

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI

**MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI
COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN INGÉNIERIE**

PAR

MICHÈLE DUBOIS

**MODÉLISATION MATHÉMATIQUE
D'UN FOUR ROTATIF DE CALCINATION D'ALUMINE**

OCTOBRE 1996



Mise en garde/Advice

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

*À mon père,
qui en luttant contre le
cancer, m'a appris à profiter de
tous les instants que la vie peut
offrir, et surtout à ne jamais
abandonner nos rêves...*

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier toutes les personnes qui, de près ou de loin, m'ont permis de réaliser ce projet.

En particulier mon directeur de recherche, monsieur André Charette, dont je ne saurais passer sous silence la très grande gentillesse et qui m'a apporté, par sa compétence et sa disponibilité, tout le support nécessaire à l'élaboration de ce projet.

À mon codirecteur, madame Duygu Kocafe, qui m'a toujours été d'une grande aide et qui a toujours su répondre à mes questions avec clarté et intérêt.

Un très gros merci également à monsieur Rung Tien Bui qui m'a toujours fait confiance et qui m'a constamment appuyée tout au long de mes travaux.

J'aimerais aussi remercier messieurs Guy Simard et André Arsenault, pour leurs précieux conseils et leur patience.

Je remercie également monsieur Jean Perron du Centre de Recherche et Développement d'Arvida pour le temps qu'il m'a consacré et la visite organisée à l'usine Vaudreuil.

Merci à madame Hélène Pinard, ingénieure à l'usine Vaudreuil d'Arvida pour le temps qu'elle m'a accordé et pour toute la documentation qu'elle m'a fait parvenir.

Je tiens également à remercier tous les membres du Groupe de Recherche en Ingénierie des Procédés et Systèmes (GRIPS) pour l'accueil qu'ils m'ont réservé au sein du groupe. Je garderai un très bon souvenir de vous tous.

Je remercie également la Chaire Industrielle CRSNG-ALCAN pour le support financier qu'elle m'a apporté tout au long de mes travaux de maîtrise.

J'aimerais finalement remercier ma famille qui m'a appuyée et encouragée tout au long de mes études.

RÉSUMÉ

Le but de ce projet était d'élaborer un modèle mathématique, statique et à une dimension, pour la simulation d'un four de calcination d'alumine actuellement en opération à l'usine Vaudreuil d'Arvida. Le modèle devait être simple, robuste et général afin de pouvoir s'adapter pratiquement à n'importe quel mode de fonctionnement. Le but premier du modèle était de pouvoir prédire les profils de température à l'intérieur du four, soit les profils de température pour le lit d'alumine, pour le gaz, la paroi intérieure et la paroi extérieure.

Le modèle a été élaboré à partir d'équations différentielles provenant de bilans thermiques et massiques effectués sur de fines tranches de four. En plus des profils de températures, le modèle permet d'obtenir beaucoup d'autres résultats intéressants tels la composition du lit à toute position dans le four, les propriétés du gaz et la quantité de poussière produite. Le modèle montre clairement que la présence de poussière, en favorisant les échanges thermiques, influence grandement le comportement global du four.

À l'usine Vaudreuil d'Arvida, on procède à l'occasion à différents tests paramétriques afin d'optimiser la production d'alumine. Une étude effectuée à l'aide du modèle a pu démontrer la solidité et la souplesse de celui-ci en ce qui a trait à son utilisation éventuelle pour l'amélioration du procédé de calcination de l'alumine. Il est en effet possible de faire varier n'importe quel paramètre de fonctionnement du four et d'observer son comportement. Il s'avère ainsi plus économique, en temps et en argent, de faire une étude paramétrique à l'aide du modèle que des tests sur l'installation réelle.

Sous sa forme actuelle le modèle s'avère déjà très efficace. La plupart des résultats qu'il produit sont très près des mesures d'usine et il peut déjà permettre à l'usine Vaudreuil d'étudier l'ensemble des paramètres affectant la production. Certaines améliorations peuvent par contre être apportées au modèle comme par exemple les ajouts de chlore dans le gaz, et de fluorure d'aluminium et d'oxyde basique de sodium dans le solide.

