

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

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

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

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

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

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

{eq:phase-domains}

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\left. \begin{array}{l} \{ \text{eq:heat-solid-phase} \\ \text{eq:heat-liquid-phase} \} \end{array} \right\} t \in (0, \infty)$

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

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

ou simplement

Σ_2

$(\Omega_1(t) \cup \Omega_2(t))$ sont des ensembles...)

Écrire le problème (2.5)-(2.6) $\forall t \in (0, \infty)$ puis le compléter avec les cond. au bord et initiale en (2.9)-(2.11) ?

A l'interface $\Gamma(t)$ entre les phases liquide et solide, on suppose que la température est continue, $[\Theta] = 0$, et que la condition de Stefan est vérifiée. On note $v_\Gamma(t, x)$ la vitesse de l'interface $\Gamma(t)$. La condition de Stefan s'écrit alors :

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

{eq:stefan-condition}

(0,00)

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

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

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

$$\Theta(t, x) = \Theta_{Liq}, \quad \forall x \in \Gamma(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \quad \text{(2.9)}$$

$$\Theta(t, x) = \Theta_D(x), \quad \forall x \in \Gamma_D(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \quad \text{(2.10)}$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \nu}(t, x) = \Theta_N(x), \quad \forall x \in \Gamma_N(t), \quad \forall t \in [0, \infty), \quad \text{(2.11)}$$

{eq:heat-transition}

{eq:heat-dirichlet}

{eq:heat-neumann}

t ∈ [0, ∞)

{(θ en t = 0 fixé par la cond. initiale)}

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

10,00 × 52 → 12

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

idem dans tout ce qui suit

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

à chaque occurrence, remplacer Ω_1, Ω_2 et Γ par $\Omega_1(t), \Omega_2(t)$ et $\Gamma(t)$...

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

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

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

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

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

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

{eq:enthalpy}

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

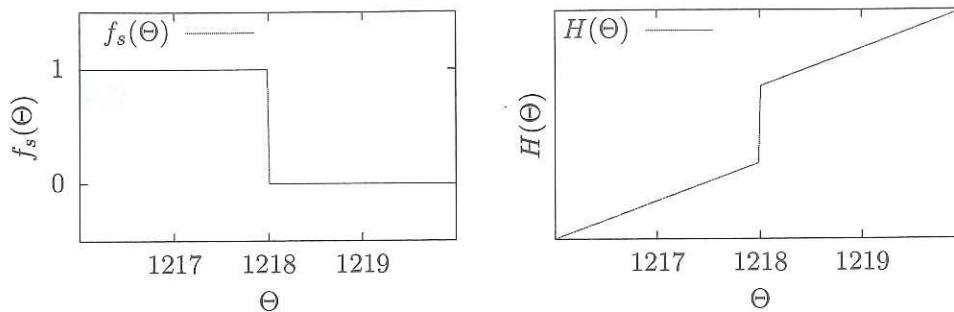


FIGURE 2.1 – Gauche : fraction solide du bain f_s en fonction de la température. Droite : Enthalpie du bain électrolytique en fonction de la température.

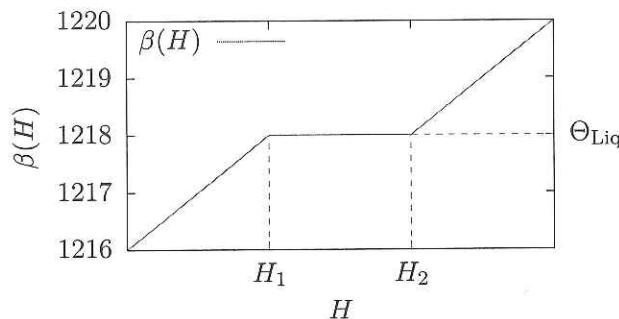


FIGURE 2.2 – Fonction $\beta(H)$. On a noté $H_1 = \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},1} \rho_e$ et $H_2 = \Theta_{\text{Liq}} C_{\text{p,e},1} \rho_e + \Delta H_{\text{sl}}$ et $\Theta_{\text{Liq}} = 1218 \text{K}$.

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

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

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

La fonction β est représentée sur la figure 2.2. Pour les besoins de la représentation, on a choisi ici $\Theta_{\text{Liq}} = 1218 \text{K}$ et $\Delta H_{\text{sl}} = 5.508 \times 10^5$.

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

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

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

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

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

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

✓ x esz

Les fonctions Θ_{Init} , Θ_D et Θ_N ont été définies au paragraphe précédent, et β est définie par la relation (2.14). L'équation (2.15) est à comprendre au sens faible. Plus précisément, on peut montrer que si H et Θ satisfont (2.15)-(2.16) au sens faible et si H et Θ sont suffisamment régulières dans $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$ définis par (2.1) avec $[\Theta] = 0$ sur Γ , alors Θ satisfait (2.5), (2.6) et (2.8).

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

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

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

$$(2.22)$$

et soit Γ_{tx} dans l'espace-temps :

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

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

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

où $\text{Div} = (\frac{\partial}{\partial t}, \nabla)$. Alors si Θ est suffisamment régulière dans $\Lambda_1 \cap \Lambda_2$ et $[\Theta] = 0$ sur Γ , Θ est solution forte de (2.5), (2.6). De plus, on doit avoir :

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

$\Lambda_1 \cup \Lambda_2$?

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

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

pas bien compris la partie ci-dessus (ainsi que son utilité...)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Ce schéma numérique basé sur la formule de Chernoff (2.30) a été proposé par M. Paolini [PSV88].

Remarque 1. Le schéma formé par les équations (2.27) à (2.30) peut être interprété comme un schéma d'Euler implicite en temps associée à un développement limité au premier ordre de (2.16). En effet, (2.27) se réécrit

$$\mu \frac{\Theta^{n+1} - \beta(H^n)}{\tau} - \operatorname{div}(D_\Theta \nabla \Theta^{n+1}) = 0, \quad (2.31)$$

ce qui correspond à

$$\frac{H^{n+1} - H^n}{\tau} - \operatorname{div}(D_\Theta \nabla \Theta^{n+1}) = 0 \quad (2.32)$$

en utilisant (2.30). ✓

On décrit maintenant la discrétisation en espace des équations (2.27)-(2.29).

