



**Modélisation mathématique de la formation d'agrégats et de la dissolution de
l'alumine dans le bain d'électrolyse**

Par

Thomas Roger

Sous la direction de László I. Kiss et Sándor Poncsák

**Thèse présentée à l'Université du Québec à Chicoutimi en vue de l'obtention du grade de
Philosophiæ Doctor (Ph. D.) en ingénierie**

Soutenue le 17 juin 2022

Jury :

Kadiata Ba, Professeure, Département des sciences appliquées, Présidente du Jury

László I. Kiss, Professeur, Département des sciences appliquées, Directeur de doctorat

Sándor Poncsák, Professeur-chercheur sous octroi, Département des sciences appliquées, Co-Directeur de doctorat

Nadia Chailly, Ph. D. Ingénieur Modélisation, Rio Tinto, Membre externe

Véronique Dassylva-Raymond, Professeure, Département de mathématiques, d'informatique et de génie, UQAR, Membre externe

Québec, Canada

© Thomas Roger, 2022

RÉSUMÉ

Pour l'industrie de l'aluminium, la compréhension de l'injection à la dissolution de l'alumine dans le bain électrolytique est critique pour identifier le point optimal des conditions d'opération. De l'injection à la complète dissolution, plusieurs mécanismes physiques et chimiques interagissent : mécanique des solides et des fluides, transfert de chaleur, changement de phase et dissolution.

Le modèle mathématique présenté dans cette thèse utilise la méthode des éléments discrets (DEM) pour considérer la poudre d'alumine solide sous la forme d'un matériau granulaire. Il est couplé à la méthode « hydrodynamique des particules lissées (SPH) pour simuler le liquide électrolytique. Dans l'optique d'accélérer le calcul, le simulateur utilise les cartes graphiques pour utiliser le potentiel du calcul parallèle. Le modèle permet également le calcul du transfert thermique et la formation de l'agrégat lié au frittage de l'alumine. De plus, le changement de phase est intégré au modèle pour considérer l'effet de la solidification du bain sur la formation du radeau. Finalement, le rythme de dissolution de l'alumine est calculé localement selon les conditions présentes. Une analyse des résultats de ces effets combinés permet de mettre en évidence les pistes d'amélioration du processus et des conditions d'injection de l'alumine.

Le développement d'un modèle nécessite plusieurs validations pour calibrer le modèle. Les expériences de validations sont divisées en deux méthodologies : le développement de validation avec des expériences analogues à basse température et des validations d'injection sous des conditions rapprochées des conditions industrielles (alumine + bain en fusion). La facilité d'approche des modèles analogues permet d'apporter une meilleure compréhension des phénomènes physiques présents lors de l'injection d'un matériau granulaire dans un liquide. Ces validations consistent en l'injection de graines de moutarde refroidies à l'azote liquide dans l'eau pour observer la mécanique des solides et des fluides, le transfert thermique et le changement de phase. Certaines validations à basse température sont aussi réalisées avec des échantillons de sel pour étudier les liens entre le transfert thermique, le changement de phase et la dissolution. Ces validations utilisent plusieurs technologies pour observer les phénomènes : caméra haute vitesse, imagerie schlieren et vélocimétrie par images de particules. Pour effectuer les validations à haute température, la température de la surface supérieure du radeau a été suivie avec une caméra thermique suivant l'injection dans le bain électrolytique. Dans d'autres cas, il y a eu repêchage des radeaux pour permettre de faire une analyse visuelle de ses propriétés.

À la suite du développement du modèle et de la validation, une simulation de référence a été établie utilisant plusieurs paramètres correspondant aux validations, ou bien à des conditions typiques de l'industrie. Ce cas a permis d'identifier certains comportements typiques de l'ensemble du processus. Subséquemment, une étude paramétrique est réalisée pour analyser l'influence de ces paramètres sur la

formation du radeau d'alumine. Les résultats permettent de mettre en évidence les paramètres d'entrée qui ont la plus forte influence sur le processus de dissolution d'alumine tout en offrant une explication détaillée concernant les conséquences observées suite à la modification de chacun des paramètres étudiés, que ce soit: la variation de surface de contact alumine-bain, la quantité de bain solidifié ou principalement, le rythme de dissolution d'alumine.

ABSTRACT

For primary aluminum producers, understanding each step of alumina feedings is critical to reach optimal process conditions. From the injection of the powder to its complete dissolution, several physical and chemical mechanisms are interacting: solid and fluid mechanics, heat transfer, phase change and dissolution.

The mathematical model presented in this thesis uses the discrete element method (DEM) to consider the solid alumina powder as an individual particle. It is coupled to the "smoothed particle hydrodynamics" (SPH) method to simulate the liquid electrolyte. In order to decrease the computational time, the simulator uses graphics cards to use the benefits of parallel computing. The model is also used to calculate the heat transfer and coalescence of solid materials resulting from alumina sintering. Then, phase change is integrated into the model to consider the cohesion effect caused by bath. Consecutively, the dissolution rate of alumina particles is calculated locally for each respective set of conditions. A detailed study of the combined effect of these mechanisms will lead to enhanced injection conditions leading to improved alumina dissolution in electrolysis cells.

The development of a model requires several validations to tune the model. Validation experiments are divided into two methodologies: validation development with analogous low temperature experiments and alumina injection validations at high temperature. The versatility offered from analogue validations provides deeper understanding of the physical phenomena in effect during the injection of a granular material into a liquid. The setup used consists of injecting mustard seeds cooled with liquid nitrogen into water to observe solids and fluids mechanics, heat transfer and phase change. Low temperature validations were also carried out with salt samples to study the interactions between heat transfer, phase change and dissolution. Several technologies were used to observe these phenomena: high-speed camera, schlieren imaging and particle image velocimetry. High-temperature validations were performed while injecting alumina into electrolytic bath. Under a controlled environment, the temperature of the upper surface of the generated raft was monitored using an infrared camera. In other experiments, the raft itself was collected after a specific time to perform a visual analysis of its structure.

Following the development of the model and the validations, a reference scenario was used using parameters corresponding to the validations and typical industrial values. This scenario can pinpoint the expected behaviour during the injection and dissolution process. Finally, a parametric study is carried out to analyze the influence of input parameters on the formation of the alumina raft. The results make it possible to highlight the parameters with the upmost effect on the process, which pave forward potential applications for further optimization of the dissolution of alumina, whether it is by enhancing the surface contact between the alumina and the bath, or reducing the amount of solidified bath, in order to directly improve the alumina dissolution rate.

DÉDICACE

À ma sœur, Pauline, qui m'a donné la force de réaliser cette thèse,
force négligeable comparée à sa force contre la maladie.

Tu me rends fière d'être ton frère.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier le professeur Laszlo Kiss, directeur du présent projet de recherche pour m'avoir fait confiance pour la réalisation de ce projet, pour m'avoir accueilli dans son groupe de recherche, le GRIPS (Groupe de Recherche en Ingénierie des Procédés et Systèmes) durant ces 5 dernières années, et pour m'avoir transmis une partie de ses connaissances scientifiques. Je le remercie également pour son humanité et ses encouragements tout le long du projet. Je remercie également Sandor Poncsak, codirecteur de cette thèse, pour son encadrement, son professionnalisme et sa confiance. Je remercie également Lukas Dion pour m'avoir guidé durant ces dernières années, pour ses encouragements, sa persévérance et sa rigueur sur l'amélioration de cet écrit.

Je tiens à remercier Kirk Fraser pour sa contribution importante dans ce projet. Je te remercie de tout le savoir que tu m'as transmis et d'avoir cru dans les choix réalisés durant ce doctorat.

Un grand merci à toute l'équipe du GRIPS qui a permis le développement des méthodes de validation. Je tiens à remercier Guillaume Bonneau pour son encadrement durant les expériences et ses encouragements précieux. Merci à Patrice Paquette et Martin Truchon, techniciens du groupe de recherche, pour leur professionnalisme et leur perfectionnisme qui ont permis d'atteindre l'excellence des résultats expérimentaux. Je remercie également mes autres collègues, étudiants et stagiaires qui ont contribué à cette thèse.

Je tiens à remercier Rio Tinto pour leur support financier et leur expertise technique. Je remercie Jean-François Bilodeau, conseiller principal R&D chez Rio Tinto, et Sébastien Gérard, Ingénieur chercheur chez Rio Tinto, pour leurs encouragements et leurs critiques qui ont permis d'atteindre le niveau actuel du modèle mathématique. Je remercie également le CRSNG (Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada) pour leur support financier.

Je tiens à faire un remercie spécial à Renaud Santerre pour sa contribution à ce projet. Il nous a quitté trop tôt pour qu'il puisse voir le résultat de son aide précieux.

Je tiens à remercier tous mes amis présents à mes côtés durant ces 5 ans pour leur encouragement et leur soutien. Je tiens à remercier particulièrement Anne-Marie Proulx, ma compagne, pour son soutien et l'amour qu'elle m'a apportés et qui ont permis d'accomplir cette thèse.

Je tiens à finir ces remerciements pour ma famille. Cette thèse est l'accomplissement d'un nombre important d'années d'études. Merci à mes parents pour leur support, leur amour et leur confiance qu'ils ont toujours eue. Je n'aurais jamais pu réaliser ce projet sans eux. Merci à ma sœur pour ses encouragements et de m'avoir transmis sa force naturelle qui donne du courage nécessaire à la réalisation d'une thèse.

TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ	ii
ABSTRACT	iv
DÉDICACE	v
REMERCIEMENTS	vi
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES TABLEAUX	xii
LISTE DES FIGURES	xiii
NOMENCLATURE	xxi
LISTE DES ABRÉVIATIONS	xxvi
CHAPITRE 1	1
INTRODUCTION	1
1.1 . L'ALUMINIUM	1
1.2 . L'ÉLECTROLYSE D'ALUMINIUM	3
1.3 . LE PROCÉDÉ HALL-HÉROULT	5
1.4 . L'ALUMINE	6
1.4.1 PRODUCTION DE L'ALUMINE	6
1.4.2 CARACTÉRISATION DE L'ALUMINE	7
1.4.3 LA TENEUR EN EAU DANS L'ALUMINE	11
1.5 . LE BAIN	12
1.5.1 LA COMPOSITION	12
1.5.2 LA TEMPÉRATURE	12
1.5.3 LA DENSITÉ	14
1.6 . LA DISSOLUTION DE L'ALUMINE	15
1.7 . STRUCTURE DES AGRÉGATS	16
1.8 . PROBLÉMATIQUE	19
1.9 . ORIGINALITÉ	19
1.10 . OBJECTIFS	20
1.10.1 OBJECTIF PRINCIPAL	20
1.10.2 OBJECTIF SECONDAIRE	21
CHAPITRE 2	22
REVUE DE LITTÉRATURE	22
2.1 . FORMATION DES AGRÉGATS	22
2.2 . MODÈLES MATHÉMATIQUES	26
2.2.1 SIMULATION DU TRANSPORT DE L'ALUMINE DANS LES CUVES	26

2.2.2	MODÉLISATION DE LA FORMATION DU RADEAU ET DE L'INFILTRATION DU BAIN	30
2.2.3	MODÉLISATION DE L'INJECTION DE L'ALUMINE	34
2.2.4	MODÉLISATION MULTIPHASIQUE.....	36
2.2.5	MODÉLISATION DU CHANGEMENT DE PHASE	39
2.3.	CONCLUSION DU CHAPITRE	42
CHAPITRE 3.....		43
LE MODÈLE MATHÉMATIQUE.....		43
3.1.	PRÉSENTATION SOMMAIRE DE L'ALGORITHME DU MODÈLE	43
3.2.	HYDRODYNAMIQUE DES PARTICULES LISSÉES (SPH)	46
3.2.1	THÉORIE.....	46
3.2.2	LA FONCTION DE LISSAGE.....	49
3.2.3	SPH APPLIQUÉE À LA MÉCANIQUE DES FLUIDES	49
3.3.	MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS (DEM).....	51
3.4.	COUPLAGE DEM-SPH.....	53
3.4.1	FORCE DE TENSION DE SURFACE.....	53
3.4.2	FORCE DE TRAINÉE	54
3.4.3	FORCE DE FLOTTAISON	56
3.5.	MODÈLE THERMIQUE.....	56
3.5.1	TRANSFERT DE CHALEUR.....	56
3.5.2	CHANGEMENT DE PHASE.....	59
3.6.	MODÈLE DE MONTÉE DE LIQUIDE	60
3.7.	MODÈLE DE DISSOLUTION.....	62
3.8.	MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS : MODÉLISATION DES PAROIS SOLIDES ...	62
3.9.	OPTIMISATION DE LA RECHERCHE DE VOISINAGE	63
3.10.	PROGRAMMATION ET OPTIMISATION AVEC LE CALCUL PARALLÈLE	64
3.11.	CUDA FORTRAN	66
3.12.	COMPILATION SOUS LINUX.....	66
CHAPITRE 4.....		68
SIMULATION NUMÉRIQUE.....		68
4.1.	GÉOMÉTRIE	68
4.2.	MODÈLE MÉCANIQUE	70
4.2.1	CONDITION INITIALE.....	70
4.2.2	CONDITIONS AUX FRONTIÈRES	71
4.2.3	HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE MÉCANIQUE	72

4.3 .	MODÈLE THERMIQUE.....	73
4.3.1	CONDITION INITIALE.....	73
4.3.2	CONDITION AUX FRONTIÈRES.....	74
4.3.3	HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE THERMIQUE	75
4.4 .	MODÈLE DE TRANSFERT DE MASSE.....	75
4.4.1	CONDITION INITIALE.....	75
4.4.2	CONDITION AUX FRONTIÈRES.....	76
4.4.3	HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE DE TRANSFERT DE MASSE	77
4.5 .	INFILTRATION DU BAIN	77
4.5.1	CONDITIONS INITIALES ET AUX FRONTIÈRES	77
4.5.2	HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE D'INFILTRATION	79
CHAPITRE 5		80
MÉTHODES DE VALIDATIONS		80
5.1 .	VALIDATIONS À BASSE TEMPÉRATURE.....	80
5.1.1	ANGLE DE REPOS.....	81
5.1.2	DENSITÉ APPARENTE	86
5.1.3	IMAGERIE HAUTE VITESSE	88
5.1.4	REPÊCHAGE DE RADEAU.....	93
5.1.5	IMAGERIE SCHLIEREN	95
a.	THÉORIE ET MONTAGE DE L'IMAGERIE SCHLIEREN.....	95
b.	EXPÉRIENCE D'INJECTION DE GRAINES DE MOUTARDE	97
c.	EXPÉRIENCE DE LA DISSOLUTION D'UN BLOC DE SEL.....	101
d.	EXPÉRIENCE DU COUPLAGE DU TRANSFERT THERMIQUE AVEC CHANGEMENT DE PHASE ET DISSOLUTION	103
e.	COMPARAISON AVEC LE MODÈLE MATHÉMATIQUE.....	106
5.1.6	VALIDATION DE VITESSE D'ÉCOULEMENT LIÉ À LA CONVECTION NATURELLE.....	107
5.2 .	VALIDATIONS AUX CONDITIONS D'OPÉRATION DES CUVES D'ÉLECTROLYSE	111
5.2.1	MESURE DE TEMPÉRATURE D'UN RADEAU DURANT L'INJECTION	112
a.	CALIBRATION DE L'ÉMISSIVITÉ DE L'ALUMINE	112
b.	MESURE DE LA TEMPÉRATURE DE LA SURFACE SUPÉRIEURE D'UN RADEAU	121
5.2.2	REPÊCHAGE DE RADEAUX	126
a.	PLAN EXPÉRIMENTAL	126

b.	RÉSULTATS ET ANALYSES	129
c.	COMPARAISON AVEC LE MODÈLE.....	137
CHAPITRE 6	138
RÉSULTATS ET DISCUSSION	138
6.1 .	L'INJECTION.....	138
6.2 .	LA CONDITION DE RÉFÉRENCE	144
6.2.1	ANALYSE DU RADEAU ET DE LA DISSOLUTION DE L'ALUMINE	146
6.2.2	ANALYSE DE LA CONCENTRATION D'ALUMINE DANS LE BAIN	152
6.2.3	ANALYSE DE LA CONVECTION NATURELLE	154
6.2.4	CAS DE RÉFÉRENCE – POINTS IMPORTANTS.....	156
6.3 .	L'ANALYSE PARAMÉTRIQUE	156
6.3.1	CONDITION 1 : VARIATION DE LA TEMPÉRATURE AMBIANTE LIÉE AUX PERTES DE CHALEUR	158
6.3.2	CONDITION 2 : VARIATION DE LA TEMPÉRATURE DE PRÉCHAUFFAGE DE L'ALUMINE AVANT L'INJECTION	163
6.3.3	CONDITION 3 : VARIATION DE LA SURCHAUFFE DU BAIN	168
6.3.4	CONDITION 4 : ÉTUDE DE L'INJECTION LENTE	173
6.3.5	CONDITION 5 : ÉTUDE DE L'INJECTION EN MOUVEMENT	177
6.4 .	BILAN DES RÉSULTATS	182
CHAPITRE 7	183
CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS	183
7.1 .	RETOUR SUR LES CONSTATS CONSIDÉRANT LA VALIDATION DU MODÈLE MATHÉMATIQUE	185
7.2 .	CONCLUSION DES RÉSULTATS.....	189
7.2.1	L'INJECTION.....	189
7.2.2	LE SCÉNARIO DE RÉFÉRENCE.....	191
7.2.3	L'ANALYSE PARAMÉTRIQUE	193
7.3 .	RECOMMANDATIONS	194
7.3.1	EXPLOITATION DU MODÈLE MATHÉMATIQUE.....	195
7.3.2	RECOMMANDATIONS SUR L'INFORMATIQUE ET LA PROGRAMMATION	195
7.3.3	RECOMMANDATIONS PHYSIQUES.....	197
LISTE DE RÉFÉRENCES	201

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 5-1 : COMPARAISON DES DENSITÉS ENTRE LA MÉTHODE DE VALIDATION ANALOGUE ET L'INJECTION DE L'ALUMINE DANS LES CUVES D'ÉLECTROLYSE	89
TABLEAU 5-2: TABLEAU COMPARATIF ENTRE L'UTILISATION DE LA CAMÉRA THERMIQUE ET UN THERMOCOUPLE POUR LA MESURE DE LA TEMPÉRATURE DU RADEAU	112
TABLEAU 5-3: COMPARAISON DES PARAMÈTRES D'INJECTION ENTRE LA MÉTHODE ANALOGUE ET LA MÉTHODE RÉELLE AVEC L'ALUMINE DANS LE BAIN	126
TABLEAU 5-4: PLAN EXPÉRIMENTAL DE L'INJECTION D'ALUMINE POUR LE REPÊCHAGE DE RADEAUX	127
TABLEAU 5-5: PHOTOS DE RADEAUX D'ALUMINE INJECTÉE DANS LE BAIN ET REPÊCHÉS	129
TABLEAU 5-6: ANALYSE VISUELLE DE LA STRUCTURE DES RADEAUX D'ALUMINE INJECTÉE DANS LE BAIN ET REPÊCHÉS	132
TABLEAU 6-1 : CONDITIONS UTILISÉES POUR L'INJECTION PRINCIPALE.....	145
TABLEAU 6-2: VALEURS DES VARIABLES UTILISÉES POUR L'ANALYSE PARAMÉTRIQUE	158
TABLEAU 6-3: TABLEAU RÉCAPITULATIF DES RÉSULTATS OBTENUS.....	182

LISTE DES FIGURES

FIGURE 1-1 : DEMANDE GLOBALE DE L'ALUMINIUM EN 2015 (SANS LA CHINE)	1
FIGURE 1-2 : PRODUCTION MONDIALE DE L'ALUMINIUM EN 2019 (EN MILLIER DE TONNES)	2
FIGURE 1-3 : SCHÉMA REPRÉSENTANT UNE CUVE D'ÉLECTROLYSE	5
FIGURE 1-4 : SCHÉMA ILLUSTRANT LES ÉTAPES PRINCIPALES DU PROCÉDÉ BAYER	7
FIGURE 1-5 : IMAGE PRISE AU MICROSCOPE POUR MESURER LA RONDEUR D'UNE PARTICULE D'ALUMINE	9
FIGURE 1-6 : MESURE DE LA SPHÉRICITÉ D'UNE PARTICULE D'ALUMINE	10
FIGURE 1-7 : CARACTÉRISATION GÉOMÉTRIQUE DES PARTICULES D'ALUMINE EN FONCTION DE LA SPHÉRICITÉ ET DE LA RONDEUR	11
FIGURE 1-8 : FRACTION LIQUIDE EN % MASSIQUE EN FONCTION DE LA TEMPÉRATURE ET DE LA TENEUR EN FLUORURE D'ALUMINIUM	13
FIGURE 1-9 : SCHÉMA DE LA STRUCTURE D'UN RADEAU	18
FIGURE 1-10 : ZOOM SUR LA STRUCTURE D'UN RADEAU	18
FIGURE 2-1 SCHÉMA REPRÉSENTANT UN AGRÉGAT PRODUIT EN LABORATOIRE PAR ØSTBØ	22
FIGURE 2-2 : IMAGE DE COUPE DE 4 RADEAUX D'ALUMINE APRÈS UN REPÊCHAGE: (A) DURÉE DE FLOTTAISON : 300 S ; (B) DURÉE DE FLOTTAISON : 90 S ; (C) DURÉE DE FLOTTAISON : 60 S; (D) DURÉE DE FLOTTAISON : 210 S	23
FIGURE 2-3 : INFILTRATION DU BAIN DANS UN DISQUE D'ALUMINE COMPRIMÉ	24
FIGURE 2-4 : ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE SUR LA PARTIE SUPÉRIEURE D'UN RADEAU À L'AIDE D'UNE CAMÉRA THERMIQUE	25
FIGURE 2-5 : DISTRIBUTION DE CHAQUE PHASE EN FONCTION DE LA POSITION VERTICALE POUR DEUX RADEAUX REPÊCHÉS	26

FIGURE 2-6 : DISTRIBUTION DE LA CONCENTRATION D'ALUMINE DANS UN PLAN HORIZONTAL ($Z = 0.225$ M) AU MILIEU DE LA DISTANCE ANODE-CATHODE À DIFFÉRENT TEMPS : (A) 2 S, (B) 5 S, (C) 10 S, (D) 20 S, (E) 40 S, (F) 80 S, AND (G) 144S.	27
FIGURE 2-7 : COMPARAISON ENTRE LES COURBES DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE OBTENUES PAR SIMULATIONS ET EXPÉRIENCES.....	28
FIGURE 2-8 : MESURE DANS LES CONDITIONS DE LABORATOIRE DE LA PROPORTION DISSOLTE D'UNE INJECTION D'ALUMINE DANS UN BAIN D'ÉLECTROLYSE EN FONCTION DU TEMPS	29
FIGURE 2-9 : SCHÉMAS REPRÉSENTANT LA GÉOMÉTRIE POUR UN AGGLOMÉRAT (A) ET UN RADEAU (B).....	30
FIGURE 2-10 : SCHÉMA REPRÉSENTANT LA CONDUCTION DE CHALEUR ET DE LA DISSOLUTION D'UNE PARTICULE D'ALUMINE.....	32
FIGURE 2-11 : GÉOMÉTRIE DU DISQUE D'ALUMINE ET DE LA GELÉE FORMÉE PAR LES ÉCHANGES THERMIQUES DU MODÈLE DÉVELOPPÉ PAR KASZAS	33
FIGURE 2-12 ISOTHERMES DE 700°C POUR UNE SURCHAUFFE DU BAIN DE 35°C ET LA SURFACE DU DISQUE À UNE TEMPÉRATURE DE 500°C.....	33
FIGURE 2-13: COUPLAGE DES MÉTHODES VOF-DPM POUR SIMULER L'INJECTION DE L'ALUMINE DANS LE BAIN	34
FIGURE 2-14 : MONTAGE DU TEST DU BARRAGE POUR VALIDER UN MODÈLE SPH-DEM..	37
FIGURE 2-15 : COMPARAISON DU TEST DU BARRAGE ENTRE L'EXPÉRIENCE ET LA SIMULATION.....	38
FIGURE 2-16 : ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE ET DE LA VITESSE D'ÉCOULEMENT DANS LE MÉTAL EN FUSION DURANT LE PASSAGE DU LASER.....	40
FIGURE 2-17 : ÉTAT (0 : SOLIDE ; 1 : LIQUIDE) DU MÉTAL LORS DU PASSAGE DU LASER ET ISOTHERME DANS LE MÉTAL EN FUSION	41
FIGURE 3-1: SCHÉMA DE L'ALGORITHME DE RÉOLUTION DU MODÈLE MATHÉMATIQUE	45
FIGURE 3-2: INTERPOLATION AVEC LA MÉTHODE SPH.....	47

FIGURE 3-3 : SCHÉMA EXPLIQUANT L'APPLICATION DE LA FORCE DE TENSION DE SURFACE SUR LES PARTICULES SOLIDES	54
FIGURE 3-4: PREMIERS INSTANTS À LA SUITE DU CONTACT ENTRE LES PARTICULES ET LE LIQUIDE APRÈS L'INJECTION	61
FIGURE 3-5 : INFILTRATION DU LIQUIDE À LA SUITE DU RÉCHAUFFEMENT DES PARTICULES D'ALUMINE	61
FIGURE 3-6 : SCHÉMA REPRÉSENTANT LA RECHERCHE DE VOISINAGE EN 2D (FRASER, 2017).....	64
FIGURE 3-7 : L'ARCHITECTURE PASCAL DES CARTES GRAPHIQUES	65
FIGURE 4-1 : VITESSE DES PARTICULES APRÈS LEUR CRÉATION	70
FIGURE 4-2: SCHÉMA REPRÉSENTANT LE LIEN MÉCANIQUE LORS D'UN CONTACT ENTRE DEUX PARTICULES SOLIDES	72
FIGURE 5-1: SCHÉMA DE LA FORMATION DU TAS AVANT ET APRÈS LA REMONTÉE DU TUBE CONTENANT LES PARTICULES.....	82
FIGURE 5-2: MONTAGE POUR LA MESURE DES ANGLES DE REPOS DE MATÉRIAUX GRANULAIRES	83
FIGURE 5-3: TAS DE BILLES SPHÉRIQUES DE VERRE POUR LA MESURE DES ANGLES DE REPOS (EXPÉRIMENTALEMENT ET AVEC LE RÉSULTAT DE SIMULATION)	84
FIGURE 5-4: TAS D'ALUMINE POUR LA MESURE DES ANGLES DE REPOS (EXPÉRIMENTALEMENT ET AVEC LE RÉSULTAT DE SIMULATION).....	85
FIGURE 5-5 : IMAGE DE LA SIMULATION POUR DÉTERMINER LA DENSITÉ APPARENTE DU MATÉRIAU GRANULAIRE.....	87
FIGURE 5-6 : IMAGES PRISES SUITE À L'INJECTION SUIVANT LA MÉTHODE D'INJECTION. 91	
FIGURE 5-7 : PHOTOS D'UN RADEAU PRODUIT APRÈS L'INJECTION DE GRAINES DE MOUTARDE, PRÉALABLEMENT, REFROIDIES AVEC DE L'AZOTE LIQUIDE	94
FIGURE 5-8: SCHÉMA REPRÉSENTANT LA RÉFRACTION DE LA LUMIÈRE LORS D'UN CHANGEMENT DE MILIEU AVEC UNE VARIATION DE DENSITÉ	95

FIGURE 5-9 : SCHÉMA EXPLIQUANT LA MÉTHODE SCHLIEREN ET MONTRANT LA TRAJECTOIRE D'UN FAISCEAU LUMINEUX	95
FIGURE 5-10 : PHOTO DU MONTAGE SCHLIEREN UTILISÉ POUR RÉALISER LES EXPÉRIENCES	97
FIGURE 5-11 : IMAGES OBTENUES, AVEC L'IMAGERIE SCHLIEREN AVEC LE FILTRE EN POSITION HORIZONTALE, DE L'INJECTION DES GRAINES DE MOUTARDE À DIFFÉRENT TEMPS APRÈS L'INJECTION	98
FIGURE 5-12: IMAGES OBTENUES, AVEC L'IMAGERIE SCHLIEREN AVEC LE FILTRE EN POSITION VERTICALE, DE L'INJECTION DES GRAINES DE MOUTARDE À DIFFÉRENT TEMPS APRÈS L'INJECTION	100
FIGURE 5-13: PHOTO D'UN ÉCHANTILLON DE SEL DE L'HIMALAYA DÉCOUPÉ POUR L'EXPÉRIENCE.....	101
FIGURE 5-14 : IMAGE SCHLIEREN DE LA DISSOLUTION D'UN BLOC DE SEL DANS L'EAU. 102	
FIGURE 5-15: IMAGES SCHLIEREN D'UN BLOC DE SEL REFROIDI AVEC DE L'AZOTE LIQUIDE PUIS PLONGÉ DANS L'EAU	103
FIGURE 5-16 IMAGES SCHLIEREN D'UN ÉCHANTILLON DE SEL CHAUFFÉ PUIS IMMÉRÉ DANS LE FOND D'UN RÉSERVOIR D'EAU ((A) : 15S APRÈS L'IMMERSION; (B) : 90S APRÈS L'IMMERSION).....	105
FIGURE 5-17 : CONVECTION NATURELLE DANS LE BAIN 2 SECONDES APRÈS L'INJECTION	106
FIGURE 5-18: POURCENTAGE MASSIQUE D'ALUMINE DISSOUTE DANS LE BAIN À 30 SECONDES ET 60 SECONDES APRÈS L'INJECTION	107
FIGURE 5-19: IMAGE RÉELLE CAPTURÉE PAR LA CAMÉRA UTILISÉE AVEC LE PIV.....	108
FIGURE 5-20 : SCHÉMA DE L'INSTALLATION DE L'IMAGERIE PIV	109
FIGURE 5-21 : MONTAGE AVEC LES ATTACHE-CÂBLES POUR CONTENIR LE RADEAU	110
FIGURE 5-22 : ANALYSE OBTENUE AVEC L'IMAGERIE PIV DE LA CONVECTION NATURELLE À LA SUITE DE L'INJECTION DE GRAINES DE MOUTARDE REFROIDIES	110

FIGURE 5-23 : ÉMISSIVITÉ D'UN CRISTAL D'ALUMINE EN FONCTION DU NOMBRE D'ONDE	114
FIGURE 5-24 : COURBE DE L'ÉMISSIVITÉ EN FONCTION DE LA TEMPÉRATURE	115
FIGURE 5-25 : PHOTO DE L'EXPÉRIENCE POUR ESTIMER L'ÉMISSIVITÉ DE L'ALUMINE ...	115
FIGURE 5-26: ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE DE LA SURFACE DE L'ÉCHANTILLON D'ALUMINE PRISE PAR LES TROIS THERMOCOUPLES	116
FIGURE 5-27: IMAGE DE CAMÉRA THERMIQUE OBTENUE AVEC LE LOGICIEL FLIR TOOLS AVEC LA POSITION DES SONDAS DE MESURE	118
FIGURE 5-28 : ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE DE L'ÉCHANTILLON MESURÉE AVEC LA CAMÉRA THERMIQUE POUR DIFFÉRENTES ÉMISSIVITÉS ET AVEC LE THERMOCOUPEL À LA SURFACE DE L'ALUMINE PURE.....	119
FIGURE 5-29 : ÉMISSIVITÉ DE L'ALUMINE EN FONCTION DE LA TEMPÉRATURE POUR LES 4 SONDES PLACÉES SUR LE LOGICIEL DE LA CAMÉRA THERMIQUE	120
FIGURE 5-30: IMAGE PRISE AVEC LA CAMÉRA THERMIQUE DU RADEAU JUSTE APRÈS L'INJECTION DANS LE BAIN	122
FIGURE 5-31 : ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE DE LA SURFACE SUPÉRIEURE DU RADEAU À LA SUITE DE L'INJECTION	123
FIGURE 5-32 : ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE MINIMALE DU RADEAU OBTENUE, AVEC LE MODÈLE, COMPARÉE AUX VALEURS OBTENUES AVEC LA CAMÉRA THERMIQUE	125
FIGURE 5-33 : PHOTOS DE L'ALUMINE AVANT L'INJECTION; À GAUCHE : 15G DE POUDRE D'ALUMINE (TYPE A ET B); AU MILIEU : 15G DE GRAINE D'ALUMINE (TYPE B ET D); À DROITE : COMPARAISON DE LA TAILLE DES PARTICULES ENTRE L'ALUMINE EN POUDRE ET EN GRAIN.	127
FIGURE 5-34: SCHÉMA DE L'EXPÉRIENCE D'INJECTION D'ALUMINE DANS LE BAIN POUR REPÊCHER DES RADEAUX.....	128

FIGURE 5-35 : CADRE DE RÉCUPÉRATION POUR LE REPÊCHAGE DES RADEAUX D'ALUMINE	129
FIGURE 5-36: À GAUCHE (A) : IMAGE DU DESSOUS DU RADEAU OBTENU AVEC LE MODÈLE ; À DROITE : PHOTOS DE DESSUS (B) ET DESSOUS (C) DU RADEAU PRIS LORS D'EXPÉRIENCE D'INJECTION (TYPE C)	137
FIGURE 6-1: DÉFORMATION DU MAILLAGE D'INJECTION AVEC L'ENTONNOIR.....	139
FIGURE 6-2: IMAGES EXTRAITES DE LA SIMULATION DURANT L'INJECTION À DIFFÉRENT TEMPS (PARTICULES GRISES : PARTICULES D'ALUMINE, PARTICULES BLANCHES : PARTICULES DE BAIN SOLIDIFIÉ, PARTICULES BLEUES : PARTICULES DE BAIN, PAROIS GRISES : PAROIS DU CONTENANT MODÉLISÉ EN FEM)	140
FIGURE 6-3: ÉVOLUTION DE LA CONVECTION NATURELLE EN FONCTION DU TEMPS JUSTE APRÈS L'INJECTION.....	142
FIGURE 6-4: PARTICULES SUBISSANT LA FORCE DE TENSION DE SURFACE (PARTICULES D'ALUMINE ET DE BAIN SOLIDIFIÉ).....	144
FIGURE 6-5 : MASSE DE BAIN SOLIDIFIÉ ET D'ALUMINE DISSOUTE ET DE LA CONCENTRATION D'ALUMINE DANS LE BAIN EN FONCTION DU TEMPS POUR L'INJECTION PRINCIPALE	147
FIGURE 6-6 : TAUX DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS.....	149
FIGURE 6-7: PHOTO DE DESSOUS DU RADEAU DES PARTICULES D'ALUMINE UNIQUEMENT POUR LA MESURE DE LA SURFACE DU RADEAU EN FONCTION DU TEMPS.....	150
FIGURE 6-8: ÉTUDE DE LA SURFACE DU RADEAU EN FONCTION DU TEMPS COMPARÉ AU FLUX DE DISSOLUTION	151
FIGURE 6-9: TAUX DE DISSOLUTION EN FONCTION DE LA SURFACE DU RADEAU	152
FIGURE 6-10 : CONCENTRATION EN ALUMINE DANS LE BAIN EN FONCTION DU TEMPS .	153
FIGURE 6-11: ÉVOLUTION DE LA CONVECTION NATURELLE EN FONCTION DU TEMPS ...	155
FIGURE 6-12: MASSE DE BAIN SOLIDIFIÉ ET D'ALUMINE DISSOUTE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 1 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	159

FIGURE 6-13: COMPARAISON DE LA TEMPÉRATURE MINIMALE ENTRE LA CONDITION 1 ET LA CONDITION DE RÉFÉRENCE.....	160
FIGURE 6-14 : TAUX DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 1 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	161
FIGURE 6-15: CONVECTION NATURELLE À 180S POUR (A) : LA CONDITION 1 ET (B) : LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	162
FIGURE 6-16: MASSE DE BAIN SOLIDIFIÉ ET D'ALUMINE DISSOUTE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 2 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	164
FIGURE 6-17: ÉVOLUTION DE LA CONVECTION NATURELLE ET LA TEMPÉRATURE POUR CHAQUE ZONE DE LA CONDITION 2	166
FIGURE 6-18 : TAUX DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 2 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	167
FIGURE 6-19 : MASSE DE BAIN SOLIDIFIÉ ET D'ALUMINE DISSOUTE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 3 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	169
FIGURE 6-20: COMPARAISON DE LA TEMPÉRATURE MINIMALE DANS LE RADEAU ENTRE LA CONDITION 3 ET LE CAS DE RÉFÉRENCE.....	170
FIGURE 6-21: TEMPÉRATURE DU BAIN ET VITESSE SELON L'AXE Y DANS LE BAIN À 30 SECONDES APRÈS L'INJECTION POUR LA CONDITION 3 ET LA CONDITION DE RÉFÉRENCE.....	171
FIGURE 6-22 : TAUX DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 3 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CR).....	172
FIGURE 6-23: MASSE DE BAIN SOLIDIFIÉ ET D'ALUMINE DISSOUTE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 4 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	174
FIGURE 6-24: IMAGE DU RADEAU FORMÉ APRÈS UNE INJECTION LENTE (EN VUE PLONGEANTE ET EN VUE HORIZONTALE). IMAGE PRISE À 5 SECONDES ET 50 SECONDES APRÈS LE DÉBUT DE L'INJECTION, CORRESPONDANT À LA FIN DE L'INJECTION.....	175

FIGURE 6-25: COMPARAISON DE LA SURFACE DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS ENTRE LA CONDITION 4 ET LA CONDITION DE RÉFÉRENCE	175
FIGURE 6-26 : TAUX DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 4 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CR).....	176
FIGURE 6-27 : IMAGE DURANT L'INJECTION EN MOUVEMENT (SIMULATION) ET À 5 SECONDES POUR LA CONDITION DE RÉFÉRENCE	178
FIGURE 6-28 : MASSE DE BAIN SOLIDIFIÉ ET D'ALUMINE DISSOUTE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 5 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CR).....	179
FIGURE 6-29 : TAUX DE DISSOLUTION DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 5 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CP).....	180
FIGURE 6-30 : SURFACE DE L'ALUMINE EN FONCTION DU TEMPS POUR LA CONDITION 5 COMPARÉE À LA CONDITION DE RÉFÉRENCE (CR).....	181

NOMENCLATURE

Lettres romaines	Significations
A	Surface [m ²]
\vec{a}	Accélération [m ² /s]
$a_{con\ nat}$	Accélération de convection naturelle [m ² /s]
B	Module d'élasticité de la particule solide [Pa]
C_D	Coefficient de trainée [-]
C_p	Chaleur massique [J/kg.K]
C_s	Chaleur spécifique volumique à l'état solide [J/m ³ .K]
C_L	Chaleur spécifique volumique à l'état liquide [J/m ³ .K]
c	Concentration [mol/m ³ ou kg/m ³ ou %vol]
$c_{Al_2O_3}$	Concentration volumique d'alumine dans le bain [%vol]
$c_{sat\ Al_2O_3}$	Concentration volumique d'alumine de saturation [%vol]
c_{bain}	Proportion infiltrée des particules d'alumine [-]
D	Coefficient de diffusion [m ² /s]
D_{bain}	Coefficient d'infiltration du bain dans l'alumine [m ² /s]
$D_{Al_2O_3}$	Coefficient de diffusion de l'alumine dans le bain [m ² /s]
d	Diamètre [m]
d_1	Plus grand diamètre pour le calcul de la sphéricité [m]
d_2	Plus petit diamètre pour le calcul de la sphéricité [m]

F	Force [N]
\bar{F}_{ext}	Forces externes [N]
f	Fonction générale
\vec{f}^{p-p}	Forces entre particules solides [N]
\vec{f}^{f-p}	Force entre particules et liquide [N]
\vec{f}^{ext}	Forces externes [N]
\vec{f}^n	Force normale de contacte [N]
\vec{f}_{el}^n	Force normal élastique [N]
\vec{f}_{diss}^n	Force normale d'amortissement [N]
\vec{f}^t	Force de friction [N]
\vec{f}^{ST}	Force de tension de surface [N]
\vec{f}^D	Force de trainée [N]
\vec{f}^B	Force de flottaison [N]
f^{liq}	Résultante de la force de trainée sur le liquide [N]
\vec{f}_{coh}	Force de cohésion [N]
g	Gravité [m ² /s]
H	Enthalpie [kJ/kg]
h	Longueur de lissage [m]
$h_{échelle}$	Coefficient d'échelle [-]
h_{eq}	Coefficient de transfert de chaleur globale [W/m.K]
h_{eff}	Coefficient d'échange global de chaleur par les parois [W/m ²]

i	$i^{\text{ème}}$ particule [-]
j	$j^{\text{ème}}$ particule [-]
k	Conductivité thermique [W/m.K]
$k_{Al_2O_3}$	Coefficient de transfert de masse [kg/m ² s]
k_c	Coefficient de contact [N/s]
k_{coh}	Coefficient de cohésion [N]
L	Chaleur latente de changement de phase [kJ/kg]
m	Masse [kg]
$\dot{m}_{Al_2O_3}$	Taux de dissolution massique [kg/s]
$N_{i\ liq}$	Nombre de Voisins liquides [-]
$N_{cal\ voisin}$	Nombre de calcul de voisinage [-]
N_{part}	Nombre de particules [-]
\vec{n}	Vecteur normal à la surface [-]
P_{imm}	Périmètre mouillé de la particule [m]
p	Pression dans le liquide [Pa]
\dot{q}	Source de chaleur volumique [W/m ³]
R	Longueur de lissage adimensionné [-]
R_{rond}	La rondeur d'une particule [-]
Re	Nombre de Reynolds [-]
r	Distance entre particules [m]
$r_{rondeur\ max}$	Plus grand rayon pour le calcul de la rondeur [m]
$r_{rondeur}$	Rayon de chaque cercle pour le calcul de la rondeur [m]
S	Sphéricité [-]

s	Taille initiale des particules [m]
T	Température [°C]
T_{inf}	Température de l'environnement [°C]
$T_{solidus}$	Température de solidification [°C]
T_{moy}	Température Moyenne des particules de liquide voisines [°C]
T_{obj}^4	Température de l'objet [°C]
T_{cap}^4	Température du capteur de la caméra [°C]
t	Temps [s]
\vec{t}^t	Vecteur tangent à la surface [-]
V	Volume [m ³]
v	Vitesse [m/s]
\bar{v}	Amplitude de vitesse [m/s]
v_{ave}	Vitesse moyenne des particules de liquide voisines [m/s]
W	Kernel / fonction de lissage [m ⁻³]
\bar{x}	Position du point de calcul [m]

Lettres grecques	Significations
------------------	----------------

α	Facteur de convergence [-]
α_d	Constante spécifique à la dimension pour la fonction de lissage [m ⁻³]

β	Coefficient de transfert de mouvement entre les phases [N.s/m ⁴]
$\beta_{con\ nat}$	Coefficient de dilatation thermique du fluide [1/K]
γ	Coefficient de tension de surface [N/m]
δ_n	Interpénétration entre particules [m]
$\dot{\delta}_n$	Vitesse d'interpénétration entre particules [m/s]
ε	Vide moyen local [-]
ε_{ray}	Émissivité thermique par rayonnement [-]
η_c	Coefficient d'amortissement [kg/s]
η_{coh}	Coefficient d'amortissement pour la cohésion [kg/s]
θ	Angle de contact du liquide [°]
λ_m	Longueur d'onde [mm]
μ	Coefficient de friction [-]
μ_f	Viscosité dynamique du fluide [Pa.s]
ρ	Densité [kg/m ³]
ρ_{bain}	Densité du bain [kg/m ³]
σ	Contrainte mécanique [Pa]
σ_{ray}	Constante de Stefan-Boltzmann [W/m ² .K ⁴]
φ_{ray}	Flux thermique par rayonnement [W/m ²]

LISTE DES ABRÉVIATIONS

Noms	Significations
CFD	Computational fluid dynamics
DEM	Discrete Element Method (Méthode des éléments discrets)
FEM	Finite Element Method (Méthode des éléments finis)
SPH	Smoothed Particle Hydrodynamics (Hydrodynamique des particules lissées)
VOF	Volume Of Fluid (Méthode du volume de fluide)

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 . L'ALUMINIUM

L'aluminium est un métal de plus en plus prisé pour sa densité faible et sa résistance mécanique importante sous la forme d'alliages. Une étude du marché de l'aluminium présentée en 2015 par Dudin *et al.* (Dudin *et al.*, 2017) montre que l'aluminium est principalement utilisé dans l'ingénierie des transports, la construction et l'électricité comme illustré sur la Figure 1-1.

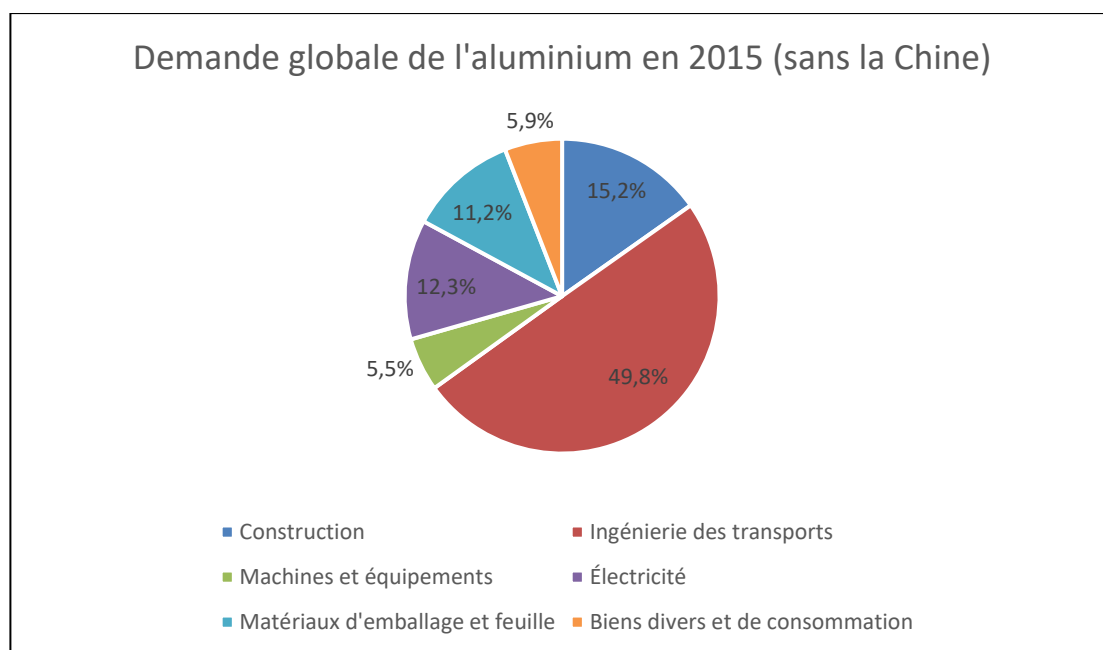


Figure 1-1 : Demande globale de l'aluminium en 2015 (sans la Chine)
Source : (Dudin *et al.*, 2017)

L'évolution de marché de l'automobile étant de plus en plus rapide et l'efficacité de véhicule de plus en plus élevée, l'aluminium joue un rôle

important par ses propriétés mécaniques. Son utilisation est également intéressante dans la construction d'édifice toujours plus grand donc nécessitant une réduction de la masse tout en gardant des propriétés mécaniques accrues.

L'aluminium a la capacité d'être recyclé à l'infini. Son utilisation comme matériau d'emballage ou dans l'industrie de l'automobile est d'autant plus justifiée. Il permet de réduire l'empreinte carbone des produits développés et d'améliorer l'image commerciale des compagnies l'utilisant.

La production de l'aluminium est principalement contrôlée par la Chine, l'Europe et la région Orientale, l'Asie et l'Amérique du Nord comme le montre la Figure 1-2 :

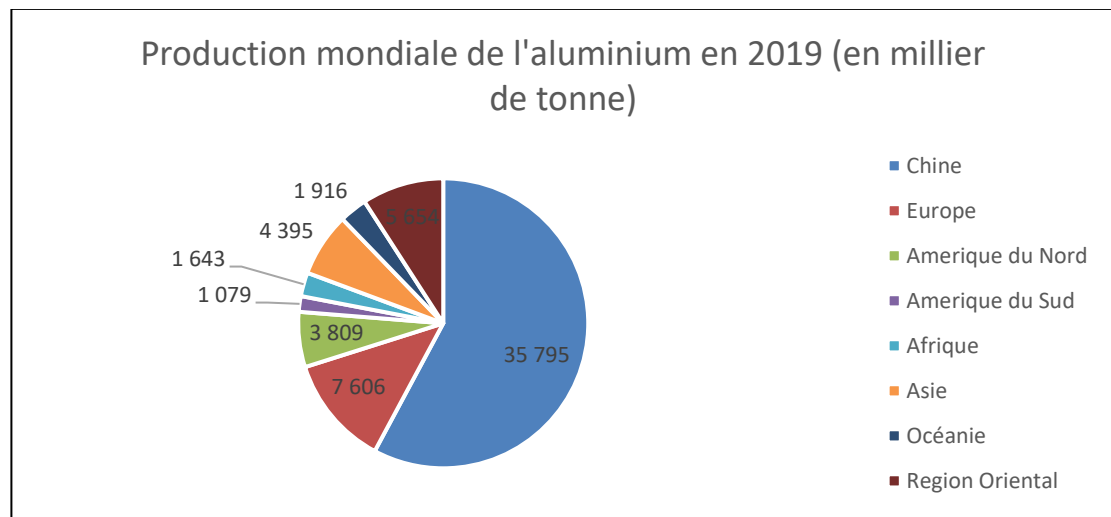


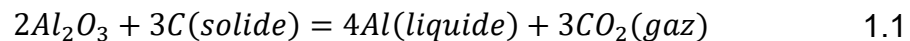
Figure 1-2 : Production mondiale de l'aluminium en 2019 (en millier de tonnes)
Source : ("Primary aluminium production," 2020)

L'aluminium fait partie des derniers métaux découverts. La recherche sur les alliages d'aluminium n'est pas encore rendue à son apogée. La raison de cette découverte récente est que l'aluminium ne se trouve pas à l'état pur

sur la Terre. Sa principale présence est sous la forme d'oxyde, l'alumine. La première goutte d'aluminium a été produite en 1854 par le chimiste Henri Sainte-Claire Deville. La réduction de l'alumine est réalisée avec du sodium et permet la production du premier lingot. En 1886, les deux chercheurs Paul Héroult (France) et Charles Martins Hall développent simultanément le procédé d'électrolyse nommé « Hall-Héroult » et qui est la méthode principalement utilisée dans l'industrie aujourd'hui.

1.2 . L'ÉLECTROLYSE D'ALUMINIUM

L'électrolyse d'aluminium consiste à séparer les atomes d'oxygène des atomes d'aluminium qui constituent l'alumine, de symbole Al_2O_3 . La méthode d'électrolyse consiste au passage d'un fort courant continu entre une anode et une cathode, séparées d'un électrolyte, le bain. L'équation chimique générale est la suivante :



L'alumine injectée, sous la forme d'une poudre, à la surface du bain se dissout dans l'électrolyte sous différents ions complexes, principalement en $Al_2OF_6^{2-}$, $Al_2OF_6^{4-}$ et $Al_2O_2F_4^{2-}$. La réaction à l'anode, constituée de carbone, permet d'arracher les atomes d'oxygène et libère du dioxyde de carbone sous forme gazeuse. Cette réaction produit des ions AlF_4^- . La dernière réaction se produit à la cathode pour produire l'aluminium. Celui-ci est sous la forme liquide et se dépose au fond, car sa densité est légèrement plus importante.

Les bulles de dioxyde de carbone produites lors de la réaction à l'anode remontent à la surface et permettent de créer un brassage naturel. Elles jouent un rôle important sur la dispersion de l'alumine à la suite de l'injection.

Le bain est principalement constitué de cryolithe, Na_3AlF_6 , d'alumine et de différents fluorures (fluorure d'aluminium (AlF_3), fluorure de calcium (CaF_2)). La constitution typiquement utilisée par l'industrie, pour une cuve de 180 kA, est un excès de 10.9% massique en AlF_3 , 4.5% massique de CaF_2 et de 4% massique d'alumine (Thonstad, 2001).

La cryolithe est une roche translucide, d'apparence incolore/blanche/grise qui est chauffée au-dessus de 1000°C pour dépasser son point de fusion.

Ces additifs ont pour impact de réduire la capacité de l'alumine à se dissoudre dans le bain et permettent de réduire cette température de transformation de la phase solide à liquide, le liquidus. La diminution de cette température permet de diminuer la température d'opération et de limiter les pertes thermiques vers l'environnement, donc de réduire la consommation énergétique de la cuve et d'augmenter la durée de vie de la cuve. L'industrie cherche à diminuer l'impact environnemental de la production de l'aluminium.

1.3 . LE PROCÉDÉ HALL-HÉROULT

Deux types¹ de cuves d'électrolyse Hall-Héroult peuvent être différenciées, la cuve à anodes précuites et la cuve à anodes cuites in situ, la cuve Söderberg. La méthode Hall-Héroult à anodes précuites est celle utilisée par les usines de Rio Tinto au Saguenay-Lac St-Jean et par l'ensemble de l'ère moderne de la production d'aluminium avec une géométrie représentée par la Figure 1-3.

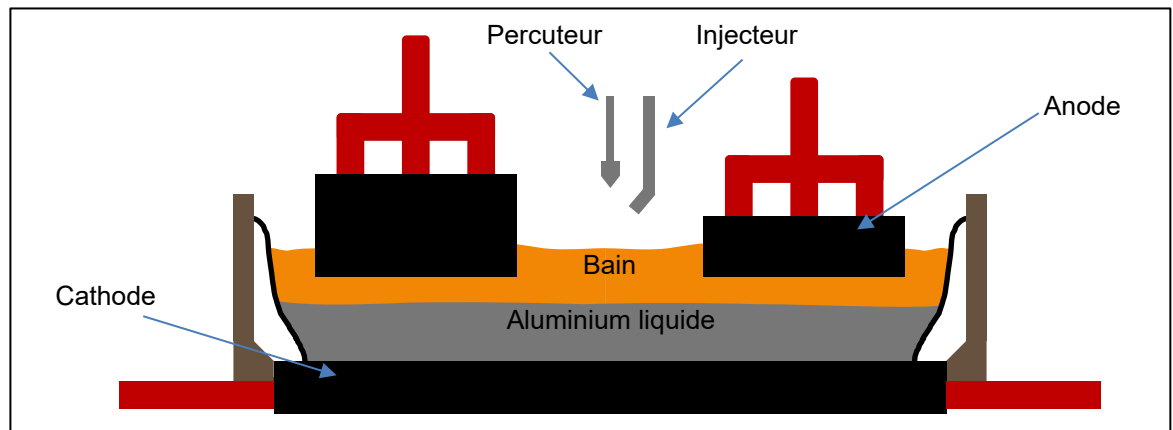


Figure 1-3 : Schéma représentant une cuve d'électrolyse

Les cuves sont principalement constituées d'une vingtaine d'ensembles anodiques, communément appelés anodes. Elles sont remplacées tous les 22 à 26 jours. Elles sont continuellement ajustées pour contrebalancer la consommation de la partie inférieure de l'anode. La distance entre l'anode de l'interface bain-métal varie entre 2 à 5 cm. La hauteur du bain se situe autour

¹ Une nouvelle technologie est en cours de développement par la compagnie Elysis. Peu d'informations sont disponibles pour être comparée aux technologies présentes dans l'industrie.

de 20 cm et la hauteur de métal fondu se situe entre 15 et 25 cm. Le courant passant dans chaque cuve est compris entre 100 et 600 kiloampères suivant la technologie utilisée. La chute de voltage, engendrée par les réactions électrochimiques et les différentes résistances ohmiques (connexions électriques, bulles, aluminium en suspension, etc.) est comprise entre 4 et 4.5 volts. La température d'opération se situe entre 955°C et 965°C. La durée de vie d'une cuve est supérieure à 4000 jours (Thonstad, 2001). Les cuves sont composées de 2 à 5 injecteurs et piqueurs. Les injecteurs fonctionnent par volume constant, ce qui représente une injection comprise entre 1 kg et 2 kg d'alumine. Les piqueurs permettent de perforer la croûte qui se forme au-dessus du bain. Elle permet de limiter les déperditions thermiques et de limiter l'évaporation du bain. La croûte permet également de limiter l'oxydation des anodes en limitant la présence d'oxygène. La croûte est constituée de bain solidifié et d'alumine.

1.4 . L'ALUMINE

1.4.1 PRODUCTION DE L'ALUMINE

La source principale d'alumine est la bauxite. La bauxite est une terre rouge présente principalement en Afrique, Amérique du Sud et Australie. L'alumine est extraite avec le procédé Bayer développé par le chimiste Karl Josef Bayer en 1887. Le procédé se divise en 7 étapes dont les plus importantes sont la digestion, la précipitation et la calcination.