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements	iii
Résumé	iv
Table des matières.....	v
Liste des figures	ix
Liste des tableaux.....	xiii
Liste des annexes	xv
Nomenclature	xvi
1.0 Introduction	1
1.1 Préambule	1
1.2 Le procédé Bayer.....	3
1.3 Le four de calcination d'alumine.....	5
1.4 Travaux antérieurs	10
1.5 Contribution du présent travail	18
2.0 Le modèle	21
2.1 Introduction	21
2.2 Élaboration du modèle.....	22

2.2.1	Hypothèses simplificatrices.....	22
2.2.2	Équations différentielles.....	25
2.2.3	Température de la paroi du four.....	34
2.2.4	Méthode de résolution.....	36
2.2.5	Fonctionnement du programme.....	37
2.3	Évaporation de l'eau.....	41
2.3.1	Température d'évaporation.....	41
2.3.2	Cinétique de l'évaporation de l'eau.....	46
2.4	La cinétique de calcination de l'alumine.....	46
2.4.1	Transformations physiques de l'alumine.....	53
2.4.2	Cinétique chimique de la déshydratation du trihydrate d'alumine.....	56
2.4.3	Cinétique chimique de la déshydratation du monohydrate d'alumine.....	58
2.4.4	Cinétique chimique de transformation de l'alumine gamma en alumine alpha.....	60
2.4.5	Chaleurs de réaction.....	62
2.4.6	Techniques utilisées pour augmenter les vitesses de réaction.....	65
2.5	La combustion du gaz naturel.....	69
2.6	La poussière.....	79
2.7	Transferts de chaleur.....	80
2.7.1	Transfert de chaleur entre le gaz et le mur intérieur.....	87

2.7.2 Transfert de chaleur entre le gaz et le solide (lit de particules).....	88
2.7.3 Transfert de chaleur entre le mur et le solide	89
2.7.4 Transfert de chaleur entre le mur extérieur et l'air ambiant.....	90
2.7.5 Transfert de chaleur à travers la paroi	91
2.7.6 Transferts de chaleur au niveau des refroidisseurs planétaires.....	91
2.8 Conclusion.....	101
3.0 Résultats	103
3.1 Introduction	103
3.2 Conditions d'opérations actuelles	104
3.3 Résultats fournis par le modèle.....	105
3.3.1 Transferts de chaleur dans le four.....	108
3.3.2 Réactions chimiques.....	111
3.3.3 Effets de la poussière.....	118
3.4 Validation du modèle.....	132
3.5 Étude paramétrique.....	139
3.5.1 Effets du débit de gaz naturel	143
3.5.2 Effets du débit d'hydrate.....	145
3.5.3 Effets du débit d'air primaire	148
3.5.4 Autres effets des débits de gaz naturel, d'hydrate et d'air primaire.....	150

3.5.5 Influences des autres paramètres de fonctionnement	154
3.6 Robustesse du modèle	172
3.7 Conclusion.....	173
4.0 Conclusion	175
Bibliographie	178
Annexes	
Annexe 1- Constantes	186
Annexe 2- Relations mathématiques	187
Annexe 3- Théorie sur la cinétique chimique.....	188
Annexe 4- Équations différentielles pour chaque zone du four.....	191
Annexe 5- Propriétés des gaz	196
Annexe 6- Liste des résultats fournis par le modèle.....	202

LISTE DES FIGURES

- FIGURE 1.1: Procédé Bayer.
- FIGURE 1.2: Four de calcination d'alumine.
- FIGURE 1.3: Disposition des refroidisseurs planétaires autour du four.
- FIGURE 1.4: Division du four de calcination d'alumine selon Gordon.
- FIGURE 2.1: Tranche de four.
- FIGURE 2.2: Tranche de solide dans la zone d'évaporation.
- FIGURE 2.3: Tranche de gaz de la zone d'évaporation.
- FIGURE 2.4: Bilan thermique sur la paroi du four.
- FIGURE 2.5: Sens de la simulation.
- FIGURE 2.6: Organigramme général du programme.
- FIGURE 2.7: Courbe de la vitesse de séchage de l'eau en fonction du taux d'humidité (Treybal, 1980).
- FIGURE 2.8: Séquences de transformation de l'alumine.
- FIGURE 2.9: Transformation de la gibbsite en boehmite.
- FIGURE 2.10: Schéma du brûleur.
- FIGURE 2.11: Graphique de la température de fin de combustion en fonction de la richesse.
- FIGURE 2.12: Gradient de température dans une flamme.
- FIGURE 2.13: Transferts de chaleur dans le four.

