TJR 13/02/2018

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

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

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

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

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

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

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

2.5 Chute de particules dans le bain

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

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

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

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

$$T = \frac{r_0^2}{2\kappa} \tag{2.63}$$

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

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

$$F_{\mathrm{D}}(r, v) = -6\pi\mu r v.$$

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

Les forces de gravité F_{g} et d'Archimède F_{A} en fonction du rayon r de la particule sont données respectivement par

$$F_{\mathrm{g}}(r) = \cancel{-}\,{+}\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_{\mathrm{Al}} g \quad \text{et} \quad F_{\mathrm{A}}(r) = {-}\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_{\mathrm{e}} g$$

m/s²

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

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

O

g>0

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}(t) = F_{\mathrm{D}}(r(t), \dot{x}(t)) + F_{\mathrm{g}}(r(t)) + F_{\mathrm{A}}(r(t)),$$

soit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\rho_{\mathrm{Al}} V(t) \dot{x}(t)\right) = \frac{4}{3}\pi r^3(t)\left(\rho_{\mathrm{e}} - \rho_{\mathrm{Al}}\right) g - 6\pi\mu r(t)\dot{x}(t). \tag{2.64}$$

x(t)

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

En utilisant la relation (2.62), nous avons

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

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

$$\rho_{\mathrm{Al}}\frac{4}{3}r^2(t)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}x(t) = g\left(\rho_{\mathrm{Al}} - \rho_{\mathrm{e}}\right)\frac{4}{3}r^2(t) - \left(6\mu - 4\rho_{\mathrm{Al}}\kappa\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}. \tag{2.66}$$

En utilisant (2.62), (2.62) (2.63) et en intégrant l'équation (2.66) sur l'intervalle de temps $[0, T]$, nous obtenons

$$\left(6\mu - 4\rho_{\mathrm{Al}}\kappa\right)x(T) = g\left(\rho_{\mathrm{Al}} - \rho_{\mathrm{e}}\right)\frac{r_0^4}{3\kappa} - \rho_{\mathrm{Al}}\frac{4}{3}\int_0^T \left(r_0^2 - 2\kappa t\right)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t)\ \mathrm{d}t. \tag{2.67}$$

mettre une ligne de détails

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

$$x(T) = \frac{g\left(\rho_{\mathrm{e}} - \rho_{\mathrm{Al}}\right)}{\kappa\left(18\mu - 4\rho_{\mathrm{Al}}\kappa\right)}r_0^4 + \frac{4\rho_{\mathrm{Al}}v_0}{18\mu - 4\rho_{\mathrm{Al}}\kappa}r_0^2. \tag{2.68}$$

simplifier !

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

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

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

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

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

?

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

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

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

?

Remarquons que $\rho_{Ae}\, x$ est négligeable par rapport à le même si $\mu = 2.10^{-3}$ kg/ms. Ainsi la formule peut être approchée sans problème pour

* $x(T)$ ...

* ~~Ozzle~~ Intérêt (inverse prop à μ, prop à v_0^4 si $v_0 = 0$ etc)

vitesse initiale $v_0 = 3\ \mathrm{m\,s^{-1}}$. La profondeur maximale lorsque le rayon initial est inférieur à ~~60~~ 80 µm est systématiquement inférieure à 1 cm.

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

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

C'est quoi la suite? Dans chap 3?

doit venir en fin de la section en remarque 4

Ok mais on ne néglige pas la force de gravité ce qui montre que le paragraphe encadré doit venir après ces remarques

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

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

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

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

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

$$R_{\mathrm{e}} = \frac{2\rho_{\mathrm{e}} v r}{\mu}$$

où v est sa vitesse relative au fluide.

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

$$\rho_{\mathrm{Al}}\frac{4}{3}\pi r^3 \ddot{x}(t) = \frac{4}{3}\pi r^3 (\underbrace{\cancel{\rho_{\mathrm{e}}}}_{Ae} - \underbrace{\cancel{\rho_{\mathrm{Al}}}}_{e})\, g - 6\pi\mu r \dot{x}(t). \tag{2.69}$$

**

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

(accélération nulle)

$$v_L = \frac{2}{9}\frac{g\,(\cancel{\rho_{\mathrm{e}} - \rho_{\mathrm{Al}}})}{\mu} r^2. \quad (\rho_{Ae} - \rho_e)$$

(2.70) A rajouter pour la suite

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

$$R_{\mathrm{e}} = \frac{4}{9}\frac{g\rho_{\mathrm{e}}\,\overset{\rho_{Ae} - \rho_e}{(\cancel{\rho_{\mathrm{e}} - \rho_{\mathrm{Al}}})}}{\mu^2} r^3.$$

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

Remarque 4. L'équation du mouvement d'une particule d'alumine de rayon r_0 supposé constant au cours du temps s'écrit en négligeant la force de gravité ($\rho_{Al} = \rho_e$) ?

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

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

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

*

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