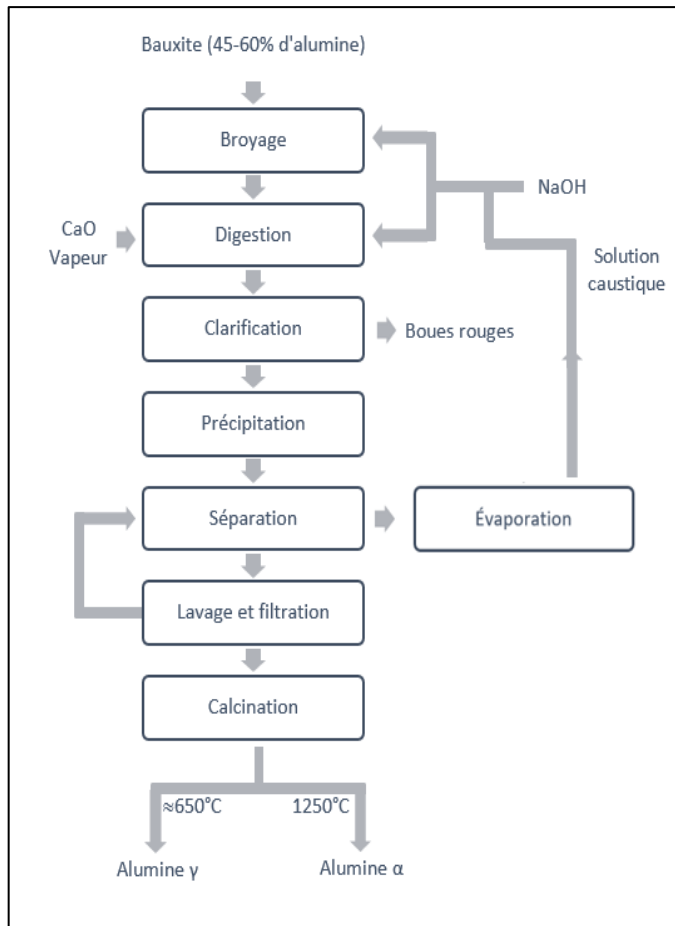


Figure 1-4 : Schéma illustrant les étapes principales du procédé Bayer
 Source : (Grjotheim & Welch, 1980), partiellement modifié

1.4.2 CARACTÉRISATION DE L'ALUMINE

Les particules d'alumine ont un diamètre moyen de 100 μm variant de 25 à 150 μm . La taille des particules a un impact sur les phénomènes physiques présents. Si les particules sont petites, leur capacité à flotter ou rester dans l'air est accrue. Elles ont une plus grande capacité à s'agglomérer comme la farine, ce qui limite la dispersion dans le bain. Si leur proportion est plus importante, le nombre de résistances thermiques de contact augmente et la chaleur se diffuse moins rapidement dans l'agglomérat mais elles vont se dissoudre plus rapidement quand elles seront entourées de bain. Les

particules de plus grosse taille mettront plus de temps à se dissoudre. Si leur taille est trop importante, elles peuvent atteindre l'interface bain-métal, voir le fond de la cuve. La taille des particules est dépendante de la température atteinte lors de la dernière étape du procédé Bayer, la calcination. Plus la température est importante, plus les particules vont être fines.

La densité de l'alumine est caractérisée selon deux principes : la densité réelle et la densité apparente. La densité réelle correspond à la densité du matériau solide pure, sans pore. Celle-ci varie entre 3200 kg/m^3 et 3900 kg/m^3 suivant la forme cristalline de l'alumine (alpha : 3900 kg/m^3 ; theta : 3600 kg/m^3 ; gamma : 3200 kg/m^3 à 3700 kg/m^3). La densité apparente correspond à la densité pour un matériau granulaire en tenant compte des pores intraparticulaires et de l'espace présent entre chaque particule (interparticulaire). La densité apparente de l'alumine est comprise entre 900 et 1150 kg/m^3 .

Deux phases de cristallisation de l'alumine sont généralement considérées comme importantes pour l'industrie, la phase gamma et la phase alpha. La concentration de la phase alpha dans l'alumine utilisée en électrolyse d'aluminium, se situe entre 10% et 30%. Le rapport massique est fonction de la température de calcination dans le procédé Bayer. Lors de l'injection, l'alumine atteint la température de changement de phase gamma vers alpha avant de se dissoudre dans le bain. La recristallisation ainsi engendrée causera la formation de plaquettes au pourtour des particules; ce qui va augmenter la cohésion entre les particules.

La forme des particules d'un matériau granulaire est caractérisée par deux notions, la rondeur et la sphéricité (Hryciw, Zheng, & Shetler, 2016). La

rondeur, R , caractérise la courbure des coins des particules et est déterminée par l'équation 1.2 suivante :

$$R_{rond} = \frac{\sum_{i=1}^N r_{rondeur\ i}}{r_{rondeur\ max} \cdot N} \quad 1.2$$

Où r_i , r_{max} et N sont respectivement le rayon du coin mesuré, le rayon du plus grand cercle interne à la particule et le nombre de coins mesurés. La mesure de la rondeur d'une particule d'alumine a été réalisée sur la Figure 1-5 et donne une valeur estimée de 0.39².

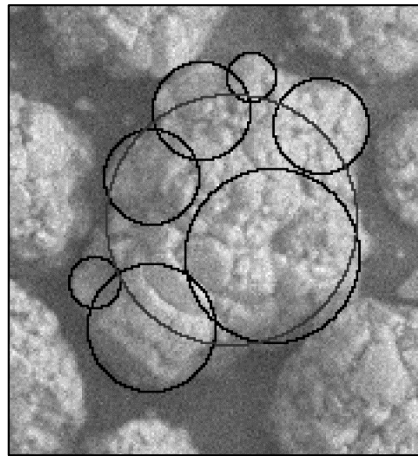


Figure 1-5 : Image prise au microscope pour mesurer la rondeur d'une particule d'alumine
Source : Photo prise par Jonathan Alarie

² Aucune étude quantitative n'a été réalisée sur la rondeur et la sphéricité de l'alumine. Cette mesure est à titre indicatif pour justifier le choix de considérer les particules sphériques dans le modèle mathématique.

La sphéricité définie si la forme générale de la particule est similaire à une sphère. L'équation 1.3 permet de calculer la sphéricité :

$$S = \frac{d_2}{d_1} \quad 1.3$$

Avec d_1 et d_2 sont le plus grand et le plus petit diamètre de la particule dans deux directions perpendiculaires. La mesure est représentée sur la Figure 1-6 et donne la valeur estimée de 0.74.

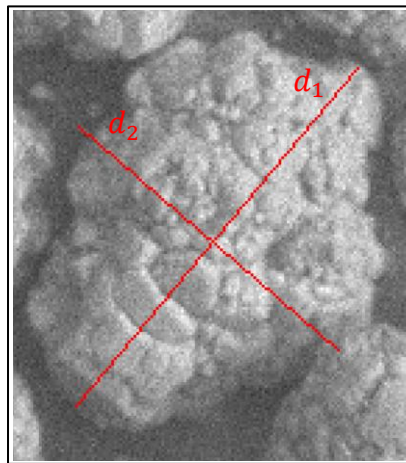


Figure 1-6 : Mesure de la sphéricité d'une particule d'alumine
Source : Photo prise par Jonathan Alarie

Hryciw *et al.* (Hryciw *et al.*, 2016) présente une interprétation graphique de la rondeur et de la sphéricité obtenues avec la Figure 1-7. Ces mesures permettent de comprendre que l'alumine peut être considérée comme une sphère avec une rugosité de surface plus importante.

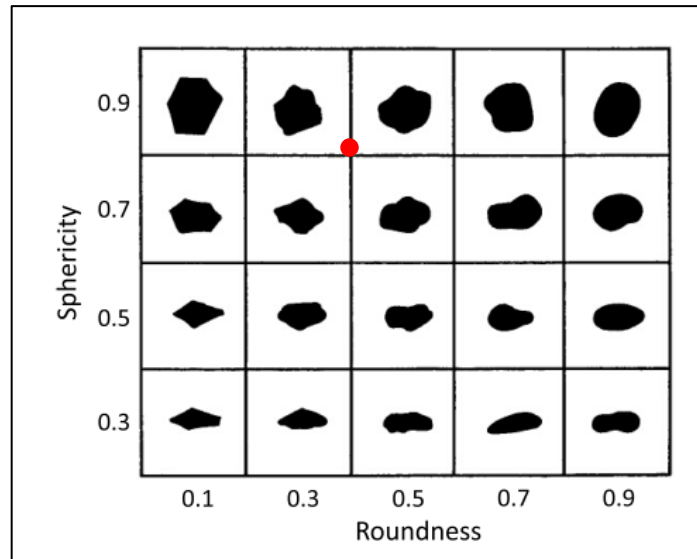


Figure 1-7 : Caractérisation géométrique des particules d'alumine en fonction de la sphéricité et de la rondeur

Source : (Hryciw *et al.*, 2016)

1.4.3 LA TENEUR EN EAU DANS L'ALUMINE

La présence d'humidité dans l'alumine est caractérisée par les paramètres LOI, « Loss on ignition » et MOI, « Moisture On Ignition ». Ces paramètres sont définis par la perte de masse durant le chauffage généré par l'évaporation de l'eau. L'humidité présente dans l'alumine peut être différenciée sous deux classes, l'eau adsorbée et l'eau absorbée. La première correspond à l'eau présente sur le pourtour de la particule. Elle s'évapore quand l'alumine est à une température inférieure à 300°C (LOI). La seconde correspond à l'eau présente dans les pores des particules par capillarité. La température de l'alumine doit être supérieure à 300°C et l'évaporation va être graduelle jusqu'à la température du bain, 960°C (MOI). Une autre source d'eau dans l'alumine peut être attribuée aux hydroxyles résiduels. La gibbsite ($\text{Al}(\text{OH})_3$) et la boehmite (AlOOH) peuvent être présentes dans l'alumine, en raison d'un processus de calcination incomplet dans le processus Bayer.

La présence de l'eau entraîne une production de fluorure d'hydrogène (HF) lors de l'injection d'alumine, ce qui constitue un danger pour le personnel et l'environnement. De plus, une teneur en eau trop importante nécessite une certaine énergie pour s'évaporer et impacte donc l'épaisseur de la gelée formée autour du radeau. En contrepartie, même si une faible teneur en humidité dans l'alumine semble bénéfique, ce n'est pas complètement le cas car l'évaporation de l'eau crée un brassage forcé du liquide permettant une meilleure répartition de l'alumine sur la surface du bain et donc une meilleure dissolution.

1.5 . LE BAIN

1.5.1 LA COMPOSITION

Le bain électrolytique est principalement composé de cryolite, seul solvant connu de l'alumine. Le point de fusion de la cryolite pure est d'environ 1010°C mais des additifs peuvent être utilisés pour diminuer cette température de fusion. Cela permet de diminuer la température d'opération des cuves d'électrolyse, mais influence considérablement la concentration de solubilité maximale ainsi que le taux de dissolution de l'alumine.

1.5.2 LA TEMPÉRATURE

La température d'opération de la cuve doit être supérieure à la température de changement de phase du bain. Cet écart est caractérisé comme étant la « surchauffe ». Une forte surchauffe permet de limiter la formation de radeau, mais influencera la rentabilité de la production de

l'aluminium par des pertes énergétiques plus importantes. La surchauffe couramment rencontrée dans l'industrie est de 10°C (Walker, 1993).

La température de solidification du bain est dépendante de sa composition chimique et donc, de sa teneur en alumine. La concentration au contour d'un radeau d'alumine peut être considérée comme la concentration de saturation. La solidification du bain ne se réalise pas à une température fixe comme pour l'eau, mais sur une plage de température allant de 700 à 950°C comme le montre la Figure 1-8. Cette plage de température est présente car les constituants du bain se solidifient à des températures différentes.

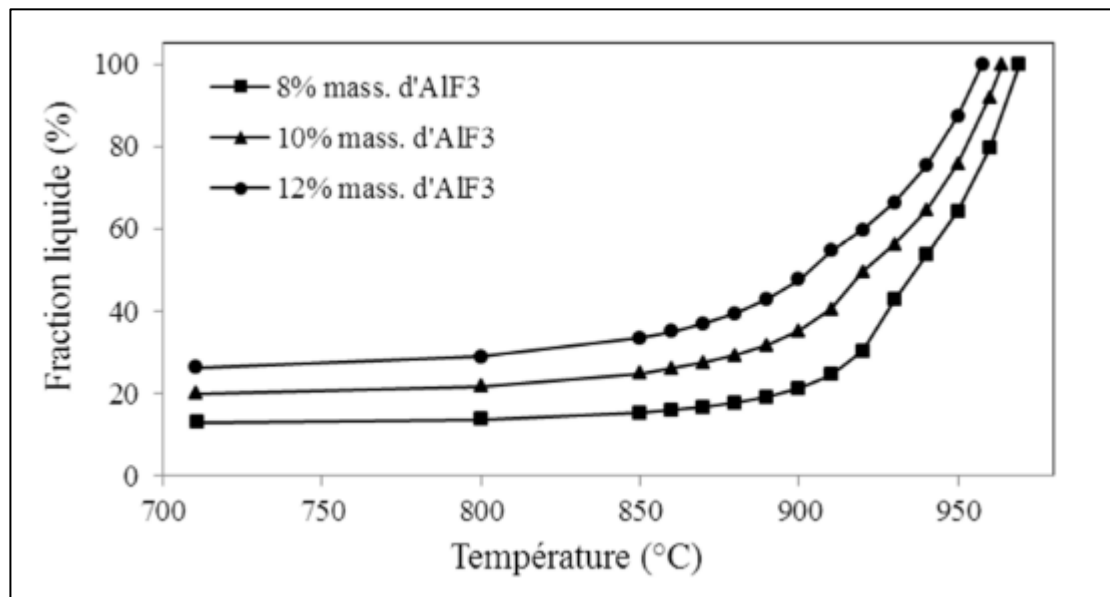


Figure 1-8 : Fraction liquide en % massique en fonction de la température et de la teneur en fluorure d'aluminium
Source : (Dassylva-Raymond, 2015)

Ces résultats ont été obtenus avec le logiciel FactSage®. La fraction liquide devrait tendre vers 0 dans la réalité. Le bain peut être considéré à l'état solide pour une fraction liquide inférieure à 40%, car la structure est suffisante

pour considérer le bain figé. Durant la transition, le bain prend l'apparence d'un liquide de plus en plus visqueux.

1.5.3 LA DENSITÉ

La densité du bain est fonction de la température et de la composition du bain et peut-être déterminée avec l'équation suivante (Kvande & Rorvik, 1985) :

$$\begin{aligned} \rho_{bain} = & 2.64 - 0.0008 T[^\circ C] + 0.18 (ratio\ mass\ NaF/AlF_3) & 1.4 \\ & - 0.008(mass\%Al_2O_3) + 0.005(mass\%CaF_2) \\ & + 0.008(mass\%MgF_2) - 0.004(mass\%LiF) \end{aligned}$$

L'équation montre que la densité du bain diminue avec l'augmentation de la teneur en alumine bien que l'alumine ait une densité supérieure au bain. Cette diminution implique une stagnation du bain saturé en dessous du radeau si aucun écoulement n'est présent dans le liquide.

La densité du bain (2100 kg/m³) et de l'aluminium (2300 kg/m³) sont semblables. La densité du bain ne doit pas être trop importante pour ne pas impacter l'équilibre de la cuve et éviter la remontée d'aluminium. L'effet de la température constitue un risque important sur l'inversion bain-métal dans le cas d'un arrêt prolongé de la cuve.

1.6 . LA DISSOLUTION DE L'ALUMINE

La dissolution de l'alumine est gouvernée par les conditions d'opération des cuves soit la surchauffe, la composition du bain, l'intensité du brassage et la teneur en alumine dissoute. Le calcul du taux de dissolution ($\dot{m}_{Al_2O_3}$) décrite par l'équation (1.5) est influencée par un coefficient de transfert de masse $k_{Al_2O_3}$ [kg/m²s], la surface d'échange (A) et la différence entre concentration massique d'alumine dans le bain ($c_{Al_2O_3}$) et la concentration massique de saturation ($c_{sat Al_2O_3}$). La teneur de saturation est située entre 6 %mass et 7 % mass selon la composition du bain.

$$\dot{m}_{Al_2O_3} = k_{Al_2O_3} A(c_{Al_2O_3} - c_{sat Al_2O_3}) \quad 1.5$$

Le coefficient de transfert de masse est influencé par la composition du bain, la température et le brassage présent dans le bain. Ce brassage est créé par la remontée des bulles et par l'écoulement dans la cuve engendrée par les forces magnétiques.

La surface d'échange est également un paramètre important d'où la nécessité la dispersion maximale de l'alumine à la surface du bain ou dans le bain sous la forme de particules individuelles. Les agrégats limitent la surface d'échange.

La teneur de saturation en alumine du bain est fonction de la composition du bain.

La méthode d'injection aura un impact sur la dispersion de l'alumine et donc sur l'efficacité de la dissolution. L'utilisation de plusieurs injecteurs dans les cuves est privilégiée pour permettre une répartition plus homogène. La

quantité injectée influencera la taille des agrégats et donc la surface d'échange. La notion d'agrégat est définie dans le paragraphe suivant.

1.7 . STRUCTURE DES AGRÉGATS

Lors de l'injection d'alumine, deux phénomènes prépondérants vont engendrer la formation d'un premier agrégat, communément appelé l'agrégat mère ou le radeau. Ces deux phénomènes sont le changement de phase du bain et le frittage. Le bain possède une surchauffe typique variant entre 2°C à 15°C. Lorsque la surchauffe atteint une valeur nulle (0°C), le liquidus est atteint et les premiers cristaux de bain solide apparaissent. L'alumine étant injectée à une température comprise entre 100°C et 150°C, son injection va refroidir le volume de bain situé autour des particules sous la température de changement de phase du bain. Une quantité considérable de bain passera de l'état liquide à l'état solide. Ce bain solidifié formera une gelée sous la forme d'une coquille autour du radeau empêchant les particules d'alumine de se disperser et de se dissoudre dans le bain. Au fil de plusieurs minutes, des morceaux du radeau peuvent se séparer et couler pour former des « agrégats enfants ». Si le bain solidifié est suffisamment important pour empêcher la désintégration rapide de l'agrégat et augmenter sa densité, celui-ci pourra couler sous la surface et atteindre l'interface bain-métal, voir la surface de la cathode. Ce dépôt sur la cathode correspond aux boues d'alumine et doit être évité pour le bienfait du procédé. Ces boues impactent le passage du courant et diminuent l'efficacité de la cuve.

Différentes strates distinctes peuvent être observées dans le radeau comme décrit avec la Figure 1-9. Lors de l'injection, le bain est à une température supérieure à celle du liquidus, ce qui lui permet de pénétrer entre les grains d'alumine, situés sur la partie inférieure du radeau, avant de se solidifier. Ce liquide solidifié entre les particules va les maintenir ensemble et les empêcher de se disperser et de se dissoudre dans le bain. La masse thermique du radeau est suffisamment importante pour solidifier une couche de bain autour du radeau.

Lors de la montée en température du radeau, l'alumine va se recristalliser de gamma en alpha. Ce phénomène commence à apparaître entre 700°C et 750°C et va provoquer l'apparition des plaquettes sur le pourtour des particules et dans les particules. Ces excroissances vont créer une cohésion entre les particules par l'apparition de point de soudure, appelée le frittage. Les plaquettes vont augmenter la surface de contacts entre les particules et vont donc augmenter la rugosité et aider à maintenir les particules entre elles.

La dernière couche se trouve sur la partie supérieure du radeau. Les particules d'alumine ne sont pas imprégnées de bain et leur température est faible. Les particules sont indépendantes les unes des autres sous la forme d'un matériau granulaire.

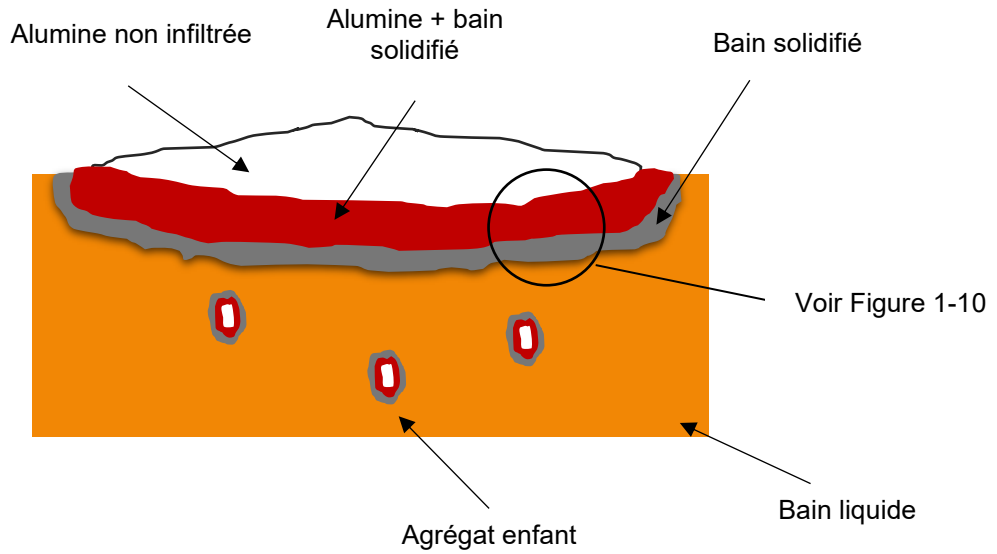


Figure 1-9 : Schéma de la structure d'un radeau

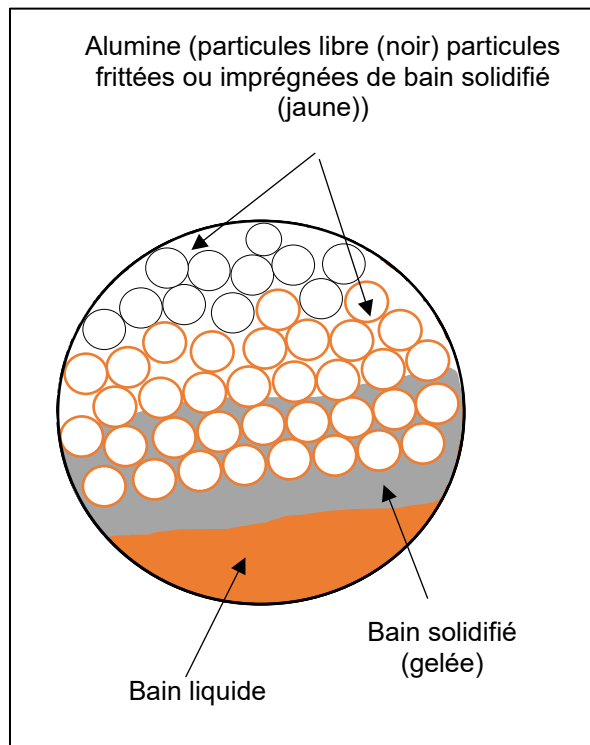


Figure 1-10 : Zoom sur la structure d'un radeau

Les radeaux observés dans les cuves d'électrolyse sont différents. Le brassage engendré par les bulles de gaz et les vagues vont modifier la

structure du radeau. Des éclaboussures de bain vont permettre de recouvrir le radeau d'une croute de bain. Le brassage va permettre également de fracturer le radeau en plusieurs morceaux. L'écoulement du bain présent dans les cuves va permettre d'augmenter le déplacement du radeau ce qui va augmenter les collisions entre les morceaux de radeaux et les parois (anodes, parois latérales de la cuve).

1.8 . PROBLÉMATIQUE

La dissolution de l'alumine est une étape clé pour optimiser la production d'aluminium. Une dispersion et une dissolution rapide permettent une concentration plus homogène et une production efficace. La formation d'agrégat diminue le taux de dissolution et favorise leur présence à l'interface bain-métal et à la surface de la cathode. La compréhension de la formation et de la désintégration des agrégats permet d'optimiser le taux de dissolution et participe à l'augmentation de la stabilité de la cuve.

1.9 . ORIGINALITÉ

Beaucoup de recherches (Alarie *et al.*, 2021; Alarie *et al.*, 2020; Sindre Engzelius Gylver *et al.*, 2019; Poncsák *et al.*, 2019; Rolseth & Thonstad, 1991; Sindre Engzelius Gylver, 2019; Thonstad, 2001) portent sur l'étude de l'injection de l'alumine et la compréhension des phénomènes thermophysicochimiques présents. Plusieurs modèles mathématiques (Dassylva-Raymond, 2015; Einarsrud, Gylver, & Manger, 2018; Hou *et al.*, 2019; Csilla Kaszas *et al.*, 2020; S.-y. Li, Li, Hou, Li, & Cheng, 2019) étudient

la dispersion de l'alumine dans les cuves d'électrolyse d'aluminium. Mais aucun modèle mathématique n'a été publié où l'intérêt est de suivre l'évolution des particules d'alumine individuelles durant l'injection.

Le sujet de la thèse étudie l'injection d'une poudre dans un liquide, en prenant en considération les effets provenant des échanges thermiques, du changement de phase et du transfert de masse. Plusieurs modèles mathématiques dans le domaine de la recherche générale étudient l'écoulement de particule dans un liquide, mais ne tiennent pas compte d'autant de phénomènes.

Le développement de ce modèle va permettre une meilleure compréhension de l'injection de l'alumine tout en démontrant le potentiel d'une nouvelle méthode de simulation pour des systèmes aussi complexes comprenant l'injection de poudre dans un liquide.

1.10 . OBJECTIFS

1.10.1 OBJECTIF PRINCIPAL

L'objectif de ce doctorat est de développer un modèle mathématique pour suivre les particules d'alumine de l'injection à leur dissolution complète. Le modèle regroupera tous les mécanismes présents : contacts mécaniques, écoulement de fluide, transfert de chaleur, changement de phase, transfert de masse et forces de cohésions (frittage). Ce modèle permettra d'identifier les phénomènes dominants qui exercent une influence sur la dissolution d'alumine. Une étude paramétrique sera réalisée pour déterminer les

conditions optimales et déterminer l'influence de ces paramètres sur la structure du radeau.

1.10.2 OBJECTIF SECONDAIRE

Le développement d'un modèle mathématique nécessite de validations expérimentales pour calibrer le modèle et justifier les résultats. Ce doctorat présente également le développement des méthodes de validation analogue à basse température. Ces expériences ont pour objectif d'apporter de la compréhension sur les phénomènes thermiques, mécaniques et chimiques présents lors de l'injection d'un matériau granulaire dans un liquide avec changement de phase.

CHAPITRE 2

REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 . FORMATION DES AGRÉGATS

Les agrégats sont depuis très longtemps étudiés, car leur formation retarde fortement la dissolution et la dispersion de l'alumine. Les premiers auteurs à avoir défini la formation des agrégats sont Rolseth et Thonstad (Rolseth & Thonstad, 1991). Ils définissent l'agrégat comme une combinaison de couches de bain solidifié (gelée) et de la transformation γ - α de l'alumine. Østbø (Østbø & Niels, 2002) a développé une méthode pour produire des radeaux et observer les différentes couches dans les agrégats. Le schéma de la Figure 2-1 représente la géométrie obtenue après l'immersion dans le bain d'une canette en aluminium rempli d'alumine.

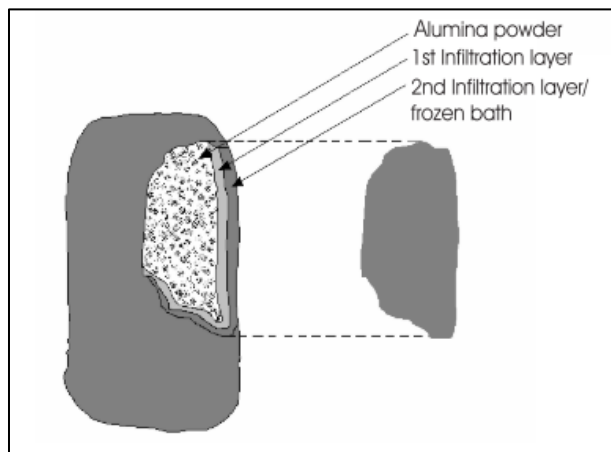


Figure 2-1 Schéma représentant un agrégat produit en laboratoire par Østbø
Source : (Østbø & Niels, 2002)

D'autres auteurs ont publié plus récemment des observations similaires, mais avec des méthodes plus proches des conditions rencontrées dans une cuve d'électrolyse. Gylver *et al.* (Gylver, Solheim, Gudbrandsen, Follo, & Einarsrud, 2020) ont présenté le repêchage de radeau après l'injection de 4 grammes d'alumine dans des conditions de laboratoire.

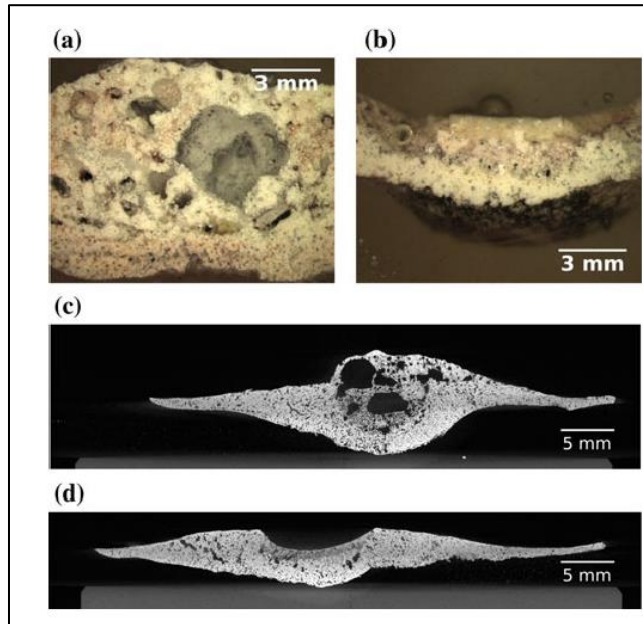


Figure 2-2 : Image de coupe de 4 radeaux d'alumine après un repêchage: (a) durée de flottaison : 300 s ; (b) durée de flottaison : 90 s ; (c) durée de flottaison : 60 s ; (d) durée de flottaison : 210 s

Source : (Gylver *et al.*, 2020) (Used with permission of The Minerals, Metals & Materials Society)

Les photos des radeaux montrent différentes strates comme mentionnées précédemment, mais avec une géométrie plus similaire à des radeaux observés dans les cuves d'électrolyses (Sindre Engzelius Gylver, 2019). Ces photos montrent également la formation de pores dans le radeau qui sont engendré par l'expulsion et l'expansion de produit gazeux, notamment les vapeurs d'eau.

Pour l'étude de l'infiltration du bain dans le radeau, Kaszas *et al.* (C. Kaszas, 2020) ont développé une méthode avec des disques d'alumine comprimés et mettent en évidence l'avancement du front du bain dans le matériau granulaire.

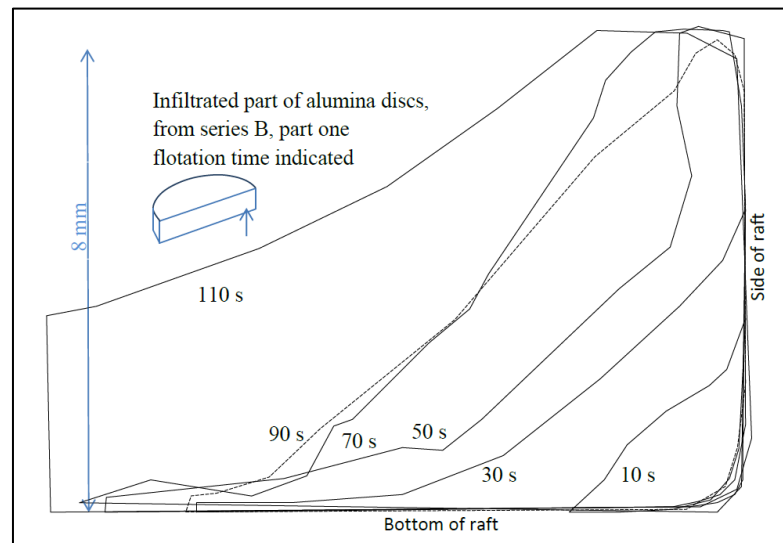


Figure 2-3 : Infiltration du bain dans un disque d'alumine comprimé
Source : (C. Kaszas, 2020)

Cette étude porte sur la montée en température du radeau. Les résultats indiquent que les particules d'alumine doivent être à une température supérieure à celle de la solidification du bain pour permettre l'imprégnation. L'évolution du bain présentée au sein du radeau se rapproche des observations de Gylver *et al.* (Gylver *et al.*, 2020) malgré l'utilisation d'une méthode différente pour la production du radeau.

Kaszas (C. Kaszas, 2020) a présenté une expérience pour mesurer l'évolution de la température sur la partie supérieure d'un radeau, encore une fois constitué d'un disque d'alumine comprimée. La mesure de la température est faite à l'aide d'une caméra thermique et la partie supérieure du radeau est peinte en noir pour limiter les variations de l'émissivité thermique. Cette

variable est primordiale pour bien évaluer la température de la surface étudiée par la caméra thermique. Comme il a été rapporté dans la thèse de Kaszas que l'émissivité thermique de l'alumine change avec la température, la peinture noire permettait une réduction des erreurs sur la mesure. Le résultat mesuré est présenté à la Figure 2-4.

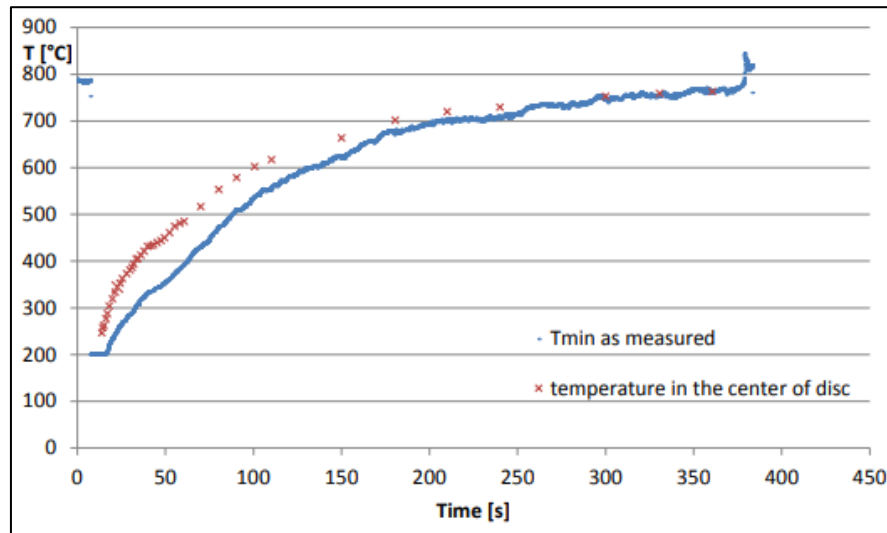


Figure 2-4 : Évolution de la température sur la partie supérieure d'un radeau à l'aide d'une caméra thermique
Source : (C. Kaszas, 2020)

Ces résultats ont servi de base pour la mise en place d'une expérimentation de validation présente dans la section 5.2.1.

Gylver *et al.* (S. E. Gylver *et al.*, 2019) ont également présenté une étude sur le repêchage de radeaux dans les cuves d'électrolyse. Cette recherche a étudié la structure ainsi que la composition dans les radeaux repêchés (Figure 2-5).

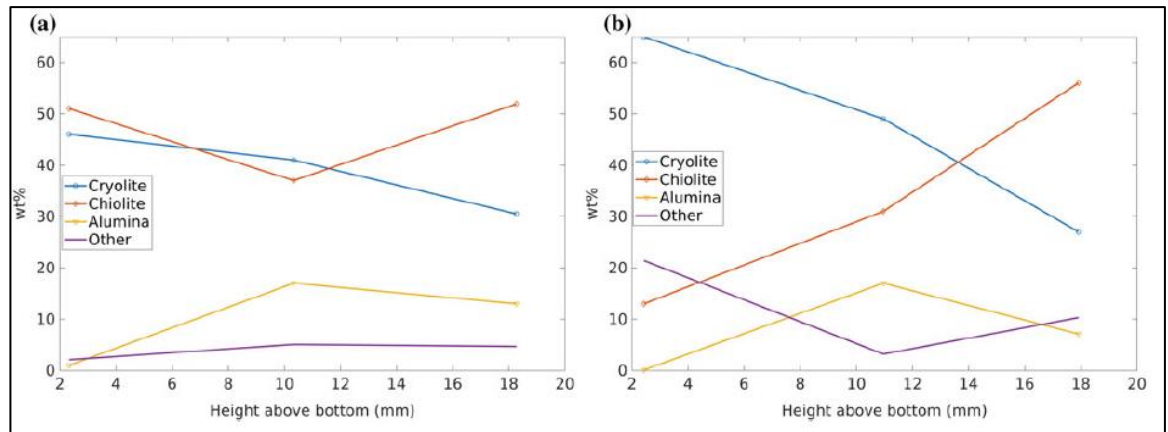


Figure 2-5 : Distribution de chaque phase en fonction de la position verticale pour deux radeaux repêchés
 Source : (S. E. Gylver *et al.*, 2019) (Used with permission of The Minerals, Metals & Materials Society)

Ces résultats montrent une importante proportion de bain électrolytique dans toute l'épaisseur du radeau. La présence d'alumine sur la partie inférieure est nulle comme observée avec les radeaux produits en laboratoire.

La présence de strate dans le radeau de laboratoire n'est pas présente dans les radeaux produits en usine. Cette conséquence pourrait être produite par la présence d'un brassage plus important dans les cuves d'électrolyses. Les bulles et les vagues permettent la projection de bain liquide sur la surface supérieure du radeau.

2.2 . MODÈLES MATHÉMATIQUES

2.2.1 SIMULATION DU TRANSPORT DE L'ALUMINE DANS LES CUVES

Une grande partie de la littérature s'intéresse à la dispersion de l'alumine dans les cuves (Dion, 2018; Hou *et al.*, 2019; S.-y. Li *et al.*, 2019; Zhan, Li, Zhou, Yang, & Zhou, 2014; Zhang, Yang, Zhang, Li, & Xu, 2014). Le

transport de l'alumine est généré par l'écoulement du bain sous l'effet magnéto-hydrodynamique et par le déplacement des bulles autour des anodes. Zhan *et al.* ont développé un modèle basé sur le couplage des méthodes CFD (« *computational fluid dynamics* ») et TPPBM (« *two-particle phase population balance model* ») pour observer le transport de l'alumine dans la cuve d'électrolyse. La Figure 2-6 montre un de leur résultat obtenu.

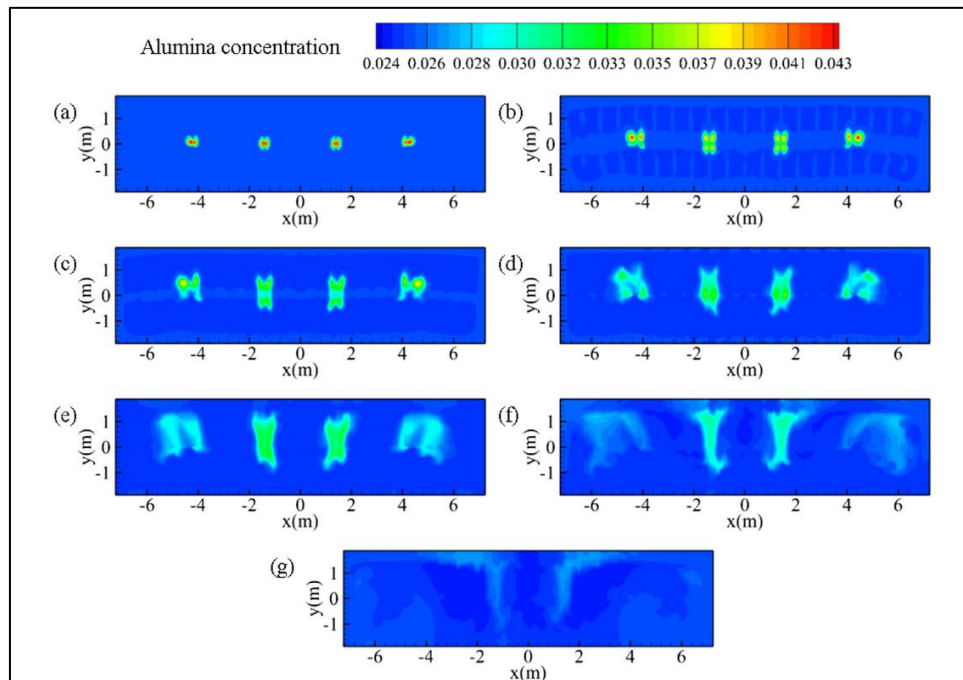


Figure 2-6 : Distribution de la concentration d'alumine dans un plan horizontal ($z = 0.225$ m) au milieu de la distance anode-cathode à différents temps : (a) 2 s, (b) 5 s, (c) 10 s, (d) 20 s, (e) 40 s, (f) 80 s, and (g) 144s.
Source : (Zhan *et al.*, 2014)

Ces résultats montrent que la dispersion de l'alumine est très rapide et que celle-ci se dissout principalement dans les zones d'injection avant de se disperser graduellement. Le transport de l'alumine est réalisé par diffusion et brassage convectif. Les écoulements dans le bain sont gouvernés par le transport des bulles générées avec l'électrolyse au niveau de l'anode et par les forces magnétiques.

Hou *et al.* (Hou *et al.*, 2019) présentent un résumé de plusieurs publications sur la dissolution de l'alumine. Ils y comparent leurs résultats obtenus numériquement avec des données obtenues expérimentalement de trois auteurs externes (Figure 2-7).

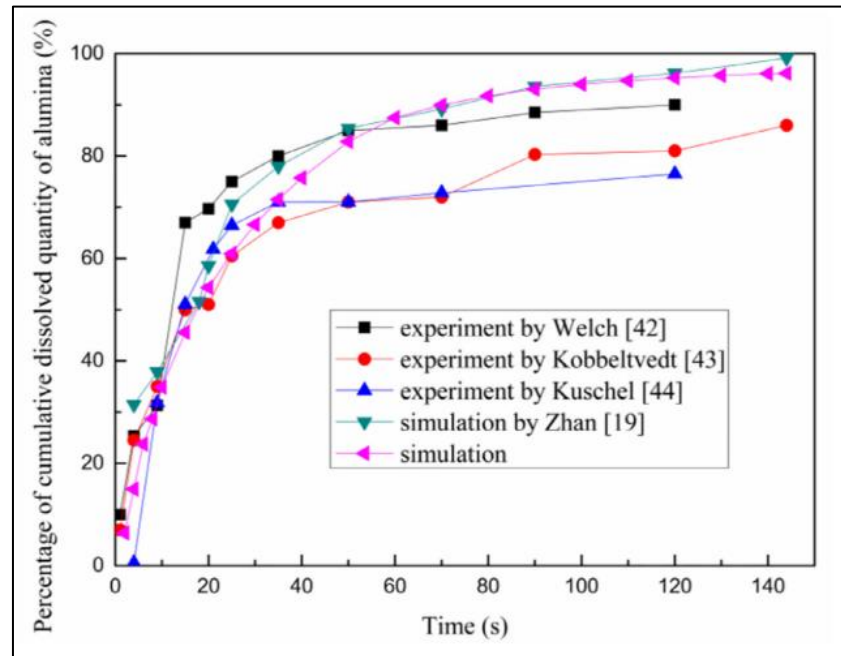


Figure 2-7 : Comparaison entre les courbes de dissolution de l'alumine obtenues par simulations et expériences
Source : (Hou *et al.*, 2019).

Le graphique montre une dissolution très importante et très rapide après l'injection. D'après les expériences en laboratoire réalisées par Gylver *et al.* (Gylver *et al.*, 2020) présentée précédemment, le radeau devrait résister un temps beaucoup plus long en surface du bain. La dissolution semble trop rapide dans les travaux de Hou *et al.* L'article de Welch *et al.* (Welch & Kuschel, 2007) ne donne pas assez d'information pour comparer leurs mesures à des expériences réalisées dans une cuve d'électrolyse. La thèse de Kobbeltvedt (Kobbeltvedt, 1997) informe plus sur la méthode d'injection de l'alumine. Les courbes originelles de leurs résultats sont les suivantes :

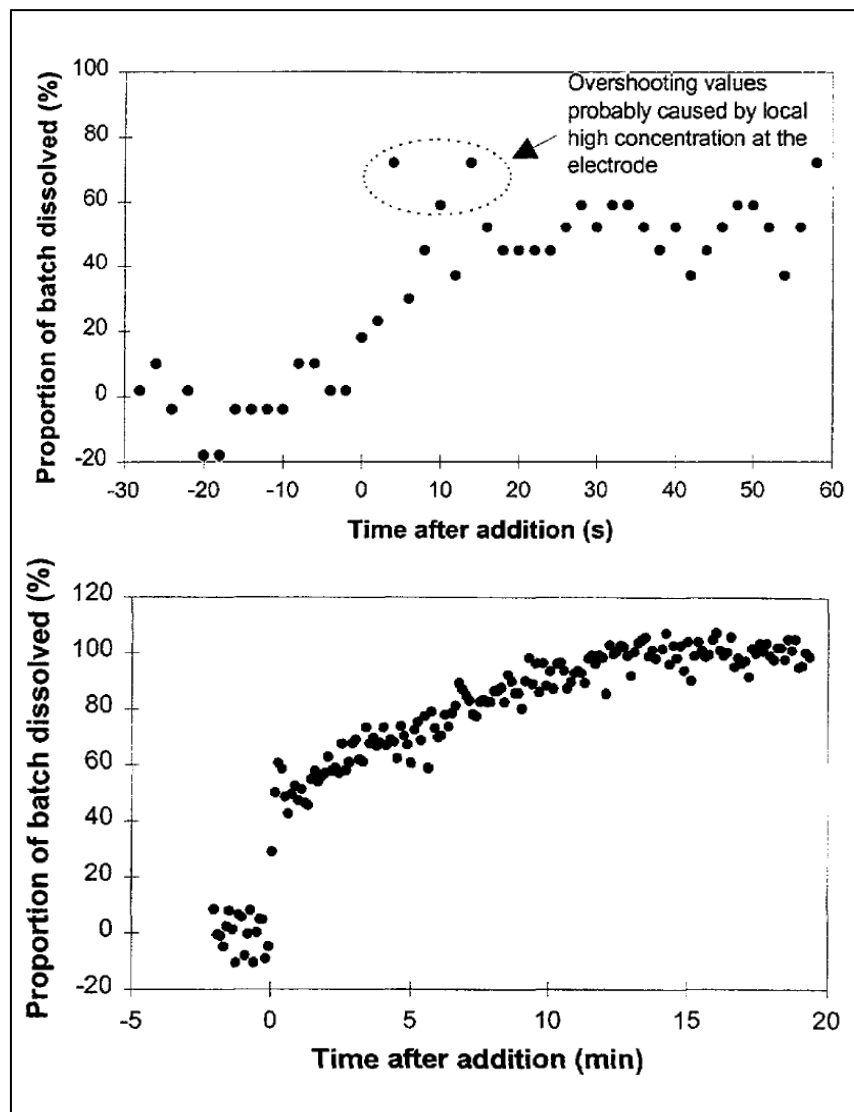


Figure 2-8 : Mesure dans les conditions de laboratoire de la proportion dissoute d'une injection d'alumine dans un bain d'électrolyse en fonction du temps
 Source : (Kobbeltvedt, 1997)

Les résultats obtenus par Hou *et al.* (Hou *et al.*, 2019) semblent plus optimistes sur le temps de dissolution d'une injection d'alumine. Les résultats sont comparés à des expériences de laboratoire qui ne peuvent tenir compte de toutes les conditions présentes dans les cuves d'électrolyse. De plus, la méthode de simulation utilisée ne tient pas compte de la formation des agrégats et du changement de phase dans le bain. Ce faisant, les résultats réels de la désintégration et de la diffusion qui en résulte dans la cuve peuvent

être impactés par la formation des radeaux. Sous l'effet des vagues et des courants dans le bain, le radeau a tendance à se déplacer et se fragmenter. C'est pourquoi, il est extrêmement important, pour illustrer la dispersion de l'alumine, de tenir compte de la désintégration du radeau et non seulement du transport de particules individuelles et de la diffusion de l'alumine dissoute.

2.2.2 MODÉLISATION DE LA FORMATION DU RADEAU ET DE L'INFILTRATION DU BAIN

Dassylva-Raymond *et al.* (Dassylva-Raymond *et al.*, 2014) et Kovács *et al.* (Kovács *et al.*, 2020) présentent les premiers modèles simulant la formation d'un radeau, du moment de l'injection, et allant jusqu'à la dissolution de l'alumine. La thèse de Dassylva-Raymond (Dassylva-Raymond, 2015) présente deux géométries étudiées, l'agglomérat sous forme d'une sphère et le radeau sous forme d'un disque. Chacun des modèles respectifs est simplifié pour résoudre les équations sous une seule dimension.

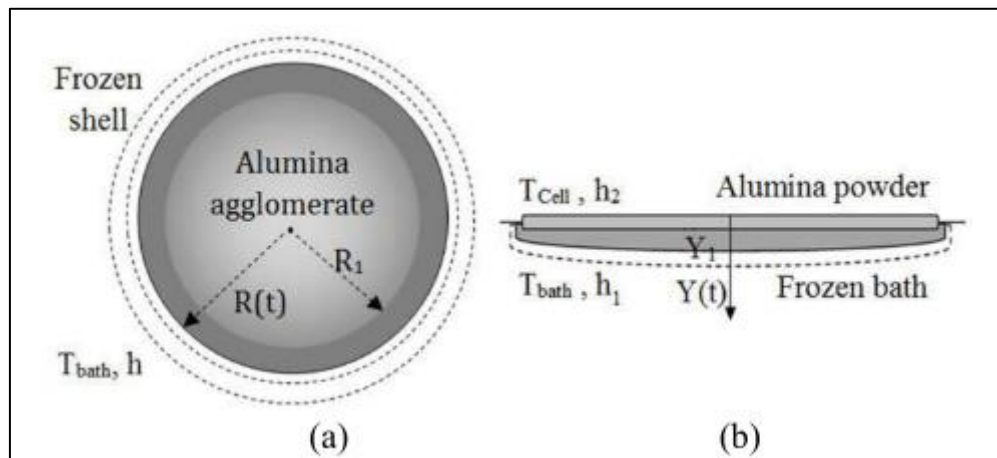


Figure 2-9 : Schémas représentant la géométrie pour un agglomérat (a) et un radeau (b)
Source : (Dassylva-Raymond, 2015)

L'avantage de ramener la formation du radeau et des agrégats à une seule dimension est de diminuer fortement le temps de calcul. Cette méthode permet de reproduire de façon précise les propriétés des matériaux sans générer d'erreur comme rencontrée avec des méthodes discrètes. Toutefois, cette méthode limite fortement les réponses étudiées au sein de l'analyse et par conséquent, freine le processus d'optimisation de l'injection d'alumine. De façon concrète, il sera impossible d'étudier l'évolution de la géométrie du radeau en fonction de différentes conditions d'injection avec cette méthode car l'épaisseur du radeau est considérée uniforme. Cette hypothèse est en opposition avec les radeaux expérimentaux produits par Gylver *et al.* (Sindre Engzelius Gylver *et al.*, 2019; Gylver *et al.*, 2020) qui montrent une irrégularité de la surface inférieure au radeau.

Kovács *et al.* (Kovács *et al.*, 2020) présente la Figure 2-10 pour montrer la philosophie de son modèle mathématique. Sa vision est proche des conditions de la formation d'un radeau et permet une meilleure compréhension.

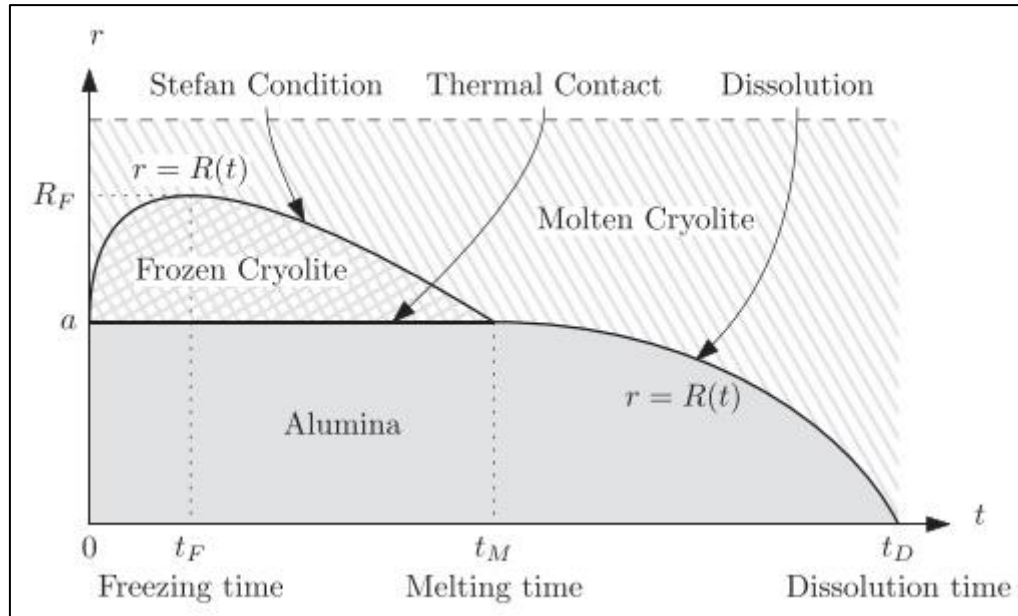


Figure 2-10 : Schéma représentant la conduction de chaleur et de la dissolution d'une particule d'alumine
Source : (Kovács *et al.*, 2020)

Le schéma montre la formation de la gelée de bain autour de la particule empêchant la dissolution. Après la disparition de ce bain solidifié, la dissolution commence et la taille de la particule d'alumine diminue. La principale différence avec la formation d'un radeau est la formation des « agrégats enfants ». Ces agrégats ont une durée de vie plus faible permettant la dissolution de l'alumine avant la disparition complète du bain solidifié. De plus, le bain solidifié disparaît de façon progressive permettant à certaines particules d'alumine d'être en contact avec du bain liquide et de se dissoudre.

Kaszas (C. Kaszas, 2020) présente un modèle en deux dimensions pour simuler les échanges thermiques entre le radeau et le bain et simuler la formation du bain solidifié comme le montre la Figure 2-11 . Le modèle permet de montrer l'évolution de la température dans un disque d'alumine comprimé (Figure 2-12).

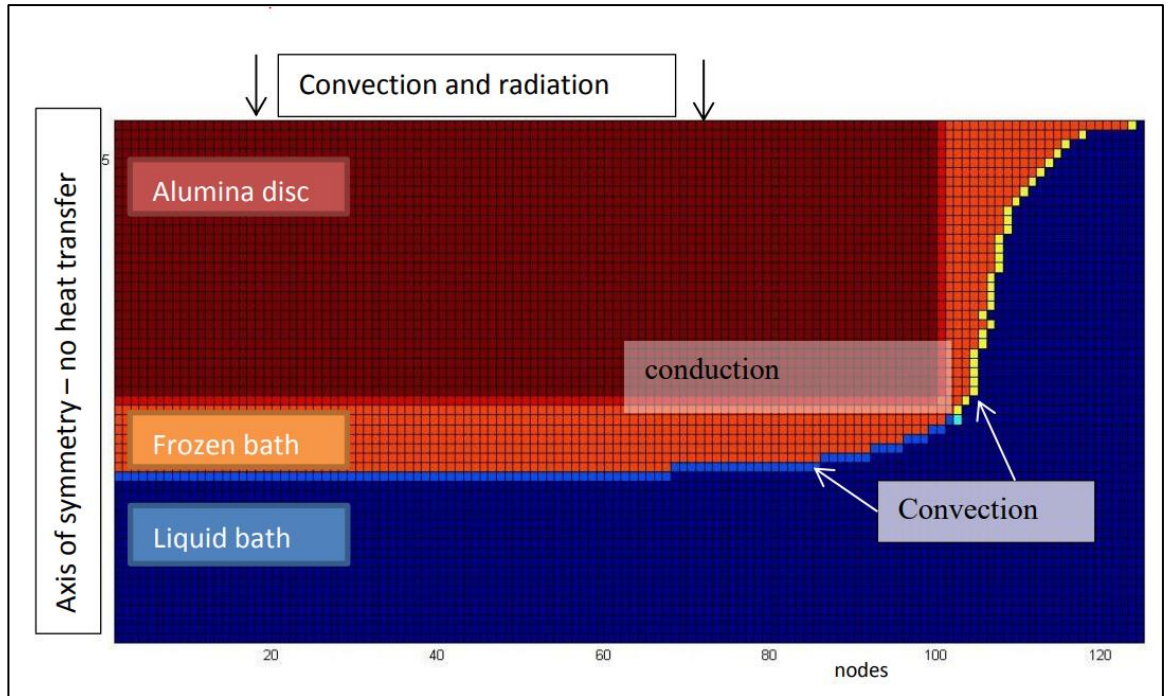


Figure 2-11 : Géométrie du disque d'alumine et de la gelée formée par les échanges thermiques du modèle développé par Kaszas
Source : (C. Kaszas, 2020)

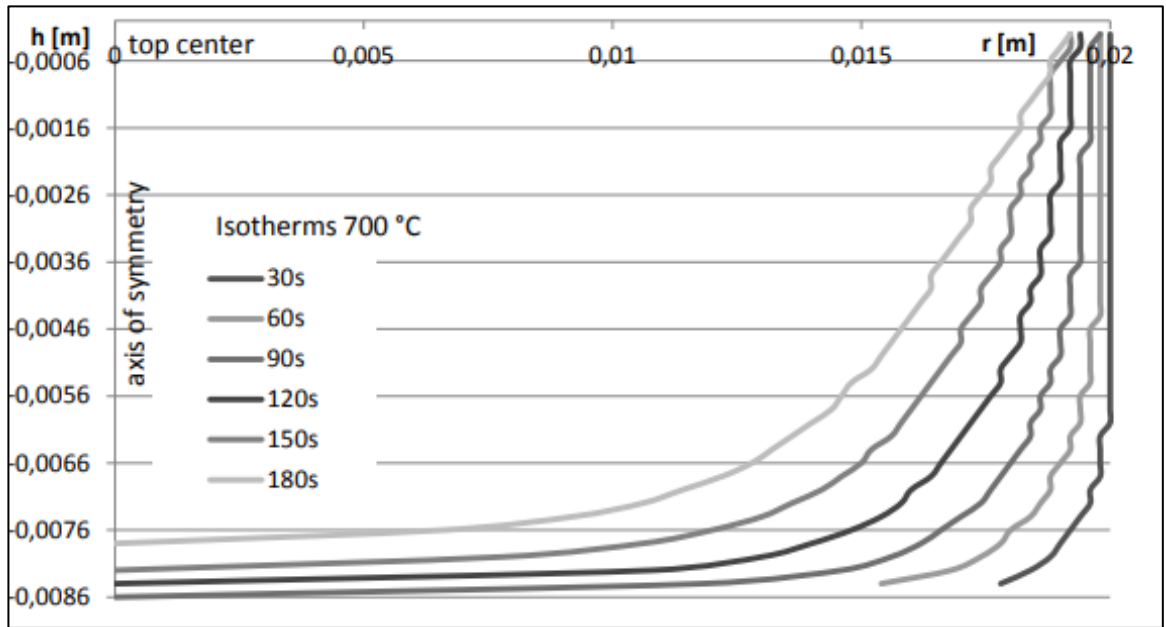


Figure 2-12 Isothermes de 700°C pour une surchauffe du bain de 35°C et la surface du disque à une température de 500°C
Source : (C. Kaszas, 2020)

La géométrie étant un disque, l'évolution de la température peut être différente que dans un radeau. Les radeaux présentés par Gylvers *et al.*

(Gylver *et al.*, 2020) montrent des épaisseurs variables et une surface inférieure irrégulière. Le transfert de chaleur peut être influencé et l'épaisseur de la gelée sera donc plus irrégulière.