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

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

soit vérifiée pour toute fonction test $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ à symétrie sphérique, où $\Theta_N^{n+1} = \Theta_N(H^{n+1}, \cdot)$

On tire parti de la symétrie sphérique du système formé par la particule et le bain environnant en reformulant maintenant le problème (2.33) en coordonnées sphériques.

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

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

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

$$\tilde{\nabla} \tilde{f} = \frac{d\tilde{f}}{dr} \hat{e}_r. \quad \text{(eq:spherical-gradient)}$$

On se donne un réel $R_{\max} > 0$ et le domaine $\Omega = \mathcal{B}(0, R_{\max}) \subset \mathbb{R}^3$ la boule ouverte de centre 0 de rayon R_{\max} . On suppose maintenant que les données du problème de Stefan (2.15)-(2.18), i.e., les fonctions Θ_D , Θ_N ainsi que la condition initiale Θ_{Init} pour la température, sont à symétrie sphérique, i.e., elle ne dépendent que de r et éventuellement t .

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

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

$\forall 0 \leq n \leq N$

(évident
mais pas
indiqué...)

Dans le premier cas, la formulation faible de l'équation (2.33) en coordonnées sphériques consiste à chercher une fonction $\tilde{\Theta}^{n+1} : [0, R_{\text{Max}}] \rightarrow \mathbb{R}$, $\tilde{\Theta}^{n+1}(R_{\text{Max}}) = \tilde{\Theta}_{\text{D}}^{n+1}$ telle que :

$$4\pi \int_0^{R_{\text{Max}}} \tilde{\Theta}^{n+1} \tilde{v} r^2 dr + \frac{4\pi\tau}{\mu} \int_0^{R_{\text{Max}}} D_{\Theta} \frac{d\tilde{\Theta}^{n+1}}{dr} \frac{d\tilde{v}}{dr} r^2 dr = 4\pi \int_0^{R_{\text{Max}}} \beta(\tilde{H}^n) \tilde{v} r^2 dr \quad (2.36)$$

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

Dans le deuxième cas, la formulation faible de l'équation (2.33) en coordonnées sphériques consiste à chercher une fonction $\tilde{\Theta}^{n+1} : [0, R_{\text{Max}}] \rightarrow \mathbb{R}$, telle que :

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^{R_{\text{Max}}} \tilde{\Theta}^{n+1} \tilde{v} r^2 dr + \frac{4\pi\tau}{\mu} \int_0^{R_{\text{Max}}} D_{\Theta} \frac{d\tilde{\Theta}^{n+1}}{dr} \frac{d\tilde{v}}{dr} r^2 dr \\ - 4\pi \tilde{\Theta}_{\text{N}}^{n+1}(R_{\text{Max}}) \tilde{v}(\max) R_{\text{Max}}^2 = 4\pi \int_0^{R_{\text{Max}}} \beta(\tilde{H}^n) \tilde{v} r^2 dr, \end{aligned} \quad (2.37)$$

pour toute fonction $\tilde{v} : [0, R_{\text{Max}}] \rightarrow \mathbb{R}$. Les facteurs r^2 et 4π qui interviennent dans les intégrants de ces deux dernières formes faibles proviennent de l'élément de volume en coordonnées sphériques $4\pi r^2 dr$. *(pas vérifié les calculs)*

Discrétisation en espace Soit un entier M . On considère une subdivision uniforme de l'intervalle $[0, R_{\text{Max}}]$, et on note $\delta = R_{\text{Max}}/M$ la taille des éléments de la subdivision. On pose $r_0 = 0$ et $r_{i+1} = r_i + \delta$, $i = 0, 1, \dots, M-1$. Pour discréteriser les problèmes faibles (2.36), (2.37) on utilise une méthode d'éléments finis Lagrange, continue et linéaire par morceaux sur chaque intervalle $[r_i, r_{i+1}]$. Les intégrales qui interviennent dans les expressions (2.36), (2.37) sont approchées numériquement par une formule de quadrature de Gauss à 3 points. A chaque pas de temps n , la fonction H^{n+1} est approximée par l'interpolant de Lagrange du membre de droite de (2.30) aux noeuds du maillage r_i , $i = 0, 1, \dots, N$. *O, 1, 2 / M*

Un test exact du problème de Stefan à symétrie plane On propose de valider l'implémentation du schéma numérique de discréterisation des formes faibles (2.36), (2.37) et du schéma de discréterisation en temps (2.27)-(2.30) en étudiant la convergence de l'erreur entre une solution exacte du problème de Stefan classique et de son approximation numérique.

Un certain nombre de solutions exactes du problème de Stefan classique sont connues. On décrit à présent l'une d'elles, découverte par F. Neumann². Cette solution a l'avantage de correspondre à une situation physique suivante que l'on peut facilement interpréter. Un matériau, qui présente une transition entre les phases solide et liquide à $\Theta_{\text{Liq}} = 0$, occupe le demi espace $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 > 0\}$. Ce matériau est initialement dans l'état liquide à la température $\Theta = \Theta_{\text{Liq}}$. Au temps initial, on le met en contact sur le bord $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 = 0\}$ avec un réservoir thermique à température constante $\Theta = -1$. Au cours de l'évolution temporelle, un front de transition de phase, de liquide à solide, se propage dans le matériau. Pour des raisons de symétrie, le front de transition reste en tout temps parallèle au bord $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 = 0\}$.

Nous utiliserons cette solution exacte au paragraphe suivant pour valider le schéma de discréterisation des équations (2.15)-(2.18)

Si, au lieu de définir une symétrie sphérique nous prenons une symétrie planaire, i.e., \tilde{f} de (2.34) est remplacée par $\tilde{f}(x_1, x_2, x_3) = \tilde{f}(x_1)$, alors il suffit de changer dr en dx

2. Franz Neumann est un mathématicien allemand. Sa solution au problème de Stefan figure dans des notes de cours donnés au début des années 1860 [Hil87].