- FIGURE 2.14: Coupe transversale du four.
- FIGURE 2.15: Disposition des refroidisseurs planétaires autour du four (coupe radiale).
- FIGURE 2.16: Géométrie reliée aux refroidisseurs planétaires.
- FIGURE 3.1: Profil de températures pour le four numéro 3.
- FIGURE 3.2: Profil de températures pour le four numéro 5.
- FIGURE 3.3: Transferts de chaleur dans le four numéro 3 (avec poussière).
- FIGURE 3.4: Transferts de chaleur dans le four numéro 5 (avec poussière).
- FIGURE 3.5: Fractions des constituants dans le lit de solide du four 3.
- FIGURE 3.6: Fractions des constituants dans le lit de solide du four 5.
- FIGURE 3.7: Comparaison de la vitesse du gaz pour les fours 3 et 5.
- FIGURE 3.8: Comparaison de l'aire d'échange entre le gaz et le solide pour les fours 3 et 5.
- FIGURE 3.9: Taux de poussierage pour les fours 3 et 5.
- FIGURE 3.10: Profil de températures pour le four 3 avec poussière.
- FIGURE 3.11: Profil de températures pour le four 3 sans poussière.
- FIGURE 3.12: Profil de températures pour le four 5 avec poussière.
- FIGURE 3.13: Profil de températures pour le four 5 sans poussière.
- FIGURE 3.14: Comparaison de la chaleur massique du gaz avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.15: Comparaison de l'émissivité du gaz avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.16: Comparaison de la conductivité thermique du gaz avec et sans poussière (four 3).

- FIGURE 3.17: Comparaison de la densité du gaz avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.18: Comparaison de la viscosité dynamique du gaz avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.19: Transfert de chaleur entre le gaz et le mur, avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.20: Transfert de chaleur entre le gaz et le solide, avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.21: Transfert de chaleur entre le mur et le solide, avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.22: Transfert de chaleur par conduction à travers la paroi, avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.23: Transfert de chaleur entre le mur extérieur et l'environnement, avec et sans poussière (four 3).
- FIGURE 3.24: Comparaison entre les températures obtenues par le modèle et les mesures d'usine (four 3, avec poussière).
- FIGURE 3.25: Injection du chlore dans le four de calcination.
- FIGURE 3.26: Effet du débit de gaz naturel sur les profils thermiques.
- FIGURE 3.27: Effet du débit de solide initial sur les profils thermiques.
- FIGURE 3.28: Température de sortie du gaz en fonction du débit d'hydrate initial (four 3).
- FIGURE 3.29: Effet du débit d'air primaire sur les profils thermiques.
- FIGURE 3.30: Variations des longueurs occupées par chacune des réactions chimiques en fonction du débit de solide initial (four 3).
- FIGURE 3.31: Variation de la longueur de la flamme en fonction de l'excès d'air (four 3).
- FIGURE 3.32: Variation de la température de fin de combustion en fonction de la richesse de la flamme (four 3).

- FIGURE 3.33: Variation de la température de calcination du solide en fonction de l'épaisseur de la paroi du four (four 3).
- FIGURE 3.34: Variation des longueurs occupées par chacune des réactions chimiques en fonction de l'angle d'inclinaison du four (four 3).
- FIGURE 3.35: Variation du temps de résidence du solide en fonction de l'angle d'inclinaison du four (four 3).
- FIGURE 3.36: Variation du temps de résidence du solide en fonction de la vitesse de rotation du four (four 3).
- FIGURE A.4.1 Zones du four.