2.2.3 MODÉLISATION DE L'INJECTION DE L'ALUMINE

Einarsrud *et al.* (Einarsrud *et al.*, 2018) sont les seuls à avoir développé un modèle mathématique pour simuler l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyse. Leur unique article, présentant leur modèle, montre le couplage entre la méthode des particules discrètes (DPM) et la méthode des volumes de fluide (VOF). Le résultat est montré sur la Figure 2-13.

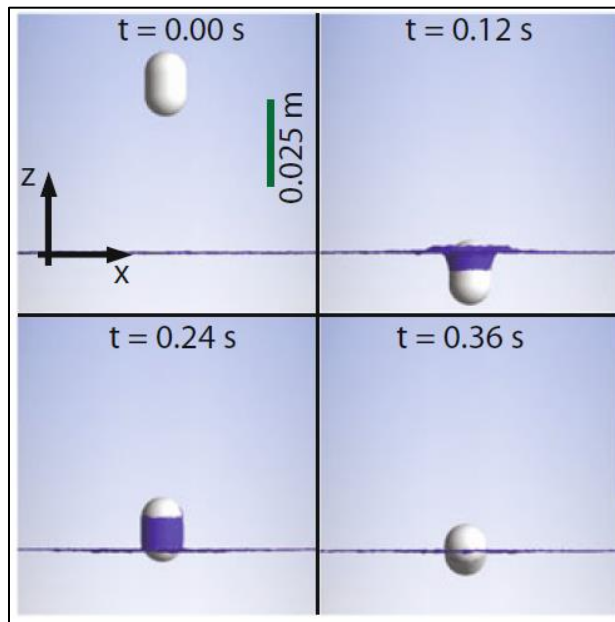


Figure 2-13: Couplage des méthodes VOF-DPM pour simuler l'injection de l'alumine dans le bain

Source : (Einarsrud *et al.*, 2018) (Used with permission of The Minerals, Metals & Materials Society)

La méthode des particules discrètes permet de simuler un radeau sous la forme d'une dose. La méthode VOF permet de simuler l'écoulement dans le liquide. Ces travaux illustrent bien le potentiel du couplage VOF-DPM pour

simuler l'injection de l'alumine. Cette simulation ne tient pas compte des échanges thermiques et du transfert de masse entre le radeau et le bain. Ces concepts physiques peuvent être implémentés facilement avec la méthodologie utilisée. La limite sera atteinte lors de l'ajout du changement de phase dans le bain. La méthode VOF est basée sur discrétisation du domaine d'étude avec un maillage qui se doit d'être fixe. Le changement de phase dans le liquide implique le mouvement du front de bain solidifié avec le radeau. Cette condition ne peut donc pas être prise en compte avec la méthode VOF.

De plus, une contrainte supplémentaire des travaux de Einarsrud *et al.* (Einarsrud et al., 2018) est que la modélisation du radeau doit comporter une géométrie fixe. Dans le cadre des travaux présentés dans cette thèse, l'objectif est de développer un modèle polyvalent permettant l'étude de changement apporté à méthode d'injection, ce qui influencera la géométrie du radeau et donc la rapidité avec laquelle l'alumine atteint la dissolution complète.

Après l'analyse de ces différents articles portant sur la simulation de l'injection de l'alumine, les méthodes de simulation de l'injection de l'alumine ne sont pas compatibles avec l'objectif de nos travaux. Le choix se porte sur l'utilisation des deux méthodes suivantes pour offrir une plus grande liberté dans le développement du modèle mathématique :

- La méthode des éléments discrets pour simuler les particules solides individuellement.
- La méthode « Smoothed-particle hydrodynamics » pour simuler le liquide. Cette méthode également discrète permettra de tenir compte

de la cohésion entre le bain solidifié et l'alumine. Le radeau sera donc libre de déplacement à la surface du bain.

2.2.4 MODÉLISATION MULTIPHASIQUE

La simulation des particules d'alumine lors de l'injection dans les cuves d'électrolyse est très peu présente dans la littérature. La littérature généralisée propre à chacune des deux méthodes, DEM et SPH, est beaucoup plus développée que si l'on s'intéresse exclusivement au problème d'injection de particules dans une cuve d'électrolyse. La plupart des ouvrages (B. Li, Ma, Yu, Chen, & Zhou, 2018; Norouzi, Zarghami, Sotudeh-Gharebagh, & Mostoufi, 2016; Wang *et al.*, 2012; Xu & Yu, 1997) intéressants par rapport à notre problématique traitent du couplage entre la DEM et la mécanique des fluides numérique (computational fluid dynamic, CFD) pour simuler les lits fluidisés. Le couplage de ces deux méthodes ressemble à la simulation proposée par Einarsrud *et al.* (Einarsrud *et al.*, 2018) présentée précédemment. Il existe toutefois une limitation importante à l'utilisation de la CFD lorsque l'on s'intéresse à la modélisation du changement de phase dans le bain.

Deux travaux publiés présentent un couplage entre les méthodes SPH et DEM (Guo, Morita, & Tobita, 2015; Sun, Sakai, & Yamada 2013) pour simuler le transport de particules au sein d'un liquide. Ces articles possèdent plusieurs similitudes avec l'objectif de cette thèse mais les phénomènes physiques présents en surface d'un liquide n'y sont pas intégrés. Dans le cas précis qui nous intéresse, la tension de surface joue un rôle majeur sur la

flottaison du radeau sur la surface du bain et donc se doit d'être considérée pour ces travaux.

La méthode présentée pour valider leur modèle consiste à l'utilisation d'un barrage retenant un mélange de particules et de liquide comme présenté avec la Figure 2-14.

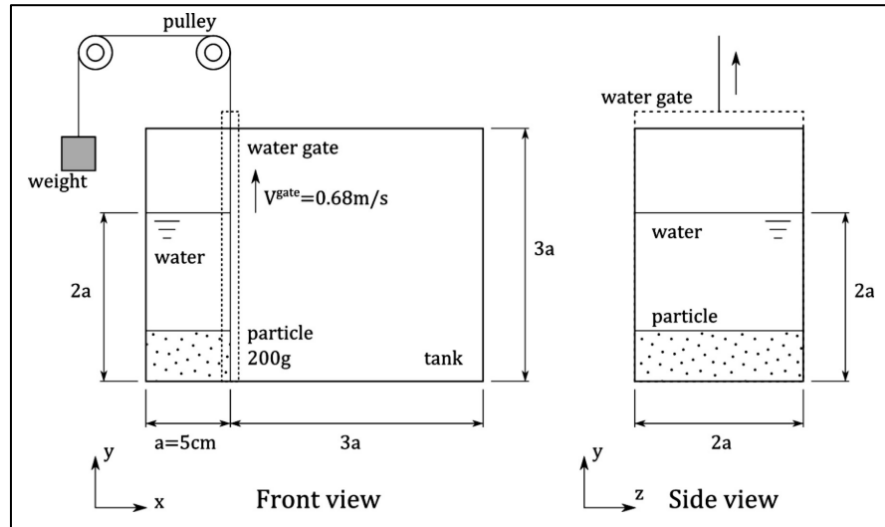


Figure 2-14 : Montage du test du barrage pour valider un modèle SPH-DEM
Source : (Sun *et al.*, 2013)

Le retrait du barrage libère le mélange. La simulation est comparée à la forme de la vague générée et la position des particules entraînées par l'écoulement tel qu'illustré ci-dessous.

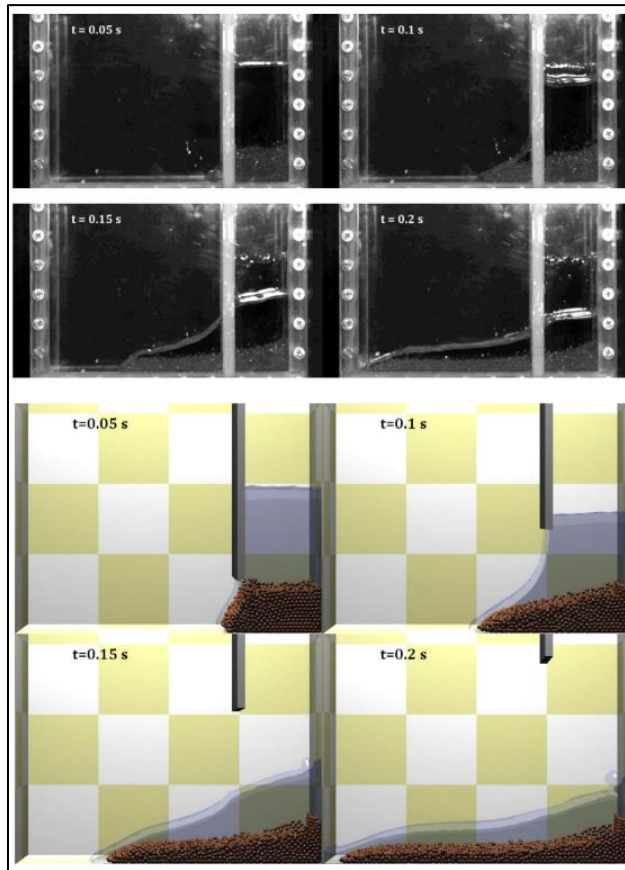


Figure 2-15 : Comparaison du test du barrage entre l'expérience et la simulation
 Source : (Sun *et al.*, 2013)

Ces résultats sont intéressants pour valider la démarche accomplie et démontrer le potentiel du couplage entre les méthodes SPH-DEM. Toutefois dans ce cas précis, la méthodologie utilisée tient compte de la teneur en liquide dans toute la zone d'étude. Les particules de liquide et de solide sont donc superposées dans la matrice considérée. Pour tenir compte du changement de phase dans nos travaux, le bain et les particules d'alumine doivent être majoritairement dans des milieux différents.

Gurupatham *et al.* (Gurupatham *et al.*, 2011) ont présentés leurs travaux visant l'étude du déplacement de particules à la surface d'un liquide. Ils montrent l'intégration de la tension de surface dans le calcul de la chute d'une

particule au sein d'un liquide immobile où il n'y a aucun écoulement. Cette absence d'écoulement est toutefois une lacune importante si l'on cherche à simuler les phénomènes avoisinants un radeau d'alumine comme présenté aux sections 2.2.1, 2.2.2 et 2.2.3 sachant que ce facteur est dominant dans le processus.

2.2.5 MODÉLISATION DU CHANGEMENT DE PHASE

Comme exprimé à plusieurs reprises précédemment, le changement de phase est une partie cruciale de la formation du radeau. Cet élément est donc primordial pour une bonne représentation de la réalité par le modèle mathématique. Plusieurs articles utilisant la méthode SPH modélisent le changement de phase (Dao & Lou, 2021; Farrokhpahan, Bussmann, & Mostaghimi, 2017; Russell, Souto-Iglesias, & Zohdi, 2018) en se basant sur la variation de la capacité thermique pour représenter la chaleur latente. La chaleur latente est l'énergie nécessaire durant le changement de phase d'un matériau. Il est possible d'estimer la transition en utilisant l'enthalpie de changement de phase du bain qui est de 550 kJ/kg pour une composition du bain standard (10% massique en excès d' AlF_3 , de 5% massique de CaF_2 et de 3% massique d' Al_2O_3) (Dassylva-Raymond, 2015).

Russel *et al.* (Russell *et al.*, 2018) présentent une étude de l'ajout d'additif par la fusion laser. Lors du passage d'un laser à la surface du métal, l'énergie projetée réchauffera la surface pour provoquer la fusion de celui-ci. Ils ont démontré, tel qu'illustré sur la figure ci-dessous, qu'il est possible avec la méthode SPH de reproduire l'écoulement dans la partie fondue du métal.

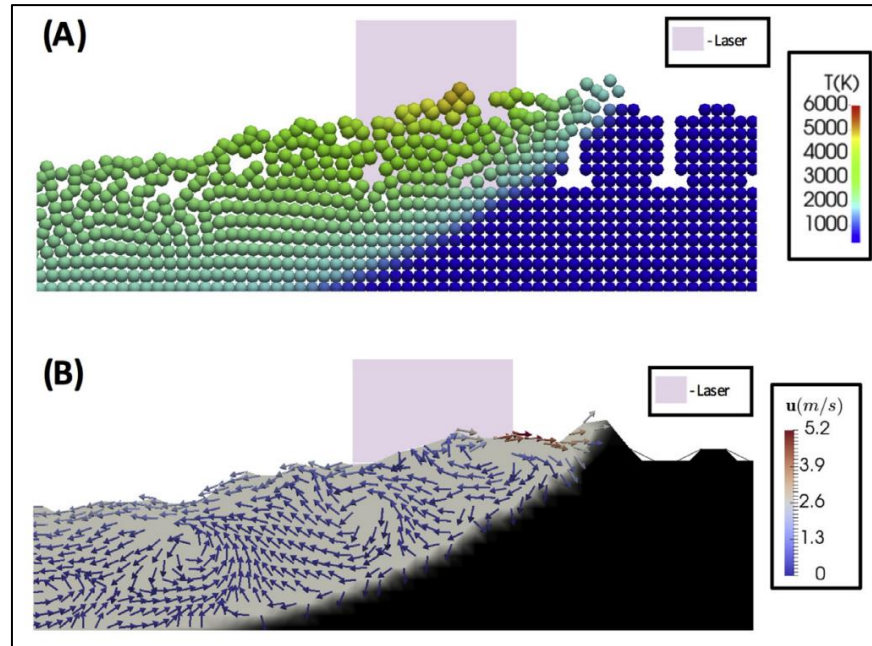


Figure 2-16 : Évolution de la température et de la vitesse d'écoulement dans le métal en fusion durant le passage du laser
 Source : (Russell *et al.*, 2018)

Lorsque le métal est à l'état solide, ils considèrent la vitesse de la particule SPH nulle ce qui simplifie considérablement la complexité de la simulation. Cet élément est distinct du modèle décrit dans cette thèse car le bain solidifié aura la possibilité de se déplacer avec le radeau. Par conséquent, la vitesse relative des particules SPH ne pourra pas être considérée comme nulle, de façon imposée, pour le bain solidifié.

Au sein des mêmes travaux, Russel *et al.* présentent également le changement de phase dans un intervalle de température du métal. Ce qui veut dire que le métal passe de l'état solide à liquide par un état transitoire comme le montre la figure suivante :

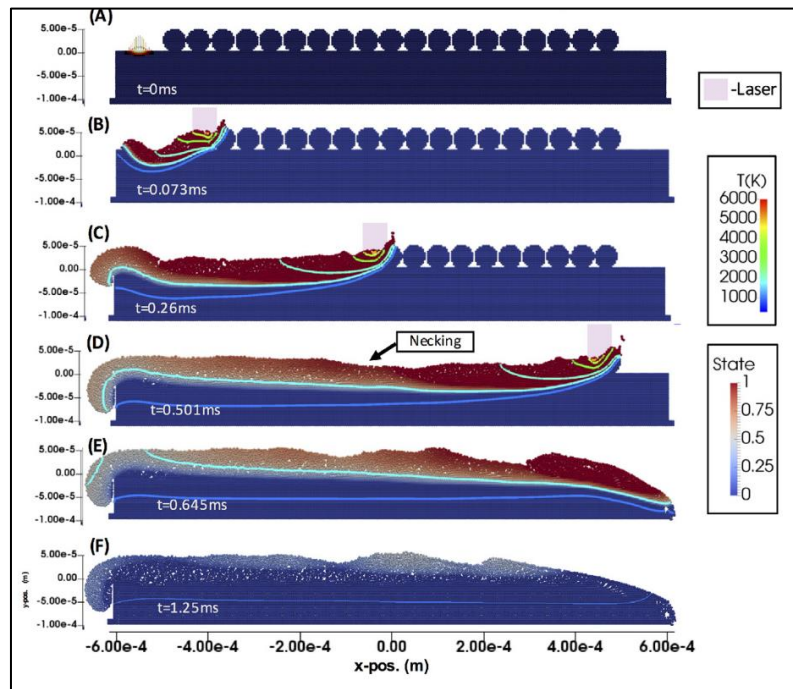


Figure 2-17 : État (0 : solide ; 1 : liquide) du métal lors du passage du laser et isotherme dans le métal en fusion

Source : (Russell *et al.*, 2018)

La zone (intervalle) de solidification/fusion (« phase transition ») est considérée par la variation de la viscosité au sein du modèle. Les auteurs considèrent une viscosité pour le début du changement de phase qui est dix fois plus importante que celle à l'état liquide. Cette similitude peut être retrouvée dans le changement de phase du bain électrolytique tel que l'illustre la Figure 1-8 qui indique la fraction totale de liquide sur une plage de température correspondante au changement de phase.

2.3 . CONCLUSION DU CHAPITRE

La revue de littérature présentée dans ce chapitre montre les difficultés à simuler l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyse. Plusieurs articles présentent des modèles étudiant l'évolution du radeau à la suite de l'injection. Le problème est réduit à une ou deux dimensions. L'objectif de cette thèse est donc d'aller plus loin dans le développement du modèle mathématique et simuler la formation du radeau à sa disparition. Le développement de ce modèle fera donc une avancée scientifique importante.

CHAPITRE 3

LE MODÈLE MATHÉMATIQUE

Ce chapitre présente la méthodologie utilisée pour développer le modèle mathématique. Le modèle est basé sur le couplage de la méthode Hydrodynamique des particules lissées (SPH) et de la méthode des éléments discrets (DEM). Le chapitre sera divisé en plusieurs sections : la présentation de l'algorithme du modèle, la présentation de la méthode Hydrodynamique des particules lissées, la présentation de la méthode des éléments discrets, le couplage entre les deux méthodes, le modèle de transfert thermique,

3.1 . PRÉSENTATION SOMMAIRE DE L'ALGORITHME DU MODÈLE

Pour simuler l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyse, les deux méthodes, Hydrodynamique des particules lissées (SPH, « Smoothed Particle Hydrodynamics ») et méthode des éléments discrets (DEM), sont couplées. La première sera utilisée pour simuler l'écoulement dans le bain, les échanges thermiques et le transfert de masse alors que la seconde méthode permettra de simuler le déplacement des particules d'alumine et le bain solidifié.

Le couplage entre les deux méthodes se fait précisément via la force de trainée, comme présenté dans la section 3.4.2.

Afin d'améliorer le temps de résolution, l'algorithme effectue des calculs parallèles avec l'utilisation d'une carte graphique.

L'algorithme est composé de cinq parties distinctes : 1) la recherche de voisinage, 2) la résolution du déplacement des particules SPH, 3) la résolution du déplacement des particules DEM, 4) l'utilisation des sous-modèles pour calculer les échanges thermiques et les transferts de masse et 5) l'intégration permettant de calculer la vitesse et la position des particules (Figure 3-1). Les désignations « particules SPH » et « particules DEM » signifient les particules dont l'état est identifié via l'une ou l'autre de ces deux méthodes.

Le pas de temps est limité par le déplacement des particules (la vitesse du son et la vitesse maximale rencontrée par une particule) et le transfert de chaleur. Le transfert de chaleur étant lent, le pas de temps est principalement gouverné par le déplacement des particules.

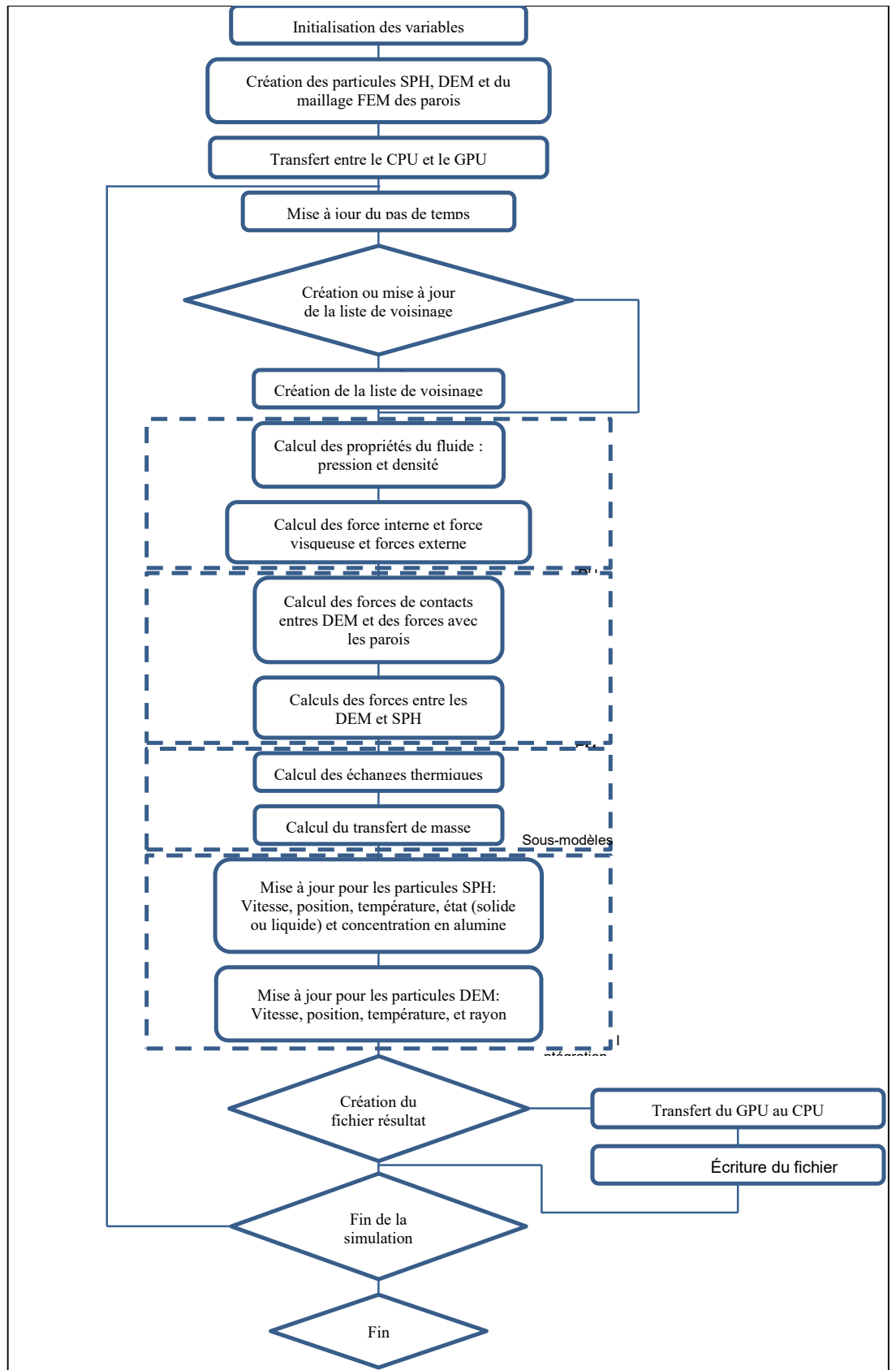


Figure 3-1: Schéma de l'algorithme de résolution du modèle mathématique

Pour améliorer la rapidité de calcul, la recherche de voisinage n'est pas réalisée à chaque pas de temps. Le pas de temps étant faible, les particules se déplacent peu. La recherche de voisinage est donc réalisée uniquement tous les 20 pas de temps.

La sortie des résultats se fait après un pas de temps définie par l'utilisateur. Dans un souci de place de mémoire, à la fin de chaque pas de temps, les valeurs des variables sont supprimées. Donc les résultats doivent être sortis durant la simulation. Les fichiers de sortie sont écrits sous le format «.vtk ». Ce type de fichier est utilisé par le logiciel Paraview[®]. Ce logiciel libre d'accès permet la visualisation et l'analyse des résultats.

3.2 . HYDRODYNAMIQUE DES PARTICULES LISSÉES (SPH)

3.2.1 THÉORIE

Hydrodynamique des particules lissées (« Smoothed Particle Hydrodynamics ») est une méthode Lagrangienne avancée sans maillage. Elle est principalement utilisée pour le calcul de la dynamique des fluides et de la mécanique des solides. Aucun maillage n'est requis ce qui fournit un cadre puissant pour résoudre les grands problèmes de déformations plastiques qui ne peuvent généralement pas être résolus par des méthodes conventionnelles basées sur le maillage. Cette méthode a été développée par deux groupes indépendants, Gingold et Monaghan (Gingold & Monaghan, 1977) et Lucy (Lucy, 1977). Monaghan a été l'un des premiers à appliquer la méthode SPH à la mécanique des fluides pour simuler l'écoulement de gaz.

La méthode SPH est considérée comme une méthode sans maillage car l'ensemble des équations de champ (équations de conservation) sont résolues par interpolation à partir d'un ensemble de particules qui se trouvent dans le domaine d'influence de la particule d'intérêt. Le domaine d'influence est défini par la longueur de lissage, h . Cette longueur correspond à la taille initiale des particules (s) multipliée par un coefficient d'échelle, $h_{\text{échelle}}$:

$$h = h_{\text{échelle}}s \quad 3.1$$

Pour rendre cette méthode sans maillage, les équations d'état sont représentées par interpolation en utilisant un « kernel », $W(r, h)$, fonction d'un ensemble de particules voisines j , présentes dans un domaine d'influence à la particule i comme le montre la figure suivante :

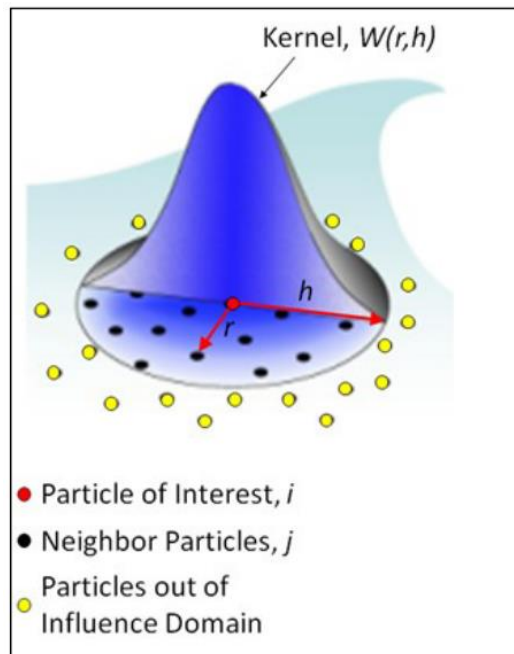


Figure 3-2: Interpolation avec la méthode SPH
Source : (Fraser, 2017)

Pour décrire l'écoulement dans le fluide (milieu continu), les fonctions continues sont approximées par un interpolant grâce à l'utilisation d'une intégrale de convolution (Fraser, St-Georges, & Kiss, 2016):

$$f(\bar{x}) = \int f(\bar{x}')W(\bar{x} - \bar{x}', h)d\bar{x}' \quad 3.2$$

où W est le kernel, également nommé fonction de lissage. Il est fonction de la position du point de calcul (\bar{x}), l'emplacement d'interpolation (\bar{x}'). L'équation d'interpolation SPH continue peut alors être écrite pour un ensemble de points matériels discrets:

$$f(x_i^\alpha) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j^\alpha)W(r, h) \quad 3.3$$

où x_i est le vecteur de position spatiale de la particule i et x_j de la $j^{\text{ème}}$ particule. m_j et ρ_j sont la masse et la densité de la $j^{\text{ème}}$ particule et $r = |x_i^\alpha - x_j^\alpha|$. N_i est le nombre total de j particules présentes dans le domaine d'influence de la particule i . Par la suite, $W(r, h)$ prendra la notation de W_{ij} .

Dans la méthode SPH, le gradient d'une fonction vecteur est représenté par la fonction simplifiée (éq. 3.3), multipliée par le gradient de la fonction de lissage :

$$\nabla f(x_i^\alpha) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j^\alpha) \nabla_i W_{ij} \quad 3.4$$

Le gradient de la fonction de lissage est donné par :

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial \bar{x}_i} = \frac{dW(r, h)}{dR} \left(\frac{1}{h}\right) \left(\frac{1}{r}\right) (\bar{x}_i - \bar{x}_j) \quad 3.5$$

où R est le ratio $R = r/h = \|\bar{x}_i - \bar{x}_j\|/h$.

3.2.2 LA FONCTION DE LISSAGE

La fonction de lissage est l'élément principal de la méthode SPH. Le choix de la fonction de lissage peut avoir un impact important sur la stabilité du modèle. Cette thèse est basée sur la fonction de lissage introduite par Yang *et al.* (Yang, Liu, & Peng, 2014) et recommandé par Fraser (Fraser, 2017):

$$W(r, h) = \alpha_d \begin{cases} R^3 - 6R + 6 & \text{pour } 0 \leq R < 1 \\ (2 - R)^3 & \text{pour } 1 \leq R < 2 \\ 0 & \text{pour } R \geq 2 \end{cases} \quad 3.6$$

où α_d est une constante spécifique à la dimension. Pour un modèle en trois dimensions, Yang *et al.* (Yang *et al.*, 2014) donne l'équation suivante :

$$\alpha_d = 15/62\pi h^3 \quad 3.7$$

Cette équation pour la fonction de lissage est choisie car elle fournit des performances améliorées pour les problèmes qui traitent principalement des champs de contraintes de compression avec des particules désordonnées, comme dans un liquide.

3.2.3 SPH APPLIQUÉE À LA MÉCANIQUE DES FLUIDES

Pour simuler l'écoulement d'un liquide, nous devons discrétiser les équations de conservation de masse et le mouvement en utilisant l'approche SPH. Le liquide est simulé avec de particules non-rigides (compressibles), donc nous devons tenir compte des variations temporelles et spatiales de la densité. L'équation de conservation de la masse pour un système compressible variable dans le temps est la suivante :

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot \rho \bar{v} = 0 \quad 3.8$$

où ρ est la densité, t est le temps et \bar{v} est la vitesse. Tel qu'effectué par Fraser *et al.* (2016), avec la méthode SPH, on peut décrire l'équation 3.8 comme :

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_j} v_{ij} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} \quad 3.9$$

où v_{ij} est la vitesse relative de la particule i par rapport à la particule j , ($v_j - v_i$).

La description mécanique continue de la conservation de la quantité de mouvement pour une particule liquide est :

$$\frac{d\bar{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \bar{\sigma} + \frac{1}{m} \bar{F}_{ext} + \bar{g} \quad 3.10$$

où $\nabla \cdot \bar{\sigma}$ est le divergent du tenseur de la contrainte avec ses composantes normales (pression) et les contraintes de cisaillement (liés à la viscosité) et g est la gravité. La force \bar{F}_{ext} regroupe toutes les forces externes intégrant la force de contact avec les parois, la force de contact entre le liquide et les particules solides et la force régie par la convection naturelle. L'équation de mouvement transformée du milieu continu en milieu discret (SPH) donne :

$$\frac{dv_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} m_j \left(\frac{\sigma_i}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} + \frac{1}{m_i} (F_{ext})_i + g \quad 3.11$$

3.3 . MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS (DEM)

La méthode des éléments discrets a été présentée pour la première fois par Williams *et al.* (Williams, Hocking, & Mustoe, 1985) en 1985 pour résoudre numériquement des problèmes associés aux matériaux granulaires. La même année, Hocking *et al.* (Hocking, Mustoe, & Williams, 1985) publient l'une des premières applications, étudiant le déplacement de la glace sur les îles artificielles. La méthode des éléments discrets est basée sur la résolution de la seconde loi de Newton, la loi de la conservation de la quantité de mouvement :

$$m\vec{a} = \sum \vec{F} \quad 3.12$$

où m , \vec{a} et \vec{F} sont respectivement la masse de l'objet, le vecteur accélération et les forces appliquées à l'objet étudié. L'équation 3.12 fût adaptée par Norouzi *et al.* (Norouzi *et al.*, 2016) pour déterminer la trajectoire d'une particule solide :

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_{j \in CL_i} \vec{f}_{ij}^{p-p} + \vec{f}_i^{f-p} + \vec{f}_i^{ext} \quad 3.13$$

où m_i et \vec{v}_i représentent la masse et la vitesse de la particule i . Les groupes de forces \vec{f}_{ij}^{p-p} , \vec{f}_i^{f-p} et \vec{f}_i^{ext} sont respectivement les forces liées aux contacts mécaniques avec la particule voisine j (entre particules et avec les parois), les forces entre les particules et le fluide et les forces externes. Ce dernier groupe de force intègre la gravité et la force de cohésion. Cette dernière force permettra de maintenir les particules solides en contact pour simuler le

changement de phase et le frittage entre les particules d'alumine. Son intégration dans le modèle est présentée dans la section 3.5.2.

Les forces interparticulaires et les forces d'interaction particules-parois sont divisées en deux composantes, une normale (\vec{n}_{ij}) et une tangentielle (\vec{t}_{ij}^t).

La force normale est basée sur un modèle viscoélastique proposé par Belytschko *et al.* (Belytschko, Liu, & O'Neal, 1990) :

$$\vec{f}_{ij}^n = \vec{f}_{el}^n + \vec{f}_{diss}^n = (k_c \delta_n + \eta_c \dot{\delta}_n) \vec{n}_{ij} \quad 3.14$$

où \vec{f}_{el}^n et \vec{f}_{diss}^n sont les composantes élastiques et d'amortissement de la force contact. δ_n et $\dot{\delta}_n$ sont l'interpénétration et la vitesse d'interpénétration. Le coefficient de contact (k_c) est déterminé par l'équation suivante :

$$k_c = \frac{BA^2}{V_i} \quad 3.15$$

où B , A et V_i sont respectivement le module d'élasticité de la particule, la surface d'impact et le volume de la particule i .

Et le coefficient d'amortissement (η_c) :

$$\eta_c = \alpha \sqrt{m_i k_c} \quad 3.16$$

où α est un facteur de convergence, m_i est la masse de la particule et k_c est le coefficient de contact présenté ci-dessus.

La force tangentielle, décrite par l'équation suivante, représente la friction entre les particules elles-mêmes et avec les parois. La friction est la résistance lors d'un déplacement parallèle et dans un sens inverse de la vitesse tangentielle. Cette force est issue de la rugosité de la surface des deux objets.

$$\vec{f}_{ij}^t = \mu |\vec{f}_{ij}^n| \vec{t}_{ij}^t \quad 3.17$$

où μ et \vec{t}_{ij}^t sont le coefficient de friction et le vecteur tangent à la surface de contact (particules ou parois). Les valeurs des coefficients de friction (inter-particule et particules-parois) sont validées dans le Chapitre 5.

3.4 . COUPLAGE DEM-SPH

Le couplage entre la méthode DEM et SPH se trouve dans le groupe de force entre le liquide et les particules \vec{f}_i^{f-p} présenté précédemment. Il tient compte de trois forces : la tension de surface (\vec{f}_i^{ST}), la force de trainée (\vec{f}_i^D) et la force de flottaison (\vec{f}_i^B).

$$\vec{f}_i^{f-p} = \vec{f}_i^{ST} + \vec{f}_i^D + \vec{f}_i^B \quad 3.18$$

3.4.1 FORCE DE TENSION DE SURFACE

La force de tension de surface représente l'interaction au point triple regroupant la présence du liquide, de l'air et du solide. Cette force est considérée lorsque la particule solide se trouve en contact avec une particule de liquide située à la surface libre.

$$f_i^{ST} = \frac{\sum_{j=1}^{N_{i liq}} \gamma P_{imm} \cos(\theta)}{N_{i liq}} \quad 3.19$$

où γ , P_{imm} et θ sont le coefficient de tension de surface, le périmètre mouillé de la particule et l'angle de contact. $N_{i liq}$ est le nombre de voisins liquides de la particule i

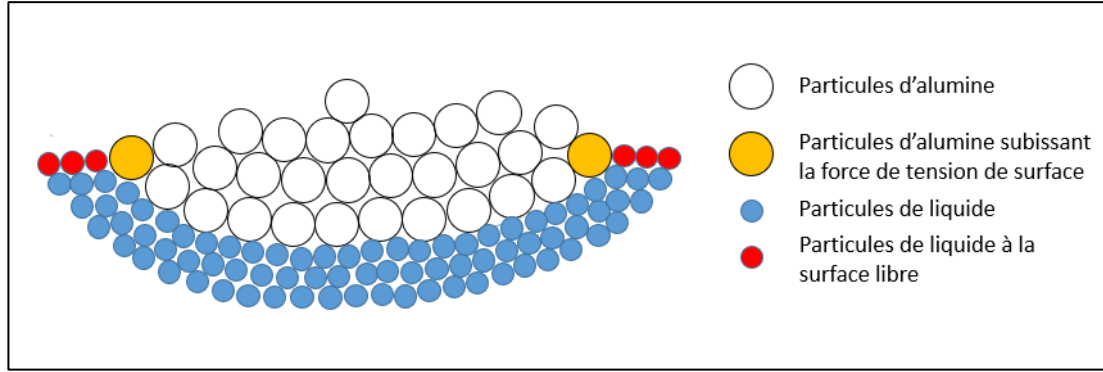


Figure 3-3 : Schéma expliquant l'application de la force de tension de surface sur les particules solides

3.4.2 FORCE DE TRAINÉE

La force de trainée représente la résistance du fluide sur un objet lorsque celui-ci se déplace. La force de trainée est générée avec la différence de pression entre l'avant et l'arrière de l'objet suivant le sens de l'écoulement ou le sens de déplacement de l'objet ainsi que de la friction dans la couche limite. Sun *et al.* (Sun *et al.*, 2013) présente une équation basée sur le vide moyen local (ε_i) pour tenir compte de l'espacement entre les particules de liquide impliqué par la méthode SPH :

$$f_i^D = \frac{\beta_i}{1 - \varepsilon_i} (v_{ave} - v_i) V_i \quad 3.20$$

v_{ave} est la vitesse moyenne des particules de liquide voisines. ε_i est donné par l'équation suivante :

$$\varepsilon_i = \frac{\sum_{j=1}^{N_{liq}} \varepsilon_j V_j W_{ij}}{\sum_{j=1}^{N_{liq}} V_j W_{ij}} \quad 3.21$$

V_j et ε_j sont respectivement le volume de la particule de liquide j et le vide local de la particule de liquide voisine j et est défini par :

$$\varepsilon_j = 1 - \sum_{k=1}^{N_{j liq}} V_k W_{ij} \quad 3.22$$

β_i est le coefficient de transfert de mouvement entre les phases :

$$\beta_i = \begin{cases} 150 \frac{(1 - \varepsilon_i)^2}{\varepsilon_i} \frac{\mu_f}{d_i^2} + 1.75(1 - \varepsilon_i) \frac{\rho_f}{d_i} |v_{ave} - v_i| & \varepsilon_i \leq 0.8 \\ 0.75 C_d \frac{\varepsilon_i(1 - \varepsilon_i)}{d_i} \rho_f |v_{ave} - v_i| \varepsilon_i^{-2.65} & \varepsilon_i > 0.8 \end{cases} \quad 3.23$$

Avec C_D le coefficient de traînée :

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_i} (1 + 0.15 Re_i^{0.687}) & Re_i \leq 1000 \\ 0.44 & Re_i > 1000 \end{cases} \quad 3.24$$

Avec Re_i , le nombre de Reynolds donné par :

$$Re_i = \frac{|v_{ave} - v_i| \varepsilon_i \rho_f d_i}{\mu_f} \quad 3.25$$

La vitesse moyenne (v_{ave}) est déterminée avec l'équation suivante :

$$v_{ave} = \frac{\sum_{j=1}^{N_{i liq}} v_j V_j W_{ij}}{\sum_{j=1}^{N_{i liq}} V_j W_{ij}} \quad 3.26$$

La résultante de cette force de traînée sur le liquide est calculée avec l'équation suivante :

$$f_i^{liq} = - \sum_{j=1}^{N_{i sol}} \frac{V_i W_{ij}}{\sum_{k=1}^{N_{j liq}} V_k W_{jk}} f_j^D \quad 3.27$$

où $N_{i sol}$, le nombre de particules solides voisines à la particule de liquide

i .

3.4.3 FORCE DE FLOTTAISON

La force de flottaison est la répercussion de la pression hydrostatique sur la surface de l'objet immergé. Cette force correspond à la poussée d'Archimède. Sun *et al.* (Sun *et al.*, 2013) présentent l'équation suivante :

$$F_i^B = -V_i \langle \nabla p \rangle (x_i) \approx -V_i \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j p_i}{\bar{\rho}_j} v_{ij} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} \quad 3.28$$

3.5 . MODÈLE THERMIQUE

Lors de l'injection de l'alumine, les transferts thermiques et le changement de phase ont un impact important sur la dispersion et la dissolution des particules. Ces éléments influenceront la formation de gelée autour et au sein du radeau ainsi que le frittage entre les particules d'alumine. Ces deux phénomènes créent un lien solide entre les particules. De plus, la gelée constitue également une barrière entre les particules et le bain liquide empêchant la dissolution de se produire. Pour cela, le modèle est constitué de deux sous-modèles, un pour le transfert thermique et un autre pour tenir compte du changement de phase.

3.5.1 TRANSFERT DE CHALEUR

Le module complémentaire de transfert de chaleur est basé sur l'équation de conduction de la chaleur :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho C_p} (k \nabla^2 T + \dot{q}) \quad 3.29$$

où T , $\nabla^2 T$, C_p , k et \dot{q} sont respectivement la température, le Laplacien de la température, la chaleur massique, la conductivité thermique et la source

de chaleur volumique. Afin de faciliter l'utilisation de sous-modèle de changement de phase, l'enthalpie est dans un premier temps calculée avec une méthode SPH :

$$\frac{dH_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{4m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{k_i k_j}{k_i + k_j} \Delta T_{ij} \frac{r_{ij} \cdot \nabla W_{ij}}{r_{ij}^2} \quad 3.30$$

où H_i est l'enthalpie de la particule i . Cette équation est utilisée pour déterminer les échanges thermiques dans le liquide et dans les particules solides. Les échanges thermiques entre les particules et le liquide sont ramenés à un échange global :

$$\frac{dH_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} h_{eq} \Delta T_{ij} \frac{r_{ij} \cdot \nabla W_{ij}}{r_{ij}^2} \quad 3.31$$

où h_{eq} est le coefficient de transfert de chaleur globale tenant compte des échanges par convection entre le liquide et les particules.

Pour tenir compte des pertes thermiques sur la surface supérieure du radeau et de l'apport de chaleur sur les parois du contenant, la notion de coefficient d'échange global (h_{eff}) est introduite. Sur la surface supérieure du radeau, le coefficient d'échange global permet de représenter les pertes par convection et rayonnement avec l'environnement (gaz, surface inférieure de la croute, environnement supérieur de la cuve). L'apport de chaleur sur les parois du contenant permet de simuler l'apport de chaleur du bain (non-simulé, pour la simulation d'une cuve d'électrolyse) ou l'apport de chaleur du four pour une expérience en laboratoire dans un petit creuset. L'apport de chaleur est implémenté avec l'équation suivante :

$$\frac{dH_i}{dt} = \frac{h_{eff} A_i}{m_i} (T_{inf} - T_i) \quad 3.32$$

où A_i et T_{inf} sont la surface de la particule étudiée et la température de l'environnement. L'environnement apporte de la chaleur dans les premiers instants car il est situé à une température supérieure à l'alumine. Quand l'alumine dépasse cette température, l'échange thermique devient une perte.

La convection naturelle participe également dans le transfert de chaleur dans le bain. Elle permet l'apport du bain chaud en dessous du radeau et influence le réchauffement du radeau et la formation de bain solidifié. La convection naturelle est liée à la variation de la densité dans le liquide en fonction de la température ou de la concentration en alumine. La détermination de la variation de la densité serait complexe à implémenter dans le simulateur dû aux équations déjà utilisées avec la méthode SPH. Pour y remédier et utiliser un simple modèle, la convection naturelle liée à la variation de la température utilise l'équation suivante :

$$a_{con\ nat} = \beta_{con\ nat} g (T_i - T_{moy}) \quad 3.33$$

Avec β , le coefficient de dilatation thermique, T_i et T_{moy} , la température de la particule de liquide et la température moyenne autour de celle-ci.

3.5.2 CHANGEMENT DE PHASE

Le calcul du changement de phase du bain est basé sur la méthode de l'enthalpie :

$$\left\{ \begin{array}{ll} H_i < 0 & T_i = T_{solidification} + \frac{H_i}{C_s} \\ H_i > 0 \text{ et } H_i < L & T_i = T_{solidification} \\ H_i > L & T_i = T_{solidification} + \frac{H_i - L}{C_L} \end{array} \right. \quad 3.34$$

où $T_{solidus}$, C_s , C_L et L sont la température de solidification équivalente, la chaleur spécifique volumique à l'état solide et liquide, la chaleur latente de changement de phase. Quand le liquide se solidifie, il est considéré comme des particules solides. Donc son interaction avec son environnement sera calculée avec la méthode DEM.

Pour diminuer le temps de calcul, la taille des particules de liquide est relativement importante avec un diamètre de 1mm. Celles-ci sont proches de celles utilisées avec la méthode analogue présentée au CHAPITRE 5 qui ont 1.7mm de diamètre (graine de moutarde). L'espace entre les particules solides n'est pas suffisant pour permettre au liquide de s'infiltrer, contrairement à la réalité. C'est pourquoi, une méthode sera présentée à la section 3.6 pour déterminer les particules d'alumine « infiltrée ».

Si deux particules d'alumine adjacentes sont « infiltrées » par le liquide et que leur température est inférieure au solidus, il est considéré que le film de liquide situé entre ces deux particules se solidifie et engendre une cohésion. Ce phénomène est donc décrit par un modèle viscoélastique et permet de maintenir les particules ensemble avec la force de cohésion (\vec{f}_{coh}):

$$\vec{f}_{coh} = \left(k_{coh} \exp\left(\frac{\delta_{ij}}{2R_{ij}}\right) + \eta_{coh} \dot{\delta}_{ij} \right) \vec{n}_{ij} \quad 3.35$$

où k_{coh} , δ_{ij} , η_{coh} et $\dot{\delta}_{ij}$ sont le facteur de cohésion, la distance entre les parois des particules, le facteur d'amortissement et la vitesse d'approche. La force est appliquée suivant la direction normale (\vec{n}_{ij}) du contact entre les particules. Cette force est également utilisée pour les particules de bain solidifié pour les maintenir assemblées.

3.6 . MODÈLE DE MONTÉE DE LIQUIDE

Les particules de liquide étant de trop grosse taille pour pénétrer entre les particules, un sous-modèle est utilisé pour calculer l'avancée du front de liquide entre les particules solides afin d'optimiser le temps de calcul. Ce sous-modèle utilise, par analogie, la loi de Darcy appliquée sur un milieu poreux:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{1}{\rho} D \nabla^2 c \quad 3.36$$

où c est la concentration et D est le coefficient de diffusion. L'équation de Darcy transformée du milieu continu en milieu discret (SPH) donne :

$$\frac{dc_{bain,i}}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{4m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{D_{bain,i} D_{bain,j}}{D_{bain,i} + D_{bain,j}} \Delta c_{bain,ij} \frac{r_{ij} \cdot \nabla W_{ij}}{r_{ij}^2} \quad 3.37$$

Avec $c_{bain,i}$ et $c_{bain,j}$ sont les proportions infiltrées de la particule solide i et de sa particule voisine j . Cette valeur peut varier entre 0 et 1 (0 pour « sèche » et 1 pour « infiltrée »). $D_{bain,i}$ est le coefficient de diffusion du bain à travers le matériau granulaire. Cette valeur doit être déterminée en mesurant la vitesse de montée de liquide dans un milieu poreux expérimentalement.

Une différence importante par rapport à la loi de Darcy appliquée dans un continuum est que le phénomène de montée du liquide est discontinu. Comme présenté sur la Figure 3-4, une particule en contact avec le liquide est directement considérée comme « infiltrée ». Le liquide met un certain temps avant de se solidifier et donc cette hypothèse est plausible. Par la suite, le liquide ne peut plus infiltrer les particules car il se solidifie (étape représentée par la Figure 3-4). Quand la température des particules d'alumine passe au-dessus de la température de liquidus, le bain peut recommencer à s'infiltrer (Figure 3-5). Pour qu'une particule commence à être infiltrée par le liquide, la particule voisine doit être entièrement « infiltrée ».

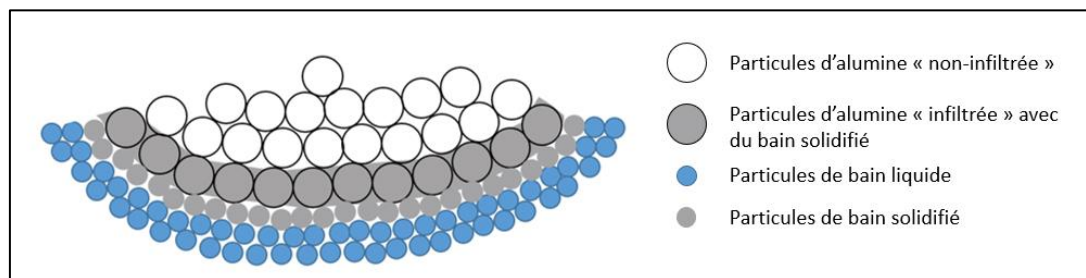


Figure 3-4: Premiers instants à la suite du contact entre les particules et le liquide après l'injection

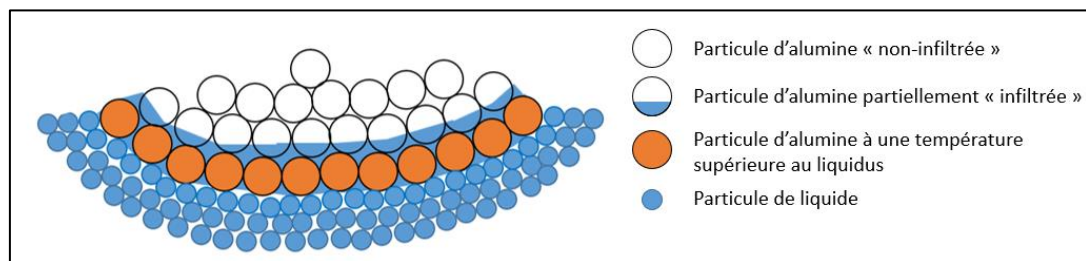


Figure 3-5 : Infiltration du liquide à la suite du réchauffement des particules d'alumine

3.7 . MODÈLE DE DISSOLUTION

La dissolution est l'objectif final de l'injection de l'alumine dans le bain. Le modèle de dissolution est basé sur la loi de Fick et permet de déterminer la diffusion moléculaire de l'alumine dans le bain. L'équation dans un milieu discret est :

$$\frac{dc_{Al_2O_3,i}}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{4m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{D_{Al_2O_3,i} D_{Al_2O_3,j}}{D_{Al_2O_3,i} + D_{Al_2O_3,j}} (c_{Al_2O_3,i} - c_{Al_2O_3,j}) \frac{r_{ij} \cdot \nabla W_{ij}}{r_{ij}^2} \quad 3.38$$

où $c_{Al_2O_3,i}$ et $c_{Al_2O_3,j}$ sont les concentrations en alumine dans la particule de liquide i et dans la particule voisine j . Cette valeur varie entre 0 et la concentration de saturation.

La dissolution des particules d'alumine est basée sur une simplification de l'équation 1.5 :

$$\frac{dc_{Al_2O_3,i}}{dt} = k_{Al_2O_3} A \quad 3.39$$

Où $k_{Al_2O_3}$ est le coefficient de transfert de masse et A la surface d'échange. Si la particule de liquide avec qui la particule d'alumine se dissout est saturée, le transfert de masse est nul.

3.8 . MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS : MODÉLISATION DES PAROIS SOLIDES

La méthode des éléments finis est utilisée pour simuler les parois du réservoir et l'injecteur. L'avantage principal d'utiliser cette méthode est la facilité de simuler des formes diverses pour l'injecteur. Les parois sont maillées avec des triangles rigides n'ayant aucune épaisseur et plat.

La géométrie est réalisée via un logiciel de conception assistée par ordinateur (CAO) comme SolidWorks®. La géométrie est surfacique et le maillage est généré par la suite avec le logiciel LS-Prepost® qui permet de générer un fichier (.k) lu dans le simulateur.

3.9 . OPTIMISATION DE LA RECHERCHE DE VOISINAGE

Dans une situation où il y a un faible nombre de particules, calculer la distance entre les particules étudiées et toutes les autres particules serait possible. Cette distance est nécessaire pour déterminer les forces de contact, transfert de chaleur ou transfert de masse par exemple. Suivant cette méthode, le nombre de calculs à réaliser suit cette équation :

$$N_{cal\ voisin} = N_{part}(N_{part} - 1) \quad 3.40$$

Ceci implique que pour 100 000 particules, le nombre de calculs s'élève à quasiment 10^{10} calculs à chaque pas de temps. C'est pourquoi plusieurs articles présentent une méthode optimisée de la recherche de voisinage.

Cette méthode consiste à mailler le domaine en cellules cubiques et de déterminer quelles particules sont présente dans celle-ci (Figure 3-6).

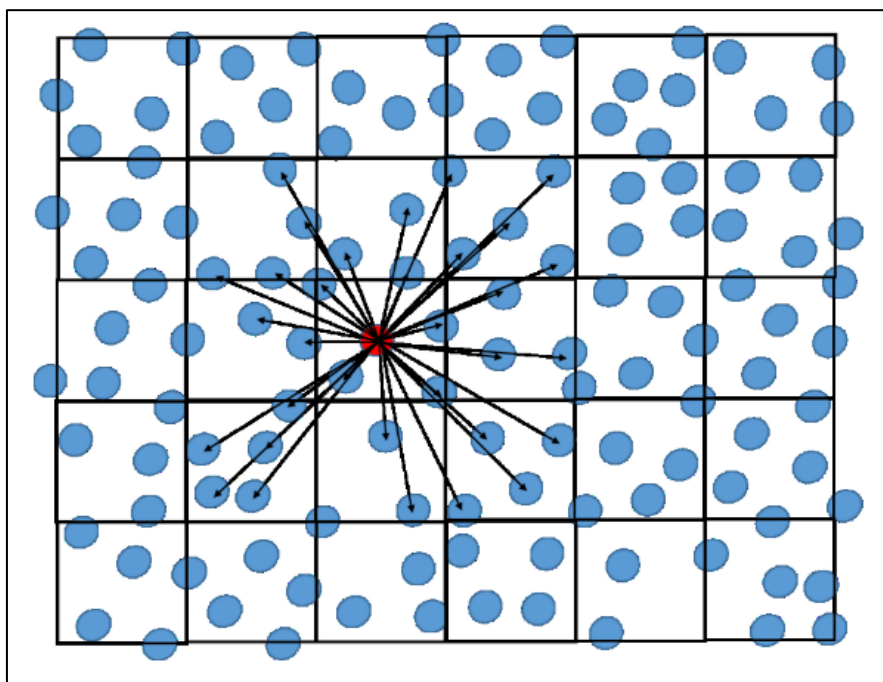


Figure 3-6 : Schéma représentant la recherche de voisinage en 2D (Fraser, 2017)

La recherche de voisinage est réalisée après un certain nombre de pas de temps. La valeur est fixée à 20 dans le modèle réalisé. Cette valeur doit être suffisamment faible pour ne pas oublier de voisin. Mais une valeur trop faible augmentera le temps de calcul car la recherche de voisinage est l'une des parties les plus énergivores pour le temps de calcul.

3.10 . PROGRAMMATION ET OPTIMISATION AVEC LE CALCUL PARALLÈLE

La grande difficulté dans le développement de ce projet concerne le grand nombre de points de calculs. Le calcul parallèle est donc la solution pour réduire fortement le temps de résolution.

Le calcul parallèle consiste à réaliser l'étude de plusieurs points de calculs en même temps. Le calcul parallèle peut être réalisé avec le processeur

principal de l'ordinateur (CPU) ou avec le processeur graphique (GPU). Les dernières générations de CPU intègrent huit cœurs, donc huit unités de calcul. Donc le CPU pourra faire au maximum huit calculs en même temps. Les GPU sont utilisés pour commander chaque pixel de l'écran. Donc ils peuvent générer un grand nombre de calculs en même temps, mais ils sont limités à des calculs simples. Les dernières générations de GPU intègrent plus de 10 000 cœurs. La différence de temps de calcul avec un CPU et un GPU augmente exponentiellement avec le nombre de particules simulées.

