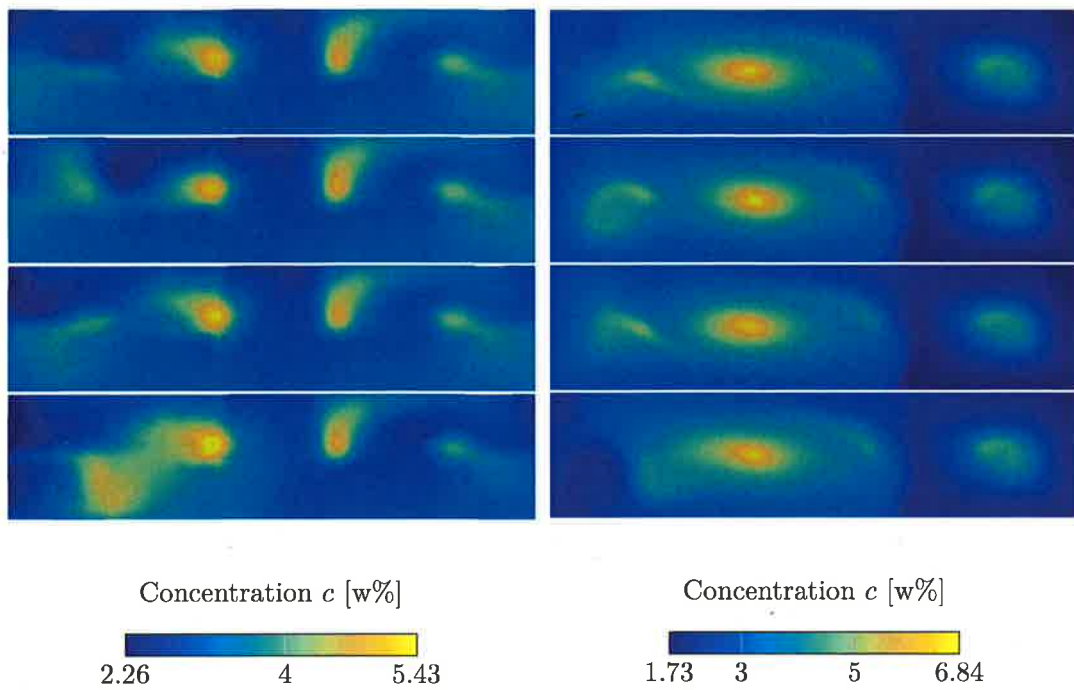
FIGURE 4.7 – Champs de vitesse stationnaire u dans l'ACD de la cuve AP32 pour différentes configuration du plan anodique. Les anodes désactivées sont respectivement, de haut en bas les anodes (1, 1), (1, 2), (2, 1) et (2, 2). Sur la droite, on a les champs de concentration d'alumine dissoute dans l'ACD 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 le fluide 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 forcé 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 discrétisation 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 $D > 0$ des réels. 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 $y_0 \in H^1(\Omega)$ une condition initiale.

Le problème consiste à trouver la fonction $y : [0, T_{\text{end}}] \times \Omega$ solution de l'équation :

$$\frac{\partial y}{\partial t}(t, x) + \vec{u} \cdot \nabla y(t, x) - D \Delta y(t, x) = S_y(t, x), t \in [0, T_{\text{end}}], x \in \Omega, \quad (\text{A.2})$$

$$y(0, x) = y_0(x) \quad x \in \Omega. \quad (\text{A.3})$$

On choisit V_h l'espace élément finit donné par :

$$V_h = \left\{ v \in C^0(\Omega) \mid v|_K \in \mathbb{P}_1(K) \quad \forall K \in \tau_h \right\}, \quad (\text{A.4})$$

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 la 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 temperature 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 temperature 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 :

$$u = \beta(g_D), \quad x \in \Gamma_D(t), \quad 0 < t < T, \quad (\text{B.15})$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \beta(g_N), \quad x \in \Gamma_N(t), \quad 0 < t < T, \quad (\text{B.16})$$

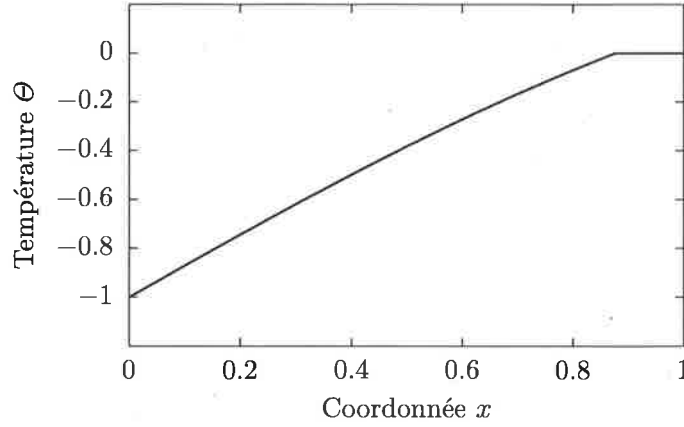


FIGURE B.1 – Solution exacte de Neumann à l'instant $t = 0.5$, restreinte à l'intervalle $[0, 1]$.

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 :

$$T(t, x) = \begin{cases} -\exp\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}} \left(\operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{x}{2\sqrt{t}}}\right) \right), & \text{si } x \leq \sqrt{2\gamma t} \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

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 résout 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}	Pa s	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
$C_{p,Al}$	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>