LISTE DES TABLEAUX

<u>TABLEAU 2.1:</u>	Caractéristiques des réactions.
<u>TABLEAU 2.2:</u>	Nomenclature et caractéristiques des différentes phases de l'alumine.
<u>TABLEAU 2.3:</u>	Paramètres cinétiques utilisés dans le modèle.
<u>TABLEAU 2.4:</u>	Chaleur massique des différentes phases de l'alumine.
<u>TABLEAU 2.5:</u>	Chaleurs de réaction à 25°C.
<u>TABLEAU 2.6:</u>	Effets d'un prétraitement mécanique sur la cinétique.
<u>TABLEAU 2.7:</u>	Effet du AlF_3 sur les énergies d'activation des phases de déshydratation.
<u>TABLEAU 2.8:</u>	Effet du AlF_3 sur les chaleurs de réaction.
<u>TABLEAU 2.9:</u>	Effet du AlF_3 sur les températures de fin de réaction.
<u>TABLEAU 2.10:</u>	Tableau de poussierage de Tackie et al. (1989).
<u>TABLEAU 2.11:</u>	Paramètres reliés au solide.
<u>TABLEAU 2.12:</u>	Paramètres reliés au gaz (Perron, 1989).
<u>TABLEAU 2.13:</u>	Paramètres reliés à la paroi.
<u>TABLEAU 3.1:</u>	Caractéristiques des fours numéro 3 et numéro 5.
<u>TABLEAU 3.2:</u>	Longueur de four occupée par chaque réaction.

<u>TABLEAU 3.3:</u>	Intervalles des températures de réactions théoriques et ceux obtenus par le modèle.
<u>TABLEAU 3.4:</u>	Pourcentage de poussière dans le gaz.
<u>TABLEAU 3.5:</u>	Comparaison des résultats du modèle avec les mesures d'usine pour le four 3.
<u>TABLEAU 3.6:</u>	Comparaison des résultats du modèle avec les mesures d'usine pour le four 5.
<u>TABLEAU 3.7:</u>	Conditions d'opération actuelles des fours 3 et 5.
<u>TABLEAU 3.8:</u>	Tests paramétriques effectués sur le four numéro 3 (sans poussière).
<u>TABLEAU 3.9:</u>	Tests paramétriques effectués sur le four numéro 5 (sans poussière).
<u>TABLEAU 3.10:</u>	Influence de la quantité de gaz naturel sur la composition du solide à la sortie.
<u>TABLEAU 3.11:</u>	Influence de l'augmentation du débit d'hydrate sur la composition du solide à la sortie des refroidisseurs planétaires.
<u>TABLEAU 3.12:</u>	Conditions de fonctionnement actuelles pour le four 3.
<u>TABLEAU 3.13:</u>	Tests paramétriques reliés aux dimensions du four 3.
<u>TABLEAU 3.14:</u>	Tests paramétriques reliés aux conditions d'opération du four 3.
<u>TABLEAU 3.15:</u>	Tests paramétriques reliés aux températures des espèces introduites dans le four 3.
<u>TABLEAU 3.16:</u>	Variations de la longueur de la flamme en fonction de la température d'entrée des réactifs.
<u>TABLEAU 3.17:</u>	Tests paramétriques sur la température d'entrée du solide et de l'air primaire.

LISTE DES ANNEXES

- ANNEXE 1: Constantes.
- ANNEXE 2: Relations mathématiques.
- ANNEXE 3: Théorie sur la cinétique chimique.
- ANNEXE 4: Équations différentielles pour chaque zone du four.
- ANNEXE 5: Propriétés des gaz.
- ANNEXE 6: Liste des résultats fournis par le modèle.

NOMENCLATURE

Variables

A_{ij}	Aire d'échange entre i et j	(m ² /m)
$A_{lit,g}$	Section transversale du lit ou du gaz	(m ²)
C	Concentration	(kg/kg)
C_f	Fraction massique de particules dans le solide	(kg/kg)
C_{p_i}	Chaleur massique de l'espèce i	(J/kg·K)
ΔC_{p_i}	Chaleur massique de la réaction i	(J/kg·K)
d	Diamètre	(m)
d_z	Diamètre moyen des particules	(m)
D	Distance centre à centre four-refroidisseur	(m)
D_c	Distance centre à centre refroidisseur-refroidisseur	(m)
D_h	Diamètre hydraulique	(m)
D_α	Diamètre des cristaux d'alumine alpha	(μ m)
E	Énergie d'activation	(J/mol)
g	Constante gravitationnelle	(m/s ²)
G_i	Débit massique de l'espèce i	(kg/s)