Les cartes graphiques de la compagnie Nvidia sont basées sur l'architecture Pascal. Cette architecture décrit la méthode d'arrangement des processeurs de la carte graphique et permet une augmentation de transistor par centimètre carré (Figure 3-7). La carte graphique est constituée d'une mémoire générale et de plusieurs multiprocesseurs. Ces multiprocesseurs sont constitués d'une mémoire locale et de processeurs (« Threads »).

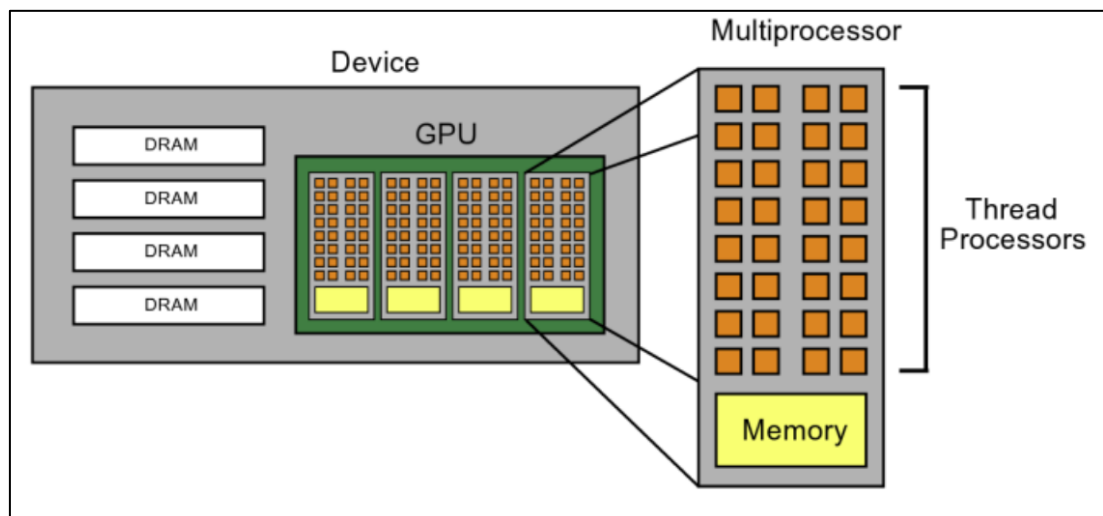


Figure 3-7 : L'architecture Pascal des cartes graphiques
Source : (Fatica & Ruetsch, 2013)

3.11 . CUDA FORTRAN

Plusieurs langages de programmation sont disponibles pour le développement de modèle mathématique utilisant les cartes graphiques : C, C++, Fortran ou Python. Chacun de ces langages possède leurs forces respectives, mais le Fortran est un des langages les plus adaptés pour le calcul scientifique et la manipulation des matrices. Faisant suite aux travaux du Dr. Kirk Fraser réaliser à l'UQAC (Fraser, 2017) qui touchait la modélisation mathématique par méthode SPH, celui-ci a été invité à s'impliquer à titre de consultant expert pour fournir certaines recommandations lors du développement du code mathématique. La décision de procéder avec un code de type Fortran a également été basée sur ce facteur, permettant donc d'être bien aligné avec les expériences précédentes du Dr. Fraser et favoriser une progression plus rapide du code mathématique.

Cuda Fortran est une adaptation du langage original Fortran pour les cartes graphiques. Le compilateur permettant le fonctionnement du code est développé dans un premier temps par PGI puis par Nvidia avec le compilateur HPC SDK. La différence entre un code en Fortran et en Cuda Fortran s'observe à deux endroits : lors de l'appel d'une fonction et dans la fonction elle-même.

3.12 . COMPILATION SOUS LINUX

Le simulateur est développé et programmé en Fortran sur un logiciel de développement (Visual Studio pour Windows et Eclipse pour Linux). Après l'écriture du programme, il est nécessaire de compiler le code pour que l'ordinateur puisse le lire sur le processeur et la carte graphique.

Pour compiler le programme Fortran sur carte graphique utilisant l'architecture Cuda, la compagnie PGI offrait le compilateur intégré à Visual Studio sous Windows. Le compilateur nécessite une mise à jour pour chaque nouvelle carte graphique. PGI a arrêté de supporter les nouvelles cartes graphiques de Nvidia en 2020, donc Nvidia a développé son propre compilateur, HPC SDK. Le compilateur est proposé actuellement uniquement sous Linux. Le programme a donc été transféré sous ce système d'exploitation. La différence avec le compilateur de PGI, HPC SDK ne s'intègre pas à un logiciel de développement. Il a donc été nécessaire d'écrire un fichier « makefile. ». Ce fichier permet d'appeler les modules du programme et de les lier au compilateur. Ces modules doivent être appelés dans un ordre précis. Les modules, appelés « maitre », doivent être compilés dans un premier temps. Puis les modules « esclaves » sont appelés. Un module « esclave » est un programme nécessitant des variables déclarées dans un module « maitre ».

CHAPITRE 4

SIMULATION NUMÉRIQUE

Ce chapitre vise à regrouper toutes les hypothèses et conditions utilisées pour réaliser les résultats présentés dans le chapitre 6. Dédier un chapitre pour rassembler les hypothèses permet à un lecteur intéressé par la modélisation de l'injection de l'alumine de comprendre la complexité du projet et de voir les limites actuelles du modèle sans devoir lire la méthodologie. Ce chapitre va présenter la géométrie, les conditions initiales et limites du modèle mécanique, du modèle thermique, du modèle de transfert de masse et de l'infiltration. Pour avoir plus de précision sur la méthodologie et les équations choisies, le CHAPITRE 3 y est consacré.

4.1 . GÉOMÉTRIE

Dans le cadre de la thèse, la géométrie représente un creuset cubique de 7 cm pour contenir le bain. L'alumine est injectée à l'aide d'un entonnoir pour se rapprocher des conditions utilisées dans les expériences analogues de validation présentées dans les sections 5.1.3 et 5.1.5 . Les expériences analogues consistent à l'injection de graines de moutarde refroidies, à l'azote liquide, dans l'eau pour étudier la formation des radeaux.

Le volume de bain est limité par les parois du creuset sur le plan horizontal et d'une hauteur de 3 cm. La taille des particules de bain est de 0.5 mm de diamètre. Cette taille est importante pour limiter également de nombre

de particules et donc le temps de calcul. La taille est inférieure à celle des particules d'alumine pour avoir une meilleure définition de l'écoulement et de la couche de bain solidifié. Une taille trop importante limiterait l'étude de l'épaisseur de bain solidifié du radeau. Le bain est représenté par 149 100 particules soit près de 97% des points de calculs.

Les particules d'alumine sont représentées par des sphères d'un diamètre de 1.7mm. Cette taille correspond aux tailles des particules de graines de moutarde utilisées pour la validation (chapitre 5). La taille moyenne des particules d'alumine utilisées dans l'industrie se situe proche de 80 μ m. L'utilisation d'une telle taille de particules impliquerait la simulation de million de particules pour une injection de 15g comme étudié durant les validations. L'augmentation de la taille implique un ajustement sur les propriétés physiques du matériau granulaire comme la densité et la conductivité thermique. Les expériences de validation avec les graines de moutarde ont montré des similitudes avec les radeaux formés avec l'alumine. La simulation avec des tailles d'alumine plus grosse permet donc de reproduire les phénomènes adéquatement tout en limitant le temps de calcul.

L'injection des particules se fait à l'aide d'un entonnoir dans le modèle pour se rapprocher des résultats obtenus en expérience et permettant éventuellement de reproduire les similitudes du milieu industriel. Les particules sont créées suivant un maillage, l'entonnoir permet de supprimer cet arrangement et d'apporter un désordre dans les particules comme rencontré dans la réalité.

4.2 . MODÈLE MÉCANIQUE

4.2.1 CONDITION INITIALE

Lors de l'injection de l'alumine, les particules ont une vitesse initiale pour leur permettre de quitter la zone de création avant l'apparition de nouvelles particules comme le montre les particules bleues de la Figure 4-1. La vitesse initiale est fixée par le flux d'injection de l'alumine. Quand les particules passent à une hauteur inférieure à la position d'injection, elle commence à subir la force de gravité et est libre de déplacement (leur vitesse augmente). Quand toutes les particules sont sorties de la boîte de création, d'autres particules peuvent apparaître jusqu'à atteindre le temps limite de l'injection.

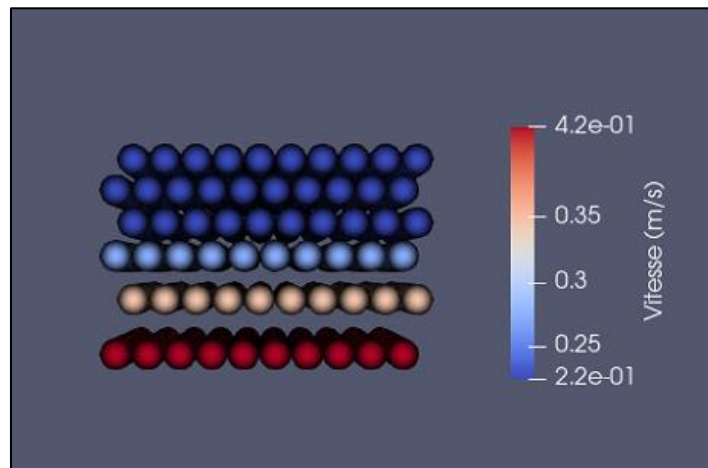


Figure 4-1 : Vitesse des particules après leur création

À l'état initial, les particules de liquide sont à l'état statique selon un maillage cubique. Durant les premiers instants, le liquide s'établit pour remplir le contenant sous l'effet de la gravité. Le maillage cubique peut avoir un impact sur les premiers écoulements mais, quand la convection naturelle est présente

dans le liquide, ce maillage devient moins présent. L'impact sur les résultats n'est pas quantifié.

4.2.2 CONDITIONS AUX FRONTIÈRES

Les particules de liquide sont contraintes mécaniquement par le contenant. À la surface du liquide, la tension de surface entre le contenant et le liquide n'est pas calculée. Cette hypothèse a un impact faible sur l'injection d'alumine et permet de réduire le temps de calcul. La géométrie représente la zone d'injection, donc aucune paroi ne devrait être présente dans cette zone. L'effet de tension de surface des parois sur l'injection est donc négligeable dans les cuves d'électrolyse.

Toutes particules, solides et liquides, sont considérées inactives si elles sortent des dimensions maximales. Cette condition est exclusivement rencontrée lors d'une rare divergence du modèle mais permet de ne plus considérer ces particules dans les calculs. Par exemple, la condition de référence présentée dans le chapitre 6 rencontre une divergence de particules d'alumine sortant par la partie supérieure de la zone d'étude. La proportion de particules divergées est de 12% de l'injection. En prévision, plus de particules ont été injectées. La masse injectée réelle (sans les particules divergées) est donc de 14.6g soit proche de la valeur cible de 15g. La divergence rencontrée peut provenir de différentes sources comme une superposition entre deux créations de particules engendrant un contact trop important. Ce problème pourra être résolu par la suite.

4.2.3 HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE MÉCANIQUE

Le modèle est basé sur les équations viscoélastiques entre chaque particule solide (alumine, bain solidifié) pour tenir compte des impacts. La friction est également présente pour ces particules pour tenir compte des forces de résistance lors de frottements entre les surfaces des particules solides. La Figure 4-2 résume le contact mécanique entre les particules solides, le contact viscoélastique est traduit par un effet ressort et d'amortissement et la friction par un effet d'amortissement :

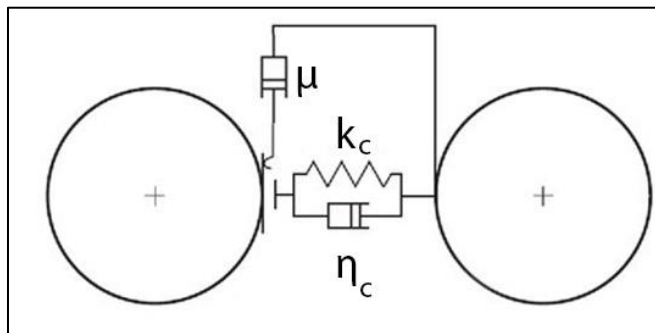


Figure 4-2: Schéma représentant le lien mécanique lors d'un contact entre deux particules solides

Une force de cohésion est générée pour représenter le lien mécanique entre les particules d'alumine par du bain solidifié. Cette force est également utilisée pour maintenir les particules de bain solidifié ensemble. Les particules d'alumine doivent avoir été en contact avec du bain liquide préalablement. Une force est générée également pour représenter le frittage et créer un lien entre les particules d'alumine si leur température est supérieure à 750°C . L'équation utilisée pour représenter le frittage est identique à celle utilisée pour la force de cohésion (voir Chapitre 3). L'évolution de ces forces est exponentielle, plus les

particules s'éloignent l'une de l'autre, plus la force est importante. Si l'éloignement est trop important (la moitié du rayon de la particule), la force devient nulle. L'objectif est de tenir compte de la rupture du radeau si celui-ci subit des forces de traction.

La convection naturelle est représentée par une accélération agissant sur les particules de bain liquide. Cette accélération est basée sur la différence entre la température de la particule et la température moyenne des particules voisines. Cette accélération est plus simple à implanter qu'une variation de la densité. Avec la méthode SPH, la densité est fonction de la vitesse relative avec les particules voisines (voir équation 3.9 du chapitre 3). L'ajout de la température dans le calcul serait trop complexe, d'où l'utilisation de l'accélération pour reproduire un résultat crédible (voir chapitre 6)

4.3 . MODÈLE THERMIQUE

4.3.1 CONDITION INITIALE

Les particules d'alumine sont injectées à une température de 150°C et le bain est à une température initiale de 975°C. Ces valeurs sont celles utilisées pour la condition générale présentée dans le chapitre 6 et sont similaires à celle d'opération des cuves d'électrolyse. Les températures peuvent être variées comme présentées dans l'analyse paramétrique.

4.3.2 CONDITION AUX FRONTIÈRES

Les pertes thermiques à la surface du bain et du radeau sont prises en compte par un coefficient d'échange global et une température ambiante fixée (équation 3.32). Le coefficient d'échange global permet de représenter les pertes par convection naturelle de l'air et du rayonnement de la surface du bain avec l'environnement (surface inférieure de la croute et ambiant si le trou d'injection est présent). La validation de cette condition de frontière est analysée dans le chapitre 5 avec la mesure de la température de la surface supérieure d'un radeau avec une caméra thermique à la suite de l'injection.

Le bain en contact avec les parois subit un échange de chaleur par convection. L'objectif est de tenir compte de l'apport de chaleur provenant du reste du bain présent autour du point d'injection (non simulé pour limiter le temps de calcul).

L'échange thermique entre le bain et les particules d'alumine est basé sur la conduction thermique. Si le bain est à l'état liquide, une conductivité équivalente est utilisée pour représenter la convection dans le bain liée à la vitesse d'écoulement ou à la convection naturelle. Si le bain est à l'état solide, l'échange thermique entre les particules de bain et d'alumine correspond à de la conduction et dépend du coefficient de la conduction respective de chacun des matériaux.

4.3.3 HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE THERMIQUE

Le changement de phase du bain se produit à une seule température comme un liquide pur. Cette condition n'est pas présente dans la réalité comme présentée précédemment avec la Figure 1-8. Cette simplification permet de ne pas calculer les forces de viscosité présente dans le bain, ce qui accélère la résolution. La méthode SPH est utilisée pour les particules de bain liquide et la méthode DEM est utilisée pour les particules de bain solidifié.

L'enthalpie de dissolution, d'une valeur de 1225.5 kJ/kg (Dassylva-Raymond, 2015), est appliquée à la particule de bain ayant reçu de l'alumine dissoute. Il faut une certaine quantité d'énergie pour dissoudre l'alumine. Cette énergie est absorbée à toutes les particules liquides voisines à celle dissoute. Pour simplifier, l'énergie est absorbée à la particule de bain ayant reçu la quantité d'alumine dissoute.

4.4 . MODÈLE DE TRANSFERT DE MASSE

4.4.1 CONDITION INITIALE

La concentration initiale dans le bain est fixée à 3%mass d'alumine et la concentration de saturation est fixée à 6%mass d'alumine. Ces valeurs sont fixées dans le cadre de cette étude. Ces valeurs pourraient être fonction des conditions d'opération spécifiques dans la suite du projet.

Pour qu'il y ait transfert de masse, i.e. dissolution d'alumine, au sein du modèle, trois conditions doivent être remplies :

- 1) Il doit y avoir au minimum une particule de bain à l'état liquide au sein du voisinage de la particule d'alumine.
- 2) La température de cette particule d'alumine doit être supérieure à la température de fusion du bain.
- 3) La concentration d'alumine dans le bain doit être inférieure à la concentration de saturation.

La deuxième condition a été considérée selon l'hypothèse que si la température est inférieure à la température de fusion du bain, une pellicule de bain solidifié serait présente autour de l'alumine qui empêcherait la dissolution.

4.4.2 CONDITION AUX FRONTIÈRES

La dissolution est basée sur une équation « binaire ». Le flux massique d'une particule d'alumine est fonction d'un coefficient d'échange, de la surface de la particule et du nombre de particules de bain liquide voisines. L'équation 3.39 présentée dans le chapitre 3 est donc simplifiée comparé à l'équation (1.5) du chapitre 1. Cette simplification ne devrait pas impacter de façon importante la masse d'alumine dissoute.

Aucune diffusion vers les frontières du contenant n'est considérée. Le modèle thermique tient compte d'apports de chaleur pour représenter un volume de bain voisin comme dans les cuves. Pour la teneur en alumine, aucun transfert de masse au-delà des frontières du contenant n'est considéré dans l'état actuel du développement du modèle. Cette amélioration est proposée dans les recommandations.

4.4.3 HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE DE TRANSFERT DE MASSE

Toute particule atteignant un rayon inférieur à 0.2mm (soit 1.3% de la masse totale) est automatiquement désactivée et la masse d'alumine restante est automatiquement distribuée uniformément au sein des particules de bain adjacentes admissibles. L'objectif de cette méthode est de limiter des gradients de taille trop importants dans le modèle ce qui aura un impact sur la stabilité du modèle et peut engendrer des problèmes lors de la recherche de voisinage. Puisque cette étape est basée sur la division de la zone d'étude, la taille des cellules est basée sur la taille de la plus grosse particule au sein du modèle. Donc si la taille des particules est très faible, le nombre de particules dans une cellule peut être très important et implique la création d'une matrice de voisinage d'une plus grande taille, ce qui engendre une surutilisation de la mémoire de la carte graphique.

4.5 . INFILTRATION DU BAIN

4.5.1 CONDITIONS INITIALES ET AUX FRONTIÈRES

Pour diminuer le temps de calcul, la taille des particules de bain est proche de celle de l'alumine. Ce choix engendre que l'infiltration du bain ne peut être possible du au faible espace entre les particules d'alumine. Pour tenir compte de ce paramètre, l'infiltration est calculée par les équations de diffusion (Darcy). À l'état initial, la proportion infiltrée du volume présent autour d'une particule d'alumine dite « sèche » est nulle (sa proportion infiltrée est de 0). Si

la particule rentre en contact avec du bain liquide, sa proportion infiltrée prend directement la valeur de 1. À la suite de l'injection, les particules formant le pourtour du radeau en contact avec le bain sont considérées comme « infiltrées ». L'hypothèse est que le bain met un certain temps avant de se solidifier durant les premiers instants du contact et permet donc d'infiltrer entièrement les particules en contact avec du bain liquide. Cette valeur est utilisée dans l'équation de la force de cohésion. Toutes particules ayant leur proportion infiltrée supérieure à 1 subie proportionnellement la force de cohésion.

Quand les particules formant le pourtour du radeau atteignent une température supérieure au liquidus, le bain peut s'infiltrer entre les particules. Donc la proportion infiltrée des particules voisines peut augmenter jusqu'à la limite de 1 (état complètement « infiltrée »).

Le module d'infiltration permettra d'analyser, dans des études futures, l'effet de l'infiltration sur la résistance mécanique du radeau et la rupture du radeau sous l'effet des vagues ou des bulles. L'analyse de ce modèle dans le cadre de cette thèse est difficile par l'absence de source externe pouvant produire la rupture du radeau.

4.5.2 HYPOTHÈSES SUPPLÉMENTAIRES DU MODÈLE D'INFILTRATION

La méthode utilisée pour simuler l'infiltration du bain engendre une erreur comparée à la réalité, puisque le bain infiltré possède une masse, une quantité d'énergie et une masse d'alumine dissoute. La méthode par diffusion permet uniquement de simuler l'infiltration du bain sans tenir compte de la présence de ce bain. De plus, le bain qui s'infiltré dissout une certaine masse d'alumine, celle-ci est considérée comme négligeable dans le modèle.

CHAPITRE 5

MÉTHODES DE VALIDATIONS

Le modèle mathématique développé dans cette thèse regroupe un certain nombre d'hypothèses. L'injection d'alumine apporte en plus de nombreuses questions difficiles à répondre dues aux conditions extrêmes dans le bain d'électrolyse (haute température, bain agressif). Pour pallier ces conditions, des validations sont importantes. Ce chapitre regroupe toutes les validations réalisées pour comprendre les mécanismes présents durant l'injection de l'alumine et obtenir un repère pour calibrer le modèle mathématique. Le chapitre est divisé en deux grandes sections : les validations à basse température avec des méthodes analogues et les validations aux conditions d'opération des cuves d'électrolyse.

5.1 . VALIDATIONS À BASSE TEMPÉRATURE

Cette première section présente les différentes expériences de validation réalisées à basse température par des méthodes analogues pour comprendre, observer et quantifier les phénomènes présents lors de l'injection d'un matériau granulaire dans un liquide. L'objectif final de cette méthodologie est de calibrer le modèle pour apporter de la crédibilité aux résultats. La section présente la validation de l'angle de repos, la densité apparente, l'observation de l'injection d'un matériau granulaire avec l'imagerie haute vitesse, l'étude de la structure d'un radeau avec le repêchage et l'observation des écoulements

liés au transfert thermique à la dissolution avec l'imagerie schlieren et l'imagerie par image de particules.

5.1.1 ANGLE DE REPOS

Lorsqu'un matériau granulaire se stabilise à la suite d'un écoulement, celui-ci formera un amoncellement qui s'apparente à un cône. Toutefois, deux angles peuvent être identifiés : l'angle entre le matériau granulaire et la paroi et l'angle en haut du tas. Chacun est fonction, respectivement, 1) de la friction entre les particules et la paroi et 2) de la friction directe entre les différentes particules.

La friction constitue la résistance de frottement ou la résistance au mouvement tangentiel entre deux surfaces. Cette friction est engendrée par la rugosité sur la surface des matériaux en contact. De façon spécifique, la rugosité est une mesure permettant de définir la taille des aspérités de surface. Ce faisant, une faible rugosité correspond à une paroi lisse et générera une friction moins importante.

La mise en place d'un essai pour mesurer l'angle de repos de particules va donc permettre de calibrer le coefficient de friction du modèle mathématique. La friction joue un rôle important sur la capacité des particules à s'écouler et à se disperser sur la surface. Dans le cas de l'injection de l'alumine, la friction sera présente entre les particules et jouera un rôle sur l'étalement des particules à la surface du bain. Une expérience a été réalisée avec des billes de verre et l'alumine. L'expérience consiste à utiliser un tube vertical creux en contact avec une plaque tel qu'illustrée sur la Figure 5-1 et la

Figure 5-2. Le tube est rempli du matériau granulaire que l'on cherche à caractériser. Ce tube est remonté à une vitesse constante et défini. Pendant cette remontée, les particules deviennent libres de se déplacer latéralement et forment ainsi un tas selon une forme caractéristique. Puisqu'il y a une certaine friction entre les particules et les parois, le tube et la plaque sont en acier et en cuivre, respectivement, dans le but de restreindre la mise en place de forces électrostatiques qui pourrait avoir un impact sur la formation du tas. Une caméra est placée perpendiculaire à l'amoncellement pour permettre de capturer l'image et de mesurer les angles de repos par analyse d'image. Un éclairage et un miroir sont utilisés pour uniformiser la couleur d'arrière-plan et ainsi permettre une meilleure qualité d'images.

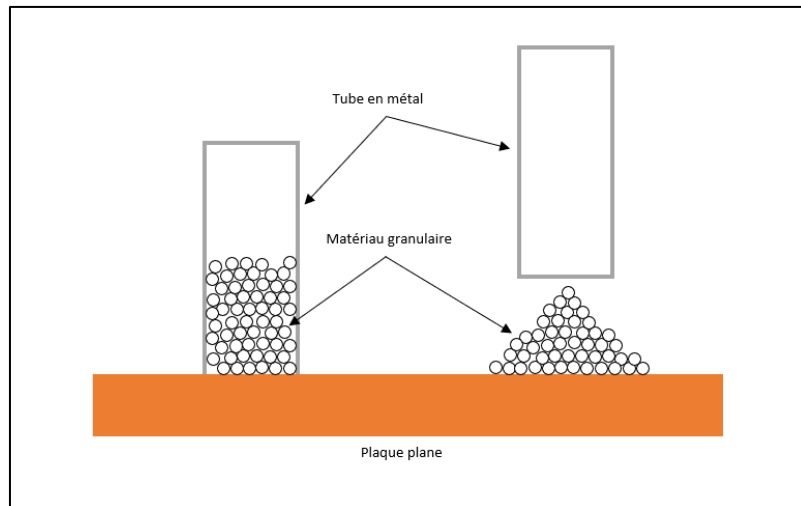


Figure 5-1: Schéma de la formation du tas avant et après la remontée du tube contenant les particules

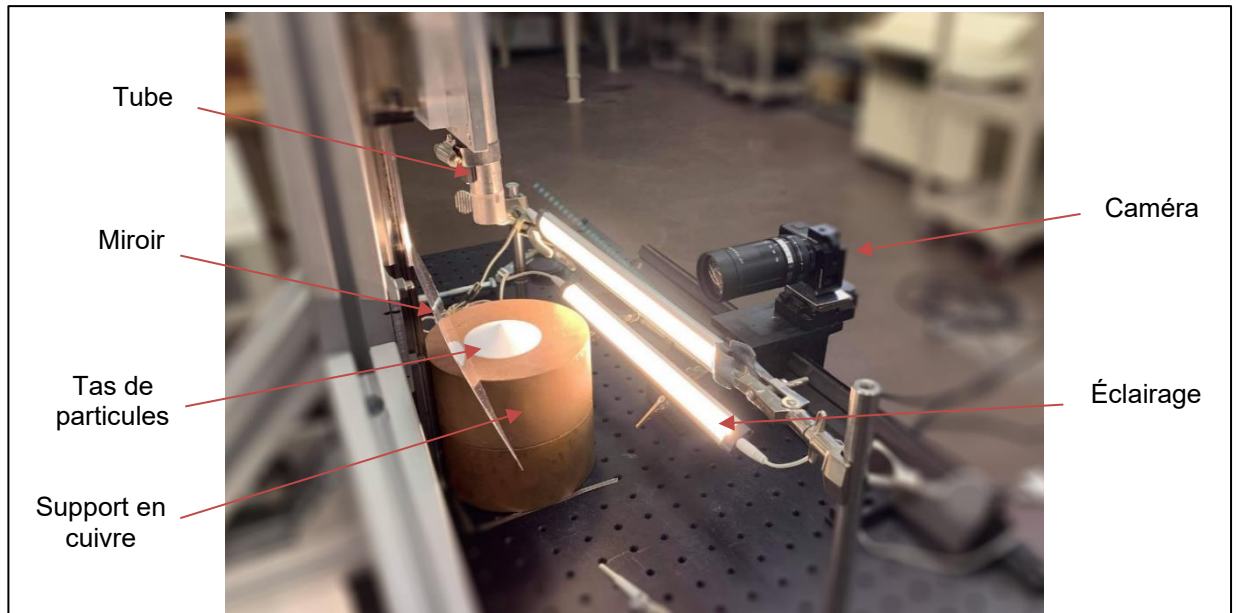


Figure 5-2: Montage pour la mesure des angles de repos de matériaux granulaires

Deux expériences ont été réalisées. La première avec des billes de verre de 0.5mm de diamètre et la seconde avec de l'alumine primaire. Des tests ont aussi été réalisés avec de l'alumine secondaire. L'alumine secondaire est de l'alumine primaire utilisée pour filtrer les gaz émis par la cuve d'électrolyse et elle est injectée dans les cuves par la suite. Mais la différence sur l'angle de repos est similaire à celle obtenue avec l'alumine primaire. L'objectif de la première expérimentation est d'étudier un matériau granulaire de géométrie sphérique et de taille homogène pour une comparaison spécifique avec le modèle mathématique qui utilise des particules sphériques, donc l'erreur sur la forme des particules sera limitée. La comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques est présentée à la Figure 5-3.

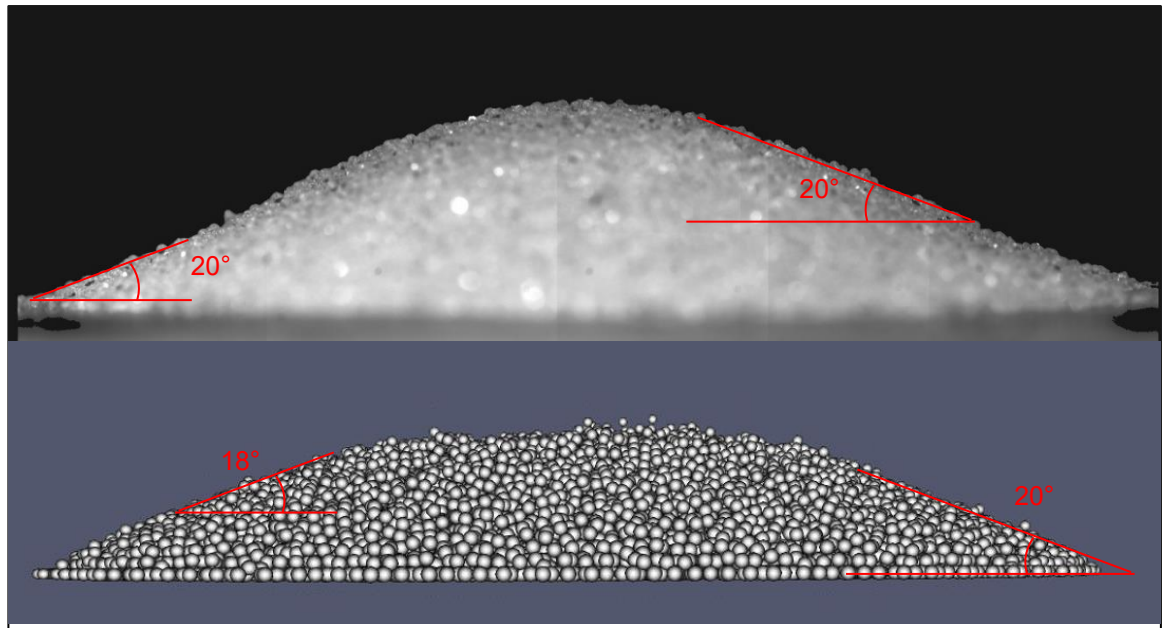


Figure 5-3: Tas de billes sphériques de verre pour la mesure des angles de repos (expérimentalement et avec le résultat de simulation)

Un tas formé avec des billes de verre sphérique montre une faible différence d'inclinaison le long des parois. La simulation montre une tendance similaire sur les angles de repos et sur la forme générale du tas.

L'expérience est réalisée également avec 15g d'alumine primaire utilisée dans l'industrie et la simulation représente 15g de particules avec un diamètre de 1.7 mm :

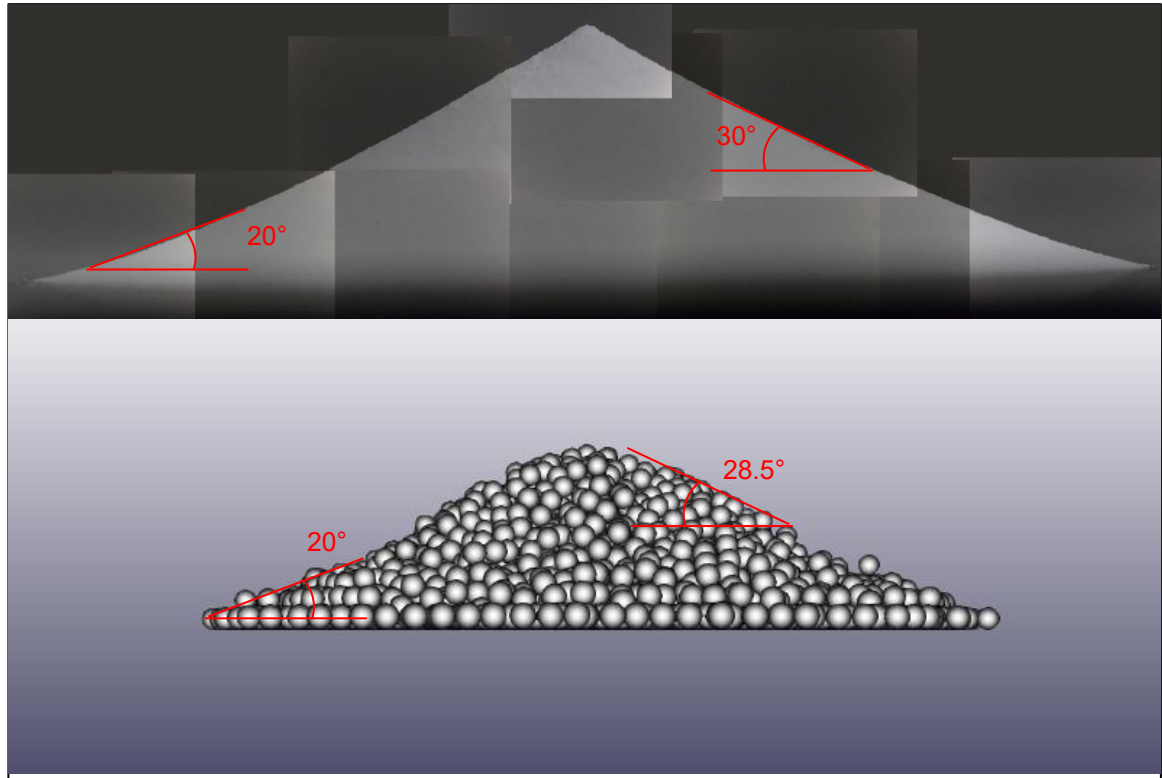


Figure 5-4: Tas d'alumine pour la mesure des angles de repos (expérimentalement et avec le résultat de simulation)

La photo prise avec l'alumine montre une variation plus importante de l'angle de repos qu'avec les billes de verre. L'objectif de cette calibration est d'obtenir des angles de repos similaires avec une taille de particules plus grande, taille utilisée dans les simulations d'injection d'alumine. Le nombre de particules est donc beaucoup plus faible.

Pour la comparaison de l'amoncellement d'alumine, un état transitoire a dû être considéré à la suite des limitations du modèle mathématique présentée au chapitre 3. Ce faisant, la géométrie de l'amoncellement d'alumine après 1.14 secondes a été considérée puisqu'il s'agit du temps caractéristique de formations de l'amoncellement en condition expérimentale.

5.1.2 DENSITÉ APPARENTE

Trois valeurs de densité sont généralement utilisées pour caractériser les matériaux granulaires : la densité réelle, la densité apparente et la densité apparente à l'échelle d'un grain. La densité réelle d'un matériau solide correspond à la masse volumique d'un matériau plein, c'est-à-dire au sein d'un grain unique du matériau et en absence de vide d'air et de porosité. La densité apparente, quant à elle, tient compte de l'espace entre les particules ainsi que l'effet des pores présents dans les particules. Cette densité est beaucoup plus facile à caractériser que la densité réelle. La dernière densité apparente à l'échelle du grain correspond la masse volumique d'un grain en tenant compte des pores.

Une validation en se servant de la densité apparente comme indicateur, permet de calibrer la force de contact entre les particules au sein du modèle mathématique. La force de contact est gouvernée par l'équation suivante, identique à celle présentée dans le chapitre 3, et où la validation permet d'ajuster le coefficient de contact, k_c :

$$\vec{f}_{ij}^n = \vec{f}_{el}^n + \vec{f}_{diss}^n = (k_c \delta_n + \eta_c \dot{\delta}_n) \vec{n}_{ij} \quad 5.1$$

La méthodologie utilisée consiste à remplir un contenant de particules et d'attendre l'état stationnaire où il y a immobilisation de toutes les particules. Si les vitesses de déplacement des particules sont nulles, la vitesse d'interpénétration ($\dot{\delta}_n$) entre les particules sera nulle également. La force est donc régie par le coefficient de contact et l'interpénétration entre les particules, δ_n . Si le coefficient de contact est plus important, l'interpénétration à l'état

d'équilibre sera plus faible. Si les particules sont moins interpénétrées, la quantité de particules présente dans un volume de contrôle sera plus faible ce qui aura une incidence proportionnelle avec la densité apparente.

La simulation réalisée avec le modèle consiste à laisser tomber suffisamment de particules pour remplir une boîte ayant un volume prédéterminé. Lorsque celle-ci est remplie, la surface est raclée pour retirer les particules placées sur la surface supérieure et en dehors de la géométrie de référence. Le nombre de particules dans la boîte permet de déterminer la masse totale au sein de notre volume et la densité apparente peut ainsi être déterminée.

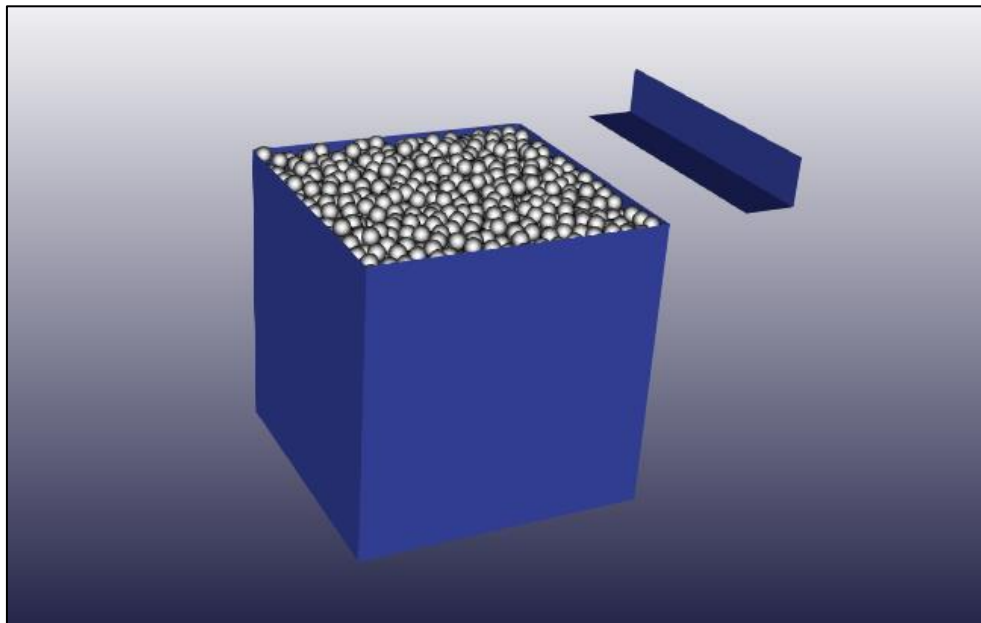


Figure 5-5 : Image de la simulation pour déterminer la densité apparente du matériau granulaire

La densité de l'alumine pleine est de 3.8 g/cm^3 , la densité apparente d'un grain est de 2 g/cm^3 et la densité apparente en vrac est de 1.1 g/cm^3 . Chaque particule simulée représente plusieurs particules d'alumine réelle.

Donc la densité des particules est fixée à 1.8 g/cm^3 de façon arbitraire. Aucune méthode mathématique permet de déterminer une densité d'un matériau granulaire quand la taille simulée est plus grande que la réalité.

Pour calibrer le coefficient k_c , la méthode itérative est utilisée. L'objectif est d'obtenir la densité apparente désirée. La simulation présentée sur la Figure 5-5 est le résultat final et représente 6497 particules de 4.63 mg chacune et d'un diamètre de 1.7 mm dans un cube de 3 cm d'arêtes. La densité apparente du matériau granulaire est donc de 1.11 g/cm^3 . Le coefficient k_c de l'équation 5.1 est donc adaptée pour obtenir la densité apparente de l'alumine.

5.1.3 IMAGERIE HAUTE VITESSE

L'injection de particules dans le liquide se produit en quelques millisecondes pour une injection de 15g de particules. L'utilisation d'une caméra standard ne permettrait pas de visionner l'injection tout en ayant une bonne définition temporelle. L'objectif d'utiliser la caméra haute vitesse pour observer l'injection est de comprendre le déplacement des particules lors de l'injection. Cette méthode permet également de déterminer la vitesse de déplacement des particules avant l'impact sur le liquide. La caméra utilisée est une « MegaSpeed MS70k ». Les vidéos sont prises à une fréquence de 300 images par seconde. Pour avoir une meilleure définition, le temps d'ouverture de la caméra est réglé au plus court possible tout en ayant une intensité lumineuse de l'image suffisante. Pour diminuer au maximum le temps d'ouverture, une lampe de 2000 W est utilisée pour assurer une intensité lumineuse suffisante.

Pour réaliser les injections de particules dans un liquide avec la présence de transfert de chaleur et changement de phase, des graines de moutarde sont utilisées. Les graines de moutarde ont une forme sphérique avec un diamètre moyen de 1.7 mm. Cette taille, beaucoup plus importante que l'alumine (80 μ m), permet de réduire le temps de simulation pendant la phase de calibration du modèle. L'avantage des graines de moutarde est le respect des proportions de densité.

Tableau 5-1 : Comparaison des densités entre la méthode de validation analogue et l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyse

	Densité apparente	Densité réelle	Densité du liquide
Expérience analogue (graine de moutarde)	0.6 g/cm ³	1.1 g/cm ³	1 g/cm ³
Expérience réelle (alumine)	1.1 g/cm ³	3.8 g/cm ³	2.2 g/cm ³

Le rapport de 2 entre la densité apparente et celle du fluide est équivalent. La densité réelle de l'alumine est plus importante que celle du bain. Les particules d'alumine mouillées auront tendance à couler plus facilement que les graines de moutarde. Mais leur comportement en radeau sera semblable. Pour permettre un transfert de chaleur et le changement de phase dans le liquide, les graines de moutarde sont préalablement refroidies avec de l'azote liquide pour approcher leur température à -175°C. La différence entre la température d'injection et la température du changement de phase du liquide est beaucoup plus faible dans le modèle physique moutarde-eau, car il est de 175°C. Cette différence de température est proche de 800°C dans les cuves d'électrolyse. Un liquide avec une température de changement de phase plus

haute permettrait d'augmenter cette différence de température. Mais ce liquide devrait être chauffé pour atteindre l'état liquide ce qui impliquerait l'apparition de convection naturelle dans le liquide. Les résultats obtenus avec l'imagerie schlieren, méthode présentée ultérieurement, seraient donc plus difficiles à interpréter.

La méthode à basse température permet de tester plusieurs configurations d'injection afin de voir l'influence sur la forme du radeau. Pour réaliser les injections, les particules sont refroidies dans un creuset et injectées à l'aide d'un entonnoir. L'entonnoir permet d'assurer d'injecter dans une zone précise et permet de reproduire l'injecteur utilisé dans l'industrie.

Pour tester différentes configurations, les particules sont injectées à différents endroits sur l'entonnoir ou avec une distance plus ou moins importante. Un test est également réalisé avec l'entonnoir incliné. Tous ces tests ont pour but de faire varier l'énergie cinétique des particules lors de leur impact à la surface du liquide. L'inclinaison de l'entonnoir permet d'augmenter la vitesse latérale des particules. Les résultats obtenus sont les suivants :

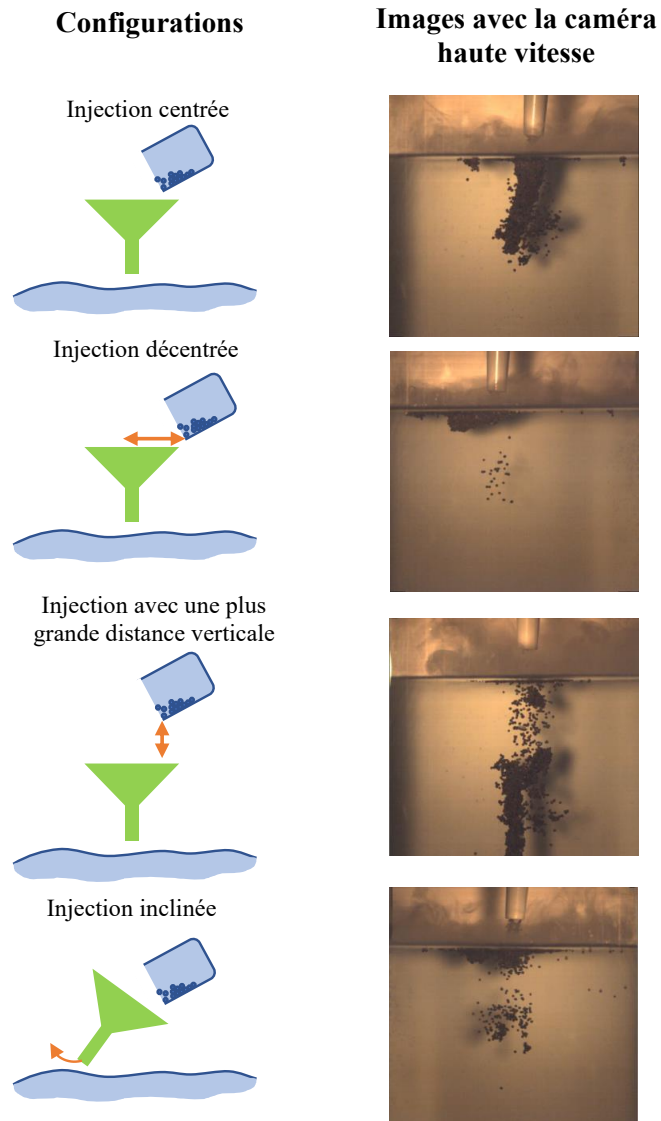


Figure 5-6 : Images prises suite à l'injection suivant la méthode d'injection

L'injection centrée permet de limiter l'interaction entre les particules et les parois de l'entonnoir. Les particules ne sont donc pas ralenties et leur énergie cinétique leur permet d'immerger dans le liquide. Cependant, l'énergie cinétique n'est pas suffisante pour laisser couler le radeau. Le changement de phase permet de maintenir les particules sous la forme d'une carotte.

L'injection décentrée permet l'augmentation l'interaction entre les particules et les parois de l'entonnoir. Les particules sont donc freinées. Leur énergie cinétique est plus faible donc les particules vont rester plus proches de la surface et former un radeau plat.

L'augmentation de la distance entre le creuset et l'entonnoir permet d'augmenter l'énergie cinétique des particules avant leur arrivée dans l'entonnoir. Leur énergie est tellement importante que le radeau va pouvoir couler. La forme du radeau est similaire à la première méthode d'injection.

L'injection avec l'entonnoir inclinée permet d'augmenter la vitesse latérale. Les particules s'éloignent du centre d'injection directement après leur impact avec la surface du liquide. Cette méthode permet de former des radeaux moins épais et de limiter la profondeur d'immersion des particules dans le liquide.

Le second avantage de l'utilisation de la caméra haute vitesse est de déterminer la vitesse de déplacement des particules. Pour déterminer la vitesse, la position d'une particule est prise entre deux frames de la vidéo. Le changement de position correspond au déplacement. Le temps et le déplacement permettent donc de déterminer la vitesse de déplacement des particules. Pour déterminer le déplacement, l'échelle de l'image doit être déterminée pour transformer un déplacement mesuré en pixel en déplacement mesuré en millimètre. Pour cela, le diamètre moyen des particules est déterminé, 1.7 mm pour les graines de moutarde. Sur l'image, le nombre de pixels pour une particule est mesuré et le rapport de pixel par millimètre est défini. La vitesse d'impact se situe autour de 1.7 mm/s lors de l'impact avec la

surface pour l'injection décentrée (injection ressemblant le plus à l'injection de l'alumine sur la forme du radeau).

5.1.4 REPÊCHAGE DE RADEAU

La méthode de repêchage des radeaux est utilisée pour caractériser l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyses et comprendre le phénomène de formation de radeau. Une étude sur le repêchage de radeau d'alumine est présentée dans la suite de ce chapitre. Cette méthode est appliquée à basse température avec les graines de moutarde pour analyser les points en commun entre les injections à haute température dans la cuve d'électrolyse et à basse température, dans le modèle analogue en laboratoire. Les conditions d'injection sont identiques aux injections réalisées avec la caméra haute vitesse. Le radeau est repêché entre 10 et 20 secondes après l'injection. Ce temps est nécessaire pour la transmission de chaleur entre les particules et le liquide et permettre le changement de phase (formation de la glace). Si le radeau est laissé une durée trop importante, la structure de glace ne sera plus présente et la forme du radeau ne pourra pas se maintenir lors du repêchage.



Figure 5-7 : Photos d'un radeau produit après l'injection de graines de moutarde, préalablement, refroidies avec de l'azote liquide

À la suite du repêchage, deux phases peuvent être observées dans les particules. La première correspond aux particules en cohésion, celles présentes sur les photos. La cohésion entre les particules est générée par la présence de glace. Cette couche de glace empêche les particules de se disperser et d'être en contact avec le liquide. Il est très difficile de déterminer l'épaisseur de cette couche, mais elle est de l'ordre de 0.1 à 0.5 millimètre. Les photos montrent un cratère dans le radeau. Ce creux est l'endroit où se trouvait la deuxième phase, les particules libres. Ces particules sont tombées lors de la manipulation du radeau. La coquille de glace empêche le liquide d'infiltrer les particules et de mouiller l'intégralité des particules. Ce cratère est situé à l'endroit d'impact des particules sur la surface du liquide.

5.1.5 IMAGERIE SCHLIEREN

a. THÉORIE ET MONTAGE DE L'IMAGERIE SCHLIEREN

L'imagerie schlieren est basée sur la relation entre la densité d'un fluide et son indice de réfraction. Puisque la vitesse de propagation de la lumière est influencée par les conditions du milieu, ceci peut induire un changement de direction des faisceaux lumineux. Les ondes du faisceau lumineux sont donc déplacées comme le montre le schéma suivant :

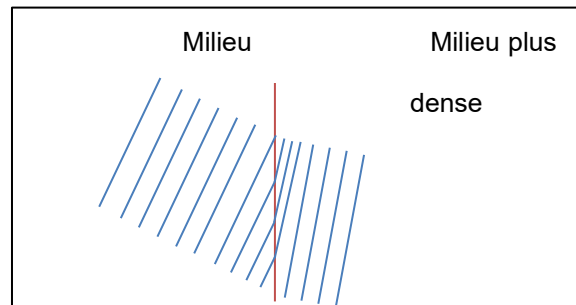


Figure 5-8: Schéma représentant la réfraction de la lumière lors d'un changement de milieu avec une variation de densité

Le montage utilisé pour réaliser de l'imagerie schlieren peut avoir différentes configurations, mais les plus courantes utilisent des miroirs ou lentilles comme le montre le schéma suivant.

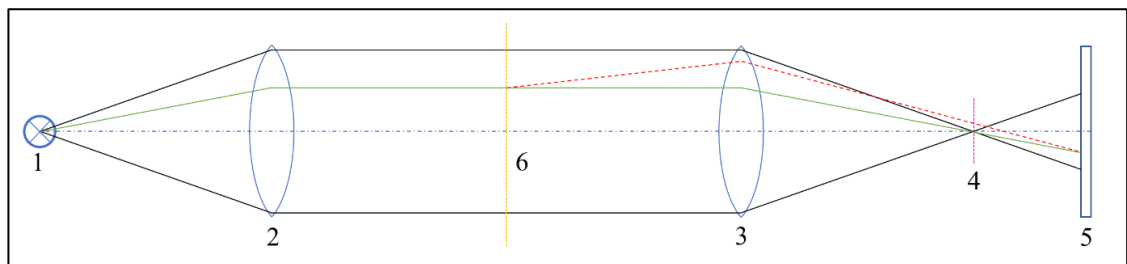


Figure 5-9 : Schéma expliquant la méthode schlieren et montrant la trajectoire d'un faisceau lumineux

La source lumineuse, située au point 1, émet des rayons lumineux dans toutes les directions en partant de la source. Une fente ou un trou de faible diamètre est donc situé au focus de la lumière pour laisser passer les rayons captés par la première lentille, le point 2. La première lentille a pour objectif de rendre les rayons parallèles les uns aux autres. Une seconde lentille, point 3, située après la zone de test, permet de focaliser les rayons sur un filtre ou un couteau (ligne violette), le point 4. Les rayons sont projetés sur un écran ou sur une caméra pour visualiser les résultats, le point 5.

Le filtre ou le couteau sont utilisés pour observer les perturbations des rayons lumineux produits dans la zone de test (point 6). Un couteau, situé au point focal de la seconde lentille, permet de mettre en évidence les zones particulièrement perturbées. À la différence, un filtre est constitué de bandes de différentes couleurs ou d'une alternance de bandes opaques et transparentes qui permettent de quantifier les variations selon un « diagramme de surface ». Le choix des bandes de différentes couleurs a été choisi pour les expériences présentées par la suite.

Le montage utilisé lors des expériences utilise deux miroirs pour faire remplacer les lentilles du schéma précédent. Les miroirs ont une forme convexe. Le montage correspond à la photo suivante :

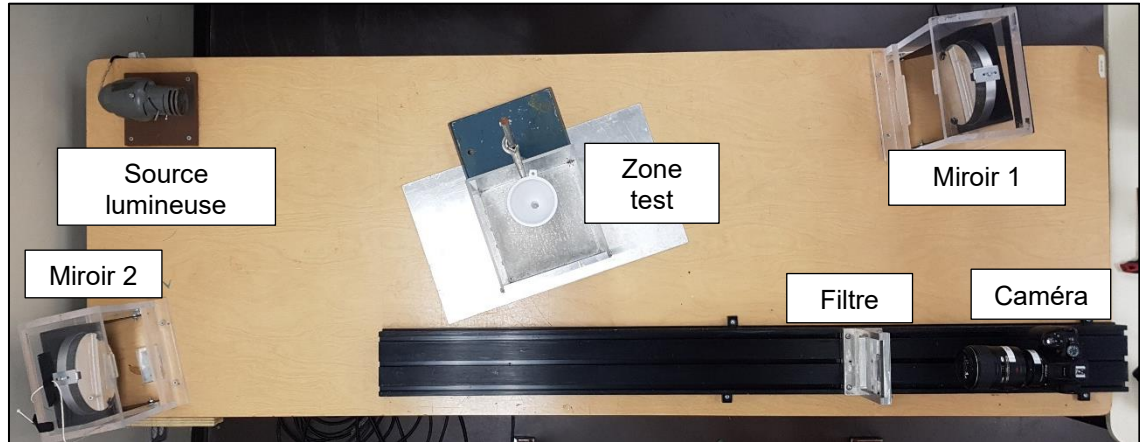


Figure 5-10 : Photo du montage schlieren utilisé pour réaliser les expériences

La source lumineuse est une lampe halogène. La source de lumière doit être le plus blanche possible pour réduire l'interaction avec les couleurs du filtre. Les lampes à l'halogène et au xénon sont les deux technologies les plus adaptées. La caméra est une Nikon D5300 munie d'une lentille 105mm macro doublée.

b. EXPÉRIENCE D'INJECTION DE GRAINES DE MOUTARDE

Comme pour les expériences analogues présentées précédemment, 14 grammes de graines de moutarde sont injectés dans l'eau. Durant toute l'injection et le réchauffement des particules, la caméra filme l'expérience.