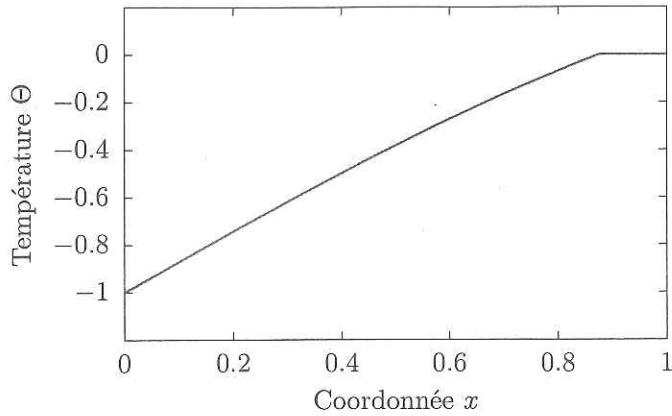


FIGURE 2.3 – Solution exacte obtenue par F. Neumann du problème de Stefan classique (2.5)-(2.8), évaluée à $t = 0.5$ sur l'intervalle $[0, 1] \subset \mathbb{R}_+$.

Validation numérique Pour valider l'implémentation du schéma numérique (2.27)-(2.30), on évalue la convergence de l'erreur entre la solution exacte définie par la relation (2.45) et $\beta(H_\delta^N)$, l'approximation de la température à l'instant T avec $\delta = R_{\text{Max}}/M$ la taille de maille :

$$\left\| \beta(H_\delta^N) - \Theta(T, \cdot) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^+)} \quad (2.47)$$

On fixe $\mu = L_\beta = 1$. On choisit $\Omega = [0, 1] \subset \mathbb{R}_+$ et $T = 0.5$. On impose des conditions aux limites de Dirichlet sur le bord de Ω , i.e., $\Gamma_D = \{0, 1\}$. On se donne $\Theta_D(0) = -1$ et $\Theta_D(1) = 0$. On choisit le pas de temps τ dans l'intervalle $[3.9 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-3}]$, et $\delta = O(\tau)$.

valeur exacte (de S au équiv. de M) ?

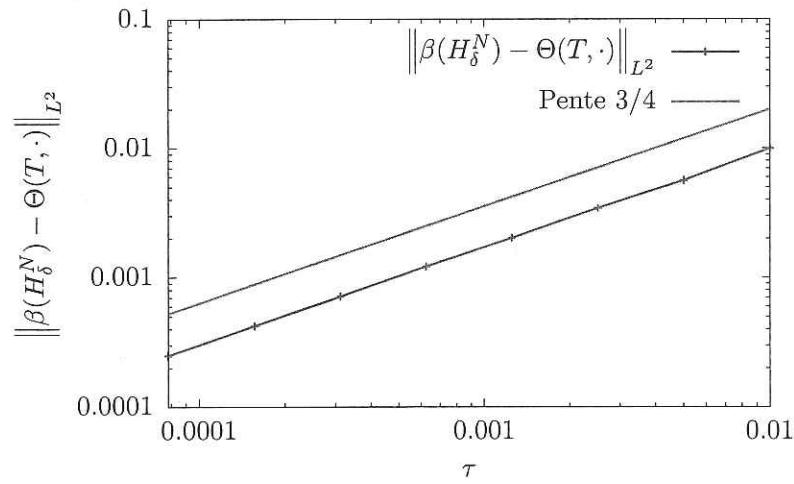


FIGURE 2.4 – Erreur L^2 entre la solution exacte de Neumann et l'approximation numérique $\beta(H_\delta^N)$. Pour ce calcul on a fixé $\mu = 1$.

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

commentaires?

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

{tab:freeze-physical-parameters}

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

donc $\Theta_{e,1} = \Theta_{e,2}$?

Formation de gel autour d'une particule Dans cette partie, on applique la méthode numérique (2.27)-(2.29) au calcul de la formation de gel autour d'une particule de bain gelé. On donne dans le tableau 2.1 la valeur des différents paramètres physiques liés aux propriétés thermiques du bain électrolytique.

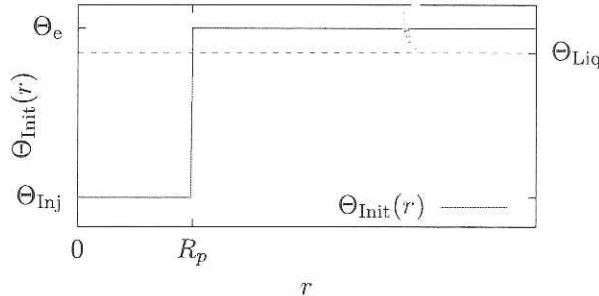


FIGURE 2.5 – Température initiale du système formé par la particule de bain gelé placée à l'origine du système de coordonnées, et du bain électrolytique environnant.

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

$$\tilde{\Theta}_{Init}(r) = \begin{cases} \Theta_{Inj} & \text{si } r < R_p, \\ \Theta_e & \text{si } r \geq R_p, \end{cases} \quad \forall r \in \mathbb{R}_+. \quad \text{(2.48)}$$

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

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

par la relation :

$$\beta(\tilde{H}(t, R_f(t))) = \Theta_{\text{Liq}}. \quad (2.49)$$

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

$$R_g(t) = R_f(t) - R_p. \quad (2.50)$$

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

$$R_g(\Theta_{\text{Lat}}) = 0. \quad (2.51)$$

On considère une particule de bain solidifié de rayon initial $r_0 = 40\mu\text{m}$, $60\mu\text{m}$ et $80\mu\text{m}$. La surchauffe du bain électrolytique est définie ici comme la différence entre la température initiale du bain Θ_e et la température de liquidus Θ_{Liq} . La figure 2.6 présente l'évolution du rayon de la particule pour trois surchauffes différentes du bain électrolytique environnant.