Gr	Nombre de Grashof	
h	Hauteur du lit de solide	(m)
h_i	Enthalpie de l'espèce i	(J/kg)
h_{ij}	Coefficient global de transfert de chaleur entre i et j	(W/m ² ·K)
H_i	Humidité rapportée au solide sec	(kg/kg)
ΔH_i	Chaleur de réaction de i	(J/kg)
ΔH_i^0	Chaleur de réaction à 25°C	(J/kg)
ΔH_w	Chaleur latente de vaporisation	(J/kg)
k	Constante de vitesse	
k_0	Constante pré-exponentielle	
k_i	Conductivité thermique de l'espèce i	(W/m·K)
K_y	Coefficient de transfert massique	(kg/m ² ·s)
L_f	Longueur de la flamme	(m)
L_m	Longueur de parcours moyen	(m)
L_T	Longueur totale du four	(m)
M_i	Masse molaire de i	(g/gmol)
N	Vitesse de rotation	(trs/min)
Nc	Nombre total de refroidisseurs planétaires	
N_i	Nombre de moles de l'espèce i	
p_i	Pression partielle de i	(Pa)

P	Pression	(Pa)
P_g	Périmètre de la zone de gaz	(m)
Pr	Nombre de Prandtl	(-)
P_s	Pression de saturation	(kPa)
P_t	Pression totale	(kPa)
q_{ij}	Transfert de chaleur par unité de longueur entre i et j	(W/m)
Q_{ij}	Transfert de chaleur entre i et j	(W)
r	Rayon	(m)
R	Constante universelle des gaz	(J/mol·K)
Ra	Nombre de Rayleigh	
R_d	Taux de production de poussière	(kg/m·s)
Re	Nombre de Reynolds	
Re_w	Nombre de Reynolds en rotation	
R_i	Vitesse de la réaction i	(kg/m·s)
R_s	Ratio stoechiométrique massique air/gaz naturel	(kg/kg)
S	Pente du four	(m/m)
t	Temps	(s)
T_i	Température de i	(K)
U_i	Quantité de mouvement de i	(N)
V_i	Vitesse linéaire de i	(m/s)

x	Position	(m)
X	Fraction de solide dans le four	
X_i	Fraction massique de i dans le solide	(kg/kg)
Y	Fraction massique de l'eau dans le gaz	(kg/kg)
Y_i	Fraction massique de i dans le gaz	(kg/kg)
Y_s	Fraction massique de l'eau dans le gaz à saturation	(kg/kg)

Symboles grecs

α	Angle de remplissage Angle sous lequel l'arc d'un refroidisseur voit l'environnement	(deg) (deg)
α_d	Absorptivité de la poussière	
β	Coefficient de dilatation Angle sous lequel l'arc d'un refroidisseur voit le four	(K ⁻¹) (deg)
ε	Porosité	
ε_i	Émissivité de i	
η	Paramètre de Craya-Curtet	
μ_i	Viscosité dynamique	(N/m ² ·s)
ν_i	Viscosité cinématique	(m ² /s)
π	Pi	
ρ_i	Densité de l'espèce i	(kg/m ³)
σ	Constante de Stefan-Boltzmann	(W/m ² ·K ⁴)

τ	Temps de résidence du solide dans le four	(min)
ϕ	Richesse de la flamme	
φ	Angle de repos statique du lit	(deg)
	Angle entre le four et deux refroidisseurs voisins	(deg)
Φ_{ij}	Constante servant au calcul de la conductivité thermique et de la viscosité dynamique	
ψ	Demi-angle de remplissage	(rad)
ω	Vitesse de rotation	(rad/s)

Indices inférieurs

a	Air, environnement
ap	Air primaire
Al(OH) ₃	Trihydrate d'alumine
AlOOH	Monohydrate d'alumine
b	Brûleur
c	Refroidisseur planétaire (extérieur)
cond	Conduction
C	Humidité critique
CO ₂	Gaz carbonique
d	Poussière
e	Extérieur

eq	Équivalent
E	Humidité d'équilibre
f	Gaz naturel
g	Gaz
H ₂ O	Vapeur d'eau provenant de la combustion du gaz naturel
i	Intérieur, espèce i
ic	Refroidisseur planétaire (intérieur)
j	Espèce j
lit	Lit de solide (solide sec + humidité)
m	Mur intérieur du four
N ₂	Azote
o	Mur extérieur du four
O ₂	Oxygène
pc	Produits de combustion
s	Solide
S	Saturation
T	Total
w	Eau
wg	Vapeur d'eau provenant du solide
z	Particule
α -Al ₂ O ₃	Alumine alpha

$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$

Alumine gamma

Indices supérieurs

c

Convection ou conduction

r

Rayonnement

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Préambule

L'aluminium est le métal le plus abondant de la terre, composant à près de huit pour-cent l'écorce terrestre. Il n'existe cependant pas à l'état naturel, se présentant plutôt sous forme d'oxyde d'aluminium (Al_2O_3). Pour obtenir l'aluminium tel qu'on le connaît il faut lui faire subir un procédé électrolytique qui permettra la dissociation des molécules d'aluminium et d'oxygène.