Les images obtenues avec le filtre en position verticale sont les suivantes :

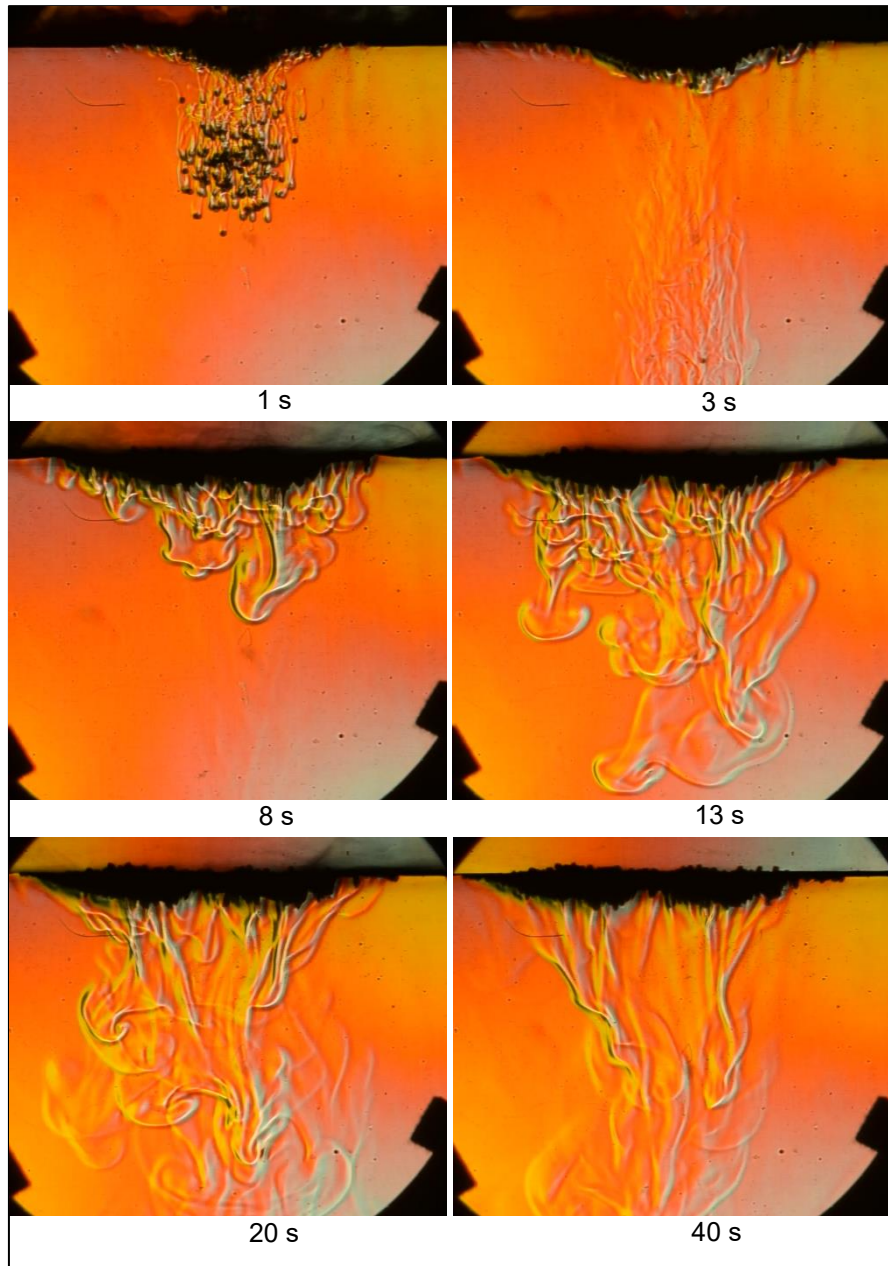


Figure 5-11 : Images obtenues, avec l'imagerie schlieren avec le filtre en position horizontale, de l'injection des graines de moutarde à différent temps après l'injection

Lors du premier instant après l'injection, plusieurs particules sédimentent sous la forme d'un nuage. Ces particules ont la capacité de couler selon deux hypothèses. La première hypothèse est que l'énergie cinétique transférer par les particules au-dessus est suffisante pour briser l'équilibre de

ces particules qui aurait dû flotter. La seconde hypothèse porte sur le changement de phase du liquide et le transfert thermique entre les particules et le liquide. Le temps n'est pas suffisant pour former un lien de glace entre les particules. Les particules sont libres de couler.

Sous le radeau, le transfert thermique entre les particules et le liquide permet de refroidir suffisamment pour former de la glace. Cette glace forme une coquille et crée un lien entre les particules situées à l'interface. Cette glace permet de créer une cohésion entre les particules et former le radeau.

Ces étapes rencontrées lors de l'injection sont reproductibles comme le montre les images prises avec le filtre en position horizontale :

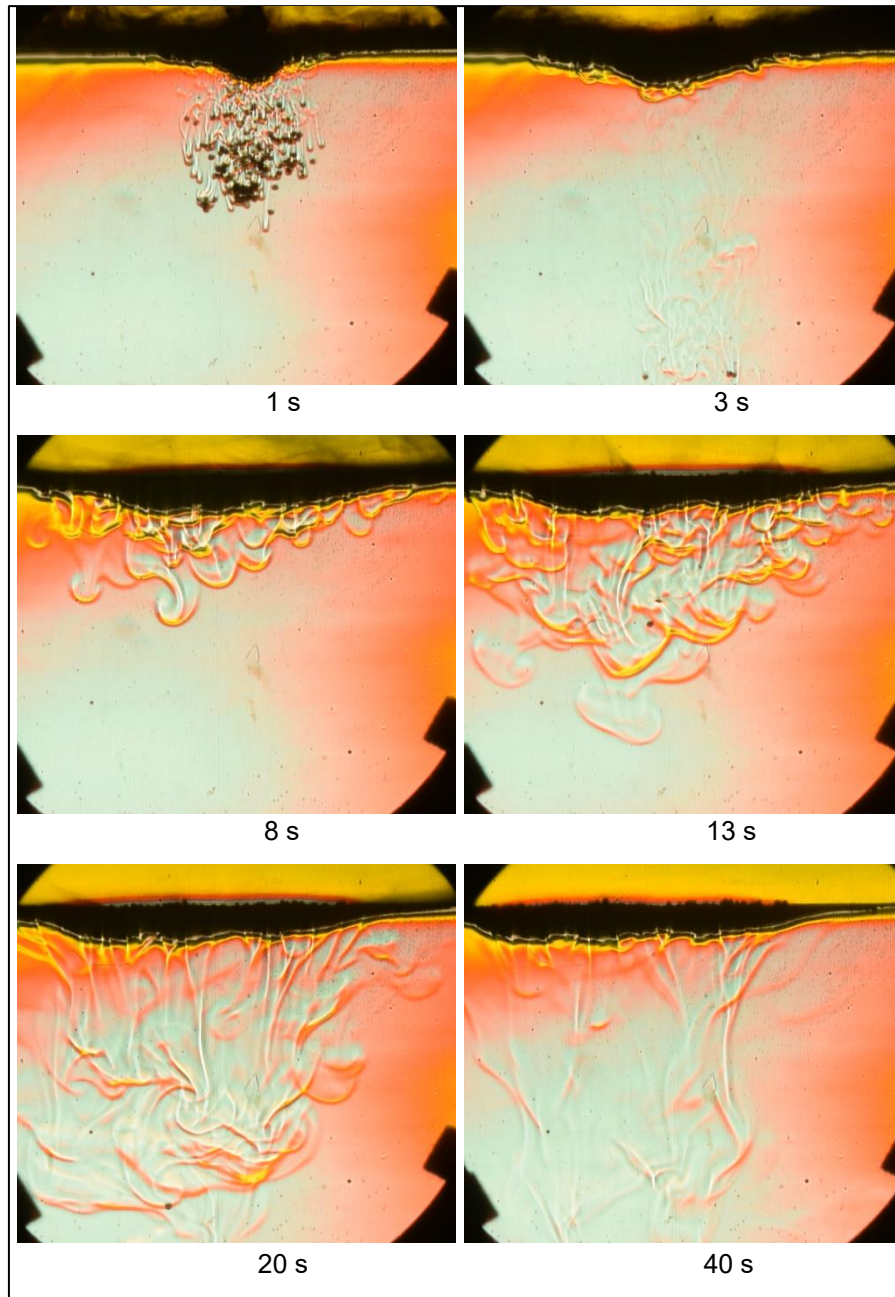


Figure 5-12: Images obtenues, avec l'imagerie schlieren avec le filtre en position verticale, de l'injection des graines de moutarde à différent temps après l'injection

Après quelques secondes suivant l'injection (5 à 8s), la couche limite thermique se décroche du radeau. La densité du liquide augmente avec la baisse de la température. Quand la couche limite thermique atteint un gradient de température suffisant avec l'ambient, elle va se décrocher du radeau et

laisser place à un nouveau volume de liquide. La couche limite va donc chuter dans le liquide sous la forme de « méduses » ou « fingers ».

c. EXPÉRIENCE DE LA DISSOLUTION D'UN BLOC DE SEL

Ces premières expériences montrent l'observation de la variation de la densité avec le changement de température. La méthode schlieren s'applique également au changement de densité par la variation de la concentration. Pour générer une variation de concentration, l'étude va porter sur la dissolution du sel dans l'eau. Pour obtenir un échantillon de sel solide et homogène, la roche de sel de l'Himalaya est utilisée. Cette roche a les propriétés d'être du sel pur sans raffinage et additifs. Étant sous la forme d'une roche, la réalisation d'échantillon est facile et la désintégration après l'injection est plus faible.



Figure 5-13: Photo d'un échantillon de sel de l'Himalaya découpé pour l'expérience

Les échantillons sont réalisés sous la forme de cylindre avec un trou au centre pour le passage du support. Le support est constitué de trois broches pliées à l'extrémité inférieure pour bloquer l'échantillon. Ce choix de support

permet de limiter la surface de contact sur la partie inférieure de l'échantillon et donc de limiter l'impact sur les écoulements et la dissolution.

La roche de sel est d'une épaisseur de 28 mm en moyenne. L'échantillon est immergé à sa moitié pour garder un repère des dimensions initiales.

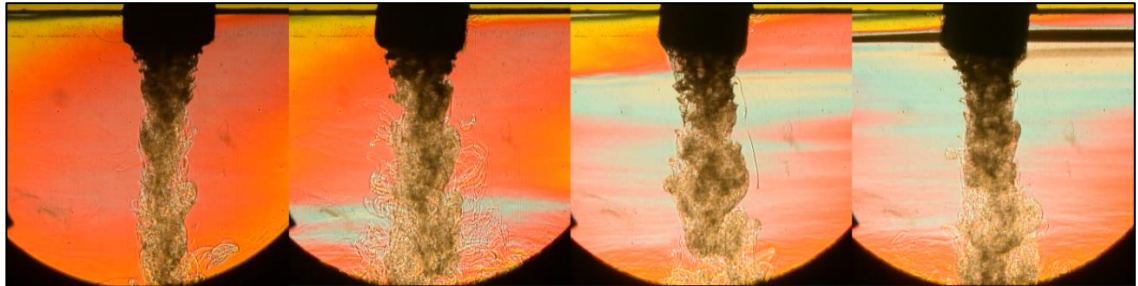


Figure 5-14 : Image schlieren de la dissolution d'un bloc de sel dans l'eau
Source : (Bouvais *et al.*, 2021)

Les images montrent la convection liée à la dissolution du sel. La troisième image montre une ligne verticale sur la droite de courant convectif. Cette ligne montre la dissolution d'une particule de sel générée par la désintégration du bloc. Les couleurs du fond passent d'orange, au début, à bleu sur la dernière image. Cette information indique la stratification de la concentration de sel dans l'eau du réservoir.

d. EXPÉRIENCE DU COUPLAGE DU TRANSFERT THERMIQUE AVEC CHANGEMENT DE PHASE ET DISSOLUTION

La réfraction de la lumière due à un changement de concentration engendre une déviation importante. Si la réfraction est trop importante pour le montage, les zones à fort gradient de concentration deviennent sombres. Cette réfraction étant plus faible avec le changement de température (coloré), les deux expériences peuvent être réalisées simultanément. Cette troisième méthode expérimentale va permettre de voir les différentes étapes lors d'une injection pour d'observer l'impact de la formation de la gelée sur la dissolution.

Pour refroidir les échantillons, l'échantillon est plongé dans de l'azote liquide. Sa température approche les -180°C . L'échantillon est directement placé sur le support et plongé dans l'eau. Les images obtenues sont les suivantes :

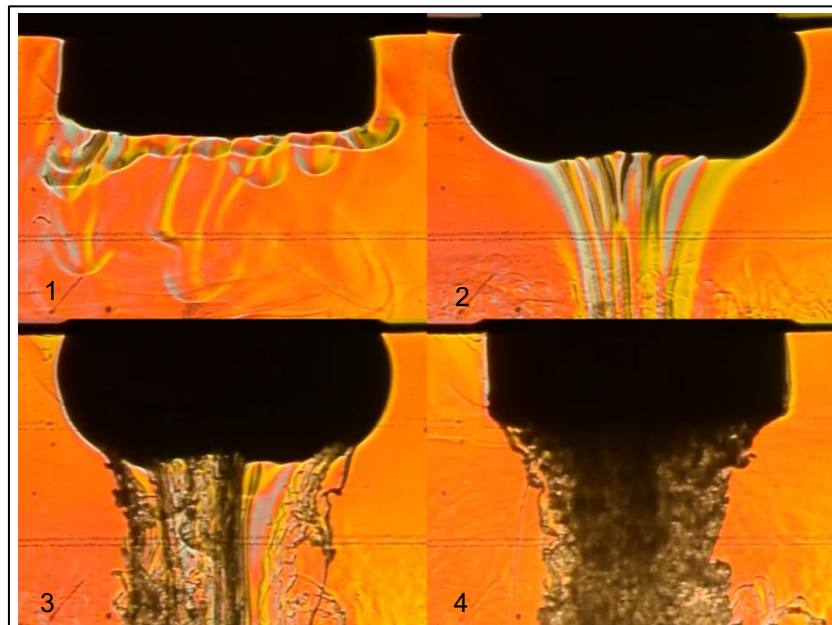


Figure 5-15: Images schlieren d'un bloc de sel refroidi avec de l'azote liquide puis plongé dans l'eau

Source : (Bouvais *et al.*, 2021)

La Figure 5-15 montre l'instant juste après l'injection avec le début de la convection naturelle gouvernée par les échanges thermiques. La glace commence à se former autour de l'échantillon d'où la courbure sur les parties latérales de l'échantillon. L'image 2 montre la convection naturelle en régime établi et la glace atteint sa taille maximale. L'image 3 montre le début de la dissolution dans les coins inférieurs du radeau. La glace a commencé à diminuer sur les côtés et a disparu sur la partie inférieure pour permettre la dissolution. La dissolution commence en moyenne, autour de 3 minutes après l'injection de l'échantillon. L'image 4 montre que la dissolution est plus rapide et l'écoulement ressemble aux expériences avec l'échantillon non refroidi. La glace est totalement disparue.

L'échantillon va refroidir l'eau donc augmenter la densité (à la condition que l'eau reste au-dessus de 4 °C). La dissolution du sel augmente aussi la densité. Les échanges thermiques et massiques, observés dans cette expérience, induisent la convection naturelle dans la même direction. Pour comparer avec les phénomènes physiques présents dans les cuves d'électrolyse, l'équation de la densité pour le bain en fonction de ses constituants est la suivante (Kvande & Rorvik, 1985):

$$\begin{aligned}
 d_{\text{bain}}[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}] = & 2.64 - 0.0008T[^\circ\text{C}] + 0.18(\text{ratio mass NaF/AlF}_3) & 5.2 \\
 & - 0.008(\% \text{mass Al}_2\text{O}_3) + 0.005(\% \text{mass CaF}_2) \\
 & + 0.008(\% \text{mass MgF}_2) - 0.004(\% \text{mass LiF})
 \end{aligned}$$

L'équation montre qu'une diminution de la température augmente la densité et qu'une augmentation de la concentration diminue la densité. Les échanges thermiques et massiques induisent donc des convections naturelles

opposées et différentes de l'expérience dans l'eau. Le phénomène d'opposition pourrait être observé en injectant un bloc de sel chauffé et positionné au fond du réservoir. Le sel saturera le fond du réservoir et l'eau chauffée par l'échantillon remontera vers la surface. Cette expérience apporte des réponses sur l'écoulement du fluide, mais le changement de phase ne peut pas être considéré. L'image obtenue à 15s et 90s après le début de l'immersion de l'échantillon dans l'eau est la suivante :

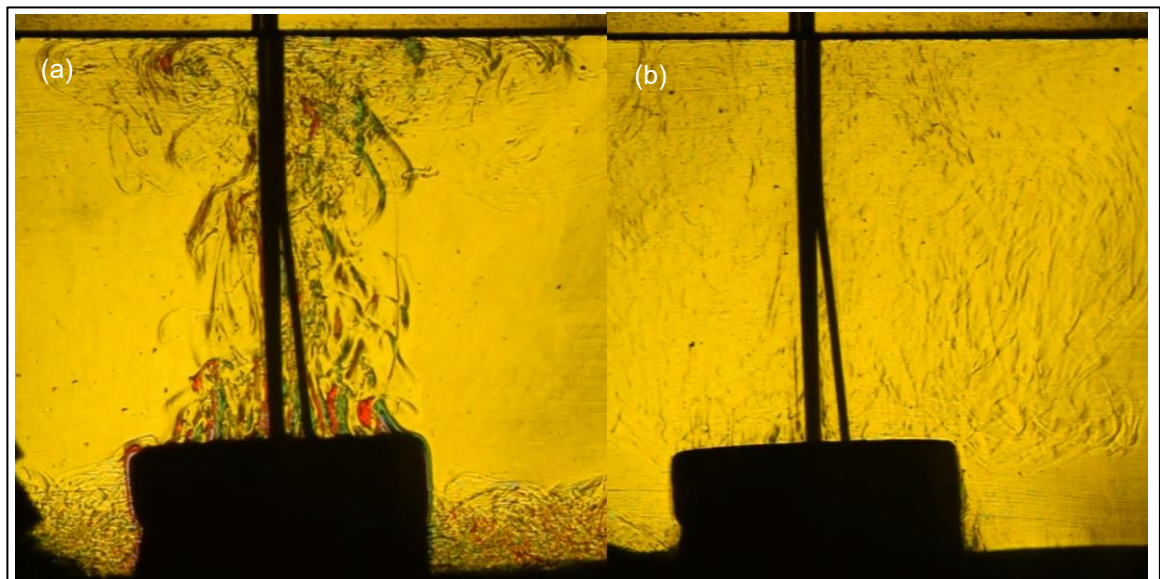


Figure 5-16 Images schlieren d'un échantillon de sel chauffé puis immergé dans le fond d'un réservoir d'eau ((a) : 15s après l'immersion; (b) : 90s après l'immersion)
Source : (Bouvais *et al.*, 2021)

La Figure 5-16 (a) montre que l'échange thermique dirige l'écoulement et le liquide monte dû à la diminution de la densité. Sur la Figure 5-16 (b), l'échantillon est à la température du liquide et un faible écoulement à la base de l'échantillon peut être observé. L'eau ayant une teneur en sel plus importante, le sel entraîné par la convection naturelle du début retombe à la suite de son retour à la température ambiante.

Toutes ces expériences réalisées avec la méthode schlieren permettent de comprendre les écoulements présents sous le radeau lors de l'injection de l'alumine. Mais l'intensité de cet écoulement ne peut être vérifiée, car la variation de la densité en fonction de la température et la concentration, l'évolution de la viscosité, la différence de température entre le radeau et le fluide, l'enthalpie de solidification ne sont pas les mêmes.

e. **COMPARAISON AVEC LE MODÈLE MATHÉMATIQUE**

Le modèle peut être comparé dans un premier temps aux Figure 5-11 et Figure 5-12 avec la figure suivante :

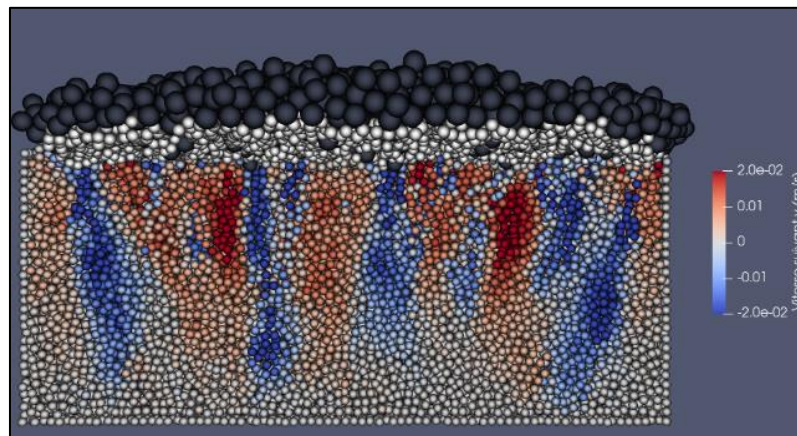


Figure 5-17 : Convection naturelle dans le bain 2 secondes après l'injection

À un moment identique après l'injection les résultats peuvent paraître différents. Mais la différence de température entre les particules injectées et le liquide est beaucoup plus importante avec l'injection d'alumine. Le décrochage de la couche limite thermique est donc plus rapide. Ceci peut expliquer que la convection naturelle est présente après 2 secondes suivant l'injection de l'alumine contre 8 secondes avec les graines de moutarde.

Le phénomène d'observer plusieurs écoulements est visible également avec le bloc de sel sur la Figure 5-16. Sur le point de vue de la dissolution, le modèle permet d'obtenir les images suivantes :

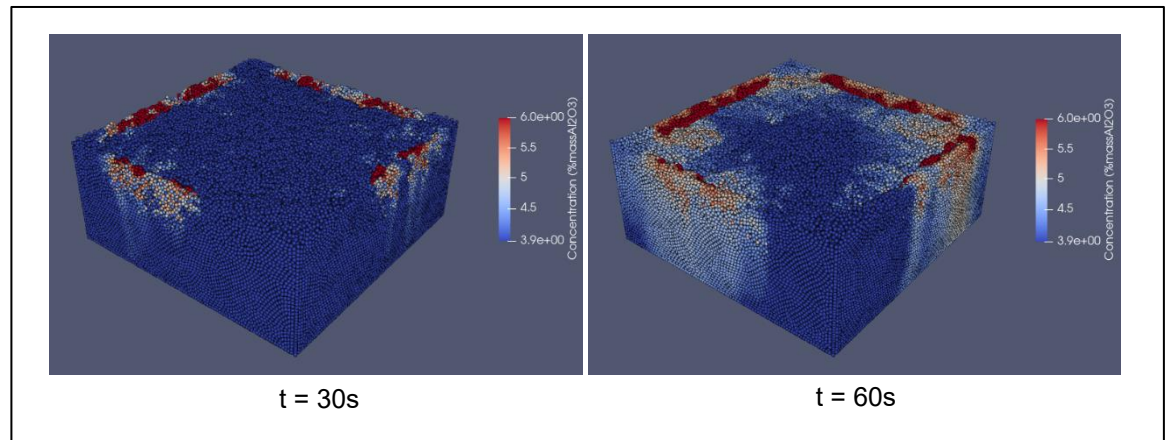


Figure 5-18: Pourcentage massique d'alumine dissoute dans le bain à 30 secondes et 60 secondes après l'injection

Le point similaire à la Figure 5-15 montrant le bloc de sel refroidi, est la limitation de la dissolution engendrée par la présence de glace ou de bain solidifié. Encore une fois, les similitudes sont impactées par les gradients de température plus faible avec la méthode analogue. Donc la disparition du bain solidifié n'est pas présente dans l'injection d'alumine contrairement au bloc de sel qui monte à une température positive dans l'expérience dans l'eau.

5.1.6 VALIDATION DE VITESSE D'ÉCOULEMENT LIÉ À LA CONVECTION NATURELLE

La convection naturelle liée à la variation de température dans le bain est simulée par l'ajout d'une accélération comme présenté dans la section 3.5.1.

Cette accélération génère un écoulement dans le fluide représentant la convection naturelle. La validation de la vitesse d'écoulement est la méthode la plus simple pour s'assurer que le domaine de vitesse obtenue par cette équation correspond bien à la réalité. Pour réaliser cette validation, la vélocimétrie par images de particules est utilisée (PIV).

La méthode PIV consiste à prendre deux photos d'un fluide rempli de particules à deux instants précis (Figure 5-19). La comparaison de la position des particules entre les deux images permet d'analyser l'écoulement du fluide. La Figure 5-20 montre l'ensemble de l'installation nécessaire au fonctionnement d'un PIV. Une image capturée par la caméra est semblable à l'image suivante :



Figure 5-19: Image réelle capturée par la caméra utilisée avec le PIV

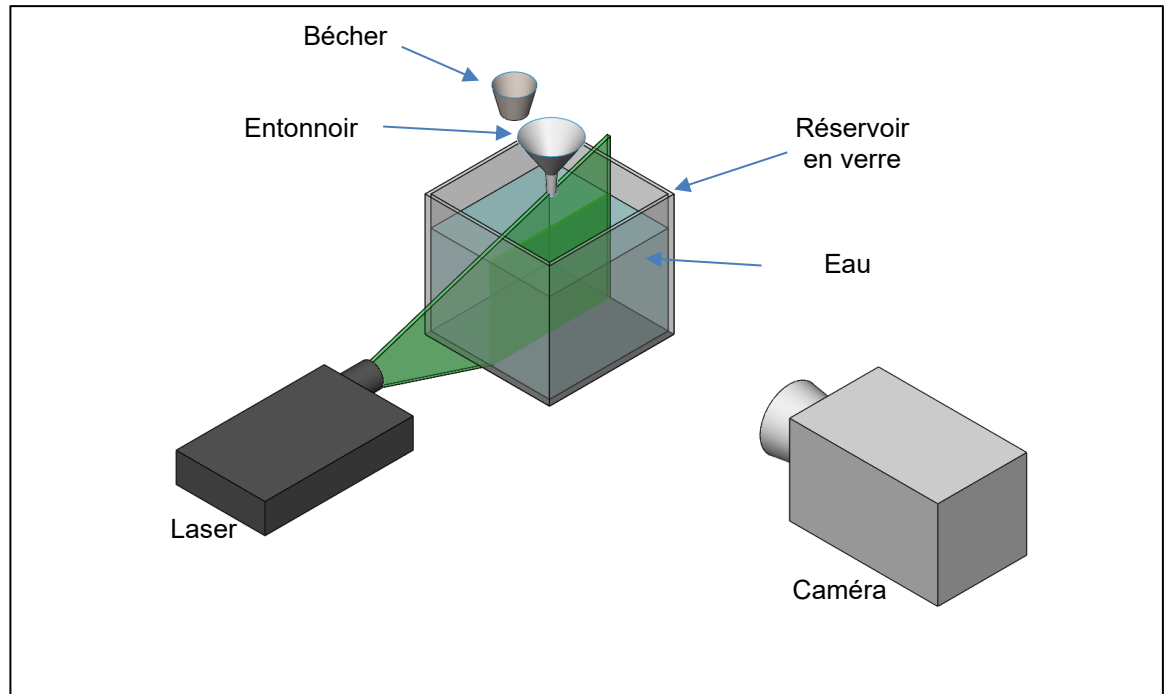


Figure 5-20 : Schéma de l'installation de l'imagerie PIV

Pour réaliser les expériences, la méthode d'injection de graines de moutarde présentée avec l'imagerie schlieren est renouvelée. Les graines sont refroidies avec de l'azote liquide pour atteindre une température avoisinant les -175°C . La différence avec les expériences schlieren, des attache-câbles sont fixés autour de l'entonnoir de façon verticale (voir Figure 5-21). Ces tiges permettent de contenir le radeau en dessous de l'entonnoir sans trop perturber sa formation. La zone d'étude restera fixe tout le long de l'acquisition et permettra une analyse plus facile.



Figure 5-21 : Montage avec les attache-câbles pour contenir le radeau

Simultanément à l'injection, l'acquisition des images avec le PIV débute. La prise d'image est fixée à une vitesse de 21 Hz avec un temps d'exposition de 1 ms. Le logiciel permet par la suite l'analyse des images et permet d'obtenir l'écoulement dans le fluide 10 secondes après l'injection (Figure 5-22). Ce temps est choisi car il permet d'observer un écoulement stabilisé et plus facile à comparer au modèle.

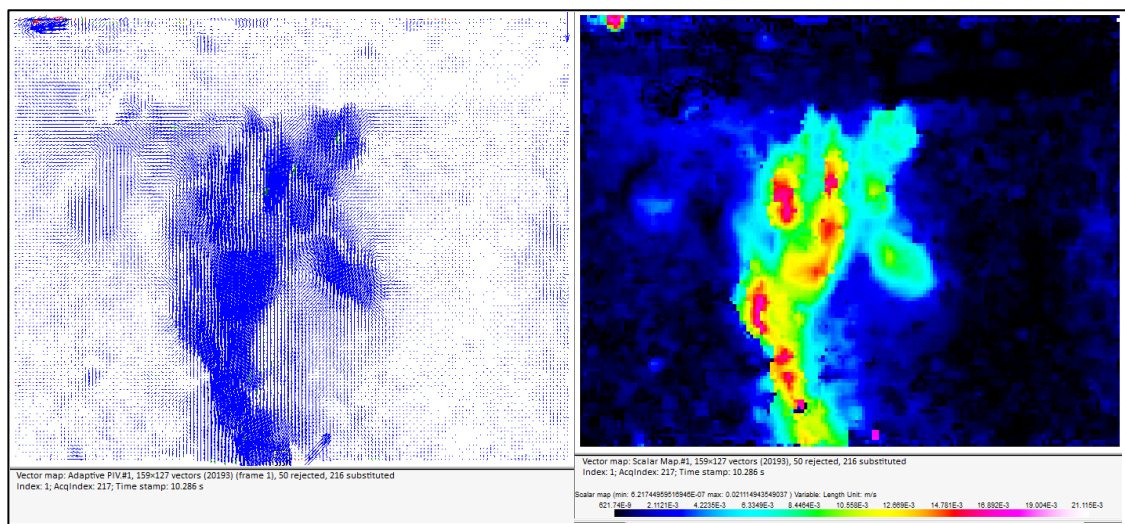


Figure 5-22 : Analyse obtenue avec l'imagerie PIV de la convection naturelle à la suite de l'injection de graines de moutarde refroidies

Les résultats montrent que la vitesse de l'écoulement est principalement comprise entre 10 mm/s et 20 mm/s dans l'écoulement généré par la convection naturelle. La densité de l'eau étant plus importante quand sa température diminue, le fluide descend comme le montrent également les images obtenues avec le PIV. La colonne de fluide descendant touche le fond du réservoir. Le fluide a donc besoin de parcourir toute cette distance pour se réchauffer et atteindre la température moyenne du réservoir.

Les résultats obtenus peuvent être comparés à la Figure 5-17 et montrent que la vitesse de descente du fluide est du même ordre de grandeur. Comme les comparaisons précédentes entre les expériences et le modèle, la rapidité de la mise en place de la convection naturelle dans le modèle est différente avec les expériences analogues dues au gradient de température plus important. De plus, la vitesse est du même ordre de grandeur, mais aucune validation peut nous dire si la vitesse est plus ou moins importante dans le bain. Mais cette méthodologie avec une expérience analogue permet de comprendre le mécanisme et donner une base avant une expérience identique avec de l'alumine dans le bain.

5.2 . VALIDATIONS AUX CONDITIONS D'OPÉRATION DES CUVES D'ÉLECTROLYSE

Cette seconde section présente les différentes expériences de validation réalisées aux conditions d'opération des cuves d'électrolyse. L'objectif est de s'assurer du lien entre les méthodes analogues présentées précédemment et l'injection de l'alumine dans les cuves. Ces validations vont

permettre également de finir la calibration du modèle mathématique. Cette section présente la mesure de la température d'un radeau et l'étude de la structure d'un radeau fabriqué en laboratoire et repêché.

5.2.1 MESURE DE TEMPÉRATURE D'UN RADEAU DURANT L'INJECTION

a. CALIBRATION DE L'ÉMISSIVITÉ DE L'ALUMINE

La méthode à basse température a permis d'observer les échanges thermiques en dessous d'un radeau avec des conditions à basse température. Mais la différence de température entre l'alumine injectée et le bain est beaucoup plus importante qu'avec les graines de moutarde. Pour valider l'échange thermique dans l'alumine après l'injection, il a été nécessaire de mesurer l'évolution de la température à la surface supérieure du radeau.

Le Tableau 5-2 montre le comparatif entre l'utilisation de la caméra thermique et un thermocouple pour la mesure de la température de la surface supérieure d'un radeau suite à l'injection :

Tableau 5-2: Tableau comparatif entre l'utilisation de la caméra thermique et un thermocouple pour la mesure de la température du radeau

	Caméra thermique	Thermocouple	
Type de mesure	Non-intrusif Mesure globale	Perturbation de l'injection Mesure à un point précis	
Position de la mesure	Précis et adaptatif	Non précis car le radeau n'est pas encore injecté	
Calibration	Émissivité de l'alumine inconnue	Aucune calibration nécessaire	
Vitesse de mesure	Mesure de la température en post-traitement	Thermocouple dégainé : Rapide mais fragile	Thermocouple gainé : Retard sur la mesure mais robuste
Choix	✓		

Le choix porte donc sur l'utilisation de la caméra thermique. La caméra thermique est une solution viable, mais implique également des imperfections pour ce type de mesure. La caméra thermique est basée sur la mesure du flux thermique émis par rayonnement de l'objet mesuré. La position de la caméra ne pouvant pas être proche du bain pour ne pas l'endommager, l'ambient impacte la précision de la mesure. Mais ce paramètre ne sera pas considéré, car impossible à quantifier.

La deuxième difficulté concerne la valeur de l'émissivité. L'équation du flux mesuré par la caméra thermique est la suivante :

$$\varphi_{ray} = \varepsilon_{ray} \sigma_{ray} (T_{obj}^4 - T_{cap}^4) \quad 5.3$$

Où T_{obj} et T_{cap} sont la température de l'objet mesuré et la température du capteur de la caméra thermique, σ_{ray} est la constante de Stefan-Boltzmann et ε_{ray} correspond à l'émissivité. Une émissivité de 1 correspond à un corps noir, l'émission est maximale. L'expérience réalisée se déroule sur une grande plage de température (de 150°C à 960°C) ce qui implique un changement continu de l'émissivité de l'alumine comme le montre le graphique suivant :

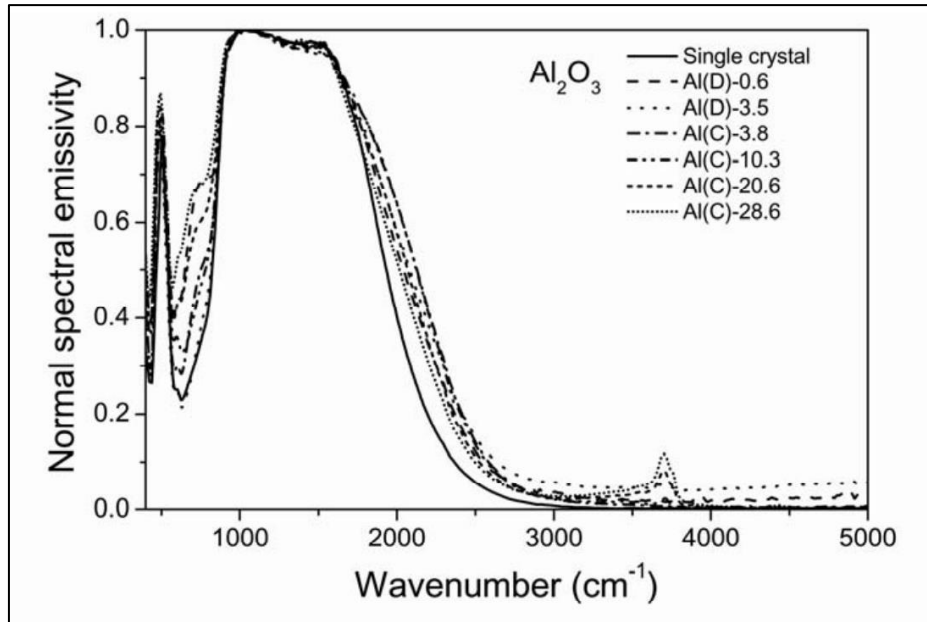


Figure 5-23 : Émissivité d'un cristal d'alumine en fonction du nombre d'onde
 Source : (Rozenbaum, De Sousa Meneses, & Echegut, 2009)

Ce graphique montre l'émissivité pour un cristal unique d'alumine. Avec l'utilisation de la loi de Wien, le graphique précédant peut-être traduit en fonction de la température :

$$\lambda_m T = 2.898 [K \cdot mm] \quad 5.4$$

Où λ_m et T sont la longueur d'onde [mm] et la température [K].

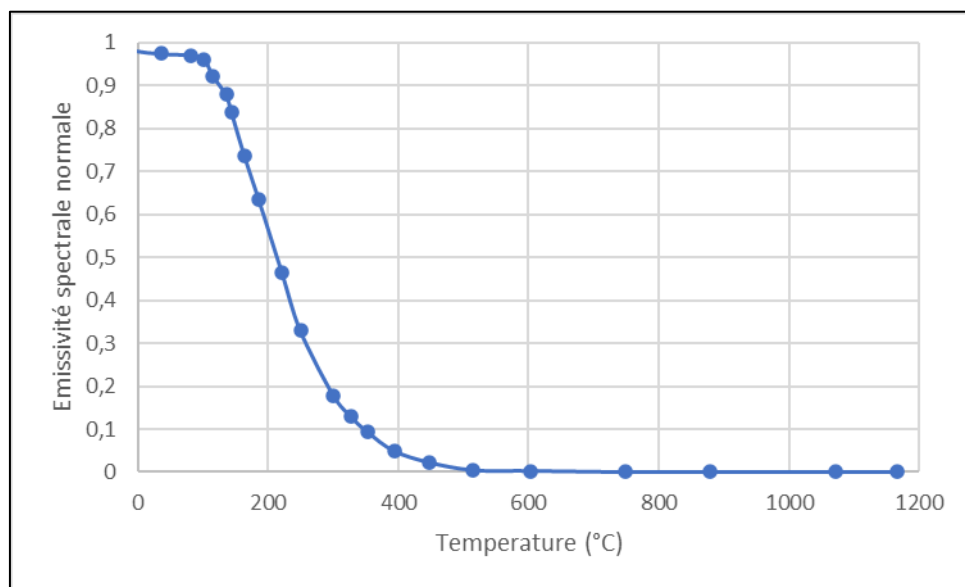


Figure 5-24 : Courbe de l'émissivité en fonction de la température

La variation de l'émissivité est très importante et tombe nulle à haute température. Une expérience a dû être réalisée pour s'assurer que ces valeurs sont applicables à un matériau granulaire.

L'expérience consiste à chauffer un récipient rempli d'alumine. La surface supérieure de l'alumine est divisée en deux zones : de l'alumine pure et de l'alumine recouverte d'une peinture noire résistante à haute température. Durant le refroidissement à l'air libre, une caméra thermique (FLIR-T62101) est utilisée pour déterminer la température de chacune des surfaces. Des thermocouples sont placés légèrement sous la surface de l'alumine pour avoir les températures de références. La photo du montage avant l'expérience est montrée sur la figure suivante :

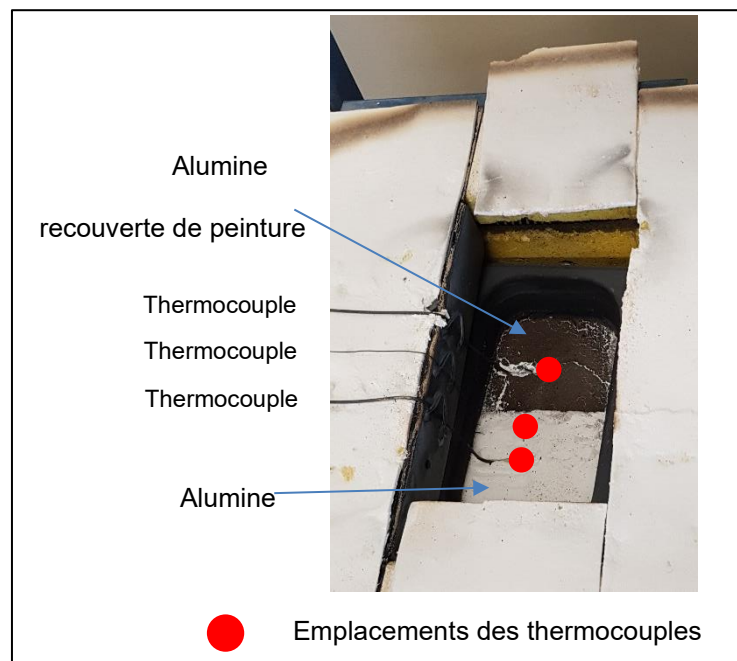


Figure 5-25 : Photo de l'expérience pour estimer l'émissivité de l'alumine

À la suite du chauffage de l'échantillon à 1100°C, le four est éteint puis l'ouverture centrale du couvercle est retirée. La caméra thermique filme la surface de l'échantillon pendant l'ensemble de son refroidissement. Les trois thermocouples sont enregistrés en continu avec une carte d'acquisition toutes les 500ms. Un « trigger » est utilisée pour caler les courbes de température obtenues avec les thermocouples et les résultats de la caméra thermique. La courbe obtenue est la suivante :

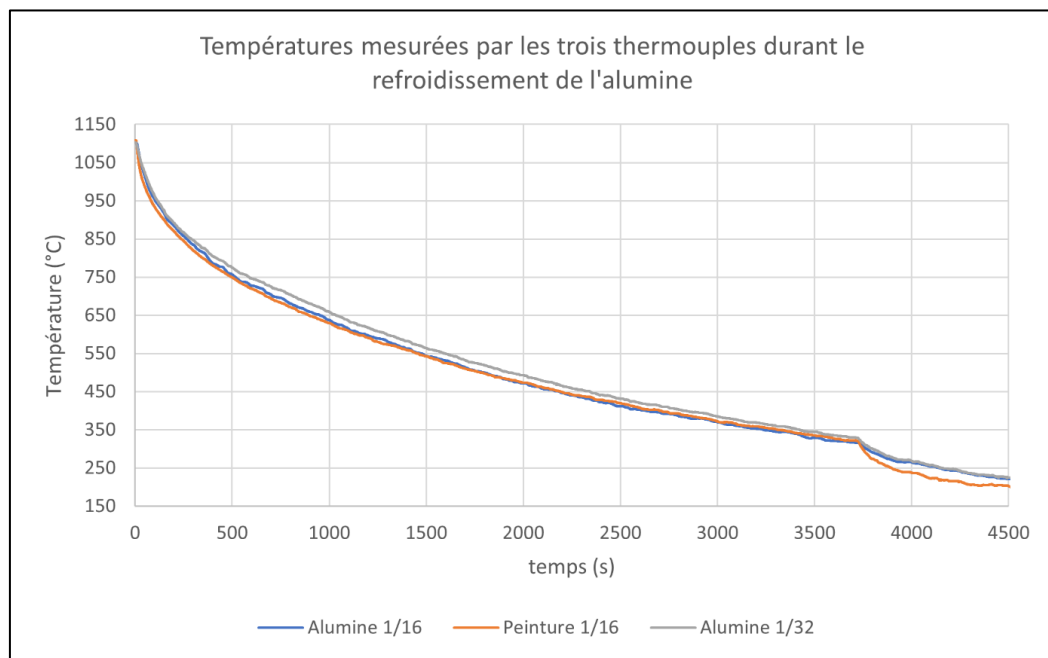


Figure 5-26: Évolution de la température de la surface de l'échantillon d'alumine prise par les trois thermocouples

Les trois thermocouples montrent une évolution similaire. Le thermocouple de diamètre de 1/32 indique une température légèrement supérieure. Cette différence est possiblement engendrée par sa position légèrement inférieure à la surface de l'alumine comparée aux autres thermocouples. L'augmentation de la pente autour de 3750 secondes est engendrée par une ouverture supplémentaire du débit d'air au sein du four. Le

refroidissement étant très lent, le couvercle du four fut enlevé pour éviter une expérience trop longue et engendrer l'analyse d'une vidéo trop lourde provenant de la caméra thermique. Sur cette dernière partie de l'expérience, le thermocouple placé au niveau de la peinture diminue de façon plus importante. Sa position doit être légèrement supérieure à la surface de l'alumine. L'ouverture du four a permis l'augmentation des pertes par convection naturelle, donc la chute de température est plus importante dans l'air proche de l'échantillon. Le thermocouple de 1/32 et de la peinture rencontre donc de légères différences. Pour cette raison, le thermocouple 1/16 situé à la surface d'alumine pure sera utilisé pour calibrer l'émissivité.

Le logiciel fourni avec la caméra thermique permet de placer des sondes sur la vidéo pour tracer l'évolution de la température en fonction du temps pour différente émissivité. La position des sondes est montrée sur la Figure 5-27. Deux sont situées sur la peinture noire, deux sur l'alumine. Faisant suite à une étude préliminaire qui a permis de cibler l'étendue de la zone d'étude pour l'émissivité. Une température respective est calculée pour les émissivités de 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 et 1.0.

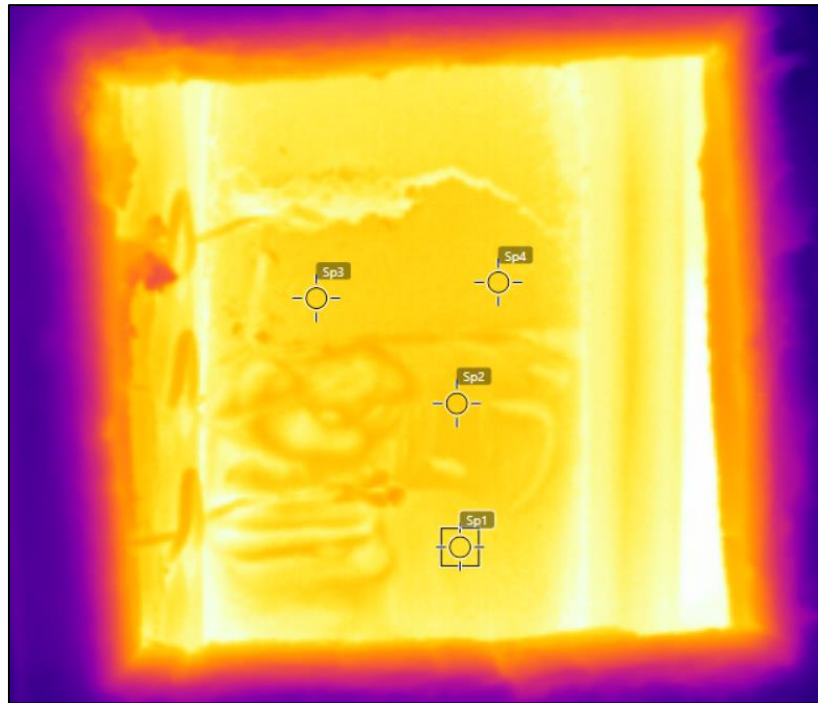


Figure 5-27: Image de caméra thermique obtenue avec le logiciel FLIR Tools avec la position des sondes de mesure

Les sondes Sp1 et Sp2 sont placées sur l'alumine pure et les points Sp3 et Sp4 sont placés sur la peinture. Leurs noms seront respectivement « Alumine 1 », « Alumine 2 », « Peinture 1 » et « Peinture 2 ». La température de l'alumine en fonction de l'émissivité pour le point « Alumine 1 » est présentée à la Figure 5-28:

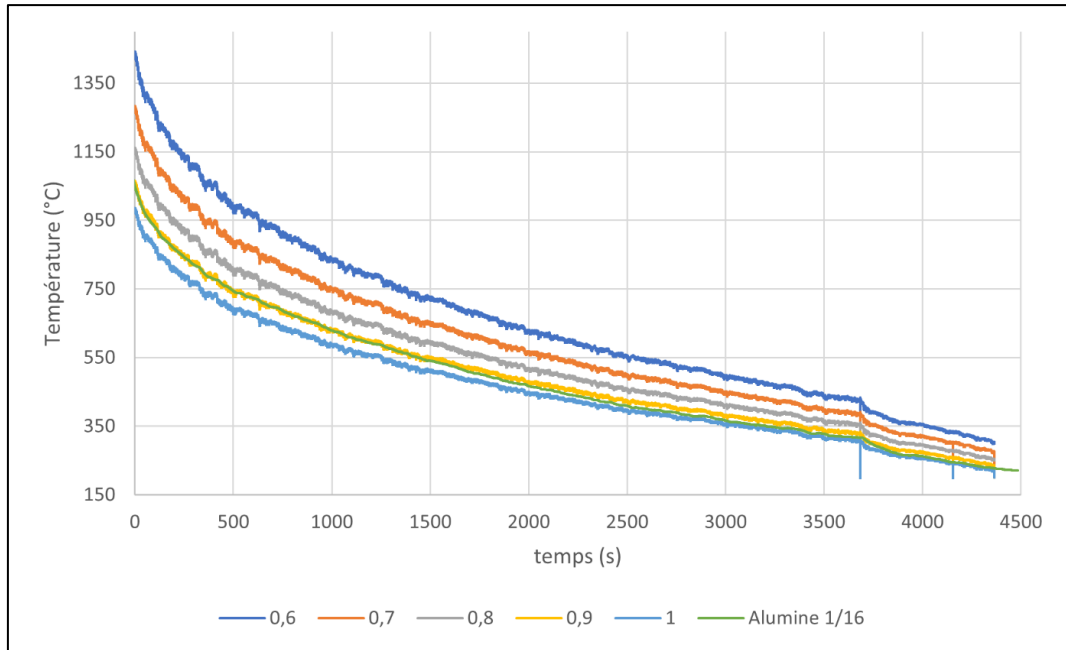


Figure 5-28 : Évolution de la température de l'échantillon mesurée avec la caméra thermique pour différentes émissivités et avec le thermocouple à la surface de l'alumine pure

Ce graphique montre que la courbe obtenue avec le thermocouple est proche de la courbe à une émissivité de 0,9. Pour une plus grande précision et voir l'évolution de l'émissivité en fonction de la température pour les 4 sondes de mesure, une analyse par interpolation linéaire permet d'obtenir le graphique suivant :

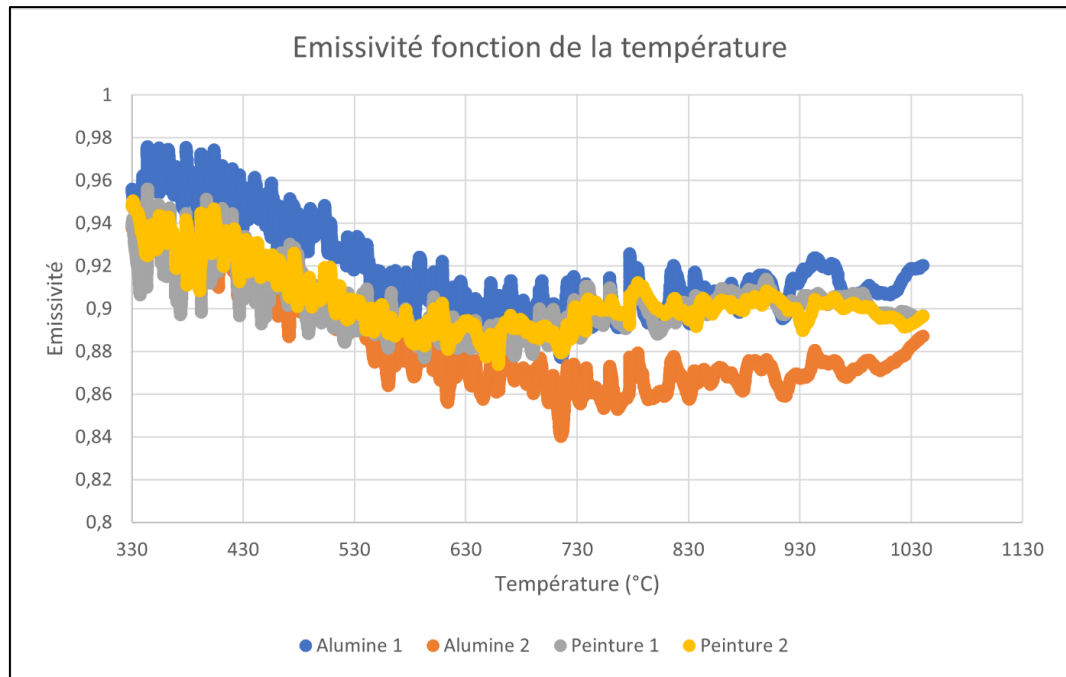


Figure 5-29 : Émissivité de l'alumine en fonction de la température pour les 4 sondes placées sur le logiciel de la caméra thermique

L'émissivité est très stable entre chacune des sondes pour une température supérieure à 330°C. Une divergence de l'émissivité est observée à la suite de l'ouverture du four pour une température inférieure à 330°C. L'exposition de la caméra thermique à une surface plus grande de l'intérieur du four pourrait impacter les résultats mesurés avec la caméra thermique.

Les résultats obtenus montrent que le comportement d'un matériau granulaire est très différent de son comportement sous la forme d'un grain monocristallin, car la seule source de la littérature indiquait que l'émissivité converge vers 0 pour une température supérieure à 400°C. Cette forte différence est engendrée par la présence de vide entre les particules et des pores présents de façon importante sur l'alumine. Ce comportement est rencontré avec la neige par exemple (Hori *et al.*, 2006).

Le résultat obtenu sur l'alumine pure et l'alumine recouverte de peinture résistante à haute température ont des tendances similaires. Elle sera utilisée lors de l'expérience de l'injection d'alumine dans le bain pour vérifier son efficacité.

Tenant compte des erreurs potentielles présentes durant l'expérience et la précision de la méthode, l'émissivité de l'alumine sera fixée à 0,9. Maintenant que l'émissivité est déterminée, une expérience d'injection d'alumine dans le bain est réalisée pour déterminer l'évolution de la température au-dessus du radeau.

b. MESURE DE LA TEMPÉRATURE DE LA SURFACE SUPÉRIEURE D'UN RADEAU

Cette expérience consiste en l'injection de 14g d'alumine primaire suivie de 1g d'alumine primaire peinte avec la peinture haute température. L'objectif est d'avoir de l'alumine pure et de l'alumine peinte sur la surface supérieure du radeau. L'injection est réalisée dans un creuset de 10cm par 10cm et d'une hauteur de bain de 7cm. Le creuset est en graphite et intégré dans une chemise d'acier inoxydable pour permettre une plus grande durée de vie du creuset. De l'argon est injecté dans le four pour limiter la présence d'oxygène et donc de limiter la combustion du creuset en graphite. Le bain est chauffé à une température proche de 970°C et sa concentration initiale est comprise entre 3%mass. et 3.5%mass. d'alumine. Le bain est également composé de 11.5%mass. d' AlF_3 et de 5.5%mass. de CaF_2 .

À la suite de l'expérience, les vidéos obtenues avec la caméra thermique sont analysées avec le logiciel « FLIR Tools » comme pour la calibration de l'émissivité. Le logiciel permet de placer plusieurs sondes, le choix a été d'en utiliser 4. Un nombre plus important n'aurait pas été nécessaire car une tendance globale de l'évolution est recherchée. Des sondes sont placées sur l'image IR comme le montre la figure suivante :

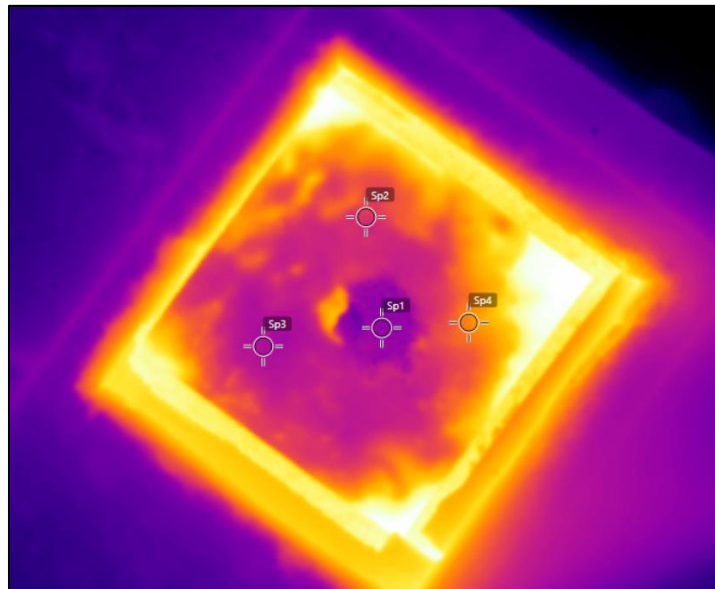


Figure 5-30: Image prise avec la caméra thermique du radeau juste après l'injection dans le bain

La sonde 1 (« Sp1 ») est située à l'endroit de l'injection de l'alumine peinte avec la peinture résistante à haute température. Les sondes 2 (« Sp2 ») et 3 (« Sp3 ») sont situées autour de cette zone sur l'alumine pure. La sonde 4 (« Sp4 ») est située plus proche de la bordure du radeau, où l'épaisseur est la plus mince. L'extraction des températures de ces sondes est montrée sur le graphique suivant :

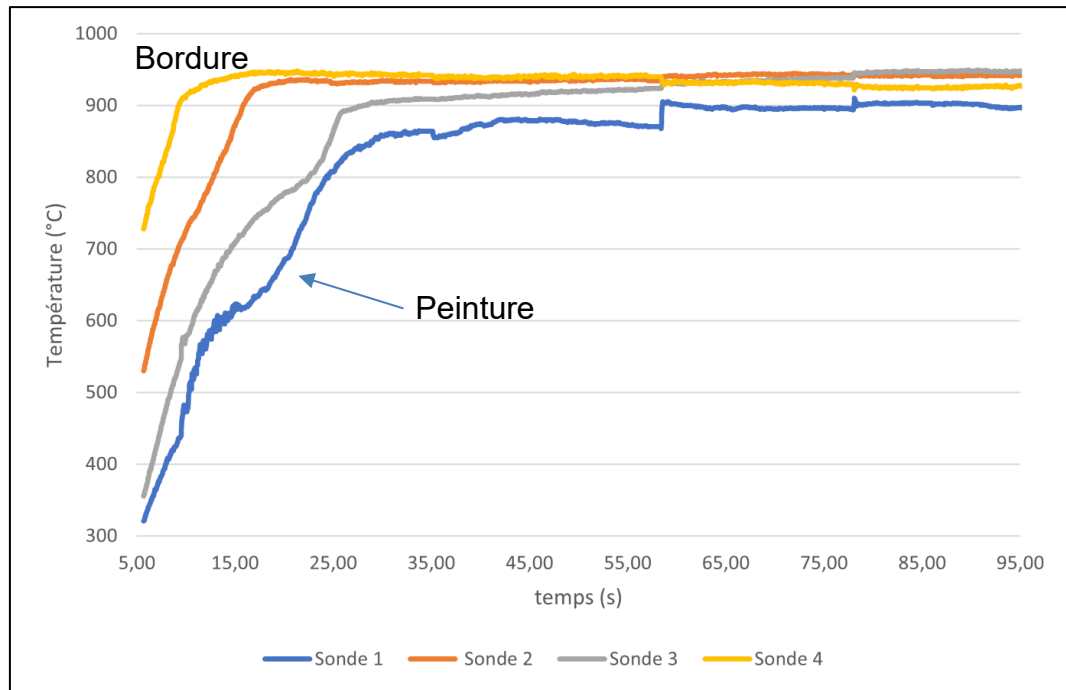


Figure 5-31 : Évolution de la température de la surface supérieure du radeau à la suite de l'injection

L'injection dure 5 secondes. Pendant cette période, aucune mesure avec la caméra thermique n'est possible due à la présence de l'entonnoir d'injection et de la manipulation lors de l'injection de la dose d'alumine peinte. Cette période implique une perte importante de donnée, mais ne peut être réduite. Les courbes permettent d'observer la montée en température de la surface du radeau. La sonde 1 étant située à l'endroit d'injection de l'alumine peinte, dose injectée en dernier, le retard sur la montée en température est observable. Cette dernière dose formant une surcouche d'alumine permet de limiter les apports thermiques de chaleur du bain. La température de cette surface reste donc la plus faible à la fin de l'expérience. La sonde 3 montre une forte hausse autour des 25 secondes. Cette augmentation est due au déplacement horizontal du radeau à la surface du

bain. Ce qui implique un changement de condition (épaisseur du radeau) et donc une augmentation de la température. Les sondes sont placées à un point fixe sur l'image et non sur le radeau. La sonde 4 montre la plus grande montée en température. Étant située sur le bord du radeau, l'épaisseur d'alumine est la plus faible et l'apport en chaleur du bain est plus important. La variation brutale de la température pour plusieurs courbes à 58.47 secondes est engendrée par un contact accidentel avec le support de la caméra.