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

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

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

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

Pour ces raisons, dans la suite de ce travail on négligera la formation de gel à la surface des particules d'alumine. Cependant, selon les simulations de V. Dassylva-Raymond [Das15], nous choisirons un temps de latence pour chaque dose de particules injectées dans le bain uniforme $\Theta_{\text{Lat}} = 1\text{s}$, indépendante du rayon. Ce temps de latence se justifie par l'effet collectif de toutes les particules d'une dose sur la température du bain environnant.

2.3 Dissolution d'une particule dans le bain

{sec:particle-dissolution}

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

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

Θ : température

Donc bain de
définir Θ_{Lat}
par le temps de
latence...

($\rightarrow T_{\text{Lat}}$?)

r_0 d'après la notation
sur fig. 4.6.

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

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

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

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

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

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

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

On suppose que cette particule est une sphère parfaite, non poreuse, et qu'elle est complètement mouillée par le bain, i.e., que la totalité de sa surface est en contact avec le bain électrolytique. Dans le travail [Hof11], la vitesse de dissolution d'une particule est une fonction f qui décrit la vitesse de variation de son rayon r , et qui dépend d'une part de

r et d'autre part de la concentration locale d'alumine dissoute c . Dans le présent travail, nous considérerons en plus l'influence de la température locale de l'électrolyte Θ sur sa vitesse de dissolution, c'est-à-dire que

$$\frac{dr}{dt} = f(r, c, \Theta). \quad (2.52)$$

On propose d'écrire la fonction f comme

$$f(r, c, \Theta) = -\frac{\kappa(c, \Theta)}{r}, \quad (2.53)$$

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

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

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

$$\kappa(c, \Theta) = \begin{cases} K \frac{c_{\text{Sat}} - c}{c_{\text{Sat}}} \left(1 - \exp \left(-\frac{\Theta - \Theta_{\text{Liq}}}{\Theta_{\text{Crit}} - \Theta_{\text{Liq}}} \right) \right) & \text{si } \Theta \geq \Theta_{\text{Liq}} \text{ et } 0 \leq c \leq c_{\text{Sat}}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.54)$$

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

$$\lim_{\Theta \rightarrow \infty} \kappa(0, \Theta) = K. \quad (2.55)$$

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

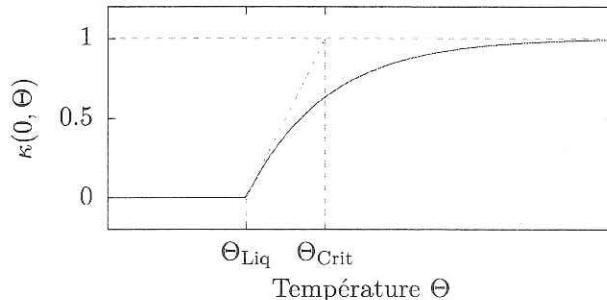


FIGURE 2.7 – Relation entre la température Θ et le taux de dissolution κ lorsque $c = 0$ et que le taux de dissolution limite $K = 1$. En vert sont les traits de construction, et donnent une interprétation du paramètre Θ_{Crit} .

Supposons maintenant que c et Θ sont des constantes données. Alors $\kappa(c, \Theta)$ est un réel fixé, et on omettra d'indiquer ses arguments jusqu'à la fin du paragraphe, puisqu'il n'y a pas de risque d'ambiguïté.

En tenant compte de (2.53), l'équation d'évolution du rayon d'une particule (2.52) de rayon initial $r_0 > 0$ devient

$$\frac{dr}{dt}(t) = -\frac{\kappa}{r(t)} \quad \text{si } t > 0, \quad \text{[eq:radius-edo-const-diss-rate]} \\ r(0) = r_0. \quad (2.56)$$

Ainsi, en notant $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$ on obtient une expression exacte pour le rayon de la particule au cours du temps :

$$\begin{aligned} r\dot{r} &= -\kappa, \\ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} r^2 &= -\kappa, \\ r^2 &= -2\kappa t + r_0^2, \\ r(t) &= \sqrt{r_0^2 - 2\kappa t}. \end{aligned} \quad \text{[eq:particle-exact]} \quad (2.57)$$

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

La vitesse de dissolution f décrite ci-dessus et l'expression du rayon d'une particule qui se dissout au cours du temps (2.57) forment la base qui permet la description de l'évolution d'une population constituée de particules de tailles hétérogènes dans un bain électrolytique, et qui fait l'objet de la section suivante.

2.4 Dissolution d'une population de particules

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

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (f(r, c, \Theta) n_p) = 0 \quad \text{si } r > 0, t > 0, \quad \text{[eq:population-pde]} \\ n_p(0, r) = n_{p,0}(r) \quad \text{si } r > 0, \quad (2.58) \quad \text{[eq:population-ic]}$$

où la vitesse de dissolution f est donnée par l'expression (2.53) et $n_{p,0}$ est une distribution de particules initiale donnée.

En tenant compte de (2.53), l'équation (2.58) pour la population de particule n_p se réécrit

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial n_p}{\partial r} + \frac{\kappa}{r^2} n_p = 0. \quad \checkmark \quad (2.60) \quad \text{[eq:population-pde-2]}$$

Dans le plan (t, r) on fixe un point (\bar{t}, \bar{r}) avec $\bar{t} > 0, \bar{r} > 0$, et on veut déterminer $n_p(\bar{t}, \bar{r})$ à partir de $n_{p,0}(r)$ par la méthode des caractéristiques rétrograde. L'équation de la ligne

pour être constant :

$$r(t) \dot{r}(t) = -\kappa$$

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

$$r(t)^2 = -2\kappa t + r_0^2$$

à exactement \bar{t} , non ?

remarque: $r(t)$ est strictement décroiss. pour t ∈ [0, T)
car $\frac{dr(t)}{dt} = -\frac{\kappa}{r(t)} < 0$

(pour autant que $\kappa > 0$)