La source la plus exploitable d'oxyde est la bauxite, minéral que l'on retrouve le plus souvent dans les régions tropicales et subtropicales. La bauxite typique contient entre 55 et 65% de Al_2O_3 , de 2 à 10% de SiO_2 , de 2 à 20% de Fe_2O_3 , de 1 à 3% de TiO_2 et de 10 à 30% d'eau combinée. Bien que la bauxite soit facile à extraire, son processus de transformation avant de devenir de l'aluminium s'avère long et complexe.

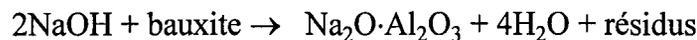
Premièrement, il faut extraire l'alumine de la bauxite, processus s'étendant du procédé Bayer jusqu'à la calcination. Globalement le procédé Bayer permet, à l'aide d'une dissolution dans la soude caustique, d'extraire le trihydrate d'alumine, $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, de la bauxite. Il faut par la suite calciner ce trihydrate d'alumine dans un long four rotatif, dans le but d'extraire l'eau du solide, eau qui se présente sous forme d'humidité et d'eau liée. Le trihydrate passe alors par une série de transformations avant de sortir du four sous la forme la plus stable des alumines, l'alumine alpha, ou corindon.

Après sa calcination, l'alumine se dirige alors vers la dernière étape qui est la transformation en aluminium. De quatre à cinq tonnes de bauxite sont nécessaires pour produire deux tonnes d'alumine qui donneront à leur tour une tonne d'aluminium.

Compte tenu de ses nombreuses qualités tel qu'un point de fusion, une dureté et une résistivité électrique élevés, l'alumine calcinée peut également devenir matière première à des transformations autres que l'aluminium. On peut en effet la retrouver dans les industries de céramiques, de réfractaires et d'abrasifs. Le présent travail traite essentiellement de la calcination de l'alumine. On verra comment le trihydrate d'alumine devient de l'alumine alpha et aussi comment fonctionne le four qui sert à calciner cette alumine.

1.2 Le procédé Bayer

Le procédé Bayer est l'étape de purification dans laquelle on transforme la bauxite en alumine hydratée (figure 1.1). La bauxite, qui est préalablement broyée, est mélangée avec une solution de soude caustique chaude afin de provoquer la dissolution de l'hydrate. Cette opération s'effectue à haute température et sous pression dans des autoclaves. Les impuretés, ou boues rouges, qui sont demeurées à l'état solide, sont par la suite séparées de la liqueur d'hydrate par floculation, décantation et filtration. Les boues rouges, qui sont composées en plus grande partie d'oxydes de fer, de silicium et de titane sont lavées afin de récupérer les produits chimiques.



La solution d'aluminate de sodium est ensuite pompée dans des décomposeurs dans lesquels est ajouté du trihydrate d'alumine pur très fin qui servira à amorcer la réaction de séparation de l'alumine avec la soude caustique. Par l'agitation et le refroidissement graduel de la solution, le trihydrate précipite sous forme de cristaux et est séparé de la solution de soude caustique par sédimentation et filtration. La solution de soude caustique est récupérée pour servir de nouveau dans les autoclaves, et les cristaux de trihydrate d'alumine obtenus sont maintenant prêts à être introduits dans les fours de calcination.