L'évolution de la température avec cette expérience va permettre de calibrer les apports de chaleur sur la partie supérieure du radeau dans le modèle. Les apports sont principalement liés aux échanges thermiques avec l'air et les parois situés à l'entrée du four. Le logiciel Paraview® permet de sortir la température minimale dans toutes les particules d'alumine. Le point le plus froid étant situé sur la partie supérieure du radeau, l'évolution de cette température peut être comparée aux valeurs mesurées avec la caméra thermique :

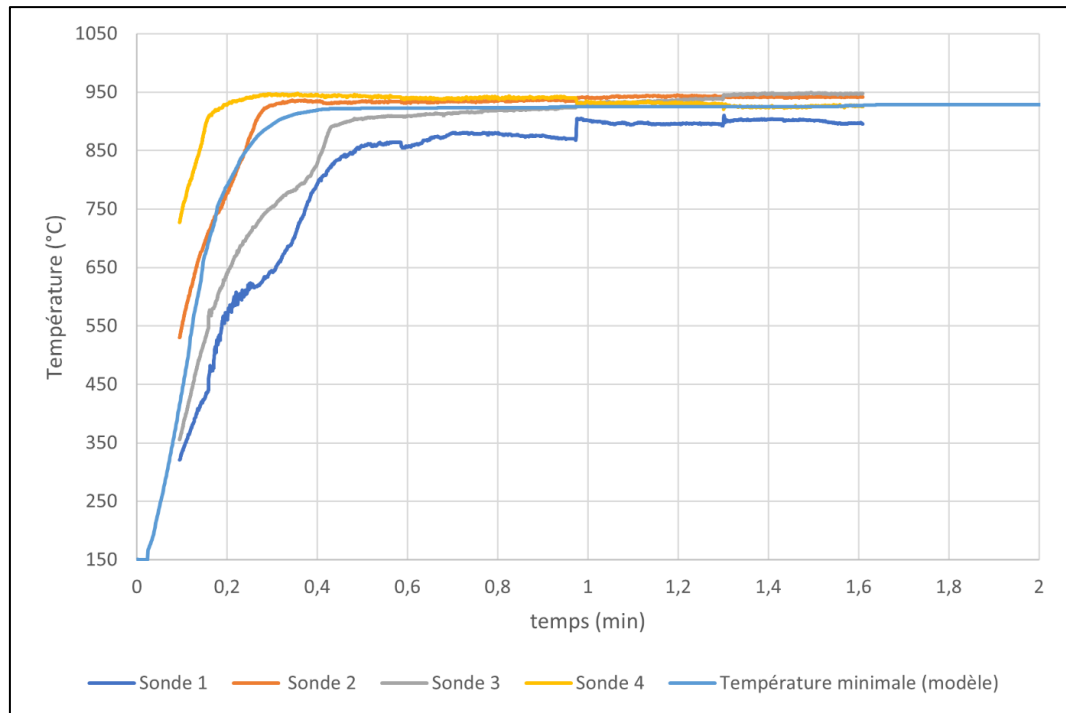


Figure 5-32 : Évolution de la température minimale du radeau obtenue, avec le modèle, comparée aux valeurs obtenues avec la caméra thermique

L'évolution de la température minimale permet de calibrer l'apport de chaleur provenant de l'ambient durant le réchauffement et calibrer les pertes de chaleur à la suite de la stabilisation de la température du radeau.

La Figure 5-32 montre une tendance similaire aux résultats expérimentaux. La valeur du coefficient d'échange pourrait être légèrement diminuée pour rejoindre la pente de la sonde 3. La sonde 1 correspond à la température de l'alumine peinte avec de la peinture haute température. Son injection étant à la suite de l'injection de l'alumine, elle comporte un retard sur son réchauffement. Donc la sonde 3 peut-être la courbe de calibration. La température de l'ambient est fixée à 900°C dans le modèle. Cette température est justifiée avec la comparaison aux températures de convergence obtenue avec l'expérience.

5.2.2 REPÊCHAGE DE RADEAUX

a. *PLAN EXPÉRIMENTAL*

Le repêchage de radeau a été présenté précédemment avec l'injection de graine de moutarde à basse température. Cette étude a montré la formation d'une coquille en glace autour du radeau permettant la création d'une structure solide et limitant l'infiltration de l'eau dans le radeau. Cette section du chapitre va étudier le repêchage d'un radeau d'alumine injectée dans le bain électrolytique. Le but est d'analyser les ressemblances et les différences entre la méthode à basse température et une injection ayant plusieurs similitudes à celles présentes dans les cuves d'électrolyse.

Le tableau suivant compare les différences entre la méthode analogue et l'injection de particule d'alumine dans le bain :

Tableau 5-3: Comparaison des paramètres d'injection entre la méthode analogue et la méthode réelle avec l'alumine dans le bain

	Méthode analogue	Méthode réelle
Température des particules à l'injection	-170°C	150°C
Température du changement de phase	0°C	Entre 940°C et 965°C
Température du liquide	20°C	Entre 970°C et 975°C
Réchauffement des particules	170°C	Entre 790°C et 815°C
Surchauffe	20°C	Entre 5°C et 25°C
Diamètre des particules	~1.8mm	~80µm

La différence de température entre les particules avant injection et la température de changement de phase du liquide est beaucoup plus faible avec la méthode analogue. La masse de liquide solidifié peut-être impactée.

Pour étudier l'injection de l'alumine, les conditions de l'expérience analyseront les conditions des cuves d'électrolyse et de la méthode basse température. Pour cela, les injections respecteront ces critères :

Tableau 5-4: Plan expérimental de l'injection d'alumine pour le repêchage de radeaux

Types d'injection	Poudre A	Poudre B	Billes C	Billes D
Types d'alumine	Poudre d'alumine		Billes d'alumine, de 3.2mm de diamètre	
Températures de préchauffage de l'alumine avant l'injection	150°C	800°C	150°C	800°C
Numéros des radeaux	1, 2 et 3	5, 6 et 10	4, 11, 12, 13, 14 et 15 (Problèmes rencontrés sur les radeaux 4, 11 et 12)	7, 8 et 9

Les deux types d'alumine utilisés sont montrés sur les photos suivantes :

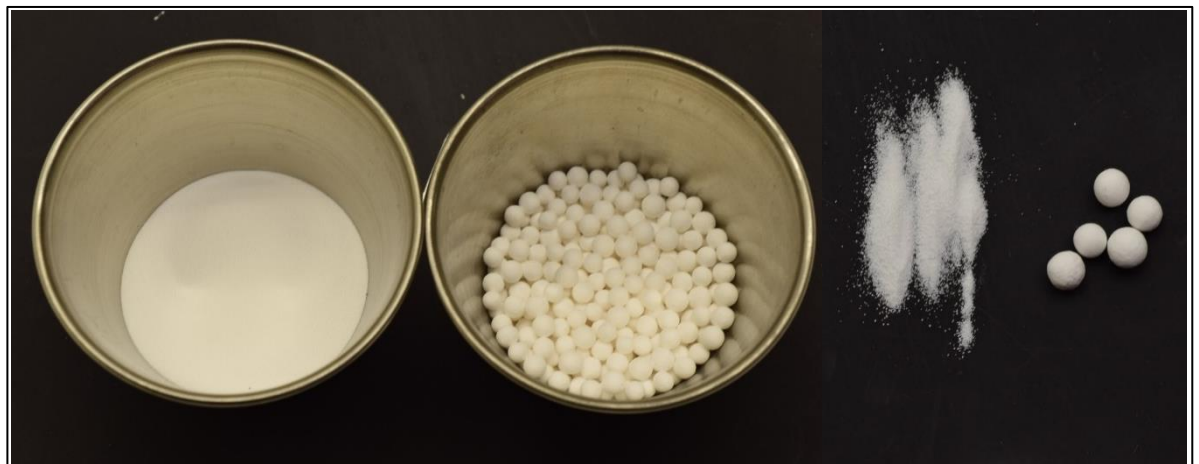


Figure 5-33 : Photos de l'alumine avant l'injection; à gauche : 15g de poudre d'alumine (type A et B); au milieu : 15g de graine d'alumine (type B et D); à droite : Comparaison de la taille des particules entre l'alumine en poudre et en grain.

Avec ces 12 injections, tous les paramètres pour faire le lien entre la basse température et les conditions industrielles seront validés.

Le schéma du montage expérimental est le suivant :

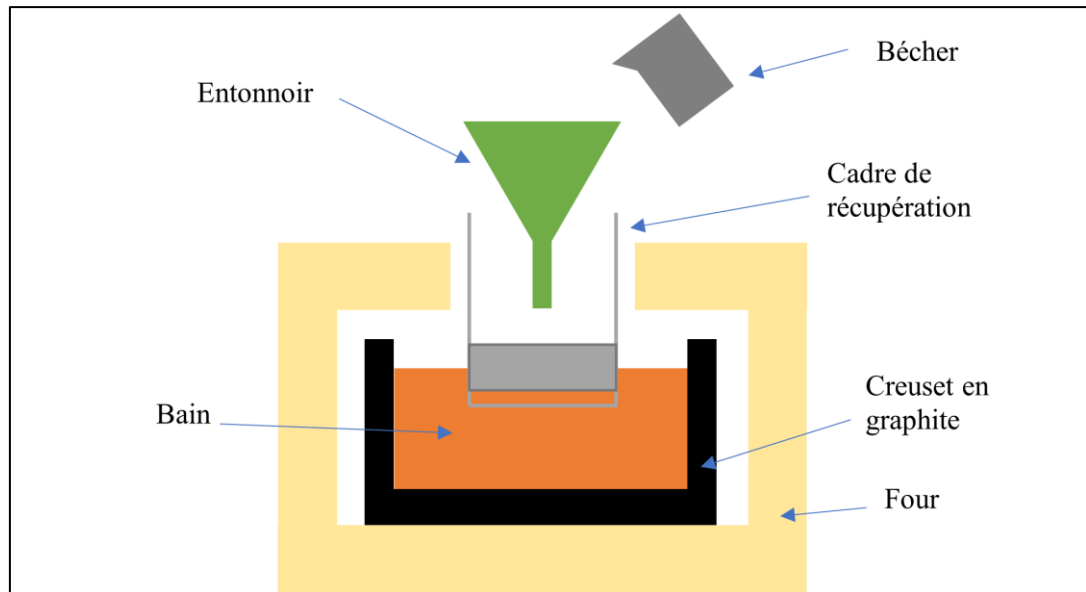


Figure 5-34: Schéma de l'expérience d'injection d'alumine dans le bain pour repêcher des radeaux

L'ouverture présente dans le couvercle du four est moins importante que la taille du creuset. Lors d'une injection d'alumine, la poudre se répartit sur la surface du bain. Le repêchage est donc plus difficile, car l'ouverture du four est trop petite. Un cadre de récupération est utilisé pour contenir l'alumine, limiter sa propagation et faciliter le repêchage du radeau. La photo suivante montre un cadre de récupération avant son utilisation :

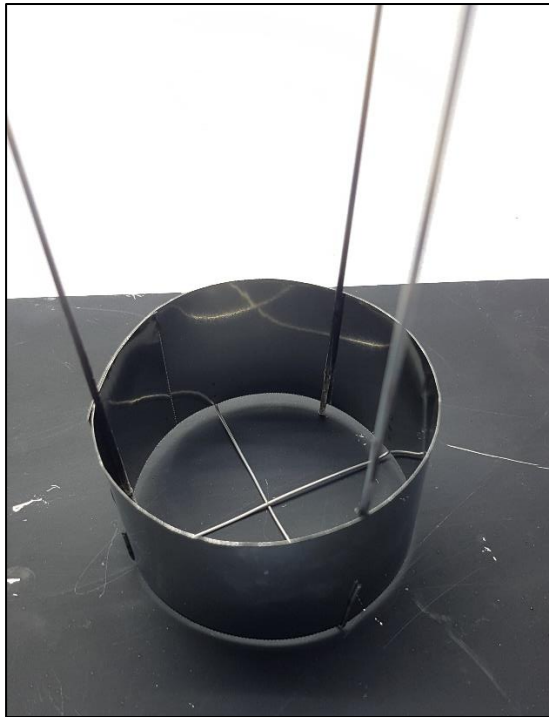




Figure 5-35 : Cadre de récupération pour le repêchage des radeaux d'alumine






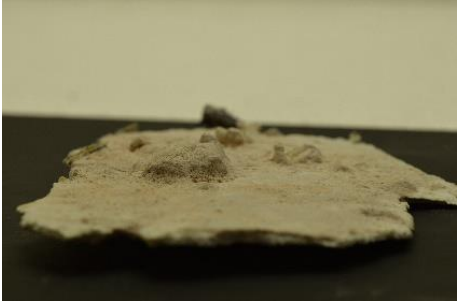




b. RÉSULTATS ET ANALYSES

L'analyse de la structure des radeaux est regroupée dans deux tableaux, un premier avec les photos (Tableau 5-5) et un second avec l'analyse visuelle de la structure des radeaux (

Tableau 5-6).

Tableau 5-5: Photos de radeaux d'alumine injectée dans le bain et repêchés

Numéros échantillon	Photos	
	Face supérieure	Face inférieure ou latérale
1 (Poudre A)		

<p>2 (Poudre A)</p>		
<p>3 (Poudre A)</p>		
<p>4 (Billes C)</p>	<p>Non repêché</p>	
<p>5 (Poudre B)</p>		
<p>6 (Poudre B)</p>		
<p>7 (Billes D)</p>		









<p>8 (Billes D)</p>		
<p>9 (Billes D)</p>		
<p>10 (Poudre B)</p>		
<p>11 (Billes C)</p>	<p>Non repêché</p>	
<p>12 (Billes C)</p>	<p>Non repêché</p>	
<p>13 (Billes C)</p>		



Tableau 5-6: Analyse visuelle de la structure des radeaux d'alumine injectée dans le bain et repêchés

Numéros échantillon	Poudre ou billes libres	Description structure
<p>1 (Poudre A)</p>	<p>Récupération de 4.65g d'alumine sous la forme d'une poudre</p>	<p>Le radeau se divise en trois zones suivant l'épaisseur (de bas en haut): du bain solidifié, de l'alumine infiltrée par du bain solidifié ou frittée et de l'alumine sous forme de poudre.</p> <p>L'épaisseur de la partie infiltrée et frittée est comprise entre 1.8mm à 2mm.</p> <p>Plusieurs zones ont la présence de pores, mais la structure paraît homogène.</p> <p>La partie inférieure montre une bosse à l'endroit d'impact de l'alumine lors de l'injection.</p>
<p>2 (Poudre A)</p>	<p>Récupération de 7.39g d'alumine sous la forme d'une poudre</p>	<p>La structure du radeau est similaire à l'échantillon 1.</p> <p>L'épaisseur de la partie infiltrée est comprise entre 2mm à 2.5mm.</p> <p>Deux couches se distinguent, une blanche et une grise.</p> <p>La blanche pourrait correspondre à l'alumine frittée, mais non infiltrée. La partie grise pourrait correspondre à la partie infiltrée.</p>

		La partie inférieure montre une bosse à l'endroit d'impact de l'alumine lors de l'injection, mais moins prononcé que l'échantillon 1.
3 (Poudre A)	Récupération de 4.86g d'alumine sous la forme d'une poudre	<p>La structure du radeau est similaire à l'échantillon 1.</p> <p>L'épaisseur de la partie infiltrée est comprise entre 2.3mm à 6mm. La partie la plus épaisse est constituée d'une section blanche pouvant correspondre à l'alumine frittée.</p> <p>La partie inférieure montre une bosse à l'endroit d'impact de l'alumine lors de l'injection de façon très prononcée. Des plaques d'alumine agglomérée sont présentes à la même position, mais sur la paroi supérieure du radeau (haut de la photo).</p>
4 (Billes C)	N.A.	Non repêché
5 (Poudre B)	N.A.	<p>Ce radeau est le seul injecté sans cylindre pour contenir l'injection. Certaines parties du radeau n'ont pas pu être repêchées.</p> <p>Le radeau est en un seul morceau solide.</p> <p>L'épaisseur du radeau est comprise entre 2mm et 3mm.</p> <p>Présence des deux épaisseurs blanche et grise.</p> <p>La partie inférieure montre une bosse à l'endroit d'impact de l'alumine lors de l'injection. Une bosse est aussi présente sur la partie supérieure, à l'endroit d'injection.</p>
6 (Poudre B)	N.A.	<p>Le radeau est en un seul morceau solide.</p> <p>L'épaisseur du radeau est comprise entre 5mm et 14mm.</p> <p>Présence des deux épaisseurs blanche et grise. La partie blanche est centrale et la partie grise est présente sur les parties inférieures et supérieures du radeau.</p> <p>La partie inférieure montre une bosse à l'endroit d'impact de l'alumine lors de l'injection.</p>

7 (Billes D)	N.A.	<p>Le radeau avait une apparence visqueuse lors du repêchage et non solide comme les radeaux d'alumine en poudre. Le repêchage étant plus difficile, seul un morceau a pu être récupéré.</p> <p>L'épaisseur du radeau varie de 2mm à 3.8mm (taille des particules)</p> <p>Un regroupement de particules sont visibles à l'endroit de l'injection sur la partie supérieure du radeau. La partie inférieure laisse apparaitre plusieurs particules liées par du bain.</p>
8 (Billes D)	N.A.	<p>Les conditions de repêchage sont identiques à celles du radeau 7.</p> <p>La structure est identique à celle du radeau 7.</p>
9 (Billes D)	<p>0.18g</p> <p>Récupération de 0.18 d'alumine sous la forme de billes (7 billes)</p>	<p>Cette injection a probablement été faite avec une surchauffe plus faible due à la réalisation des expériences en chaine sans une attente suffisante pour le réchauffement le bain.</p> <p>Ces conditions ont permis d'obtenir un radeau solide et facilité le repêchage.</p> <p>L'épaisseur du radeau est supérieure à la taille des grains d'alumine (3.8mm).</p> <p>Un amas de graine d'alumine est présent à l'endroit d'injection. La partie inférieure montre quelques graines apparentes liées par du bain solidifié.</p>
10 (Poudre B)	N.A.	<p>Le radeau est en un seul morceau solide.</p> <p>L'épaisseur du radeau est comprise entre 5mm et 14mm.</p> <p>Présence des deux épaisseurs blanche et grise. La partie blanche représente 80% de la hauteur et la partie grise est située sur la partie inférieure.</p>
11 (Billes C)	N.A.	Non repêché
12 (Billes C)	N.A.	Non repêché

13 (Billes C)	Récupération de 4g d'alumine sous la forme de bille	Le radeau se divise en deux parties : des grains d'alumine maintenant ensemble par du bain solidifié et des grains libres. L'épaisseur de bain solidifié est de la taille des grains, compris entre 3mm et 4mm. Des grains sont apparents sur la partie inférieure du radeau. Ils sont exposés au bain liquide leur permettant une dissolution.
14 (Billes C)	Récupération de 4.19g d'alumine sous la forme de bille	La structure est similaire au radeau 13.
15 (Billes C)	Récupération de 2.96g d'alumine sous la forme de bille	La structure est similaire au radeau 13.

Comparaison entre l'injection de graines de moutarde et l'injection de graines d'alumine préchauffées à 800°C (Type D):

L'injection de graines d'alumine préchauffées à 800°C est le point de référence avec la taille des particules et la différence entre la température des particules injectées et la température de changement de phase du bain. La première observation est sur la structure du radeau. Avec les graines de moutarde, l'eau n'infiltré pas le radeau dû à la couche de glace autour du radeau. Avec l'injection d'alumine, le bain infiltre totalement le radeau et permet de créer un lien solide entre les particules. L'infiltration étant plus importante, la proportion de billes d'alumine libre de mouvement est quasi nulle suite à l'injection contrairement aux graines de moutarde.

Comparaison entre l'injection de graines d'alumine préchauffées à 800°C (Type D) et l'injection de poudre d'alumine préchauffée à 800°C (Type B):

Les particules d'alumine étant beaucoup plus petites que les graines, il est plus difficile de distinguer la différence entre le bain et l'alumine. Deux épaisseurs sont observées dans le radeau de poudre d'alumine. L'épaisseur supérieure pourrait correspondre à de l'alumine frittée. Dans le radeau de type D, les graines restent sphériques.

Comparaison entre les injections de graines d'alumine préchauffées à 150°C (Type C) et à 800°C (Type D) :

L'injection de l'alumine préchauffée à 150°C permet la formation d'un radeau avec peu d'infiltration comparée à l'alumine préchauffée à 800°C. L'infiltration faible permet de former une coquille liant uniment les graines sur la partie extérieure du radeau. L'infiltration étant plus faible la quantité de graines libres est plus importante avec les radeaux de « type C ». La structure du radeau « Type C » ressemble beaucoup aux radeaux formés avec les graines de moutarde.

Comparaison entre les injections de poudre d'alumine préchauffées à 150°C (Type A) et à 800°C (Type B):

La première observation est identique aux radeaux avec les graines, l'infiltration est beaucoup plus importante avec l'alumine préchauffée à 800°C.

c. COMPARAISON AVEC LE MODÈLE

La structure du radeau peut être comparée au repêchage d'injection. L'apparence du dessous du radeau, 30s après le début de l'injection, est présentée sur la Figure 5-36.

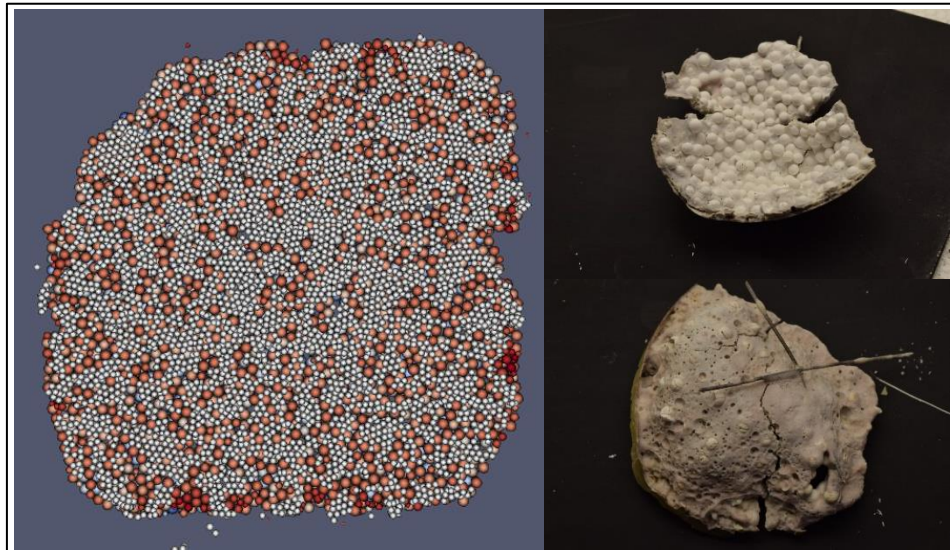


Figure 5-36: À gauche (a) : Image du dessous du radeau obtenu avec le modèle ; à droite : photos de dessus (b) et dessous (c) du radeau pris lors d'expérience d'injection (type C)

La Figure 5-36 permet de comparer la structure du radeau (vue de dessous) provenant de la simulation avec une structure provenant d'un essai expérimental réalisé avec une injection de grosses billes d'alumine durant une expérience en laboratoire. La structure présente des similarités avec la couche de bain solidifié sur la partie inférieure du radeau. Mais le nombre de particules d'alumine visible est plus important avec le modèle que sur les photos du radeau réel. Il faut noter que le diamètre est de 3.2 mm dans l'expérience contre 1.8 mm dans la simulation. Une particule dans l'expérience représente donc un amas de plusieurs particules dans la simulation, ce qui aura un effet à son tour sur la formation de bain solidifié.

CHAPITRE 6

RÉSULTATS ET DISCUSSION

Ce chapitre présente la globalité des résultats du modèle développé en couplant les méthodes SPH et DEM. Le modèle a pour objectif de simuler l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyse. Le bain est maintenu dans un creuset simulé par la méthode FEM. Ce chapitre sera divisé en trois grandes parties : la présentation de l'étape d'injection, la simulation d'une condition de référence principale et une étude paramétrique. Ce troisième sous-chapitre est particulièrement important puisqu'il permettra d'illustrer la sensibilité de différents paramètres d'entrée du modèle tout en offrant une validation supplémentaire du bon fonctionnement du modèle via l'analyse des relations causes-effets.

6.1 . L'INJECTION

Cette section traite les premiers instants de contacts entre l'alumine et le bain jusqu'à la stabilisation du radeau à la surface du bain et de l'écoulement. Durant cette étape, les forces générées sur les particules solides et liquides sont les plus importantes. L'injection et la formation du radeau sont influencées par l'énergie cinétique des particules. Les particules d'alumine étant créée sous un maillage cubique, l'entonnoir simulé avec la méthode FEM permet de créer un brassage dans les particules comme le montre la figure suivante :

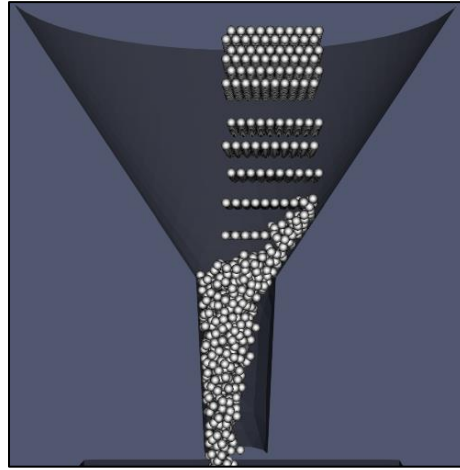


Figure 6-1: Déformation du maillage d'injection avec l'entonnoir

L'injection des particules est regroupée sur une durée de 350 ms. Les dimensions de la boîte de création et le débit de particules sont fixés. Chaque dose représente près de 600 particules. Comme montré sur la Figure 6-1, les particules sont injectées avec un maillage cubique avec un décalage d'un demi-rayon entre chaque couche pour éviter la superposition parfaite des particules. Ce faisant, avec un temps de chute moyen d'environ 125 ms, la totalité des particules d'alumine générée a atteint la surface du bain à un temps de simulation inférieur à 500 ms. Lors du premier contact entre les particules d'alumine et la surface du liquide, la force de traînée et la force de tension de surface freinent considérablement les particules. De façon simultanée, le radeau commence à se former grâce à la cohésion entre les particules et la formation du bain solidifié comme le montre la série d'images prises durant l'injection sur la Figure 6-2 (particulièrement entre les temps $t=150$ et $t=300$). Cette cohésion restreint les particules d'alumines suivantes pour leur immersion dans le bain et celles-ci s'accumuleront dans la section supérieure

du radeau. C'est l'amoncellement excédentaire qui débordera en dehors de la surface du radeau et permettra à celui-ci de s'agrandir de façon radiale.

Une coquille de bain solidifié vient recouvrir la partie inférieure du radeau empêchant les particules d'alumine d'être en contact avec du bain liquide. Cette épaisseur est observée avec les radeaux réalisés avec les graines de moutarde et l'alumine.

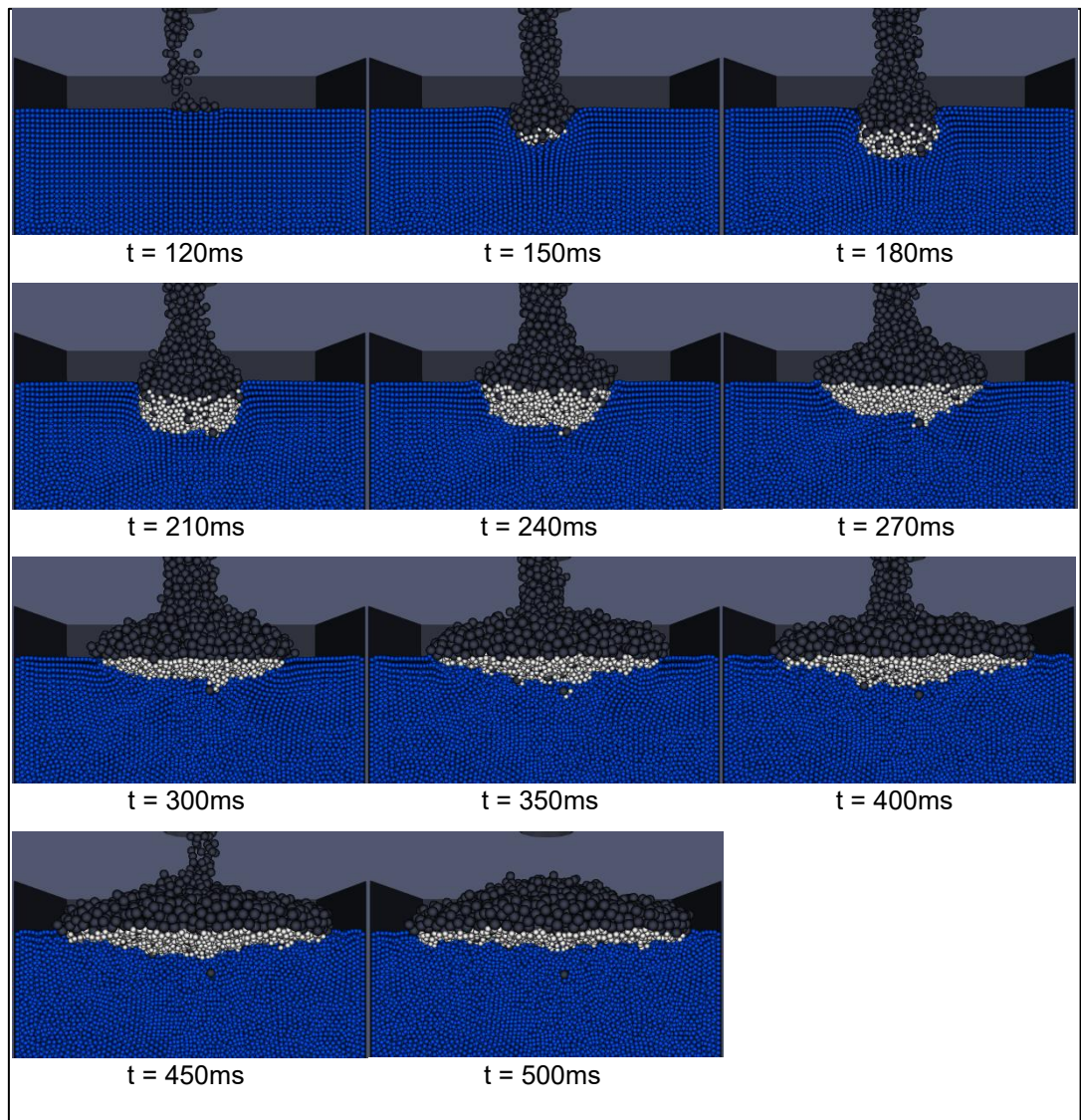


Figure 6-2: Images extraites de la simulation durant l'injection à différents temps (particules grises : particules d'alumine, particules blanches : particules de bain solidifié, particules bleues : particules de bain, parois grises : parois du contenant modélisé en FEM)

Ces résultats démontrent que la géométrie du radeau est restreinte jusqu'à 300ms. Par la suite, le radeau s'étale progressivement sur la surface du bain puisque la force de cohésion n'a pas l'effet de transformer les particules en agrégat solides mais applique plutôt un comportement visqueux similaire à de la lave. De façon vulgarisée, le comportement du radeau, sous l'effet de la force de cohésion, peut être comparé à un bracelet de perle. Chaque perle est en cohésion avec la ficelle et possède une certaine liberté de mouvement mais l'ensemble du bracelet possède un comportement visqueux.

Il a été possible d'observer aux sections 5.1.4 et 5.2.2 que la géométrie des radeaux formés avec les graines de moutarde ou avec l'alumine est plus irrégulière, moins plane. Ce résultat n'est pas totalement erroné, car le bain dit « solidifié » est plus à l'état visqueux en dessous du radeau et solide entre les particules d'alumine, la solidification du bain est une transition non-eutectique. Une étude devrait être réalisée pour améliorer la méthodologie utilisée pour simuler la cohésion entre les particules d'alumine tout en gardant un comportement visqueux dans le bain dit « solidifié », développer une solidification graduelle avec la variation de la viscosité du bain.

Les images montrent aussi quelques particules d'alumine se déplaçant librement dans le bain liquide. Ce phénomène est appelé la formation de « nuage d'alumine » dans les cuves d'électrolyse. Lors de l'injection dans les cuves, certaines particules d'alumine ont assez d'énergie cinétique et se réchauffent suffisamment rapidement pour ne pas être en cohésion avec le radeau. Elles vont pouvoir couler et se dissoudre plus rapidement dans le bain.

La Figure 6-3 montre l'évolution de la convection naturelle à la suite de l'injection et la stabilisation de la forme du radeau pour des temps supérieurs à la Figure 6-2.

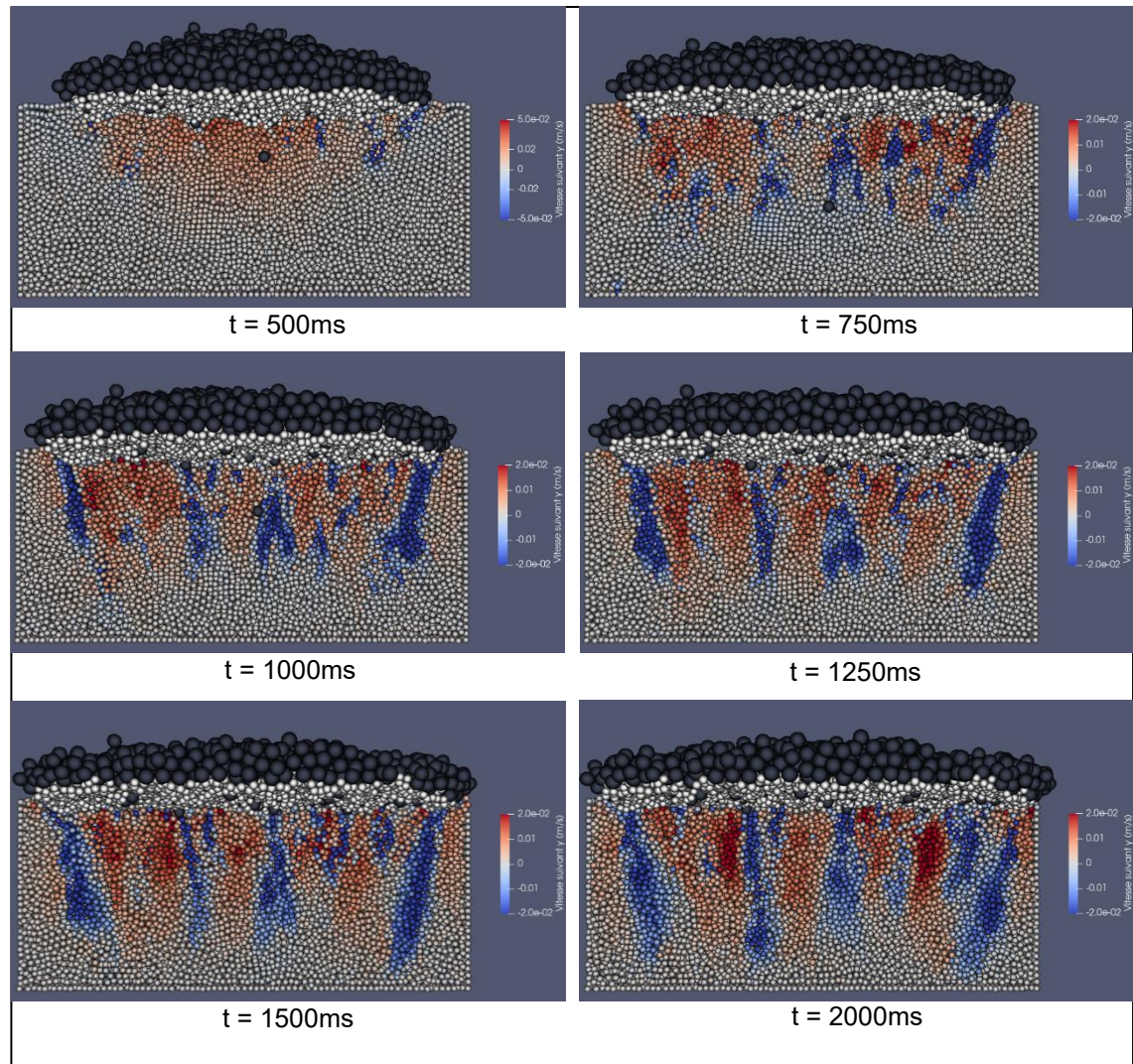


Figure 6-3: Évolution de la convection naturelle en fonction du temps juste après l'injection

Dans les premières secondes suivant l'injection, les gradients de température sont importants et l'accélération générant la convection naturelle est relativement importante également. À la section 6.2.3, la convection naturelle est présentée sur un intervalle beaucoup plus long et il est possible

de voir la stabilisation de l'écoulement à une vitesse réduite. L'écoulement est considéré laminaire pour la résolution des équations de Navier-Stokes avec la méthode SPH, mais durant les premiers instants après l'injection, le brassage lié à l'impact des particules crée une multitude de vortex générant un écoulement turbulent. L'utilisation d'équations en régime turbulent engendrerait une diminution considérable de la vitesse de calcul sans observer un changement drastique sur les résultats. Puisque ce régime turbulent est présent principalement durant les premiers instants de la simulation (pendant et peu de temps après l'injection), son effet n'a pas été pris en compte dans la simulation.

La Figure 6-3 ($t=2000$ ms) montre également la stabilisation de la forme du radeau et illustre que l'étalement est limité par les parois du réservoir.

La Figure 6-4 met en évidence les particules subissant la force de tension de surface. Dans la réalité, cette force est appliquée sur le périmètre du radeau à la position du point triple, où il y a présence simultanée de liquide, solide et de gaz. Un algorithme a été réalisé pour identifier les particules présentes en ce point et ainsi appliquer cette force précisément aux bonnes particules. Ce faisant, il est possible de valider avec la Figure 6-4 que la force de tension de surface est appliquée aux particules concernées (particules colorées).

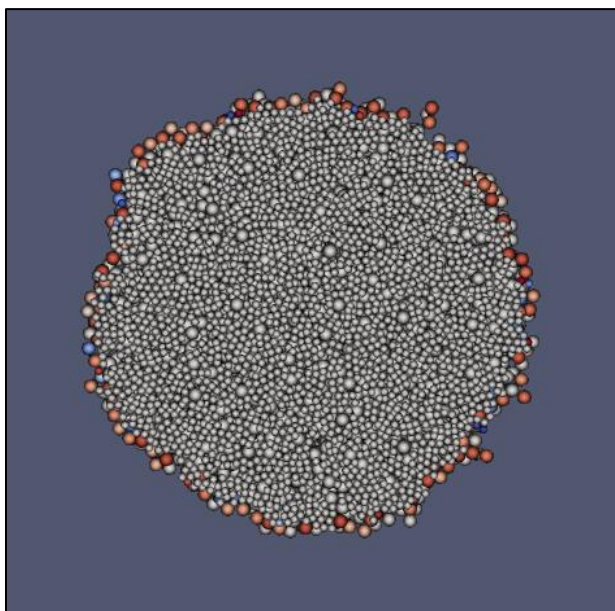


Figure 6-4: Particules subissant la force de tension de surface (particules d'alumine et de bain solidifié)

6.2 . LA CONDITION DE RÉFÉRENCE

Cette section permet d'étudier le comportement au sein de la simulation pour un cas de référence représentant des conditions moyennes et typiques des conditions réelles d'électrolyse. Les données d'entrée considérées sont résumées dans le

Tableau 6-1.

Dans le sous-chapitre suivant, ce cas de référence sera utilisé comme base comparative pour étudier l'impact de différents paramètres d'entrée sur la réponse de la simulation via une étude paramétrique.

Tableau 6-1 : Conditions utilisées pour l'injection principale

Variables	Conditions principales	Détails
Masse injectée	14 g	Limitation numérique (temps de calcul)
Température d'injection	150 °C	Condition industrielle moyenne
Méthode d'injection	Statique	Condition industrielle « idéale »
Température du bain [surchauffe]	975 °C [15°C]	Condition industrielle moyenne
Température de l'ambient	900 °C	Résultat du calage
Diamètre des particules d'alumine	1.7 mm	
Diamètre des particules de bain	1 mm	

La température d'injection est similaire à la température d'injection de l'alumine dans l'industrie. La méthode d'injection statique représente un cas d'injection industriel idéalisé où il n'y a pas de mouvement convectif dans le bain électrolytique. La surchauffe du bain est basée sur les valeurs de l'industrie. La température de solidification³ (960°C) est considérée comme une valeur fixe dans la version actuelle du modèle mathématique, or, dans la réalité, celle-ci est dépendante des constituants du bain comme la teneur en alumine et cette variation devrait être prise en considération dans les versions ultérieures du modèle. La température du milieu ambient est fixée à 900°C

³ Pour ces simulations, la température de solidification correspond à une chimie de 11% AlF₃, 5% de CaF₂ et 3% d'alumine.

suite aux résultats du calage thermique effectué en laboratoire (présentée à la section 5.2.1).

Cette simulation représente une injection de 3600 particules d'alumine au sein de 149 100 particules de bain. L'exécution de la simulation a pris 2 jours, 10 heures et 39 minutes pour un temps total simulé de 4 minutes et 7 secondes d'injection, nous donnant une vitesse de calcul de 4.21 s/h.

6.2.1 ANALYSE DU RADEAU ET DE LA DISSOLUTION DE L'ALUMINE

En plus d'écrire les fichiers résultats «.vtk » pour une lecture dans le logiciel Paraview®, le programme permet d'enregistrer la masse de bain solidifié et la masse d'alumine dissoute en fonction du temps. La concentration moyenne dans le bain est déterminée par une analyse en post-traitement qui prend en considération l'état initial de la simulation et les conditions au temps spécifique choisi. Ces résultats sont résumés pour cette injection sur la Figure 6-5.

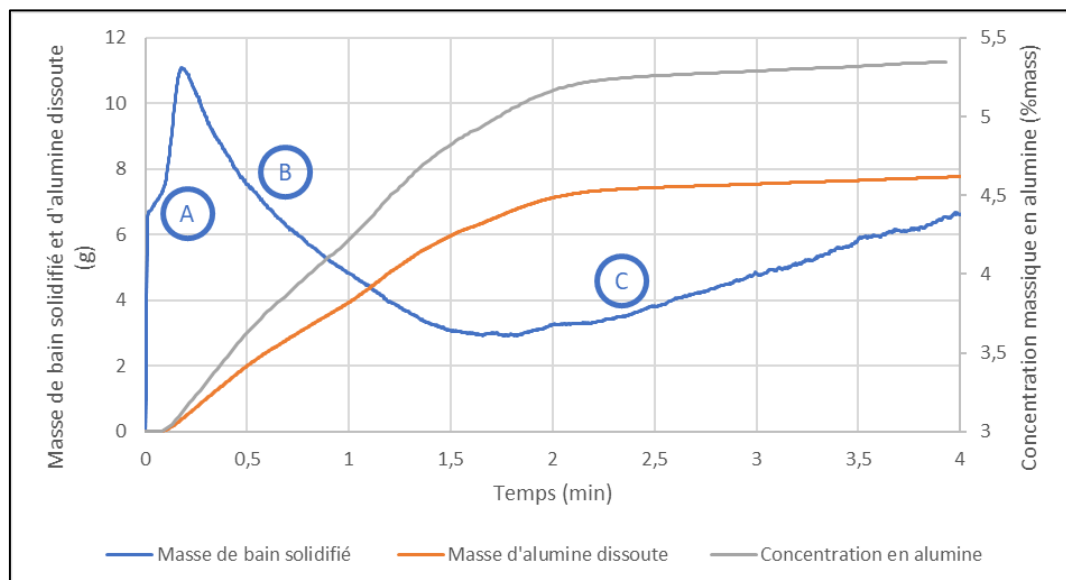


Figure 6-5 : Masse de bain solidifié et d'alumine dissoute et de la concentration d'alumine dans le bain en fonction du temps pour l'injection principale

La courbe de la Figure 6-5 peut être divisée en 3 zones distinctes :

- La zone A : La courbe de la masse de bain solidifié montre une forte augmentation juste après l'injection (entre 0.15 et 0.25 minutes) due à la masse froide d'alumine injectée.
- La zone B : Cet état temporaire est rapidement renversé par les apports de chaleur de l'ambiant (le radeau étant plus froid que l'ambiant durant les premiers instants après l'injection) et la convection dans le bain qui permettent un apport de chaleur suffisant pour diviser par trois la masse de bain solidifié à 1 min 45s de simulation.
- La zone C : Par la suite, la masse de bain solidifié augmente de nouveau, car la température du milieu ambiante au-dessus du radeau demeure inférieure au liquidus du bain électrolytique. La formation de cette gelée supplémentaire est donc la conséquence des pertes de chaleur au-dessus du bain envers le milieu ambiant.
La masse de bain solidifié à l'état final représente 49.4% du radeau.

L'alumine met quelques secondes (3-4 secondes) à réchauffer et commencer à se dissoudre. Le rythme de dissolution de l'alumine est relativement stable jusqu'à 1,5 minutes et puis la masse d'alumine dissoute se stabilise 2 minutes suivant l'injection de la masse. Cette diminution sévère de la vitesse de dissolution est la conséquence de l'augmentation de bain solidifié

provenant du déficit énergétique au sein du radeau. Ce bain solidifié joue un rôle d'isolateur thermique et limite le réchauffement de l'alumine. De plus, il restreint fortement les contacts directs entre les particules d'alumine et le bain liquide; une condition essentielle du modèle pour permettre la dissolution d'alumine. La teneur en alumine dans le bain aura également un impact considérable sur la masse d'alumine dissoute. Par conséquent, comme la concentration après 2 minutes est supérieure à 5.16 % en moyenne, celle-ci est plus proche de la concentration de saturation (6%) et la dissolution est de plus en plus restreinte. Le taux de dissolution de l'alumine dans le bain présenté sur la Figure 6-6 corrobore avec ces discussions et illustre clairement que le taux de dissolution est favorisé jusqu'à 1 minute 20 secondes. Par la suite le taux de dissolution diminue progressivement jusqu'à prendre une valeur négligeable à partir de 2,25 minutes. Il est possible également de remarquer que le taux de dissolution est le plus fort malgré la masse de bain solidifié à sa maximale autour de 0.25 minutes. Cette observation contre-intuitive est possible car le site où a lieu la dissolution est principalement situé sur le pourtour du radeau; une région où les particules d'alumine sont les plus chaudes et la masse de bain solidifié est la plus faible. Il est important de noter que ces interactions surviennent également à un temps où la concentration en alumine est près de la limite inférieure et où le périmètre du radeau est maximal, ce qui offre une plus grande surface de contact potentielle.

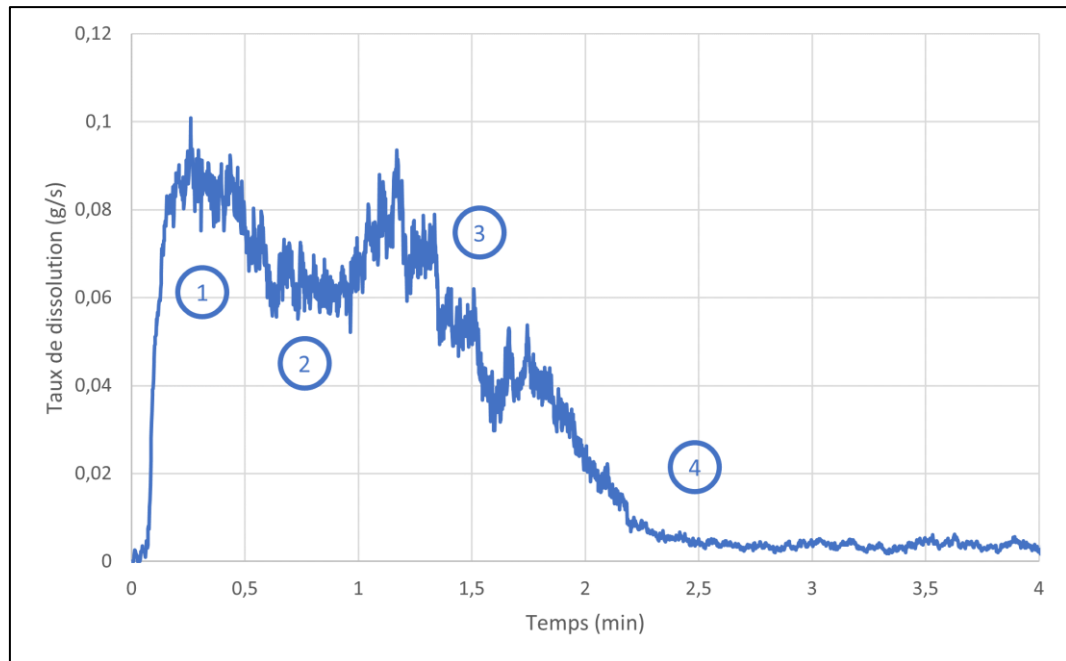


Figure 6-6 : Taux de dissolution de l'alumine en fonction du temps

La courbe de la Figure 6-6 peut être divisée en 4 zones distinctes :

- La phase 1 (de 0 à 0.5 minutes) : Dissolution des particules libres lors de l'injection,
- La phase 2 : (0.5 à 1 minutes) : Stabilisation thermique du radeau,
- La phase 3 (1 à 2 minutes) : Dissolution du radeau par le périmètre. La surface d'alumine en contact avec le bain est la plus optimale comme le montre l'analyse de la surface suivante,
- La phase 4 (2 minutes et plus) : Dissolution fortement restreinte due à l'augmentation de la concentration dans le bain.

Pour valider la corrélation entre la surface projetée du radeau et le taux de dissolution, une valeur quantitative est calculée en fonction du temps à partir d'une série d'images illustrant la vue inférieure du radeau comme à l'image suivante :

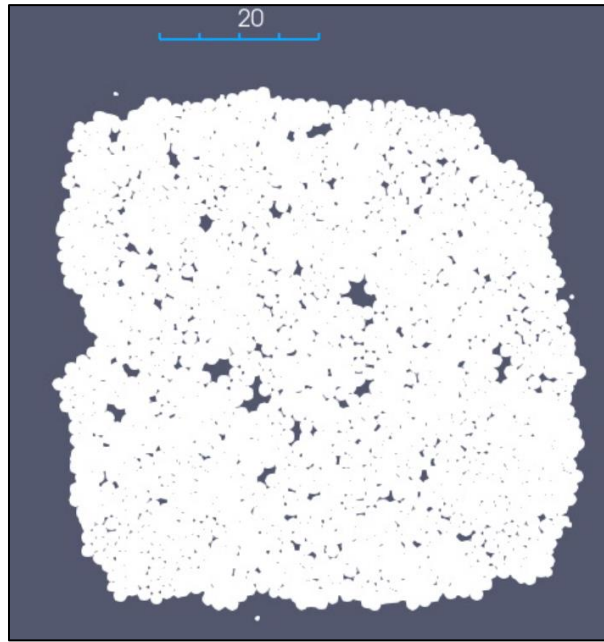


Figure 6-7: Photo de dessous du radeau des particules d'alumine uniquement pour la mesure de la surface du radeau en fonction du temps

En post-traitement, un programme exécuté sur Matlab[®] permet de déterminer le nombre de pixels blanc pour chaque image respective. Connaissant l'échelle des dimensions, il est possible de transformer le nombre total de pixels en une valeur représentative de la surface projetée en « mm² ». La mesure de la surface est réalisée pour la surface de l'alumine et la surface du bain solidifié. La différence peut donc être déterminée, soit la surface de l'alumine en contact avec du bain liquide. Le résultat obtenu est présenté sur la Figure 6-8:

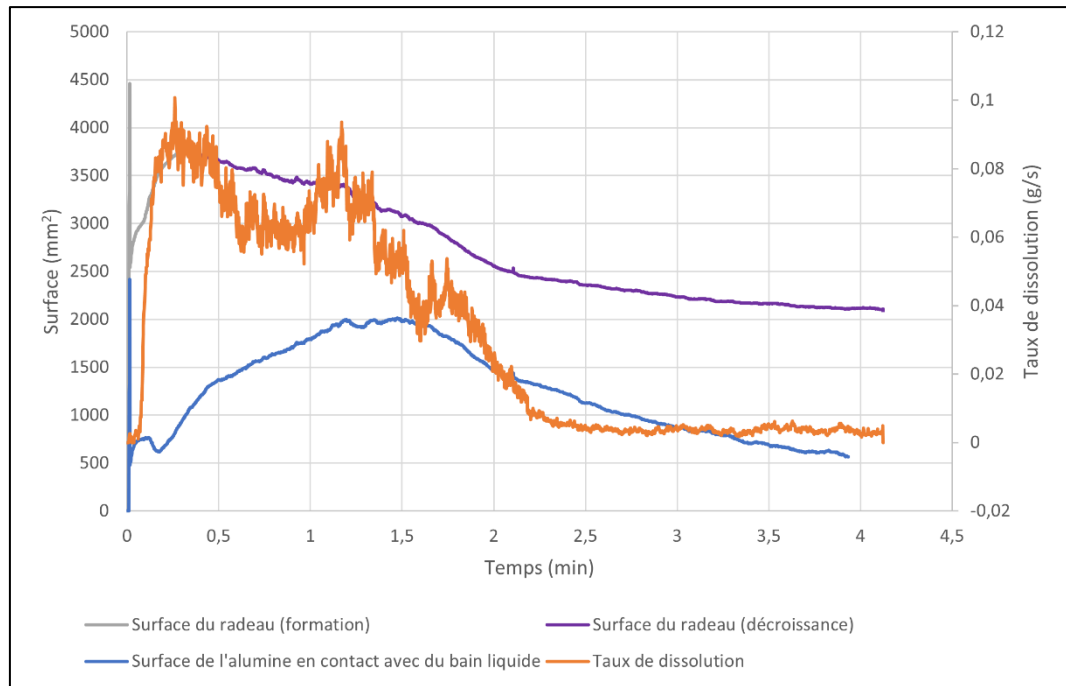


Figure 6-8: Étude de la surface du radeau en fonction du temps comparé au flux de dissolution

L'étude de la surface du radeau indique une légère relation entre la surface de l'alumine et le flux de dissolution. Le pique présent au début des courbes des surfaces est une erreur de l'analyse vidéo engendrée par les particules d'alumine au moment de l'injection. La Figure 6-9 montre la courbe du taux de dissolution en fonction de la surface du radeau. Le coefficient de détermination (R^2) est de 0.94 ce qui montre une forte corrélation linéaire entre le taux de dissolution et la surface durant la diminution de la surface. L'analyse de la surface d'alumine en contact avec le bain liquide montre aucune corrélation avec le taux de dissolution. La surface de la section du creuset, ou surface du bain, est de 7 cm par 7 cm soit une surface de 4900 mm². Le pique de la surface de l'alumine représente légèrement plus de 75% de la surface du

bain. Cette proportion est importante donc un volume de bain plus important serait intéressant de simuler et limiter l'effet des parois du creuset.

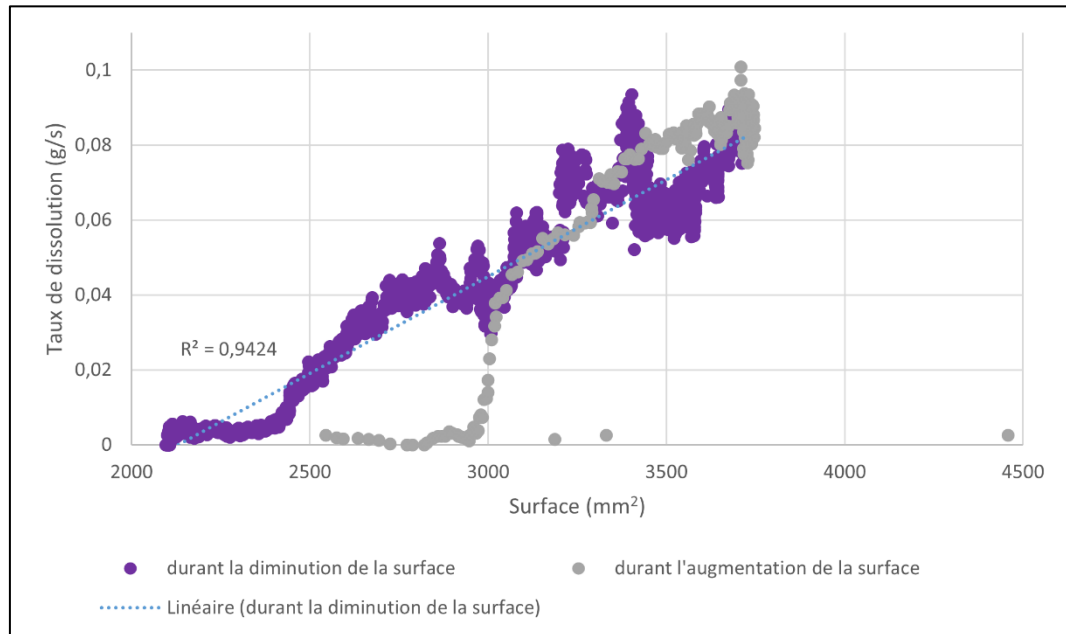


Figure 6-9: Taux de dissolution en fonction de la surface du radeau

De plus, cette étude est intéressante, car elle pourrait être comparée à une étude de la surface du radeau après une injection dans un creuset en laboratoire ou dans les cuves d'électrolyse. Le flux de dissolution est très difficile à déterminer, mais certains auteurs travaillent sur le sujet (Alarie *et al.*, 2021; Kobbeltvedt, 1997; Welch & Kuschel, 2007).