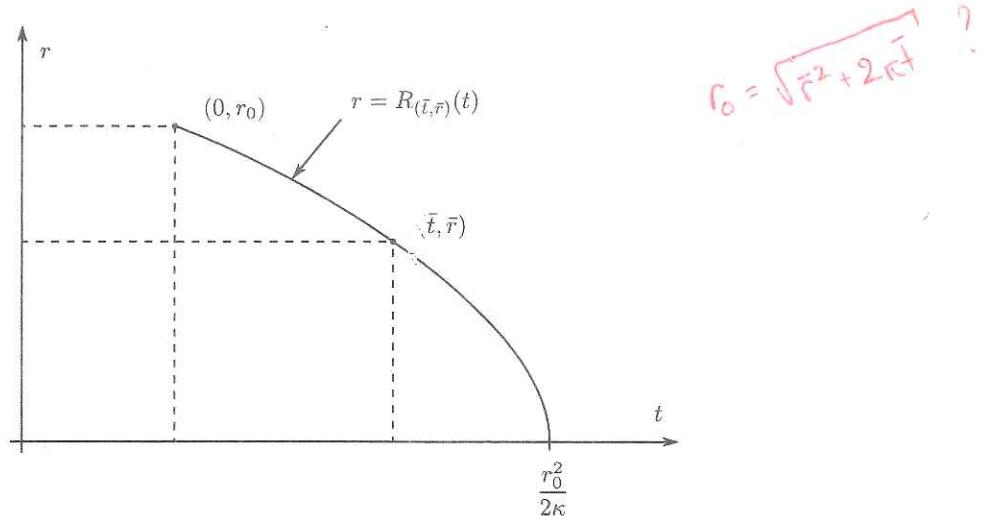


FIGURE 2.8 – Ligne caractéristique d'une particule de rayon initial r_0 qui se dissout avec une vitesse κ selon l'expression (2.57).

caractéristique $R_{(\bar{t}, \bar{r})}$ qui passe par (\bar{t}, \bar{r}) est donnée par

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

Cette situation est illustrée par la figure 2.8. Ainsi $R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t) = \sqrt{\bar{r}^2 - 2\kappa(t - \bar{t})}$, en vertu de (2.57). Notons $N_p(t) = n_p(t, R_{(\bar{t}, \bar{r})}(t))$ la valeur de n_p sur cette caractéristique. En dérivant par rapport à t et en utilisant (2.60) on a

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

Ainsi

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

qui implique que

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

En intégrant on obtient

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

(pour une certaine constante D)

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

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

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

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

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

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

{eq:population-exact-solution}
{rem:population-e(2.61)}

(pas refait
les calculs)

Remarque 2. La solution (2.61) est exacte pour autant que le taux de dissolution κ soit constant sur l'intervalle de temps $[0, T]$. Cependant, si κ est constant sur le sous-intervalle $[\bar{t} - \Delta t, \bar{t}]$ et que la distribution de particules n_p est connue au temps $\bar{t} - \Delta t$, alors on exprime facilement n_p au temps \bar{t} en fonction de n_p au temps $\bar{t} - \Delta t$ en fonction de n_p au temps $\bar{t} - dt$.

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

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

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

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

Ainsi

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

et donc

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

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

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

Approximation numérique Pour discréteriser l'équation (2.58) on procède comme dans Hofer [Hof11] et on utilise une méthode des caractéristiques [Pir89].

At

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

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

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

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

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

$$n_{p,j}^{n+1} = \begin{cases} \left(\frac{r_{s_j^n+1} - R_j^n}{\Delta r} n_{p,s_j^n}^n + \frac{R_j^n - r_{s_j^n}}{\Delta r} n_{p,s_j^n+1}^n \right) \frac{r_j}{\sqrt{r_j^2 + 2\kappa^n \Delta t}}, & \text{si } s_j^n < M, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.62)$$

et $n_{p,0}^{n+1} = 0$ pour $j=0$ et $j=M$?

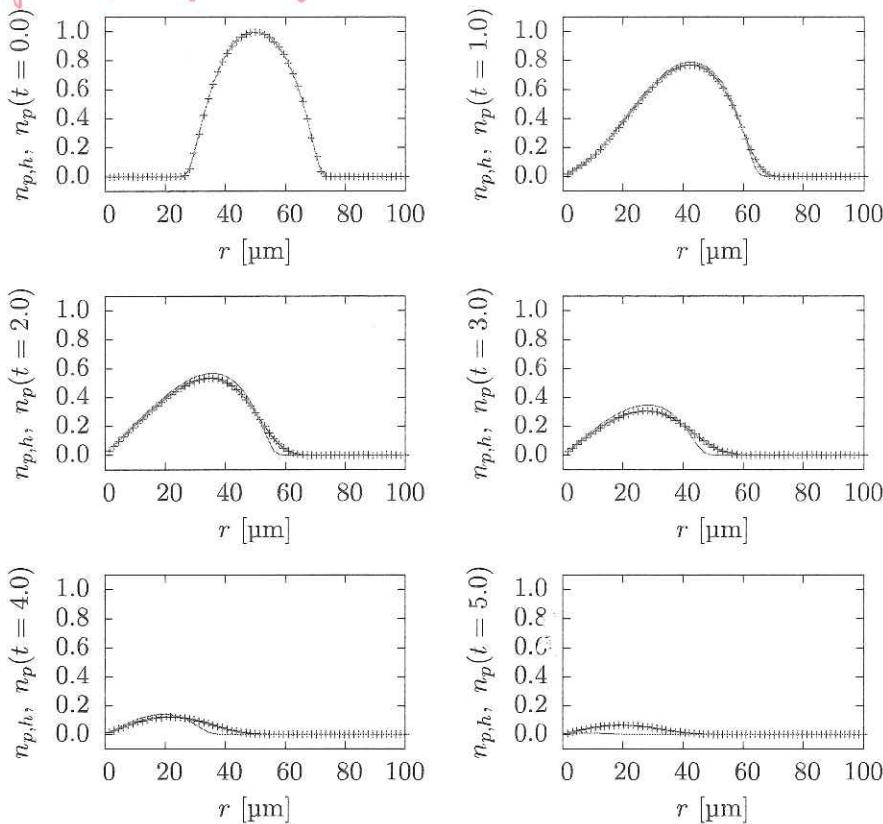


FIGURE 2.9 – Solution exacte n_p et approximation numérique avec $\Delta r = 1/64$, $\Delta t = 1.46 \times 10^{-2}$ à différents temps. La condition initiale est donnée par (2.63). En vert : solution exacte. En violet : approximation numérique.