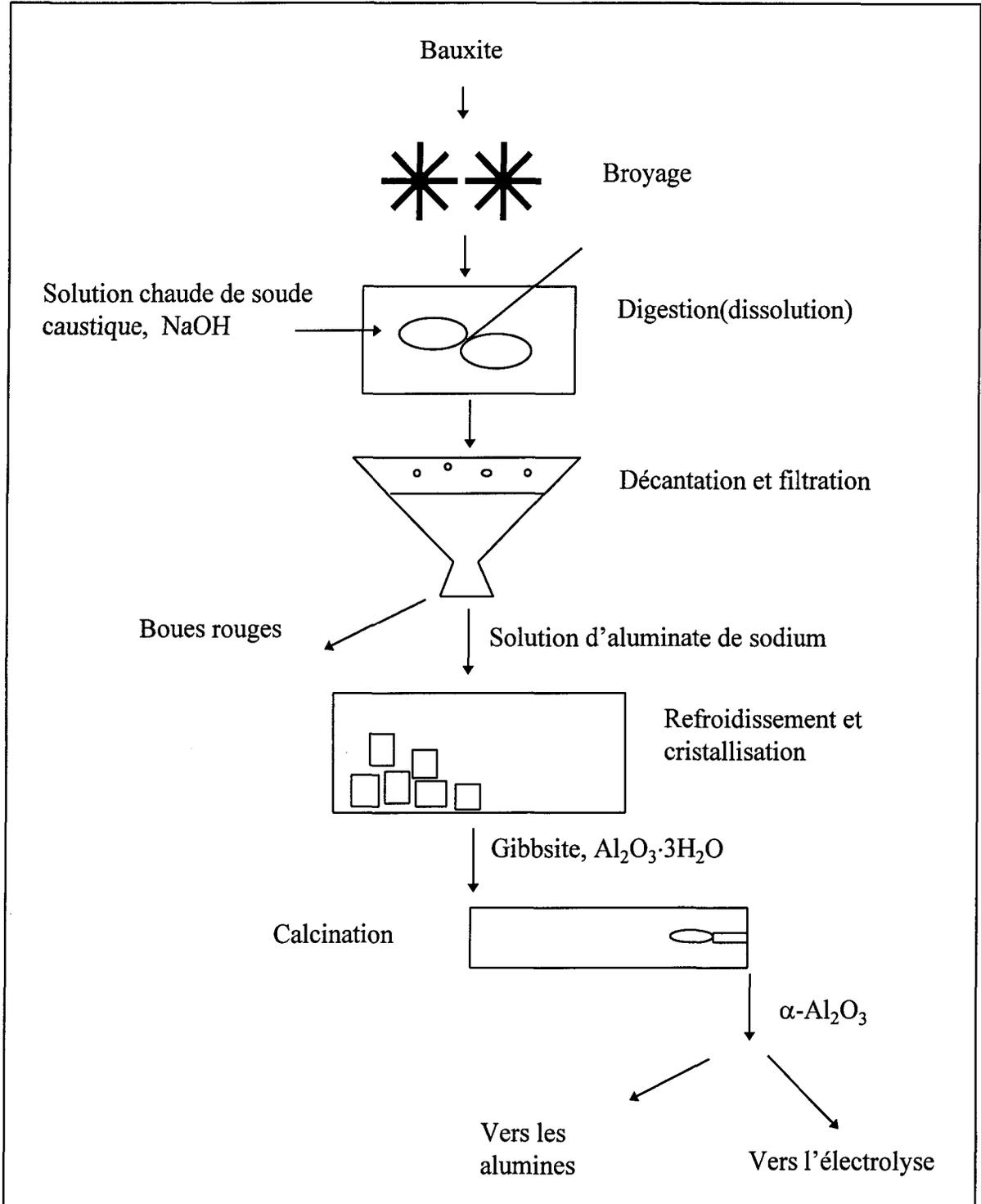


Figure 1.1 Procédé Bayer.

1.3 Le four de calcination d'alumine

Les fours de calcination d'alumine présentement utilisés à l'usine Vaudreuil d'Arvida, sont des fours rotatifs de 60 mètres de longueur par 3 mètres de diamètre et inclinés de 6 degrés (figure 1.2). Le matériau, l'hydrate, est placé dans le four par l'extrémité froide et, dû à la rotation et à l'inclinaison du four, il se déplace vers l'extrémité chaude où il atteindra des températures supérieures à 1000°C avant d'être déchargé. Un brûleur au gaz naturel placé à l'extrémité chaude du four assure un apport en énergie suffisant pour le procédé de calcination.