6.2.2 ANALYSE DE LA CONCENTRATION D'ALUMINE DANS LE BAIN

Il a été discuté à la suite de l'analyse des Figure 6-5 et Figure 6-6 que la concentration dans le bain se stabilise et le taux de dissolution d'alumine devient négligeable environ deux minutes à la suite de l'injection. La Figure

6-10 permet d'illustrer l'évolution transitoire de la distribution de la concentration d'alumine dans le bain liquide.

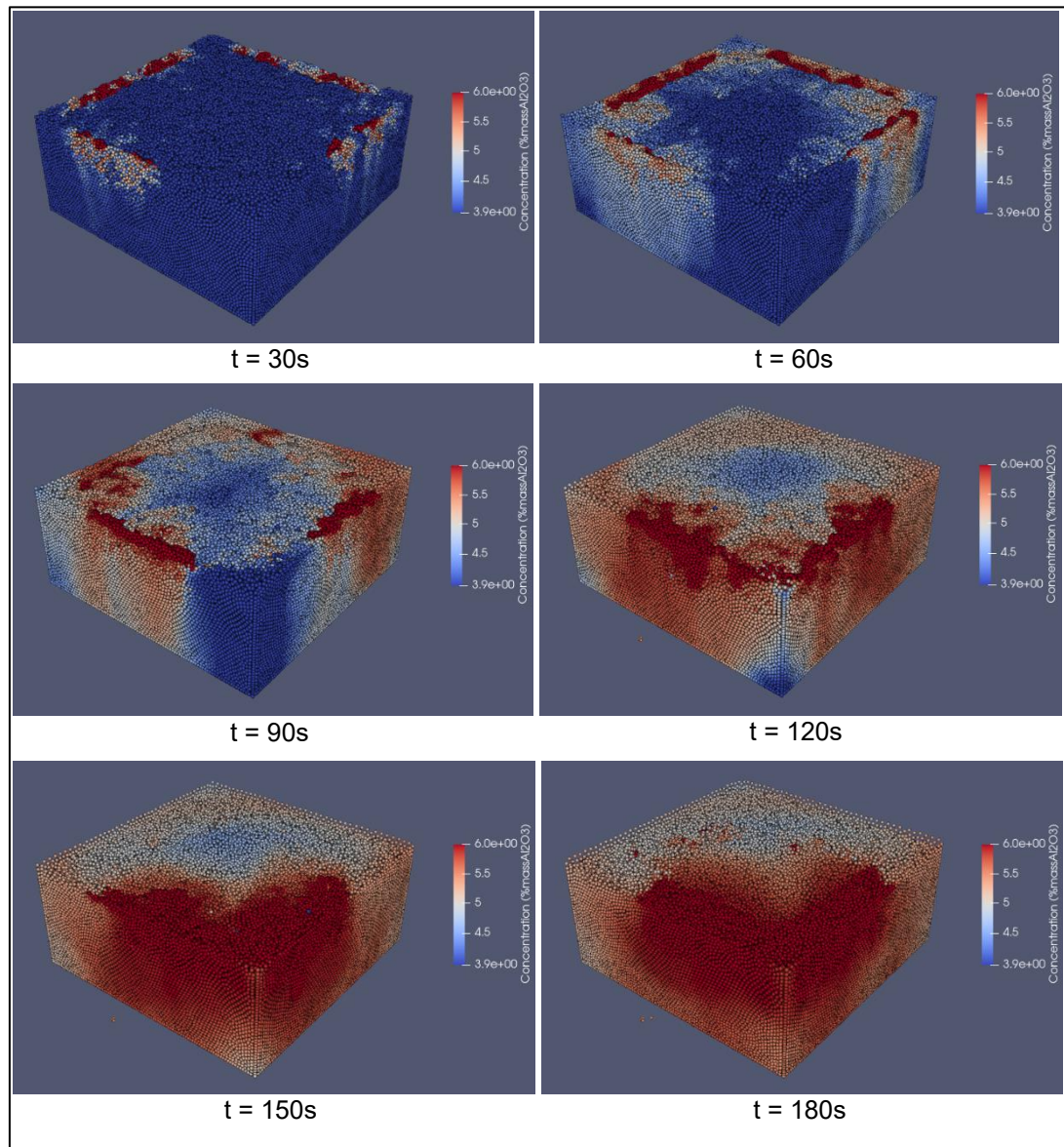


Figure 6-10 : Concentration en alumine dans le bain en fonction du temps

La Figure 6-10 montre clairement la dissolution importante qui survient sur le pourtour du radeau durant les premiers instants, jusqu'à 90s. Cette observation supporte l'analyse de la Figure 6-6. Par la suite, un coin du radeau est plus favorable à la dissolution, le coin du bas sur la Figure 6-10. Cette

condition favorable engendre une saturation du bain dans cette zone limitant la dissolution à long terme. Le taux de dissolution tend vers zéro après 2 minutes, car la saturation est atteinte dans cette zone. Le reste du radeau est recouvert de bain solidifié limitant la dissolution sur toute la surface du radeau.

Cette condition ne peut-être rencontrée dans une expérience en laboratoire ou dans les cuves d'électrolyse. Le volume de bain est soit plus important et la surface du radeau est négligeable comparé à la surface du bain. Les écoulements, générées par l'échappement des bulles ou le champ magnétique, présent dans les cuves d'électrolyse favorise la dispersion de l'alumine et permet l'optimisation de la dissolution. Pour limiter l'effet observé dans la simulation, un flux de masse pourrait-être intégré sur les parois du réservoir, ou biens l'ajout d'un terme source négatif (i.e. un puit) permettant de représenter la consommation par électrolyse. Ces deux concepts permettront une sortie de l'alumine du système étudié permettant d'en diminuer la concentration.

6.2.3 ANALYSE DE LA CONVECTION NATURELLE

Bien que certains écoulements ne sont pas pris en compte, la convection naturelle joue un rôle sur la dispersion de l'alumine dissoute dans le modèle comme le montre la Figure 6-11. On peut voir que même si l'écoulement lié à la convection naturelle est moins intense que la convection illustrée aux instants qui suivent l'injection (Figure 6-3), la convection demeure présente particulièrement sur les parois du creuset. Ce phénomène pourrait être produit par une anomalie, un écart est présent entre les deux premières

rangées de particules le long des parois. Cet écart engendre une diminution du transfert de chaleur produisant un fort gradient de température. Ce fort gradient est donc le moteur de la forte convection naturelle dans cette zone. Cette anomalie n'a pas pu être remédiée et sera dans les améliorations futures.

Alors que la température devient homogène dans le bain électrolytique, la convection naturelle est affaiblie, voire nulle après deux minutes de simulation. Ceci limite donc fortement la dispersion de l'alumine et entraîne la saturation du bain comme présenté précédemment à la Figure 6-10 (t= 120s et +).

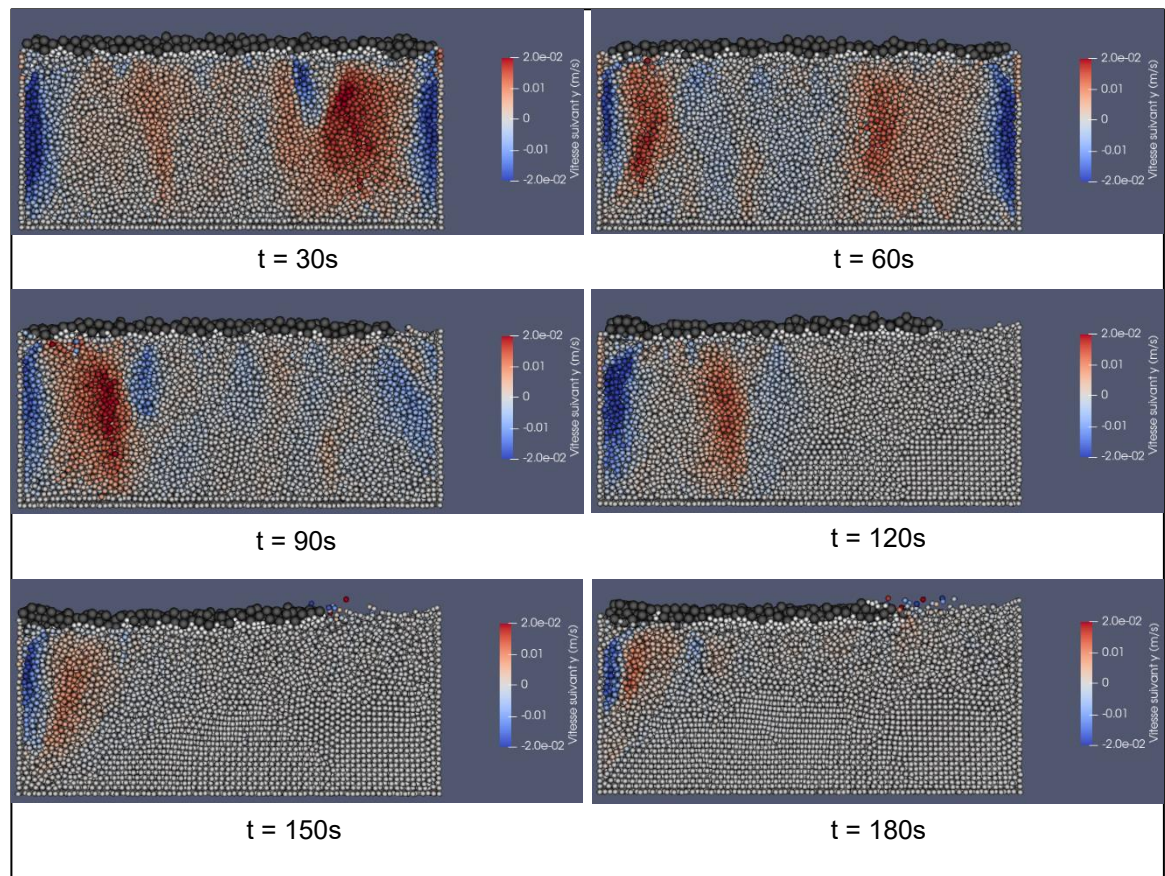


Figure 6-11: Évolution de la convection naturelle en fonction du temps

6.2.4 CAS DE RÉFÉRENCE – POINTS IMPORTANTS

La simulation de référence exécutée démontre la capacité du modèle mathématique à reproduire adéquatement les nombreux phénomènes considérés. Ce qui permet d'obtenir plusieurs données quantitatives massiques, chimiques et thermiques, notamment le taux de dissolution en alumine du radeau (mg/s), la concentration locale en alumine dans le bain (% mass.), l'évolution de la quantité de bain solidifié (g), la surface totale couverte par le radeau (mm²), l'évolution de la température moyenne, et de surface du radeau (°C) et les vitesses d'écoulement dans le bain résultant de la convection naturelle (cm/s). Sachant que chacun de ces indicateurs influence, ou est influencé par le taux de dissolution de l'alumine, il est désormais possible de comparer plusieurs cas parallèles afin d'évaluer les facteurs qui influencent positivement ou négativement la dissolution d'un amas d'alumine suite à son injection dans le bain électrolytique. Cette analyse sera présentée dans le sous-chapitre suivant.

6.3 . L'ANALYSE PARAMÉTRIQUE

L'objectif principal de cette étude paramétrique est d'étudier la sensibilité de variables d'entrée définies sur la réponse des indicateurs présentés dans la section précédente; de façon à déterminer les conditions les plus propices à favoriser une rapide dissolution de l'alumine. L'étude paramétrique sera réalisée en faisant varier un seul paramètre à la fois et en maintenant les autres paramètres identiques au cas de référence. L'amplitude très importante des variations permet d'illustrer la vaste étendue du domaine

numérique étudiable avec ce modèle mathématique. Pour cette étude, cinq cas ont été choisis :

1. Température ambiante : Ce scénario évalue l'impact de la température ambiante qui a un rôle important dans l'équilibre thermique du radeau.
2. Température d'injection : Ce scénario permet d'évaluer l'effet de la température initiale de l'alumine dans un cas où une forte quantité d'énergie thermique (alumine préchauffée) lui a été fournie avant même l'injection dans la cuve.
3. Température du bain : Ce scénario étudie l'influence de la température du bain, et notamment de la surchauffe ce qui favorisera une solidification plus rapide du bain.
4. Méthode d'injection (injection lente) : Ce scénario étudie l'effet temporel provenant d'une injection d'alumine plus lente.
5. Méthode d'injection (mouvement de l'injecteur) : Ce scénario permet de représenter « virtuellement » un cas où l'injection d'alumine avait lieu sur une surface en déplacement suite à la convection⁴ du bain présente dans la cuve d'électrolyse. Ceci influencera donc la géométrie initiale du radeau.

⁴ Aucune convection forcée n'est toutefois considérée dans le bain électrolytique.

Un résumé des différents scénarios et des valeurs respectives utilisées sont regroupés dans le Tableau 6-2 :

Tableau 6-2: Valeurs des variables utilisées pour l'analyse paramétrique

Variables	Conditions de référence	Condition 1	Condition 2	Condition 3	Condition 4	Condition 5
Masse injectée	14 g	14 g	14 g	14 g	14 g	14 g
Température d'injection	150 °C	150 °C	500 °C	150 °C	150 °C	150 °C
Méthode d'injection	Injecteur statique	Injecteur statique	Injecteur statique	Injecteur statique	Injection lente (50s)	Injecteur en mouvement
Température du bain [surchauffe]	975 °C [15°C]	975 °C [15°C]	975 °C [15°C]	965 °C [5°C]	975 °C [15°C]	975 °C [15°C]
Température ambiante	900 °C	750 °C	900 °C	900 °C	900 °C	900 °C

6.3.1 CONDITION 1 : VARIATION DE LA TEMPÉRATURE AMBIANTE LIÉE AUX PERTES DE CHALEUR

La condition 1 de l'étude paramétrique correspond à la variation de la température ambiante au-dessus du bain. Cette température était fixée à 900°C pour la condition de référence et est fixée à 750°C pour cette condition. L'objectif est d'analyser l'impact des pertes de chaleur vers l'ambiant sur la masse de bain solidifié produite et l'envergure de l'effet sur la diminution attendue du taux de dissolution de l'alumine dans le bain. La Figure 6-12 montre l'évolution de la masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps comparé aux valeurs obtenues avec la condition de référence (CP).

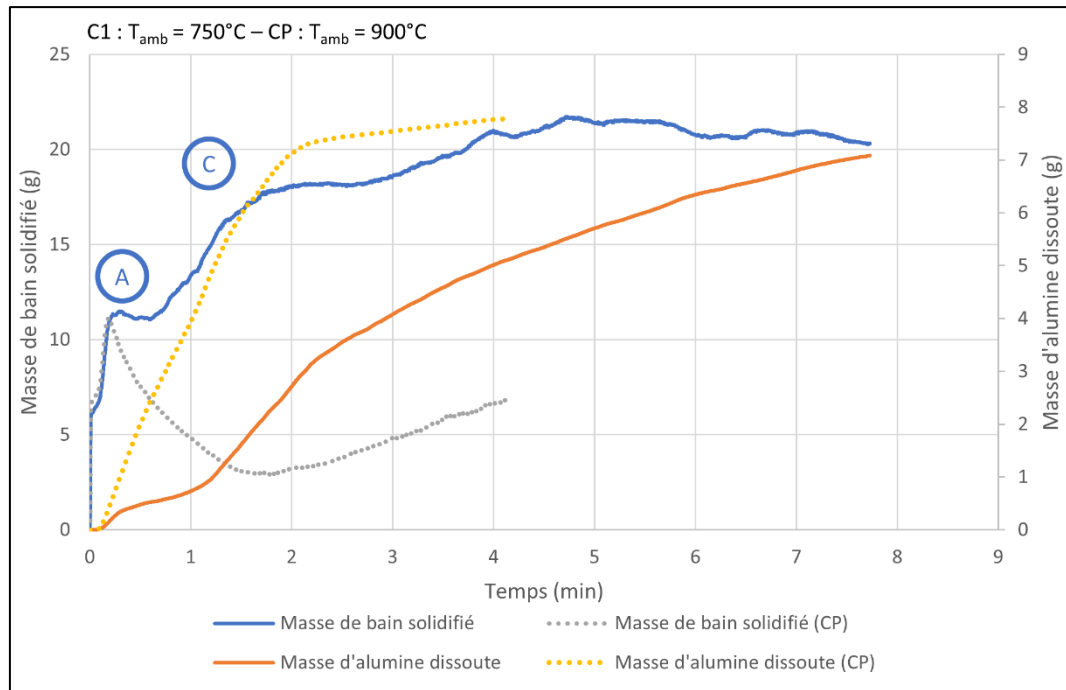


Figure 6-12: Masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour la condition 1 comparée à la condition de référence (CP)

La Figure 6-12 montre que l'évolution de la masse de bain solidifié est similaire sur les premiers instants après l'injection (Zone A). À la suite du premier pic, les pertes de chaleur sont suffisantes pour freiner la diminution de bain solidifié (entre 0.4 et 0.8 minutes) et avoir une augmentation continue par la suite (Zone C). Les résultats démontrent qu'une quantité négligeable de bain est retournée à l'état liquide suite à l'injection initiale. Dans le cas de référence, près de 60-70% de la masse de bain avait refondu dans les deux premières minutes qui suivaient l'injection. Conséquemment, la masse de bain solidifiée se met à croître plus vite, et l'on atteint 73% de la masse totale du radeau à 5 minutes après l'injection.

La formation importante de bain solidifié influence directement la dissolution de l'alumine. Ce bain solidifié limite le contact entre les particules

d'alumine et le bain liquide. Les pertes thermiques limitent aussi le réchauffement des particules d'alumine, qui conserve une température inférieure à la température de liquidus du bain et restreint donc la dissolution. Une réduction de la dissolution totale du radeau de 35.6% est observée près de 4 minutes après l'injection entre cette condition et la condition de référence. La Figure 6-13 montre que la montée en température est identique avec la condition initiale car le coefficient de transfert de chaleur équivalent reste identique. La température de convergence est beaucoup plus faible à cause de la baisse de la température ambiante.

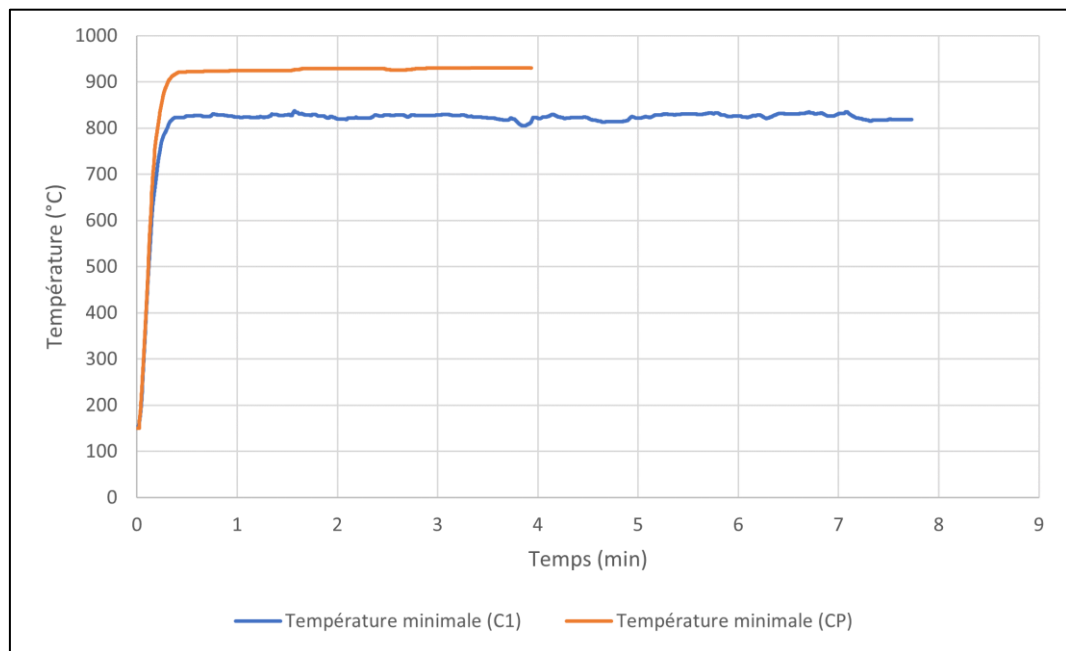


Figure 6-13: Comparaison de la température minimale entre la condition 1 et la condition de référence

La Figure 6-14 permet la comparaison du taux de dissolution entre la condition 1 et la condition de référence.

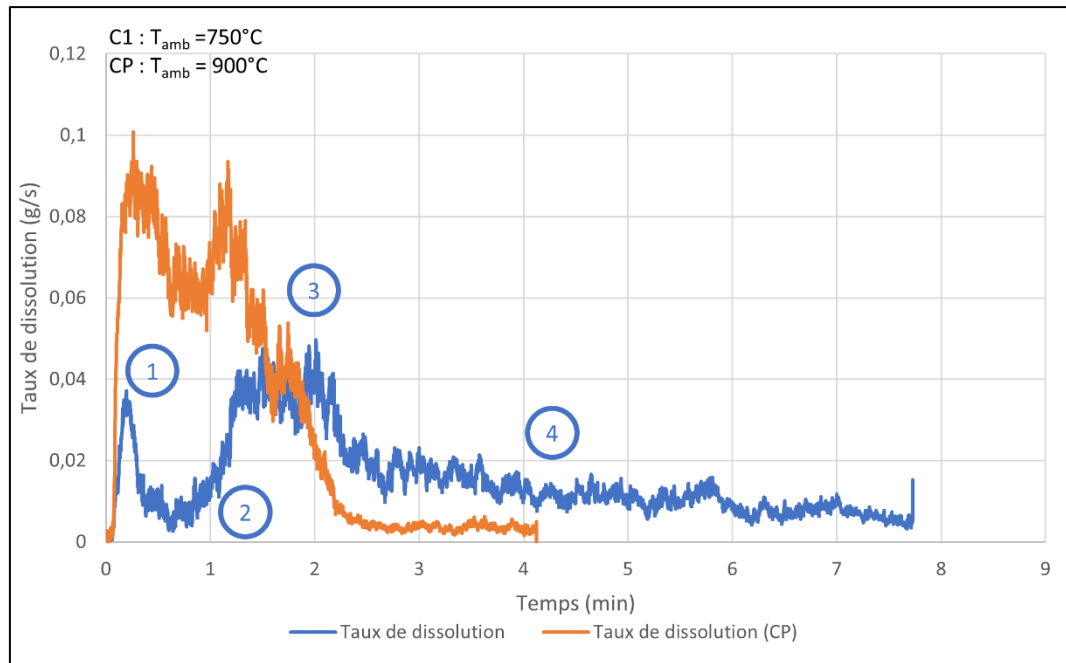


Figure 6-14 : Taux de dissolution de l'alumine en fonction du temps pour la condition 1 comparée à la condition de référence (CP)

L'analyse des zones pour comparer à la condition de référence (Figure 6-6) montre que :

- La phase 1 (de 0 à 0.5 minutes) : Dissolution des particules libres est beaucoup moins important,
- La phase 2 : (0.5 à 1 minutes) : Stabilisation thermique du radeau engendre une plus grosse formation de bain solidifié donc diminue fortement le taux de dissolution,
- La phase 3 (1 à 2 minutes) : Dissolution du radeau par le périmètre est plus limité par la masse de bain solidifié,
- La phase 4 (2 minutes et plus) : Dissolution fortement restreinte due à l'augmentation de la concentration dans le bain reste plus

importante car les gradients de température sont plus grands, favorisant la convection naturelle (Figure 6-15).

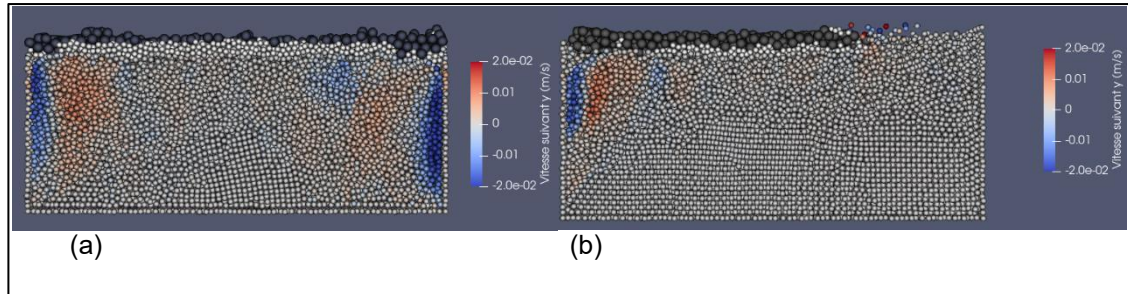


Figure 6-15: Convection naturelle à 180s pour (a) : la condition 1 et (b) : la condition de référence (CP)

L'étude de cette condition démontre qu'une variation de la température du milieu ambiant entraîne des changements importants sur la structure du radeau avec notamment, une augmentation de la masse de bain solidifié et une diminution considérable de la dissolution de l'alumine. Les publications et les études liées au repêchage de radeaux sont souvent réalisées avec une ouverture considérable de la croûte dans la cuve d'électrolyse (Sindre Engzelius Gylver *et al.*, 2019; S. E. Gylver *et al.*, 2019). Cette condition montre que l'analyse de ces radeaux peut être fortement erronée par les pertes thermiques. En condition réelle, la présence de la croûte limitera les pertes thermiques vers l'ambiant et donc la proportion de masse de bain solidifié dans le radeau sera différente des résultats publiés dans ces conditions intrusives.

6.3.2 CONDITION 2 : VARIATION DE LA TEMPÉRATURE DE PRÉCHAUFFAGE DE L'ALUMINE AVANT L'INJECTION

La condition 2 a pour objectif d'étudier l'impact de la température de l'alumine lors de l'injection sur la formation du radeau. En milieu industriel, le réservoir d'alumine est situé au-dessus de la croute. Par conséquent, l'alumine est directement préchauffée par les pertes thermiques de la cuve et peut atteindre des températures qui varient entre 100°C et 150 °C selon les périodes de l'année. Dans la condition de référence, la valeur était fixée à 150°C. Dans la condition 2, l'alumine est préchauffée à 500°C ce qui constitue un apport d'énergie supplémentaire et hors du contexte normal d'opération. Ce préchauffage représente 4 410 J pour une injection de 14g. L'objectif est de diminuer la masse de bain solidifié et d'accélérer le réchauffement de l'alumine pour évaluer son effet sur la dissolution. La Figure 6-16 montre l'évolution de la masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps comparée aux valeurs obtenues avec la condition de référence (CP).

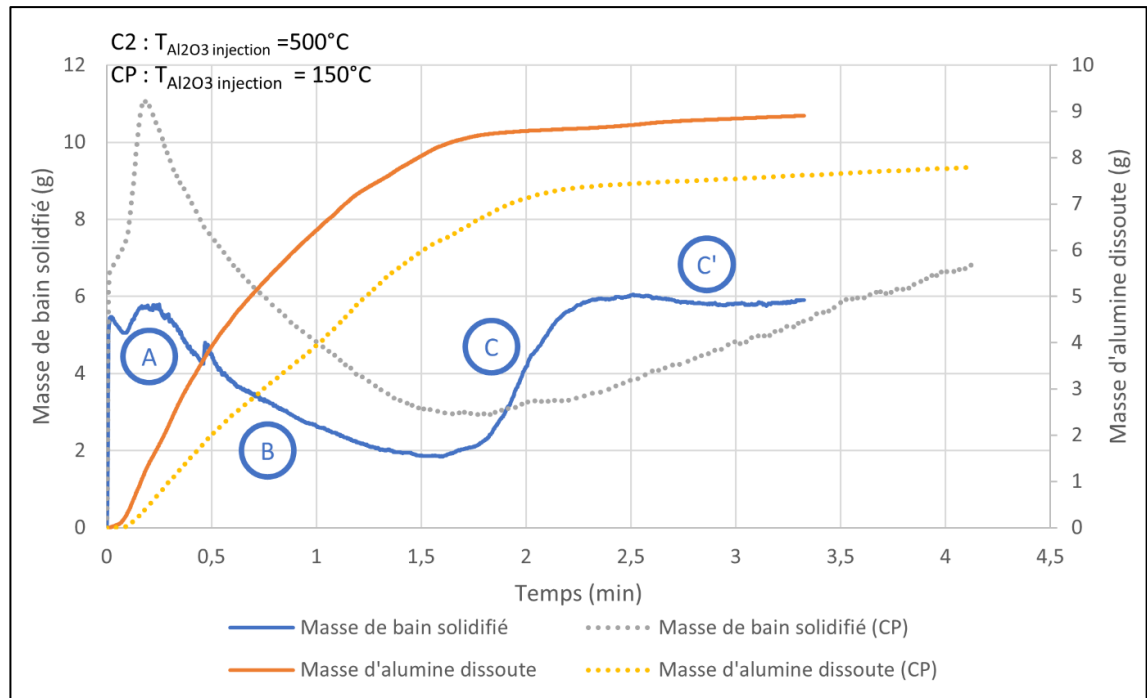


Figure 6-16: Masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour la condition 2 comparée à la condition de référence (CP)

La courbe de la Figure 6-16 peut être divisée en 4 zones distinctes :

- La zone A : La masse de bain solidifié est moins importante que la condition de référence ce qui favorise la dissolution de l'alumine. L'alumine nécessite moins d'énergie pour atteindre la température de liquidus et permettre de se dissoudre.
- La zone B : la fonte du bain solidifié est plus lente car les gradients de température sont plus faibles. Une diminution des gradients de température réduit les effets de la convection naturelle. Le pic initial étant plus faible, la masse de bain solidifié reste plus faible que la condition de référence.
- La zone C : La température est homogène dans le bain, les apports par la convection naturelle sont négligeable comparé aux pertes

thermiques comme le montre la Figure 6-17. La masse de bain solidifié augmente plus rapidement.

- La zone C': état permanent et d'équilibre, la convection naturelle est peu présente, les apports de chaleur sur les parois du creuset égalisent les pertes de chaleur sur la partie supérieure du radeau. Cette zone n'est pas rencontrée dans la condition de référence car l'évolution est plus progressive. Dans cette condition, la convection étant tellement faible que la masse de bain solidifié a augmenté brutalement durant la zone C. Les courbes de masse de bain solidifié des deux conditions pourraient se rejoindre si le temps simulé avait été identique. Le bain solidifié représente 44.5% de la masse du radeau à la fin de la simulation.

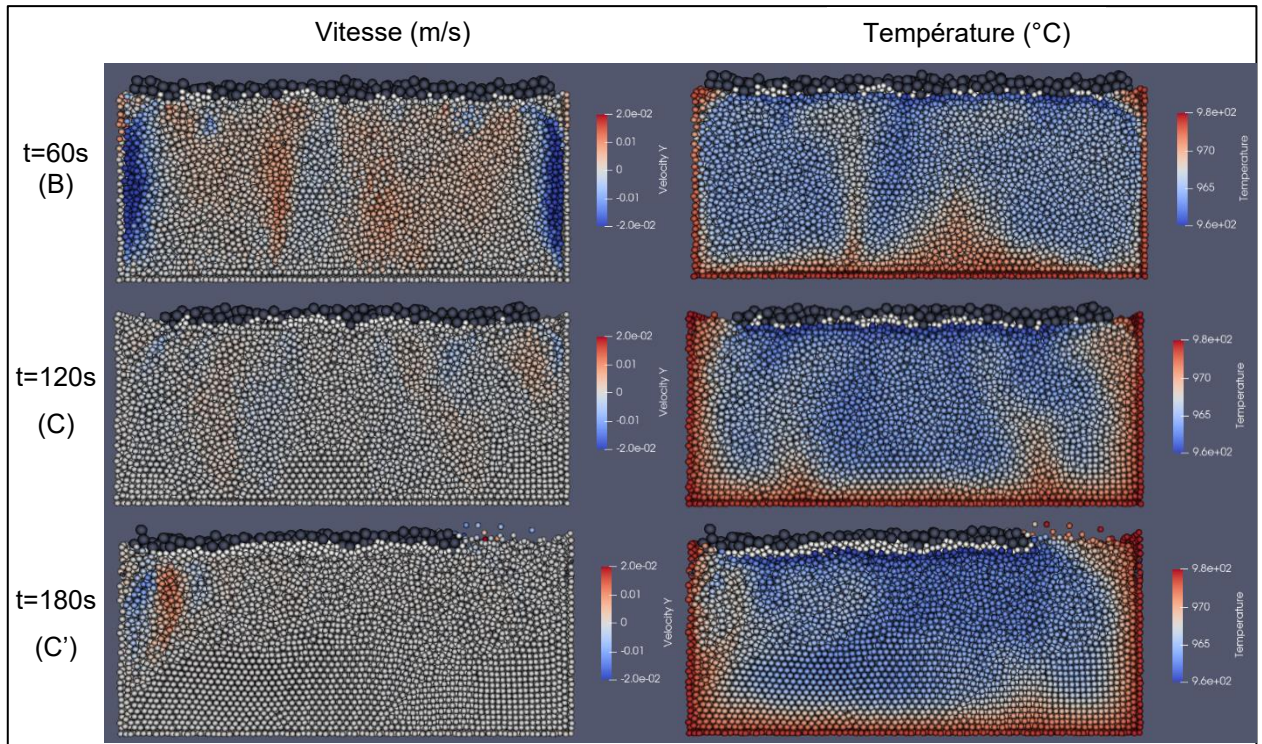


Figure 6-17: Évolution de la convection naturelle et la température pour chaque zone de la condition 2

La Figure 6-18 montre la comparaison du taux de dissolution entre la condition 3 et la condition de référence.

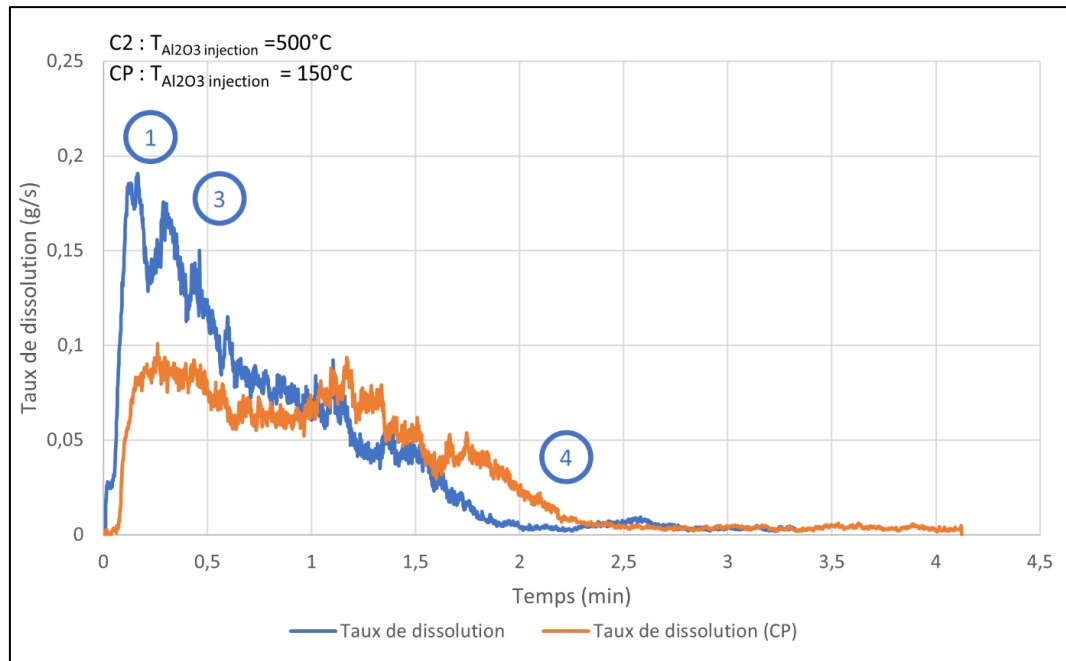


Figure 6-18 : Taux de dissolution de l'alumine en fonction du temps pour la condition 2 comparée à la condition de référence (CP)

L'analyse des zones pour comparer à la condition de référence (Figure 6-6) montre que :

- La phase 1 : une température d'injection plus importante diminue le temps pour débuter la dissolution. La proportion de bain solidifié est plus faible et la proportion d'alumine à température du bain est plus importante, donc le flux de dissolution est plus important.
- La phase 2 : cette phase n'est quasiment pas visible due à une faible masse de bain solidifié.
- La phase 3 : cette phase se produit beaucoup plus tôt, juste après la phase 1. La masse de bain solidifié est faible donc la dissolution est optimisée.

- La phase 4 : La quantité d'alumine dissoute durant les phases précédentes est très importante comparé à la condition de référence. La concentration en alumine est donc plus élevée et le bain en dessous du radeau est saturé ce qui limite plus fortement la dissolution.

La condition 2 montre que le préchauffage de l'alumine à une température supérieure à celle couramment rencontrée permet de diminuer la formation de bain solidifié et d'optimiser l'injection de l'alumine. Mais ce préchauffage engendre des surcouts sur la production de l'aluminium pour une augmentation du flux de dissolution de l'alumine limitée. Le modèle pourrait donc permettre de trouver le point optimal entre la dissolution rapide de l'alumine et le surcout engendré. De plus, à cette température, la présence d'eau dans la structure de l'alumine est faible. Ce paramètre n'étant pas considéré dans le modèle, cette condition montre une amélioration potentiellement supérieure à la réalité.

6.3.3 CONDITION 3 : VARIATION DE LA SURCHAUFFE DU BAIN

La condition 3 correspond à l'étude de la variation de la température d'opération de la cuve d'électrolyse. Dans la condition de référence, cette valeur est fixée à 975°C avec une température de changement de phase de 960°C, ce qui correspond à une surchauffe de 15°C. Dans la condition 3, la température du bain est fixée à 965°C alors que la température de liquidus est la même, ce qui nous donne une surchauffe de 5°C.

L'avantage premier de diminuer la température d'opération est de diminuer les pertes thermiques des cuves vers le milieu extérieur, d'augmenter la durée de vie des cuves et donc de diminuer les couts de fonctionnement. La diminution de la surchauffe permet également d'augmenter le rendement Faraday et la durée de vie de la cuve.

La Figure 6-19 montre l'évolution de la masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour cette condition comparée aux valeurs obtenues avec la condition de référence (CP).

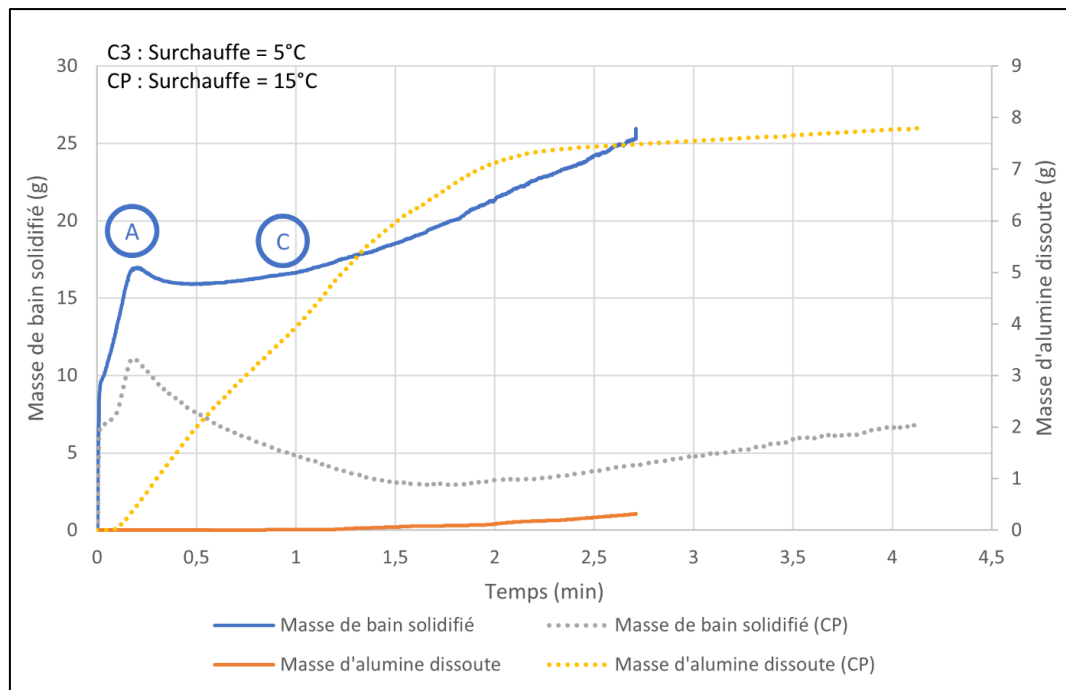


Figure 6-19 : Masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour la condition 3 comparée à la condition de référence (CP)

La Figure 6-19 montre une forte augmentation de la masse de bain solidifié dès l'injection de l'alumine (Zone A). Le bain liquide ayant moins d'amplitude d'énergie avant de passer solide, il a tendance à se solidifier plus rapidement (Zone C). Le bain solidifié représente 70.6% de la masse du radeau

à la fin de la simulation. Le bain a moins d'énergie à apporter à l'alumine pour la monter à la température du liquidus. La Figure 6-20 montre que les évolutions sont assez similaires entre la condition 3 et la condition de référence. La différence entre les températures finales est de 9.3°C.

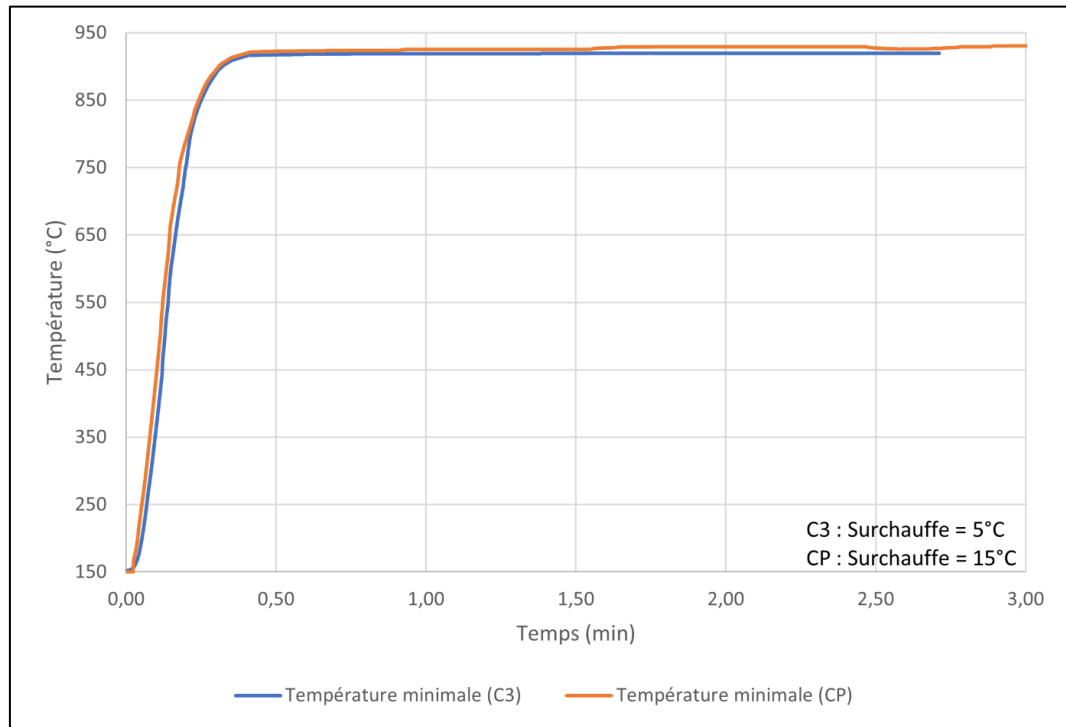


Figure 6-20: Comparaison de la température minimale dans le radeau entre la condition 3 et le cas de référence

La Figure 6-21 montre également l'impact de la diminution de la surchauffe sur la convection naturelle.

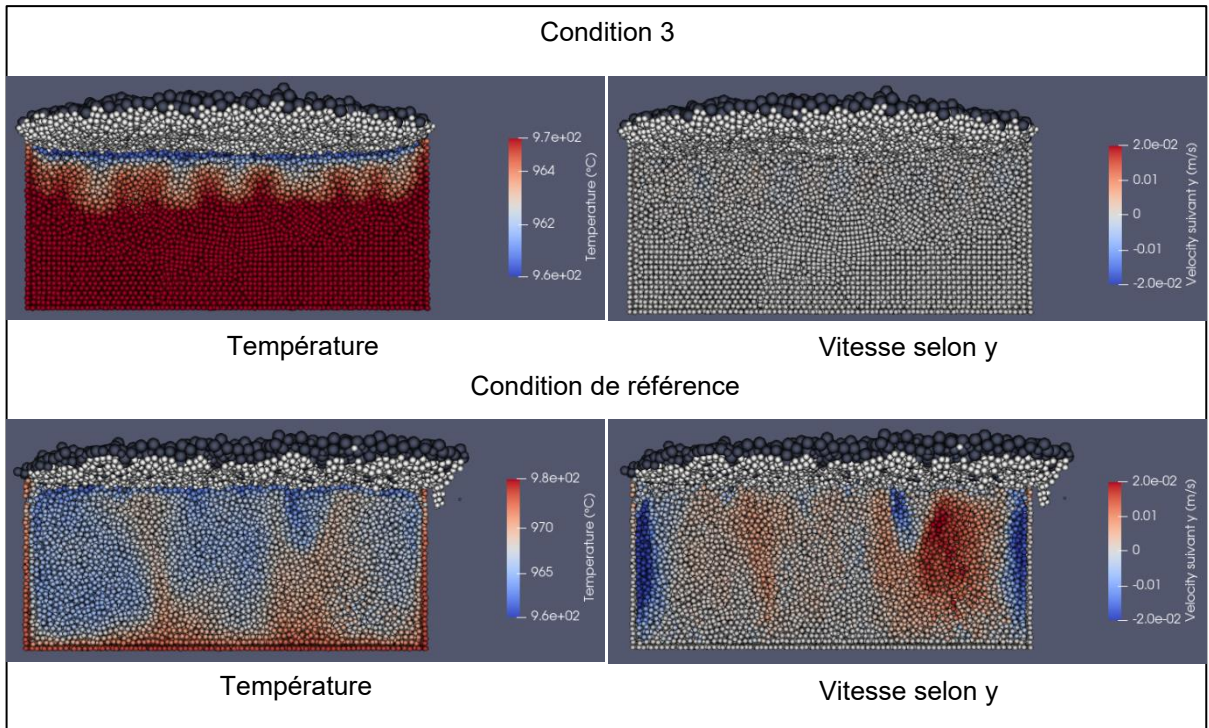


Figure 6-21: Température du bain et vitesse selon l'axe y dans le bain à 30 secondes après l'injection pour la condition 3 et la condition de référence

Une diminution de la surchauffe diminue le gradient de température donc la convection naturelle. Le transfert de chaleur est par conduction ce qui limite l'apport de chaleur par le bain.

La Figure 6-22 montre la comparaison du taux de dissolution entre la condition 3 et la condition de référence.

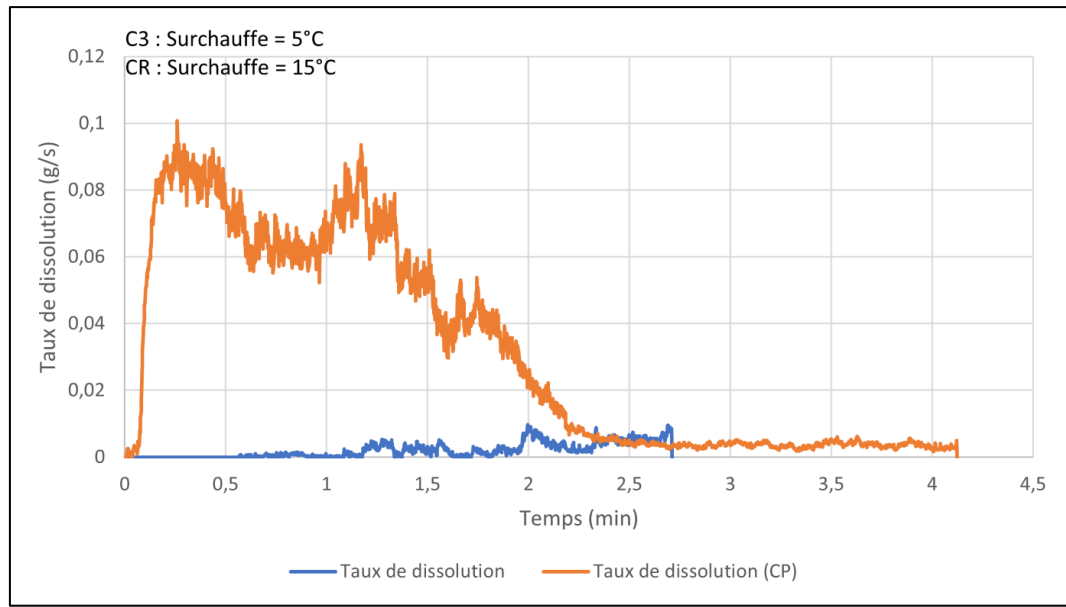


Figure 6-22 : Taux de dissolution de l'alumine en fonction du temps pour la condition 3 comparée à la condition de référence (CR)

La Figure 6-22 montre l'impact de l'augmentation importante de la masse de bain solidifié sur le taux de dissolution. La dissolution peut être considérée négligeable.

La condition 3 montre le fort impact de la surchauffe sur la formation du radeau. Une faible surchauffe engendre une augmentation de la masse de bain solidifié et la diminution des écoulements liée à la convection naturelle due aux plus faibles gradients de température. Cette dernière observation est le résultat d'une limitation du modèle actuel par rapport à la réalité du milieu industriel. Puisqu'il y a un fort mouvement convectif résultant de l'écoulement magnétohydrodynamique et de la remontée des bulles, un apport de chaleur plus important sera maintenu à proximité de l'échantillon et la masse de bain solidifié réelle serait donc réduite par rapport à la simulation. Néanmoins, l'effet instantané observable sur la solidification du bain suivant l'injection (zone 1)

demeure toutefois présent et illustre qu'une plus faible surchauffe entraînera une répercussion directe sur le taux de dissolution, ou du moins retardera celle-ci.

6.3.4 CONDITION 4 : ÉTUDE DE L'INJECTION LENTE

La condition 4 permet d'étudier l'effet de la méthode d'injection. Dans un scénario idéal, l'injection serait favorisée si l'alumine pouvait être ajoutée grain par grain (Solheim, 2014). Toutefois cette solution est irréaliste sachant qu'une seule injection d'un kilogramme d'alumine représente plus d'un milliard de particules de 80 μm de diamètre. Pour s'approcher de façon réaliste d'un cas idéal, l'injection de 14g d'alumine est répartie sur 50 secondes, soit plus de 100X plus lente que dans le scénario de référence. La Figure 6-23 montre l'évolution de la masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour cette condition comparée aux valeurs obtenues avec la condition de référence (CP).

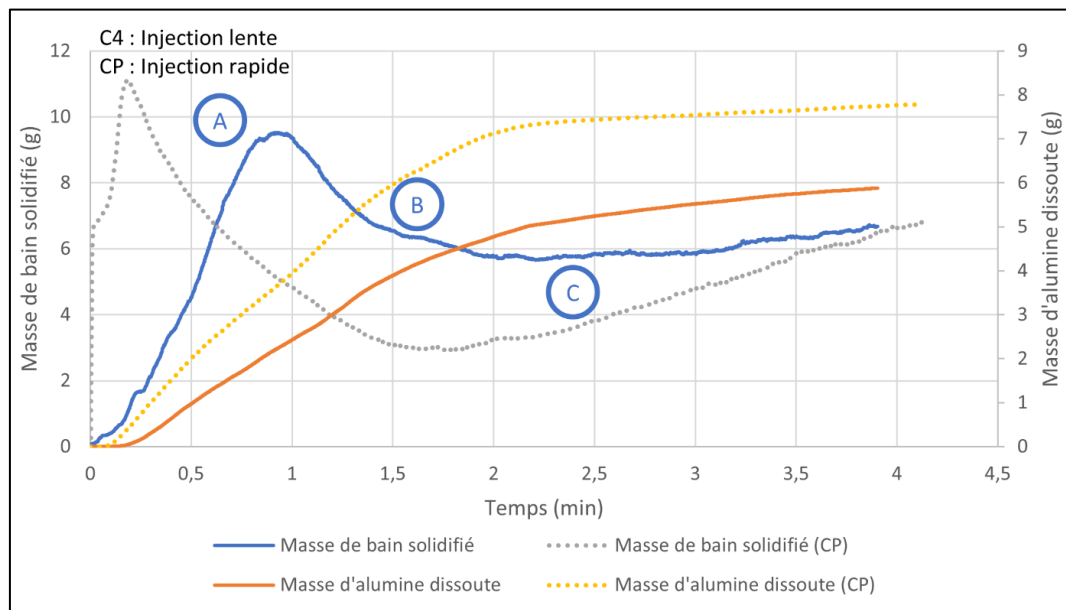


Figure 6-23: Masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour la condition 4 comparée à la condition de référence (CP)

La courbe de la Figure 6-23 peut être divisée en 3 zones distinctes :

- La zone A : La courbe de formation de bain solidifié est plus lente qu'avec la condition de référence due à l'ajout progressif de l'alumine. Le pic est moins grand grâce au réchauffement progressif de l'alumine. L'injection étant lente, l'énergie absorbée par l'alumine est répartie pour l'ensemble de l'injection de 50 secondes.
- La zone B : L'effet de la convection naturelle est moins visible. La surface du radeau est plus faible ce qui limite les apports de chaleur (Figure 6-26).
- La zone C : La masse de bain est donc plus importante au début de la zone et tend à rejoindre la courbe de la condition de référence. Le bain solidifié représente 42.2% de la masse du radeau.

La Figure 6-24 montre la structure du radeau après l'injection (à $t=5s$ et $t=50s$). L'injection lente permet la formation d'un petit agrégat dans les 15 premières secondes d'injection. Les particules qui sont injectées par la suite tombent par-dessus ce radeau et l'étalement de l'alumine sur la surface du radeau est donc diminué comme le montre la Figure 6-25. Ceci limite la surface d'échange thermique et chimique permettant la dissolution. La conséquence directe de la diminution de la surface est observable sur la quantité d'alumine dissoute. Une comparaison avec la condition de référence indique une réduction d'environ 33%. Les apports de chaleur étant plus faibles dû à la

diminution de la surface d'échange, la masse de bain solidifié ne diminue pas autant que la masse obtenue avec la condition de référence.