Validation numérique On propose maintenant de valider l'implémentation du schéma numérique (2.62) 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

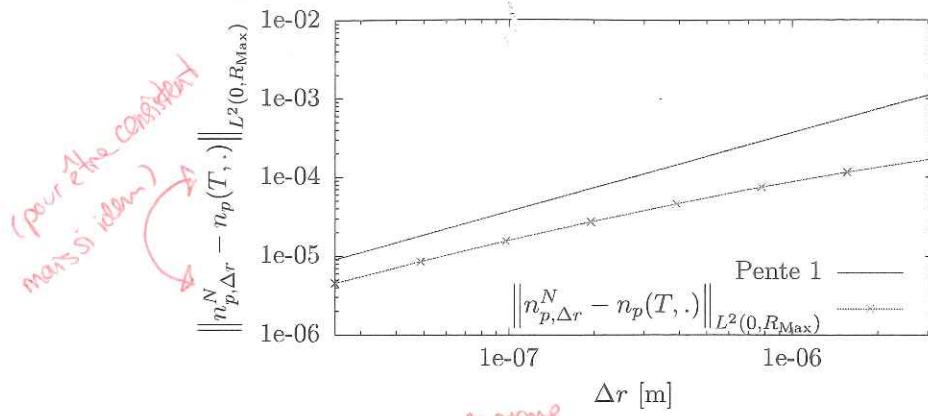


FIGURE 2.10 – Convergence de l'erreur $L^2(0, R_{\text{Max}})$ entre $n_p(T, \cdot)$ et la reconstruction linéaire par morceau des approximations $n_{p,j}^N$ sur la subdivision $\{r_j\}_{j=0}^M$. Le pas de temps est choisi tel que $\Delta t \propto \Delta r$.

tel que $0 \leq n \leq N - 1$. On choisit la distribution de particules initiale

$$n_{p,0}(r) = \exp \left(1 - \frac{1}{1 - \frac{16}{R_{\text{Max}}^2} \left(r - \frac{R_{\text{Max}}^2}{2} \right)} \right). \quad \text{(2.63)}$$

Alors la solution exacte $n_p(t, r)$ est donnée par l'expression (2.61). On note $n_{p,\Delta r}^N$ la reconstruction continue linéaire par morceau des valeurs $n_{p,j}^N$ sur la subdivision $\{r_j\}_{j=0}^M$, c'est-à-dire que

$$n_{p,\Delta r}^N(r) = n_{p,j}^N + \frac{r - r_j}{\Delta r} \left(n_{p,j+1}^N - n_{p,j}^N \right) \quad \text{si } r \in [r_j, r_{j+1}]. \quad (2.64)$$

On considère l'erreur $L^2(0, R_{\text{Max}})$ entre la solution exacte $n_p(T, \cdot)$ et $n_{p,\Delta r}^N$. La figure 2.9 illustre la solution et l'approximation numérique à différents instants. La figure 2.10 présente l'erreur $\|n_p(T, \cdot) - n_{p,\Delta r}^N\|_{L^2(0, R_{\text{Max}})}$ pour $\Delta r = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512, 1/1024, 1/2048$ et $1/4096$. On a choisi $\Delta t = \alpha \Delta r$ avec $\alpha = 0.934$. L'erreur est comparée à une droite de pente 1. On constate que l'erreur de l'approximation numérique est un $O(\Delta r)$.

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

2.5 Chute de particules dans le bain

La densité de l'alumine ρ_{Al} qui constitue les particules est de 3960 kg m^{-3} soit environ deux fois supérieure à celle du bain électrolytique ρ_{ef} qui est de 2130 kg m^{-3} . Une particule d'alumine placée dans un bain électrolytique animé par un écoulement stationnaire subit ainsi l'effet de trois forces distinctes. D'une part, cette particule est freinée 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 .

[est d'ordre Δr]

[converge en (Δr)]

* De plus
Finalement

- On considère l'erreur $n_p(T, \cdot) - n_{p,\Delta r}^N$ entre la solution exacte et l'approximation, mesurée en norme $L^2(0, R_{\text{Max}})$. (ou: On considère la norme $L^2(0, R_{\text{Max}})$ de l'erreur entre ...)

Dans cette section, nous nous proposons d'évaluer l'importance des forces de gravité et d'Archimède devant la force de traînée. Dans ce but, on considère une particule d'alumine sphérique de rayon initial r_0 placée dans un bain électrolytique au repos. On suppose que la température du bain Θ et la concentration d'alumine c sont maintenues constantes au cours du temps. On suppose de plus que le mouvement du fluide autour de la particule n'influence pas sa dissolution. Alors, la variation du rayon r de la particule au cours du temps est décrite par l'équation (2.56). Comme on l'a vu dans la section 2.4, le rayon à l'instant t est donné par

$$r(t) = \sqrt{r_0^2 - 2\kappa t}, \quad (2.65)$$

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

$$T = \frac{r_0^2}{2\kappa} \quad (2.66)$$

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 et dirigé vers le bas à l'instant $t \in [0, T]$ et $\dot{x}(t) = \frac{dx}{dt}(t)$ sa vitesse. La particule étant sphérique, on propose d'approximer la force de traînée par la loi de Stokes. Si v est la vitesse de la particule par rapport au fluide, lui-même au repos dans le référentiel, on a

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

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

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

$$F_g(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho_{Al} g \quad \text{et} \quad F_A(r) = -\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_e g$$

où $g = 9.81 \text{ m}^2 \text{s}^{-2}$ est l'accélération de la gravité.

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

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

soit

$$\frac{d}{dt}(\rho_{Al}V(t)\dot{x}(t)) = \frac{4}{3}\pi r^3(t)(\rho_{Al} - \rho_e)g - 6\pi\mu r(t)\dot{x}(t). \quad (2.67)$$

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

En utilisant la relation (2.65), nous avons

$$\frac{d}{dt}V(t) = -4\pi\kappa r(t). \quad (2.68)$$

En remplaçant (2.68) dans l'égalité (2.67), en tenant compte du fait que $V(t) = \frac{4}{3}\pi r^3(t)$, puis en divisant par $\pi r(t)$ nous obtenons

$$\rho_{Al}\frac{4}{3}r^2(t)\frac{d^2}{dx^2}x(t) = g(\rho_{Al} - \rho_e)\frac{4}{3}r^2(t) - (6\mu - 4\rho_{Al}\kappa)\frac{dx}{dt}. \quad (2.69)$$

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

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

{tab:fall-physical-parameters}

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

donner l'intervalle pour μ , i.e. $2 \times 10^{-3} \rightarrow [2 \times 10^{-3}, 1]$?

En utilisant (2.65), (2.66) et en intégrant l'équation (2.69) sur l'intervalle de temps $[0, T]$, nous obtenons

$$(6\mu - 4\rho_{Al}\kappa)x(T) = g(\rho_{Al} - \rho_e) \frac{r_0^4}{3\kappa} - \rho_{Al} \frac{4}{3} \int_0^T (r_0^2 - 2\kappa t) \frac{d^2}{dt^2} x(t) dt. \quad \text{(2.70)}$$

En intégrant le dernier terme de l'équation (2.70) par partie, nous obtenons finalement la profondeur terminale de la particule au moment de sa dissolution complète

$$x(T) = \frac{g(\rho_{Al} - \rho_e)}{\kappa(18\mu - 4\rho_{Al}\kappa)} r_0^4 + \frac{2\rho_{Al}v_0}{9\mu - 2\rho_{Al}\kappa} r_0^2. \quad \text{(2.71)}$$

Les valeurs des paramètres physiques qui correspondent à une particule d'alumine dans un bain et qui interviennent dans l'équation (2.71) sont synthétisées dans le tableau 2.2. Contrairement à l'hypothèse admise ici, le bain d'une cuve d'électrolyse est animé par une forte agitation. Ces turbulences correspondent à une viscosité équivalente μ qui caractérise l'écoulement moyen au cours du temps. Dans le bain d'une installation industrielle, cette viscosité turbulente est typiquement de l'ordre de $1 \text{ kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ou plus, et domine donc largement la viscosité physique du fluide. Pour cette raison nous considérons des viscosités dans l'intervalle $[2 \times 10^{-3}, 1]$.

(la table)

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 (2.71) 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 4 cm environ est atteinte lorsque $r_0 = 80 \mu\text{m}$ et avec une vitesse initiale $v_0 = 3 \text{ m s}^{-1}$. La profondeur maximale lorsque le rayon initial est inférieur à $80 \mu\text{m}$ est systématiquement inférieure à 1 cm.

$\sqrt{2g \cdot 0.2} \approx 1.38$

$\sqrt{2g \cdot 0.4} \approx 2.8$

$\Leftrightarrow v_0 \in [1.38, 2.8]$

mais je comprends
que tu veux les considérer
l'intervalle $[0, 3]$...

Dans cette section on a donné une expression exacte pour la position de la particule lorsque celle-ci est complètement dissoute, c'est-à-dire lorsque $t = T$. La position de la particule $x(t)$ pour tout $t \in (0, T)$ nécessite l'intégration de l'équation différentielle linéaire non-homogène et à coefficients variables (2.69). Nous ne chercherons pas ici à expliciter la solution exacte pour $x(t)$. Cependant, il est facile d'obtenir une approximation numérique de x à l'aide des intégrateurs offerts par MATLAB®, ode45 par exemple. La figure 2.12

en [m]

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

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

présente les trajectoires adoptées par trois particules de rayon initiaux différents. La figure 2.12a montre la trajectoire en entier jusqu'à dissolution complète de chaque particule, tandis que la figure 2.12b illustre la phase d'accélération initiale de chaque particule qui succède immédiatement à la condition initiale.

Nous concluons cette section par quatre 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, troisièmement du temps caractéristique pour qu'une particule soit emportée par un fluide en mouvement laminaire et quatrièmement de la validité de l'hypothèse de supposer un fluide au repos dans le bain d'une cuve d'électrolyse.

Remarque 3. En considérant la relation (2.71), 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 (2.71) sont identiques lorsque la vitesse initiale est telle que

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

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

Remarque 4. Le nombre de Reynolds d'une sphère de rayon r en mouvement rectiligne uniforme dans un fluide au repos est donné par

$$R_e = \frac{2\rho_e v r}{\mu}$$

où v est sa vitesse relative au fluide. En supposant r fixé, l'équation du mouvement d'une particule dans le fluide s'écrit

$$\rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 \ddot{x}(t) = \frac{4}{3} \pi r^3 (\rho_{\text{Al}} - \rho_e) g - 6\pi \mu r \dot{x}(t). \quad (2.72)$$