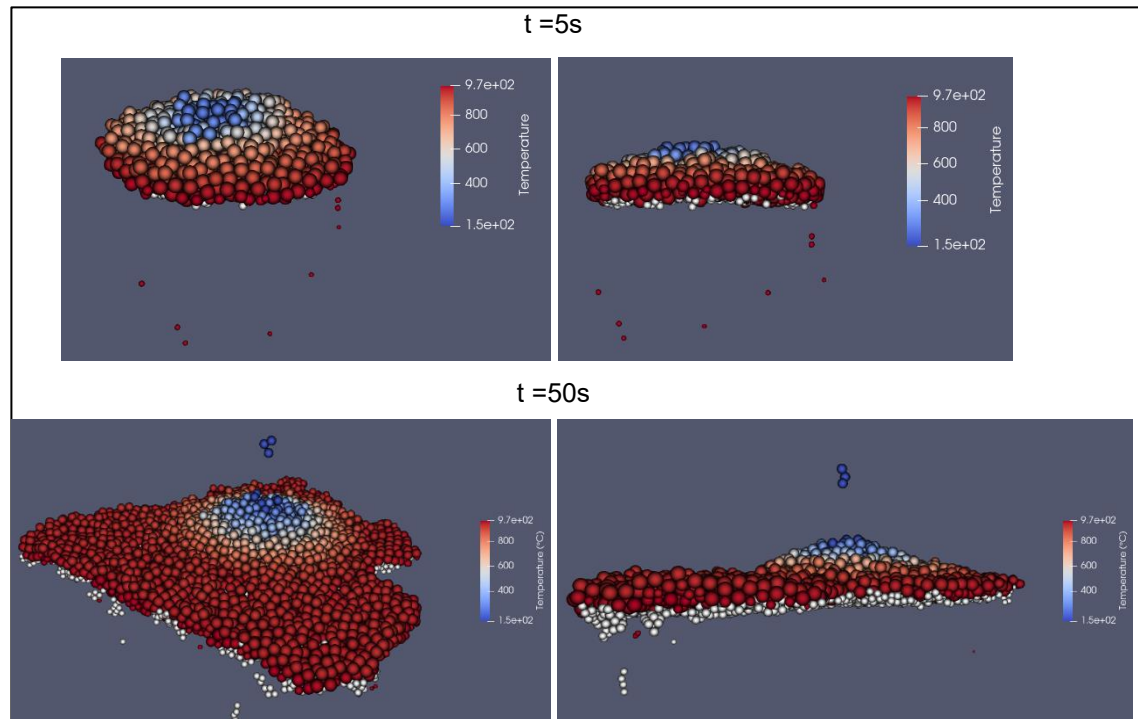


Figure 6-24: Image du radeau formé après une injection lente (en vue plongeante et en vue horizontale). Image prise à 5 secondes et 50 secondes après le début de l'injection, correspondant à la fin de l'injection

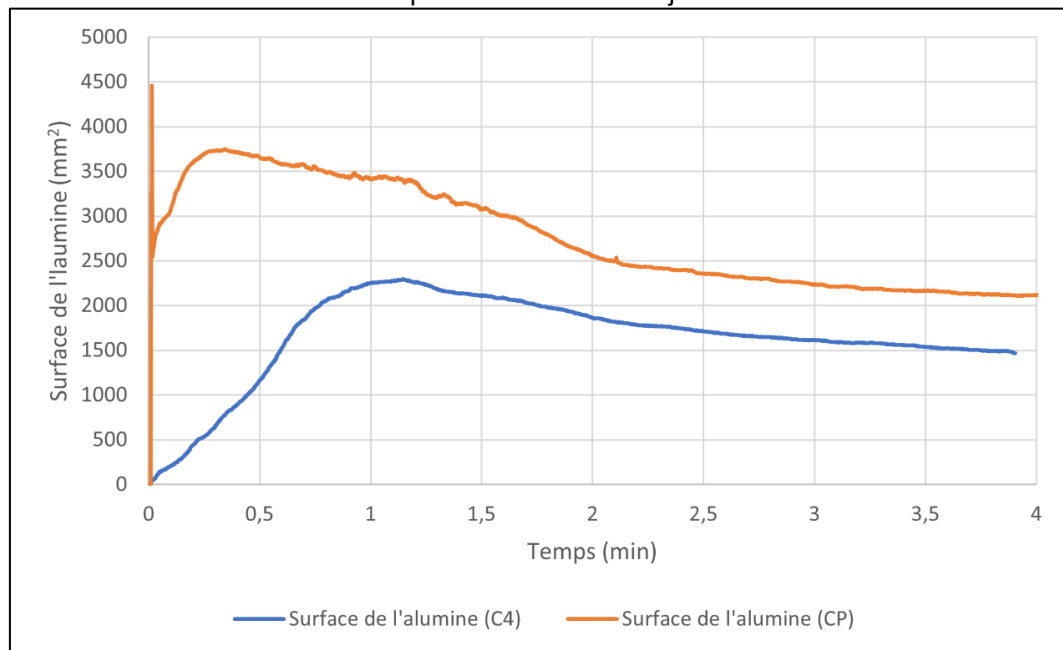


Figure 6-25: Comparaison de la surface de l'alumine en fonction du temps entre la condition 4 et la condition de référence

La Figure 6-26 montre la comparaison du taux de dissolution entre la condition 4 et la condition de référence.

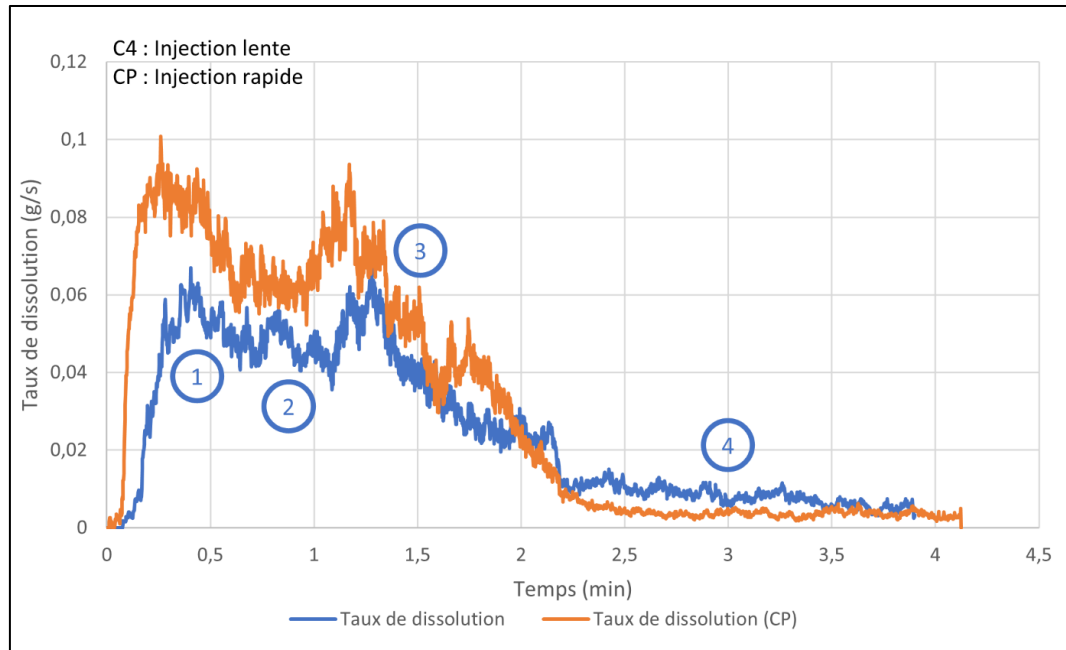


Figure 6-26 : Taux de dissolution de l'alumine en fonction du temps pour la condition 4 comparée à la condition de référence (CR)

La courbe de la Figure 6-26 peut être divisée en 4 zones distinctes :

- La phase 1: Le taux de dissolution augmente plus lentement dû à l'injection sur une plus longue durée.
- La phase 2 : La stabilisation thermique du radeau est similaire à la condition de référence
- La phase 3: La dissolution par le périmètre est plus faible car la surface du radeau est plus faible.
- La phase 4: Dissolution fortement restreinte due à l'augmentation de la concentration dans le bain. Elle est légèrement supérieure

comparée à la condition de référence car la masse d'alumine dissoute durant les phases 1 à 3 est plus faible.

La condition 4 laisse croire que l'injection lente n'est pas bénéfique pour l'injection de l'alumine dans les conditions de simulation. L'analyse de cette condition est limitée par le développement actuel du modèle. Dans une cuve d'électrolyse, des courants et vagues sont présents dans le bain. Donc une dose ne pourra jamais être injectée par-dessus le radeau et former un amas unique.

6.3.5 CONDITION 5 : ÉTUDE DE L'INJECTION EN MOUVEMENT

La condition 5 permet de contrer l'une des limitations du modèle rencontrée dans la condition 4, l'influence du déplacement du bain. Plutôt que d'étudier réellement l'influence du déplacement du bain, la simulation permettra d'étudier l'injecteur en mouvement. Le résultat est le même, car cela correspond à un changement de point de vue. L'entonnoir et le point de création des particules d'alumine seront déplacés linéairement et parallèles à la surface du bain. Le creuset étant de 7 centimètres de largeur, l'injection est donc fixée à 5 secondes à un taux de 28 mg par période de 10 ms. La vitesse de déplacement est donc fixée à 11.64 mm/s alors que les vitesses d'écoulement peuvent atteindre 100 mm/s dans une cuve d'électrolyse. Même si la vitesse simulée est plus faible que la réalité industrielle, cette méthode permet d'injecter les particules sur le périmètre du radeau comme le montre la Figure 6-27. La vitesse de déplacement de l'entonnoir n'est pas suffisante pour injecter en continu dans le liquide. La Figure 6-27 montre que la géométrie du

radeau est très similaire à la condition principale. Le bénéfice souhaité d'étendre la surface est difficile à observer dû à la limitation de la taille du creuset.

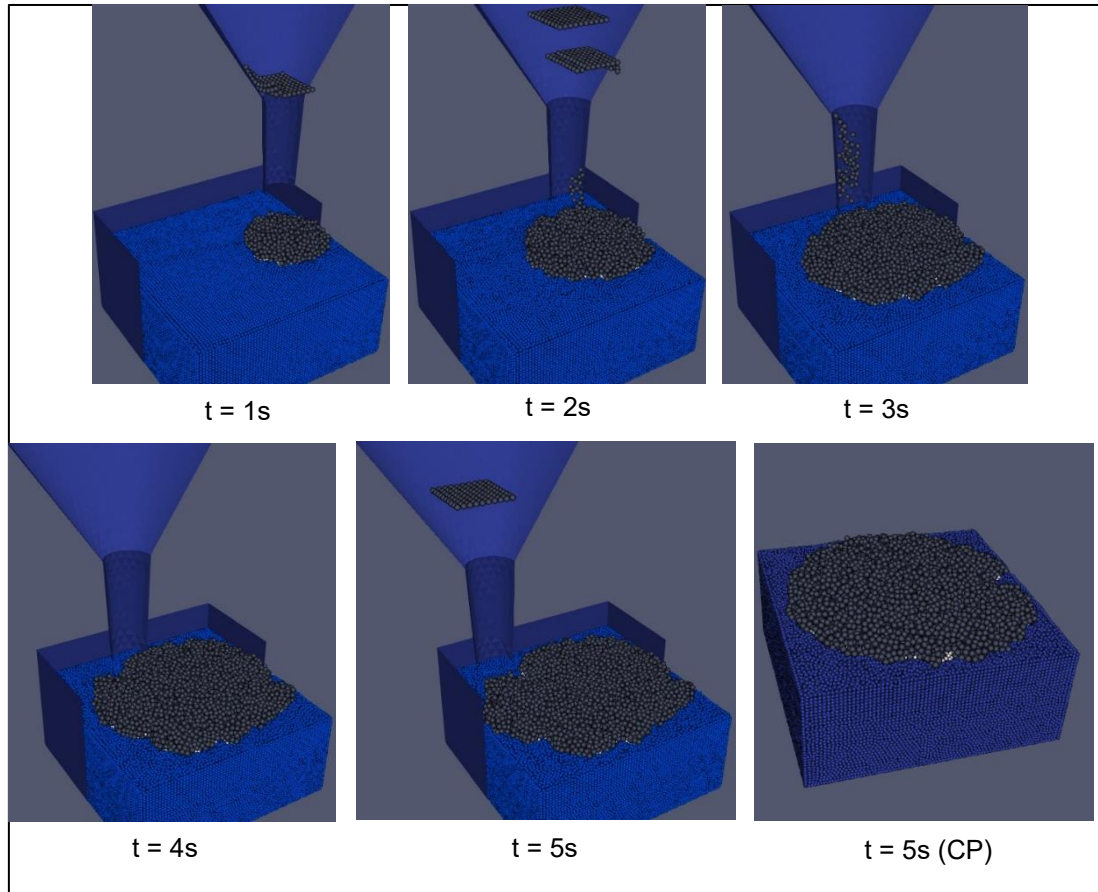


Figure 6-27 : Image durant l'injection en mouvement (simulation) et à 5 secondes pour la condition de référence

La Figure 6-28 montre l'évolution de la masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour cette condition comparée aux valeurs obtenues avec la condition de référence (CP).

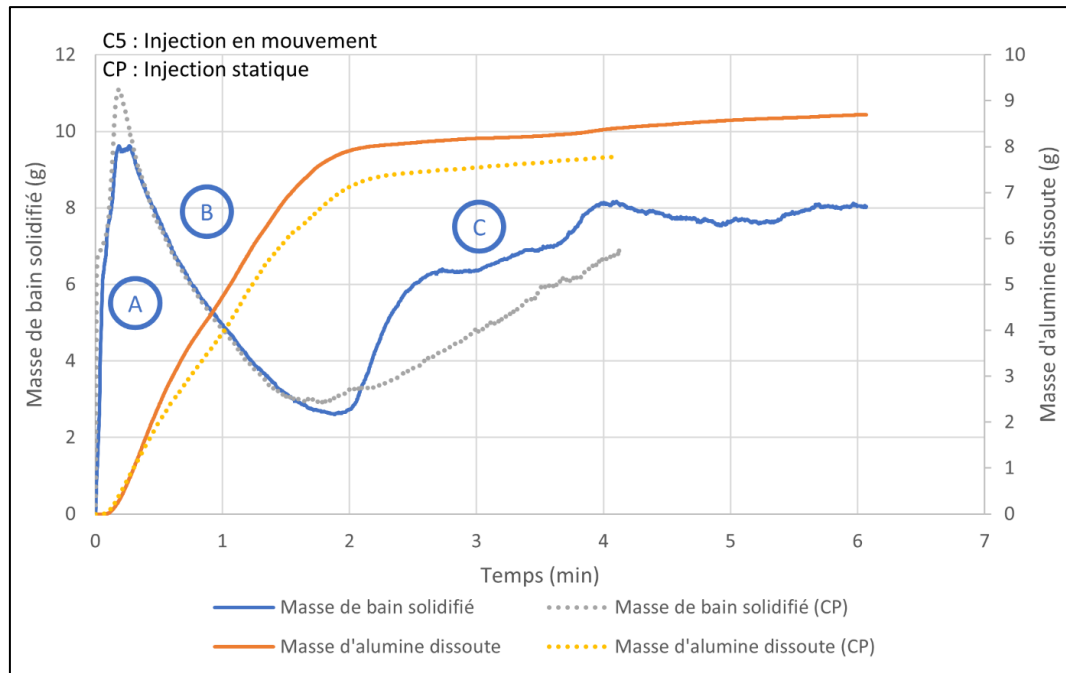


Figure 6-28 : Masse de bain solidifié et d'alumine dissoute en fonction du temps pour la condition 5 comparée à la condition de référence (CR)

La courbe de la Figure 6-28 peut être divisée en 3 zones distinctes :

- La zone A : La courbe de la masse de bain solidifié montre une forte augmentation similaire à la courbe de référence.
- La zone B : La baisse de la masse de bain solidifié engendrée par les apports de chaleur est identique à la condition de référence.
- La zone C : La répartition de l'alumine permet également d'optimiser le réchauffement. Les particules d'alumine déjà injectées ne se font pas refroidir par les nouvelles qui impactent le dessus du radeau. Toutefois, l'effet négatif de cette contribution est que la convection naturelle résultante est fortement diminuée suite au réchauffement plus rapide des particules d'alumine. L'augmentation brutale de bain solidifié à 2 minutes 30 secondes est liée à la diminution de la

convection naturelle comme pour la condition 2. La masse de bain solidifié à l'état final représente 53.1% du radeau.

La Figure 6-29 montre la comparaison du taux de dissolution entre la condition 4 et la condition de référence.

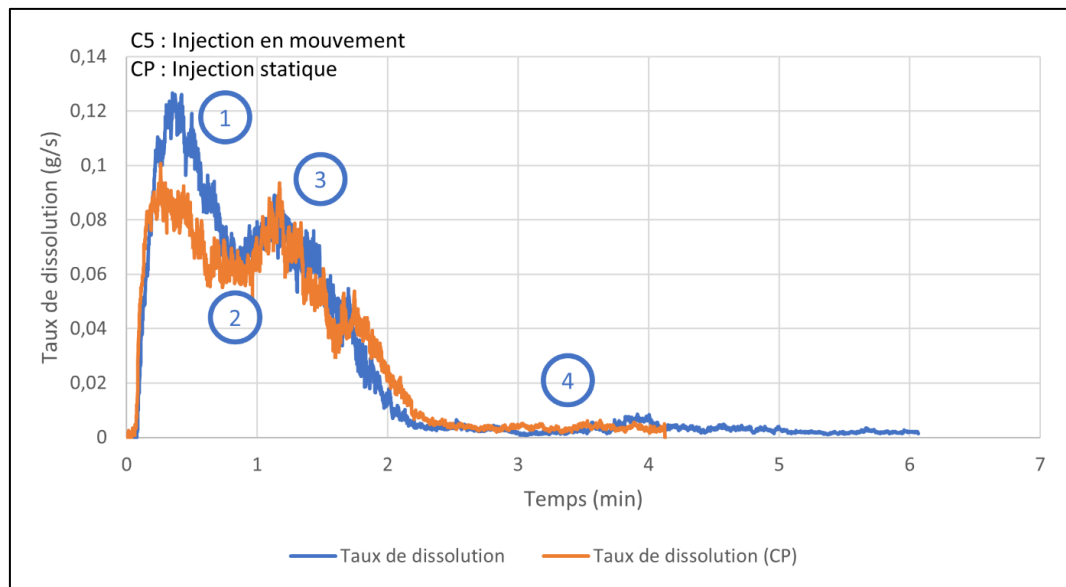


Figure 6-29 : Taux de dissolution de l'alumine en fonction du temps pour la condition 5 comparée à la condition de référence (CP)

La courbe de la Figure 6-29 peut être divisée en 4 zones distinctes :

- La phase 1: Le taux de dissolution suit la même tendance que la condition principale mais atteint un pic plus important.
- La phase 2 : La stabilisation thermique du radeau est similaire à la condition de référence
- La phase 3 : Dissolution du radeau par le périmètre reste identique à la condition de référence.

- La phase 4 : Toujours une tendance similaire à la condition de référence.

La Figure 6-30 montre l'évolution de la surface de l'alumine présente à la surface du bain en fonction du temps :

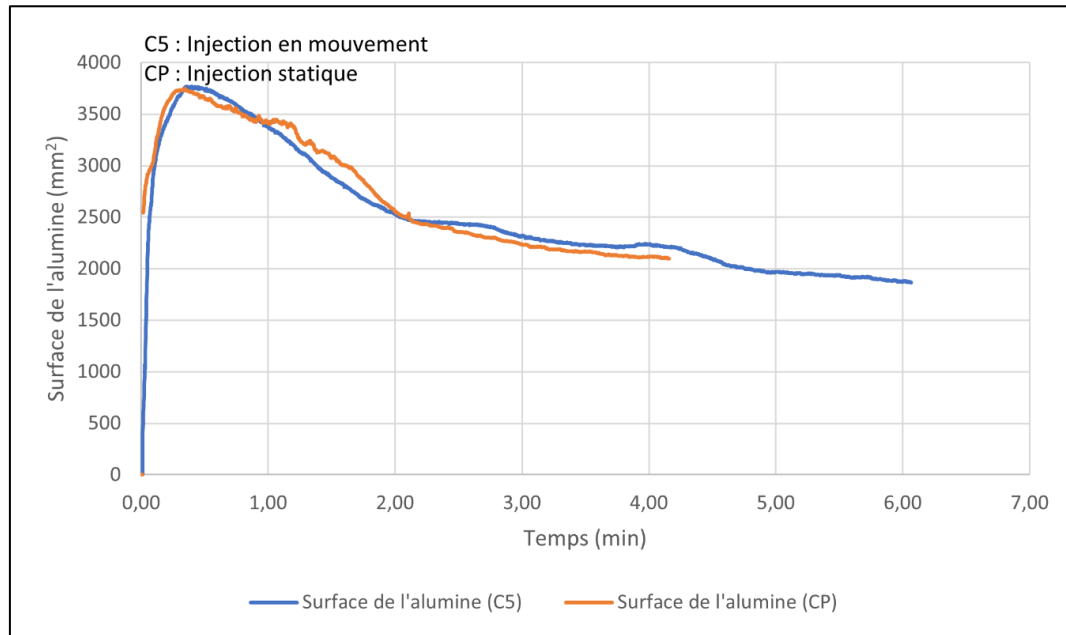


Figure 6-30 : Surface de l'alumine en fonction du temps pour la condition 5 comparée à la condition de référence (CR)

La Figure 6-30 montre que l'injection avec un déplacement n'augmente pas de façon significative la surface du radeau malgré le résultat recherché. Le radeau est contraint par les parois du creuset simulé. Une analyse similaire avec une surface de bain plus grande permettrait peut-être de montrer une plus grande différence. L'augmentation de la durée de l'injection permet également d'optimiser cette dispersion et d'augmenter la surface. Si la surface est augmentée, l'épaisseur du radeau sera diminuée. Le réchauffement du radeau sera donc plus rapide. À long terme, une surface de radeau importante permet également d'augmenter la surface d'échange massique.

6.4 . BILAN DES RÉSULTATS

Toute l'analyse présentée dans ce chapitre montre le potentiel du simulateur développé. La condition de référence met en évidence des points similaires avec toutes les validations présentées dans le chapitre précédent. Malgré les hypothèses définies pour optimiser le modèle, le modèle garde une certaine fidélité sur les résultats attendus.

L'étude paramétrique montre le potentiel du code pour analyser l'impact des paramètres sur la formation du radeau. Ces résultats permettent également de montrer que tous les mécanismes entourant la formation du radeau sont liés. Le Tableau 6-3 montre le bilan des paramètres utilisés pour l'étude paramétrique et la comparaison avec la condition de référence sur le taux de dissolution :

Tableau 6-3: Tableau récapitulatif des résultats obtenus

Variables	Conditions de référence	Condition 1	Condition 2	Condition 3	Condition 4	Condition 5
Masse injectée	14 g	14 g	14 g	14 g	14 g	14 g
Température d'injection	150 °C	150 °C	500 °C	150 °C	150 °C	150 °C
Méthode d'injection	Injecteur statique	Injecteur statique	Injecteur statique	Injecteur statique	Injection lente (50s)	Injecteur en mouvement
Température du bain [surchauffe]	975 °C [15°C]	975 °C [15°C]	975 °C [15°C]	965 °C [5°C]	975 °C [15°C]	975 °C [15°C]
Température ambiante	900 °C	750 °C	900 °C	900 °C	900 °C	900 °C
Taux de dissolution		↘	↗	↘	↘	↔
Origine de la variation		Masse de Bain solidifié	Montée plus rapide en température de l'alumine	Masse de Bain solidifié	Surface de radeau plus faible	Surface de creuset trop faible pour voir l'effet

CHAPITRE 7

CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Le projet de doctorat décrit dans cette thèse a permis le développement d'un modèle mathématique pour simuler l'injection d'alumine au sein d'un bain électrolytique. Ce modèle considère les mécanismes physiques associés à l'injection ainsi que les mécanismes thermiques et chimiques qui permettent de représenter l'ensemble du cycle de formation et de désintégration d'un radeau de bain et d'alumine. Ce cycle considère tout d'abord la solidification du bain, en passant par la fusion subséquente des particules de bain solide en allant jusqu'à la dissolution de l'amas d'alumine injectée au sein de la matrice de bain électrolytique liquide. Le modèle est basé sur le couplage de trois méthodes :

1. La méthode des éléments discrets (DEM) a été utilisée pour simuler l'alumine sous forme de particules. Cette méthode est basée sur la seconde loi de Newton pour calculer l'interaction des particules avec leur environnement afin de déterminer leur déplacement dans l'espace.
2. La méthode « Smoothed particle hydrodynamics » (SPH) a été utilisée pour simuler les écoulements dans le bain. Cette méthode discrète simule un liquide au moyen de fines particules sans maillage. L'avantage de l'utilisation de cette méthode discrète est de pouvoir simuler le bain se solidifiant autour de l'alumine durant

l'injection contrairement à des méthodes avec un maillage fixe. La méthode SPH est également utilisée pour le transfert de chaleur et la dissolution.

3. La méthode des éléments finis (FEM) a été utilisée pour simuler les parois du creuset et de l'injecteur, car la plus grande flexibilité associée à cette méthode permet une plus grande étendue pour la géométrie de l'injecteur.

Ces méthodes sont couplées à des équations de transfert de chaleur, de changement de phase et de dissolution afin de représenter adéquatement les phénomènes physiques suivants :

4. Formation de l'agrégat (radeau) constitué d'alumine et bain solidifié
5. Solidification et fusion du bain selon la méthode enthalpique
6. Dissolution de l'alumine
7. Enthalpie de dissolution
8. Variation du diamètre des particules d'alumine
9. Convection naturelle dans le bain
10. Échange d'énergie avec le milieu ambiant via la surface supérieure
11. Échange d'énergie via les parois latérales

Le couplage de tous ces phénomènes permet donc d'étudier les phases typiques résultantes de l'injection d'alumine; soit la formation rapide du radeau, la phase latente de dissolution, ainsi que la phase de dissolution et de désintégration du radeau. Les limitations associées aux dimensions du modèle entraînent également une 4^e phase qui représente l'atteinte de l'équilibre pour

un scénario donné, qui inclut un état de dissolution partiel de l'agrégat d'alumine limité par la formation de bain solidifié. Le choix des méthodes mathématiques utilisées est justifié par rapport à l'utilisation prévue du modèle, tout en assurant une flexibilité future pour permettre des développements ultérieurs et poursuivre l'évolution de celui-ci.

7.1 . RETOUR SUR LES CONSTATS CONSIDÉRANT LA VALIDATION DU MODÈLE MATHÉMATIQUE

Dans le but de faire le calage des mécanismes présents lors de l'injection d'un matériau granulaire dans un liquide à une température inférieure au liquidus, cinq méthodes de validation sur modèle analogue à température ambiante ont été développées et présentées au sein de la thèse :

1. **Mesure de l'angle de repos et de la densité apparente**: Ces validations ont permis la calibration initiale de composantes essentielles du modèle : l'interaction mécanique entre des particules solides. La validation de l'angle de repos a permis de calibrer la friction entre les particules ainsi que les contacts particules-parois. La validation de la densité apparente a permis de calibrer la force de contact élastique utilisée au sein de la méthode DEM.
2. **Injection analogue pour étudier l'effet sur la géométrie de l'amas injectée** : Plusieurs injections de graines de moutarde refroidies à l'azote liquide dans de l'eau à température pièce ont permis d'observer l'incidence des conditions d'injection sur la géométrie et le mécanisme de formation du radeau suivant

l'agglomération des graines et de glace qui s'ensuit l'injection. Ce faisant, il est possible de définir les conditions à respecter au sein du modèle mathématique FEM pour obtenir des conditions d'injection représentatives de la réalité qui permette l'obtention d'un radeau similaire à l'injection d'alumine dans les cuves d'électrolyse.

3. **Récupération de radeau de graine de moutarde et de glace suite**

à l'injection des particules : L'analyse de la structure des radeaux « moutarde-glace » récupérée à un temps compris entre 20 et 30 secondes après l'injection des particules a permis d'offrir de l'information qualitative et quantitative comparative importante pour caler le modèle mathématique. Une nette cohésion entre la glace formée et les particules a pu être observée. Ceci limite donc considérablement l'infiltration du liquide dans le radeau, et forme ainsi une structure sous la forme d'une coquille. Conséquemment, deux types de structures ont pu être observées dans le radeau : des graines de moutarde en cohésion avec la glace et des graines non infiltrées libre de mouvement.

4. **Imagerie schlieren permettant d'identifier les couches limites et**

la direction de l'écoulement thermique et massique : En observant l'injection de graines de moutarde refroidies à l'azote liquide via l'imagerie schlieren, il a été possible d'observer la cinétique du transfert de chaleur entre le radeau et le liquide. La méthode permet d'analyser les mouvements dans le bain qui sont générés (convection naturelle). La méthode permet d'observer

précisément les zones perturbées par l'injection des particules froides.

Une deuxième expérience réalisée avec une roche de sel de l'Himalaya refroidie dans de l'azote liquide a permis d'observer de façon transitoire les phases du transfert de masse et chaleur que rencontre un radeau : la formation de la gelée (glace) puis le début de la dissolution et l'atteinte d'un régime de dissolution établie. Il a été possible de mettre en évidence l'importance du phénomène de transfert de masse sur la convection naturelle en comparatif avec la température.

5. **Quantification de la vitesse d'écoulement liée à la convection naturelle par vélocimétrie par image de particules (PIV)** : Des mesures ont été réalisées par PIV pour évaluer la vitesse de l'écoulement sous un radeau formé avec des graines de moutarde 10 secondes après la formation d'un agrégat particule-glace. Ces données ont permis d'ajuster convenablement les coefficients utilisés dans l'équation d'accélération du modèle mathématique permettant de reproduire la convection naturelle thermique.

Pour assurer une cohérence entre les validations à basse température, certaines expériences comportant des injections d'alumine ont été réalisées dans un bain d'électrolyte. Ceci a permis de concrétiser la validation de certains concepts avec une comparaison typique des conditions réelles de l'industrie.

6. **Étude de l'évolution de la température de surface supérieure**

d'un radeau suivant l'injection d'alumine :

Une caméra thermique a été utilisée pour estimer l'évolution de la température de la partie supérieure d'un radeau suivant l'injection. Ces données transitoires ont permis de calibrer les apports de chaleur provenant du milieu ambiant situé au-dessus du radeau et des apports par conduction provenant du bain à travers le radeau. Ce faisant, il a été possible d'identifier qu'une température du milieu ambiant d'environ 900°C permet de s'approcher des résultats obtenus en laboratoire.

7. **Repêchage de radeau d'alumine 30 secondes après l'injection** :

Cette étude a permis d'identifier les similarités et les différences entre un radeau de graines de moutarde et un radeau composé d'alumine. Cette expérience a permis également d'étudier l'influence de la température d'injection et l'influence de la taille des particules d'alumine afin d'assurer une cohérence avec le diamètre des particules au sein du modèle mathématique (1.7mm de diamètre). La comparaison issue de l'injection de particules d'alumine de 3.2 mm de diamètre a permis de confirmer les similarités de structures avec les injections de graines de moutarde, et les résultats de la simulation. L'étude portant sur la variation de la température d'injection (150°C et 800°C) a permis d'identifier une différence sur l'infiltration du bain au sein de la poudre.

L'ensemble des validations réalisées ont permis de comprendre plus précisément plusieurs des phénomènes présents lors de l'injection d'un matériau granulaire, ce qui a permis d'adapter certaines composantes du modèle mathématique de façon à avoir une correspondance avec la réalité. Ces validations ont permis de démontrer la cohérence physique du modèle mathématique selon une variété de scénarios pour mettre en évidence l'étendue des simulations qui peuvent être potentiellement réalisées par le modèle.

7.2 . CONCLUSION DES RÉSULTATS

Chacune des simulations réalisées considère une injection de 14 grammes d'alumine dans le bain électrolytique. L'analyse d'une condition de référence a été réalisée dans un premier temps suivie par l'analyse de 5 scénarios complémentaires permettant d'étudier l'effet de différents paramètres d'entrée. Cette étude paramétrique permet de surenchérir sur la cohérence physique des résultats obtenus, mais permet principalement de quantifier l'impact de certains des paramètres d'entrée sur la formation et la dissolution d'un radeau d'alumine.

7.2.1 L'INJECTION

Ces résultats présentent les premières étapes de la formation du radeau. Ils mettent en évidence la nécessité d'utiliser la méthode FEM pour simuler un entonnoir pour brasser les particules et détruire le maillage créé lors de la génération des particules d'alumine. Ces résultats montrent la réaction

des particules lors du premier contact avec le liquide et l'effet combiné de la force de trainée et la force de tension de surface sur la forme du radeau.

Les résultats démontrent plusieurs phases distinctes qui surviennent au cours de l'injection des particules d'alumine. Suivant la chute des particules (1), l'énergie cinétique est dissipée et les particules sont freinées en surface du bain (2). Par la suite, des particules de bain se solidifient pour former une coquille sur l'ensemble de la surface inférieure du radeau (3) et le bain solidifié restreint le réchauffement des particules d'alumine et empêche la dissolution de ces particules (4). Suivant l'injection initiale, il y a une phase où les particules d'alumine se répartissent de façon quasi uniforme sur la surface du bain (5). Cette phase est la conséquence de la force de cohésion développée pour maintenir les particules entre elles, et permettre la formation d'un radeau. Toutefois, la formulation mathématique de mécanisme de cohésion implanté comporte certains degrés de liberté qui fait en sorte que l'entité simulée n'est pas aussi solide que les radeaux repêchés durant les expériences de validation. Les résultats démontrent que la géométrie des radeaux simulés ressemble plus à un radeau produit avec de fines particules d'alumine (voir section 5.2.2) ce qui est néanmoins représentatif de la réalité. Enfin, une fois que l'étalement est stabilisé (< 5 secondes), le radeau entre dans d'autres phases décrites dans l'analyse du cas de référence. Ces phases ultérieures sont principalement le résultat d'échange thermique et chimique plutôt que les conséquences des forces et des tensions mécaniques décrites dans la phase d'injection.

7.2.2 LE SCÉNARIO DE RÉFÉRENCE

Les conditions choisies pour le scénario de référence sont basées sur les propriétés rencontrées durant les expérimentations et sur certains résultats provenant de la validation :

- Masse d'alumine injectée : 14g
- Température de l'alumine avant injection : 150°C
- Température du bain : 975°C
- Injection en position statique
- Température de l'ambiance : 900°C

Les résultats provenant de l'analyse du scénario de référence démontrent que plusieurs phases distinctes peuvent être identifiées entre l'injection et la fin de la simulation.

Phase 1 : L'injection : Cette phase permet de simuler la formation du radeau en prenant en considération la position de l'injection et l'énergie cinétique de l'alumine acquise durant la chute. Une description détaillée de cette phase a été réalisée, pour le cas de référence, dans la section 7.1.1.

Phase 2 : Phase latente de dissolution : Le pic de masse de bain solidifié est atteint, et la masse commence à diminuer. La convection naturelle est stabilisée et permet un apport de la chaleur en continu et de réduire la teneur en alumine sous le radeau.

Phase 3 : Phase optimale de dissolution: Le radeau a atteint sa stabilité thermique. Les particules d'alumine situées sur le périmètre ne sont plus recouvertes de bain solidifié et peuvent se dissoudre.

Phase 4 : Stabilisation du taux de dissolution : atteinte des limites du modèle actuel. La masse de bain solidifié augmente. Le bain se sature en alumine limitant la dissolution. Aucun flux sortant n'est utilisé dans le modèle pour simuler un volume de bain plus important. Ce flux permettrait de limiter la saturation du bain. La convection naturelle diminue limitant les apports de chaleur au radeau.

La température du dessus du radeau suit une tendance similaire aux expériences réalisées avec la caméra thermique. La structure du radeau produit avec la simulation peut être comparée aux radeaux réalisés avec de grosses particules d'alumine. Des particules d'alumine ne sont pas recouvertes de bain 30s après l'injection. La force de cohésion développée pour maintenir les particules entre elles ne permet pas de produire une géométrie identique du radeau comparé aux expériences. L'alumine a tendance à plus s'étaler sur la surface. La force de cohésion permet de créer un comportement visqueux au lieu d'un comportement solide. L'étalement des particules d'alumine est observable avec de l'alumine fine durant les expériences. Donc cette force de cohésion permet plus de reproduire l'injection d'alumine fine en augmentant le diamètre des particules simulées, donc en réduisant le temps de calcul.

L'équation d'accélération utilisée pour simuler la convection naturelle permet de former des mouvements verticaux du bain. Ce mouvement est représenté par la présence de plusieurs vortex. Les expériences réalisées avec l'imagerie schlieren et avec la méthode PIV montrent la présence d'un vortex principal. Le résultat obtenu avec la simulation peut être perturbé par le volume

de bain simulé trop petit. L'effet des parois a donc beaucoup d'influence sur le mouvement du bain.

7.2.3 L'ANALYSE PARAMÉTRIQUE

Grâce à l'étude paramétrique, il a été possible de faire ressortir l'influence des paramètres d'entrée sur la formation et la dissolution d'un radeau d'alumine. Notamment, les différences principales respectives entre le scénario de référence et chacun des scénarios supplémentaires ont été décrites dans le chapitre 6. Le résumé des constats principaux associés à une variation de 1) la température d'injection, 2) la température du bain (surchauffe), 3) la température du milieu ambiant (pertes thermiques) et 4-5) la méthode d'injection est décrite ci-dessous.

L'analyse paramétrique montre que :

- L'augmentation des pertes thermiques à la surface (diminution de la température ambiante) entraîne une diminution de la température du radeau et entraîne une augmentation de la masse de bain solidifié. La dissolution de l'alumine est donc réduite car moins de particules d'alumine peuvent être en contact avec du bain liquide.
- L'augmentation de la température de l'alumine à l'injection permet de diminuer la masse de bain solidifié et d'accélérer la montée en température de l'alumine. La dissolution de l'alumine est donc augmentée.
- La baisse de la température du bain (baisse de la surchauffe) entraîne une forte augmentation de la masse de bain solidifié. Le

gradient de température dans le bain est plus faible donc la convection naturelle est moins intense. La dissolution est donc fortement réduite car moins de particules peuvent se dissoudre dans le bain liquide.

- L'injection lente a pour effet de limiter l'étalement de l'alumine à la surface du bain. La surface du radeau est plus faible ce qui limite la surface d'alumine en contact avec du bain liquide. La dissolution de l'alumine est donc réduite.
- L'injecteur en mouvement ne montre pas un changement important avec la condition de référence. La surface du bain est trop faible pour voir un étalement de l'alumine plus important. La masse d'alumine dissoute est donc similaire.

7.3 . RECOMMANDATIONS

Le développement d'un modèle mathématique est un processus en évolution puisque l'on cherche à se rapprocher de la réalité. Néanmoins, il y a également un équilibre à maintenir en termes de bénéfices et d'efforts pour assurer une productivité accrue de la part du chercheur. Les résultats présentés au sein de cette thèse prouvent que le modèle mathématique a atteint l'objectif du projet. Il est également clair qu'une utilisation plus étendue du modèle mathématique permettra de mieux comprendre et d'optimiser l'injection d'alumine au sein des cuves d'électrolyse. Pour se faire, plusieurs recommandations sont décrites ci-après pour retirer un maximum d'information pertinente tout en raffinant certains concepts qui limitent actuellement l'étendue

temporelle des simulations. Trois types de recommandations peuvent être distinguées : L'exploitation du modèle mathématique, les recommandations sur l'informatique et programmation et les recommandations physiques.

7.3.1 EXPLOITATION DU MODÈLE MATHÉMATIQUE

Le développement a atteint un niveau où les résultats obtenus montrent un potentiel pour étudier l'injection de l'alumine dans les cuves d'électrolyse. Avant de réaliser tout investissement de temps ou dans le matériel, le modèle peut être exploité pour pousser l'analyse paramétrique déjà débutée. Une étude pourra donc être réalisée avec les mêmes paramètres déjà présentés dans le chapitre 6 mais avec une augmentation du nombre de valeurs. Les résultats permettront de fournir à l'industrie plus de données sur les conditions d'injection.

7.3.2 RECOMMANDATIONS SUR L'INFORMATIQUE ET LA PROGRAMMATION

- Au cours du développement numérique du code mathématique, une attention particulière a été portée pour paralléliser le code selon une stratégie qui minimise le temps de calcul et de favoriser une meilleure rapidité d'exécution ou une augmentation du volume considéré. Cependant, l'attention la plus rigoureuse associée à ces détails peut difficilement rivaliser avec les avancées technologiques qui permettent de décupler le potentiel de calcul via l'ajout de micro-processeur et d'une meilleure capacité d'échange entre les

composantes. Il a été possible d'évaluer cet effet technologique lorsque la simulation est passée d'une carte RTX980ti à une carte RTX 3090, ce qui a permis de faire passer le temps de simulation de 0.1 s/h à environ 7s/h de simulation. Les avancés futures sur la nouvelle carte graphique permettra d'augmenter les dimensions du modèle simulé ou diminuer le temps nécessaire pour réaliser la simulation.

- Pour remédier à cette dépendance aux développements de Nvidia®, une étude pourrait analyser l'augmentation des performances attendues avec l'utilisation de deux cartes graphiques en parallèle. La limitation actuelle n'est pas la mémoire de la carte graphique (6Go utilisés sur 24Go), mais le nombre de processeurs. Malgré le nombre important sur la dernière carte graphique, l'installation de deux cartes graphiques en parallèle permettrait de doubler celui-ci et donc de doubler la vitesse de calcul ou doubler le nombre de particules simulées. La limite de cette installation est le taux de transfert de données entre les cartes graphiques via le port PCI. Certaines matrices (position, vitesse, température, enthalpie, concentration, rayon) devront être présentes sur les deux cartes graphiques pour toutes les particules pour déterminer les interactions entre deux particules, chacune résolue sur une carte graphique différente. À chaque pas de temps, ces matrices devront donc être mises à jour sur les deux cartes graphiques.

- La programmation du simulateur, et particulièrement l'inscription de données d'entrées essentielles à la simulation, a été effectuée sans prendre en considération un utilisateur externe. Certaines données d'entrée sont écrites sur des fichiers d'entrée (« .txt ») et d'autres sont uniquement présentes dans le programme source. Ce faisant, pour une utilisation à long terme par un groupe restreint d'utilisateurs variés, il est essentiel de rendre toutes les variables accessibles via un ou plusieurs fichiers d'entrée. Ce faisant, il sera possible subséquemment de développer une interface graphique utilisateur (« GUI ») pour permettre une utilisation facile par un opérateur externe.

7.3.3 RECOMMANDATIONS PHYSIQUES

Les recommandations physiques présentent les améliorations apportées à la simulation pour s'approcher des conditions réelles des cuves d'électrolyse. Les améliorations seront présentées dans l'ordre de développement potentiel en fonction de l'effort estimé pour leur implantation.

1. **Température de changement de phase** : La première amélioration porte sur la prise en compte de l'évolution de la température de changement de phase en fonction des constituants du bain (principalement de la concentration en alumine). Cet ajout pourra changer de façon considérable la masse de bain solidifié.
2. **Flux sortant d'alumine** : Représenter un plus grand volume de bain par l'ajout d'un flux sortant d'alumine sur les parois du creuset. Les

résultats montrent une saturation du bain due à un volume de bain simulé trop faible. Un flux pourrait être ajouté pour simuler un volume de bain plus important et étudier la dissolution complète d'un radeau.

3. Pression et densité du bain lors du changement de phase :

Analyse de la pression et de la densité des particules de bain passant de l'état solide à liquide. Une pression importante dans le bain a été observée à plusieurs reprises au sein des simulations. Ceci engendre une force de flottaison très importante et peut entraîner une divergence des particules solides avoisinantes à la particule liquide. Le modèle mathématique actuel corrige numériquement ces erreurs ponctuelles pour éviter la divergence de l'ensemble de la simulation, mais il est fortement recommandé d'apporter des modifications à la physique associée au changement de phase pour permettre d'étendre le potentiel d'utilisation du modèle mathématique.

4. La solidification avec un modèle visqueux :

L'ajout d'un état visqueux où la viscosité serait une fonction de la température permettrait de mieux représenter la physique de solidification et de fusion du bain. Actuellement le bain se solidifie à une température eutectique fixe. Toutefois, comme cela a été présenté dans le CHAPITRE 2, le bain est hétérogène et la solidification de celui-ci est progressive.

5. Ajout des bulles dans le bain :

Les bulles produites par l'électrolyse ont un effet important sur la formation et la

désintégration du radeau. Ces bulles favorisent l'écoulement du bain en dessous du radeau permettant l'apport de chaleur et de bain à faible teneur d'alumine dissoute. Ces bulles provoquent des perturbations localisées permettant la rupture du radeau et favorisent la dispersion du radeau à la surface du bain.

6. **Évaporation de l'eau** : L'ajout de l'expansion instantanée de l'eau présente dans l'alumine passant sous la forme de vapeur. À la suite de l'injection, le réchauffement de l'alumine est brutal. L'eau structurale et adsorbée à la surface d'alumine s'évapore rapidement générant une dispersion de la poudre. (Effet volcan)
7. **Étude des vagues présentes dans la cuve** : Développer un générateur de vagues sur une paroi du contenant. Comme discuté précédemment, les vagues ont un impact sur la dispersion du radeau. Si les bulles ne sont pas suffisantes pour créer des vagues, un générateur de vagues pourrait être programmé sur l'une des surfaces du creuset pour étudier l'effet des vagues sur la désintégration du radeau.
8. **Écoulement dans le bain** : L'écoulement dans le bain a un effet sur la dissolution de l'alumine dans le bain. L'écoulement joue un rôle aussi sur le transport du radeau. Un écoulement pourrait être généré par la création de particules de liquide (SPH) via une paroi du creuset pour simuler l'entrée du liquide. La paroi opposée pourrait permettre de simuler un flux sortant de particule de bain en fonction du débit injectée à l'entrée. La vitesse d'écoulement à l'entrée pourrait être

fixée en fonction de la vitesse relative entre la vitesse du fluide et la vitesse de déplacement du radeau. Si la vitesse relative est nulle, le flux entrant de liquide serait nul pour éviter la sortie du radeau de la zone d'étude.

LISTE DE RÉFÉRENCES

- Alarie, J., Kiss, L. I., Poncsák, S., Santerre, R., Guérard, S., & Bilodeau, J. F. (2021). Influence of Additives on Alumina Dissolution in Superheated Cryolite Melts [Conference Paper]. *Minerals, Metals and Materials Series* (Vol. 6, pp. 533-540). doi: 10.1007/978-3-030-65396-5_75 Repéré à https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85104385048&doi=10.1007%2f978-3-030-65396-5_75&partnerID=40&md5=abe2ce8008b845650649f8dc9f1ff0a4
- Alarie, J., Roger, T., Kiss, L. I., Poncsák, S., Guérard, S., & Bilodeau, J. F. (2020). Validation of the Gravimetric Method to Properly Follow Alumina Dissolution in Cryolitic Bath [Conference Paper]. *Minerals, Metals and Materials Series* (pp. 680-687). doi: 10.1007/978-3-030-36408-3_92 Repéré à https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85079640802&doi=10.1007%2f978-3-030-36408-3_92&partnerID=40&md5=ea2e76f6c6ace7458dcfee11fbd60a79
- Belytschko, T., Liu, W. K., & O'Neal, M. (1990). Contact - Impact Algorithms for Penetration Studies. *U.S. Army Research Office*.
- Bouvais, A., Dion, L., Roger, T., Kiss, L., Bonneau, G., Bilodeau, J. F., & Guérard, S. (2021). Experimental Study and Visualization of the Thermal and Dissolution Flux Using Schlieren Methods to Improve the Understanding of the Kinetics of Alumina Dissolution in Cryolitic Melts. Communication présentée au ICSOBA 2021.
- Dao, M. H., & Lou, J. (2021). Simulations of Laser Assisted Additive Manufacturing by Smoothed Particle Hydrodynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 373, 113491. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113491>
- Dassylva-Raymond, V. (2015). Analyse et modélisation du comportement des agrégats d'alumine dans le procédé Hall-Héroult. (PhD Thesis). Université du Québec à Chicoutimi. Repéré à <https://constellation.uqac.ca/4121/> Disponible dans WorldCat.org.
- Dassylva-Raymond, V., Kiss, L. I., Poncsák, S., Chartrand, P., Bilodeau, J. F., & Guérard, S. (2014). Modeling the Behavior of Alumina Agglomerate in the Hall-Héroult Process. Dans *Light Metals 2014* (Vol. 9781118889084, pp. 603-608). doi: 10.1002/9781118888438.ch102. Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84927952391&doi=10.1002%2f9781118888438.ch102&partnerID=40&md5=68c6ff8a7d8de7f5b28d923545e0dde0>

- Dion, L. (2018). Modelisation of perfluorocarbon emissions based on the alumina distribution and local current density in an aluminium electrolysis cell. (PhD Thesis). Université du Québec à Chicoutimi.
- Dudin, M. N., Voykova, N. A., Frolova, E. E., Artemieva, J. A., Rusakova, E. P., & Abashidze, A. H. (2017). Modern trends and challenges of development of global aluminum industry. *Metalurgija*, 56(1-2), 255-258.
- Einarsrud, K. E., Gylver, S. E., & Manger, E. (2018). *CFD modelling of alumina feeding [Conference Paper]. Minerals, Metals and Materials Series* (Vol. Part F4, pp. 557-564). doi: 10.1007/978-3-319-72284-9_73 Repéré à https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85042460924&doi=10.1007%2f978-3-319-72284-9_73&partnerID=40&md5=5153aefc3083e76ae2035cc2fa246843
- Farrokhpanah, A., Bussmann, M., & Mostaghimi, J. (2017). New smoothed particle hydrodynamics (SPH) formulation for modeling heat conduction with solidification and melting. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 71(4), 299-312. doi: 10.1080/10407790.2017.1293972
- Fatica, M., & Ruetsch, G. (2013). CUDA Fortran for Scientists and Engineers: Best Practices for Efficient CUDA Fortran Programming. doi: 10.1016/C2013-0-00006-0. Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84903504990&doi=10.1016%2fC2013-0-00006-0&partnerID=40&md5=f94d82acd81f3be97ba5911e71b649a5>
- Fraser, K. (2017). Robust and efficient meshfree solid thermo-mechanics simulation of friction stir welding. (PhD Thesis). Université du Québec à Chicoutimi.
- Fraser, K., St-Georges, L., & Kiss, L. I. (2016). A Mesh-Free Solid-Mechanics Approach for Simulating the Friction Stir-Welding Process. *IntechOpen*. doi: 10.5772/64159
- Gingold, R., & Monaghan, J. (1977). Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*.
- Grjotheim, K., & Welch, B. J. (1980). Aluminium smelter technology : a pure and applied approach. Dusseldorf: Aluminium-verlag GmbH.
- Guo, L., Morita, K., & Tobita, Y. (2015). Numerical simulations of gas–liquid–particle three-phase flows using a hybrid method. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 53(2), 271-280. doi: 10.1080/00223131.2015.1043156
- Gurupatham, S., Dalal, B., Hossain, M. S., Fischer, I. S., Singh, P., & Joseph, D. D. (2011). Particles dispersion on fluid–liquid interfaces. *Particuology*, 9(1), 1-13. doi: 10.1016/j.partic.2010.10.002

- Gylver, S. E., Omdahl, N. H., Prytz, A. K., Meyer, A. J., Lossius, L. P., & Einarsrud, K. E. (2019). Alumina Feeding and Raft Formation: Raft Collection and Process Parameters. Communication présentée au Light Metal 2019
- Gylver, S. E., Omdahl, N. H., Rørvik, S., Hansen, I., Nautnes, A., Neverdal, S. N., & Einarsrud, K. E. (2019). The micro- and macrostructure of alumina rafts [Conference Paper]. *Minerals, Metals and Materials Series* (pp. 689-696). doi: 10.1007/978-3-030-05864-7_85 Repéré à https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85064883634&doi=10.1007%2f978-3-030-05864-7_85&partnerID=40&md5=be2eec620e85610c70569320a4394521
- Gylver, S. E., Solheim, A., Gudbrandsen, H., Follo, Å. H., & Einarsrud, K. E. (2020). Lab Scale Experiments on Alumina Raft Formation [Conference Paper]. *Minerals, Metals and Materials Series* (pp. 659-663). doi: 10.1007/978-3-030-36408-3_89 Repéré à https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85079674062&doi=10.1007%2f978-3-030-36408-3_89&partnerID=40&md5=9e600880b55b2d8d5794606c00854b33
- Hocking, G., Mustoe, G. G. W., & Williams, J. R. (1985). Influence of artificial island side-slopes on ice ride-up and pile-up. Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021944762&partnerID=40&md5=0fbfe01e06e59019f76e241341a7ee43>
- Hori, M., Aoki, T., Tanikawa, T., Motoyoshi, H., Hachikubo, A., Sugiura, K., ... Takahashi, F. (2006). In-situ measured spectral directional emissivity of snow and ice in the 8–14 μm atmospheric window. *Remote Sensing of Environment*, 100(4), 486-502. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rse.2005.11.001>
- Hou, W., Li, H., Li, M., Zhang, B., Wang, Y., & Gao, Y. (2019). Multi-physical field coupling numerical investigation of alumina dissolution. *Applied Mathematical Modelling*, 67, 588-604. doi: 10.1016/j.apm.2018.11.041
- Hryciw, R. D., Zheng, J., & Shetler, K. (2016). Particle Roundness and Sphericity from Images of Assemblies by Chart Estimates and Computer Methods. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 142(9). doi: 10.1061/(asce)gt.1943-5606.0001485
- Kaszas, C. (2020). Behaviour of alumina powder fed into molten electrolytic bath. (PhD Thesis). Université du Québec à Chicoutimi.
- Kaszas, C., Kiss, L. I., Poncsak, S., Guerard, S., Alarie, J., & Roger, T. (2020). Flotation of Alumina on the Surface of the Electrolyte in an Aluminum Electrolysis Cell. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 51(4), 1824-1835. doi: 10.1007/s11663-020-01836-6

- Kobbeltvedt, O. (1997). Dissolution kinetics for alumina in cryolite melts. Distribution of alumina in the electrolyte of industrial aluminium cells. Norway. Repéré à <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/328121>
- Kovács, A., Breward, C. J. W., Einarsrud, K. E., Halvorsen, S. A., Nordgård-Hansen, E., Manger, E., ... Oliver, J. M. (2020). A heat and mass transfer problem for the dissolution of an alumina particle in a cryolite bath. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 162. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120232
- Kvande, H., & Rorvik, H. (1985). Influence of bath density in aluminium electrolysis. Communication présentée au Light Metals: Proceedings of Sessions, AIME Annual Meeting (Warrendale, Pennsylvania). Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021857276&partnerID=40&md5=79844d37cceb76f9d6a3e31a4b9ea56>
- Li, B., Ma, M., Yu, Y., Chen, C., & Zhou, Z. (2018). Particle scale study on heat transfer of gas–solid spout fluidized bed with hot gas injection. *Particulate Science and Technology*, 1-10. doi: 10.1080/02726351.2018.1438547
- Li, S.-y., Li, M., Hou, W.-y., Li, H.-s., & Cheng, B.-j. (2019). Simulation of alumina dissolution and temperature response under different feeding quantities in aluminum reduction cell. *Journal of Central South University*, 26(8), 2119-2128. doi: 10.1007/s11771-019-4159-7
- Lucy, L. (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomy J.*
- Norouzi, H. R., Zarghami, R., Sotudeh-Gharebagh, R., & Mostoufi, N. (2016). Coupled CFD-DEM Modeling: Formulation, Implementation and Application to Multiphase Flows. Wiley. Repéré à <https://books.google.ca/books?id=7DQWDQAAQBAJ>
- Østbø, P., & Niels, P. (2002). Evolution of alpha phase alumina in agglomerates upon addition to cryolitic melts.
- Poncsák, S., Rakotondramanana, L., Kiss, L. I., Roger, T., Guérard, S., & Bilodeau, J. F. (2019). Evolution of Mechanical Resistance of Alumina Raft Exposed to the Bath in Hall-Héroult Cells. Communication présentée au Light Metal 2019
- Primary aluminium production. (2020). Repéré le 2020-07-27, à <http://www.world-aluminium.org/statistics/#linegraph>
- Rolseth, S., & Thonstad, J. (1991). Agglomeration and dissolution of alumina in cryolite baths. Dans M. Sahoo, & P. Pinfold (Éds.), *Extraction, Refining, and Fabrication of Light Metals* (pp. 177-190). Amsterdam: Pergamon. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-041444-7.50021-4>. Repéré à <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080414447500214>

- Rozenbaum, O., De Sousa Meneses, D., & Echegut, P. (2009). Texture and porosity effects on the thermal radiative behavior of alumina ceramics. *International Journal of Thermophysics*, 30(2), 580-590. doi: 10.1007/s10765-008-0510-1
- Russell, M. A., Souto-Iglesias, A., & Zohdi, T. I. (2018). Numerical simulation of Laser Fusion Additive Manufacturing processes using the SPH method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 341, 163-187. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.06.033>
- Sindre Engzelius Gylver, N. H. O., Stein Rørvik, Ingrid Hansen, Andrea Nautnes, Sofie Nilssen Neverdal, and Kristian Etienne Einarsrud. (2019). The Micro- and Macrostructure of Alumina Rafts. *Light Metal 2019*, 689-696.
- Solheim, A. (2014). A novel design criterion for alumina feeders in aluminium electrolysis cells. Communication présentée au TMS Light Metals. Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84899894285&partnerID=40&md5=3c6fffac72f508f7f5a7b979eafa61c3>
- Sun, X., Sakai, M., & Yamada, Y. (2013). Three-dimensional simulation of a solid–liquid flow by the DEM–SPH method. *Journal of Computational Physics*. doi: 10.1016/j.jcp.2013.04.019
- Thonstad, J. (2001). *Aluminium electrolysis : fundamentals of the Hall-Héroult process* (3rd ed.). Dusseldorf: Aluminium-Verlag.
- Walker, D. I. (1993). Alumina in Aluminium Smelting and its Behaviour After Addition to Cryolite-Based Electrolytes. (PhD Thesis). University of Toronto.
- Wang, S., Guo, S., Gao, J., Lan, X., Dong, Q., & Li, X. (2012). Simulation of flow behavior of liquid and particles in a liquid–solid fluidized bed. *Powder Technology*, 224, 365-373. doi: 10.1016/j.powtec.2012.03.022
- Welch, B. J., & Kuschel, G. I. (2007). Crust and alumina powder dissolution in aluminum smelting electrolytes. *JOM*, 59(5), 50-54. doi: 10.1007/s11837-007-0065-9
- Williams, J. R., Hocking, G., & Mustoe, G. G. W. (1985). Theoretical basis of the discrete element method. Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021788775&partnerID=40&md5=e0d1454be2cbd1c5aa422267a0d39241>
- Xu, B. H., & Yu, A. B. (1997). Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, 52(16), 2785-2809.
- Yang, X., Liu, M., & Peng, S. (2014). Smoothed particle hydrodynamics modeling of viscous liquid drop without tensile instability. *Computers and Fluids*, 92, 199-208. doi: 10.1016/j.compfluid.2014.01.002

- Zhan, S., Li, M., Zhou, J., Yang, J., & Zhou, Y. (2014). CFD simulation of dissolution process of alumina in an aluminum reduction cell with two-particle phase population balance model. *Applied Thermal Engineering*, 73(1), 805-818. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2014.08.040
- Zhang, H., Yang, S., Zhang, H., Li, J., & Xu, Y. (2014). Numerical Simulation of Alumina-Mixing Process with a Multicomponent Flow Model Coupled with Electromagnetic Forces in Aluminum Reduction Cells. *Jom*, 66(7), 1210-1217. doi: 10.1007/s11837-014-1020-1