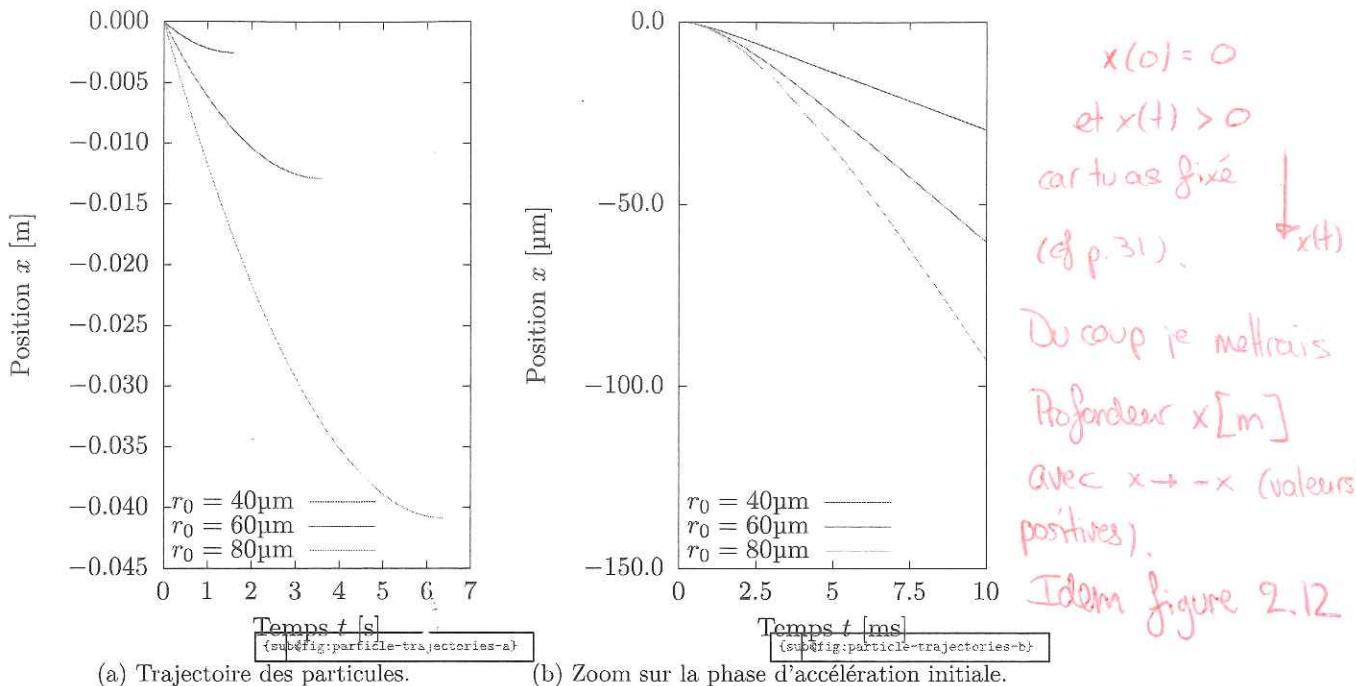


FIGURE 2.11 – Trajectoires de trois particules de rayons initiaux $r_0 = 40, 60$ et $80\mu\text{m}$ et une vitesse initiale $v_0 = 0$. Les trajectoires sont intégrées pour $t < \frac{r_0^2}{2K}$. Notez les échelles différentes sur chaque graphique.

On obtient la vitesse limite de chute de la particule v_L en remplaçant dans (2.72) \dot{x} par v_L et en posant $\ddot{x} = 0$ (accélération nulle). En résolvant pour v_L on obtient

$$v_L = \frac{2}{9} \frac{g(\rho_{\text{Al}} - \rho_e)}{\mu} r^2. \quad (2.73)$$

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

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

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

Remarque 5. En négligeant la force de gravité ($g = 0$), l'équation du mouvement d'une particule d'alumine de rayon r_0 supposé constant au cours du temps s'écrit

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

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

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

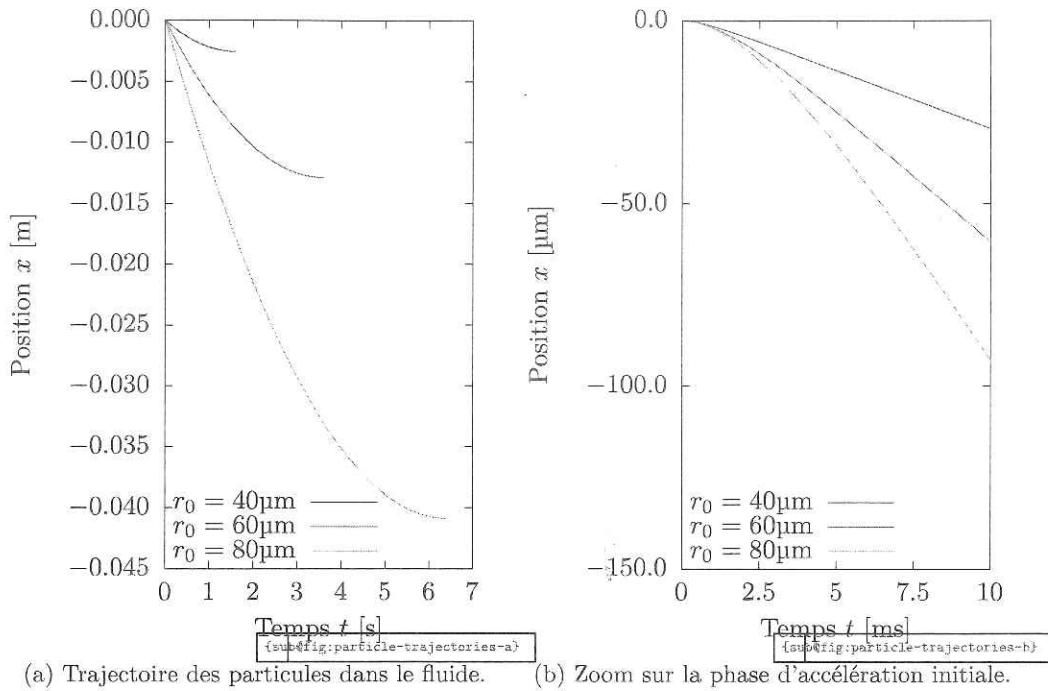


FIGURE 2.12 – Trajectoires de particules de rayon initial $r_0 = 40, 60$ et $80\text{ }\mu\text{m}$. Chaque particule est placée à l'origine avec une vitesse nulle au temps $t = 0$. Les trajectoires sont intégrées jusqu'à ce que les particules soient complètement dissoutes, c'est-à-dire sur l'intervalle de temps $\left[0, \frac{r_0^2}{2\kappa}\right]$. Notez les différentes échelles sur les deux graphiques.

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

Remarque 6. 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. Les turbulences se manifestent par une viscosité apparente de l'écoulement moyen supérieure à la viscosité laminaire du bain. Dans le bain d'une cuve d'électrolyse industrielle, cette viscosité turbulente est typiquement de l'ordre de $1\text{ kg m}^{-1}\text{ s}^{-1}$. 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.

On conclut que la gravité a un effet négligeable sur le transport de particules individuelles dans une cuve d'électrolyse. 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 dans les chapitres 3 et 4 qui suivent.

0.1 mm