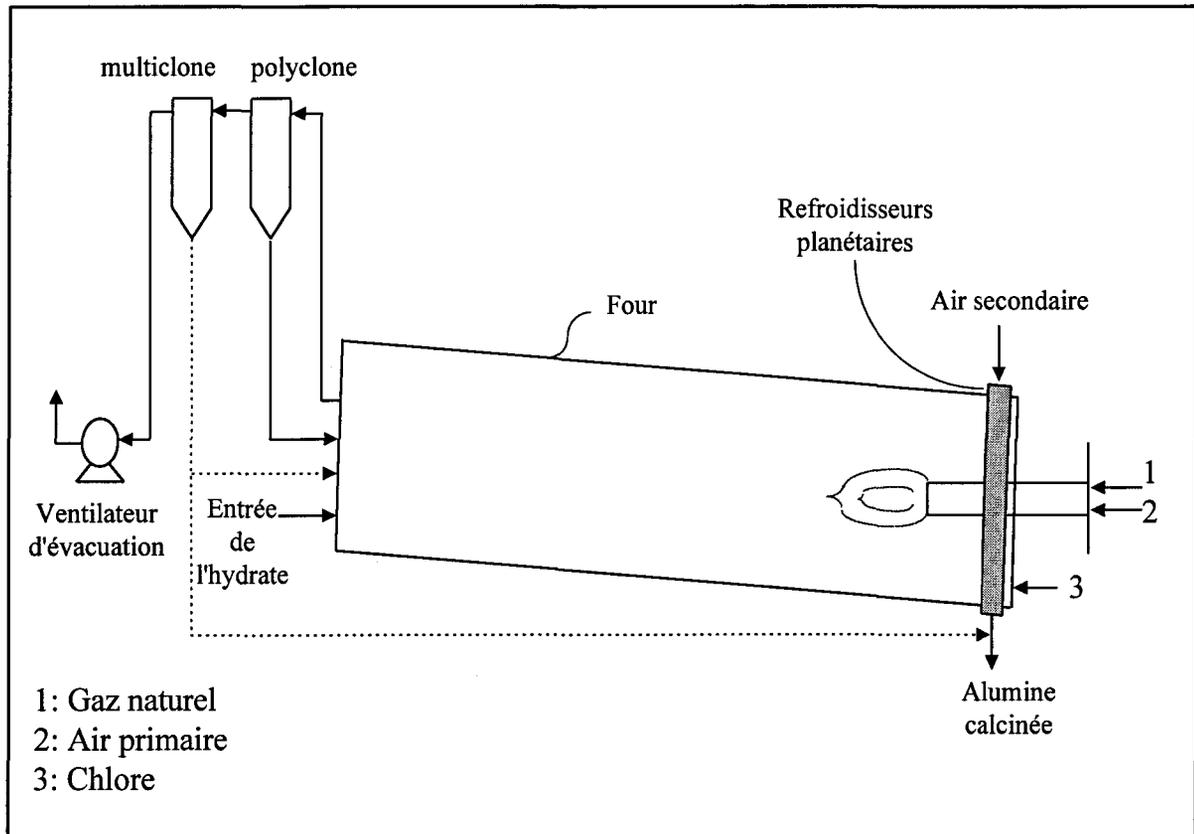
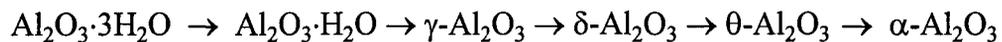


Figure 1.2 Four de calcination d'alumine.

L'intérieur du four est recouvert de réfractaire pour minimiser les pertes vers l'extérieur et la coque est en acier. La poussière qui est produite à l'intérieur du four est généralement récupérée dans les polyclones et réintroduite dans le four pour être calcinée de nouveau. Pour ce qui est de l'air secondaire qui entre à l'intérieur du four, mentionnons que celui-ci est tout simplement de l'air extérieur s'introduisant principalement par les refroidisseurs planétaires dû à l'effet de dépressurisation se produisant à l'intérieur du four. Cette quantité d'air étant assez considérable, on peut l'employer pour brûler le gaz naturel, l'air manquant étant compensé par l'air primaire.

Comme on peut le voir sur la figure 1.2, la flamme se situe juste au-dessus du solide, ce qui permet d'obtenir un chauffage direct de l'alumine à des températures très élevées. Le chauffage est très important dans un tel four puisque, contrairement à la calcination du coke qui s'autosuffit en énergie, le trihydrate d'alumine nécessite constamment de la chaleur pour effectuer ses transformations chimiques. Le trihydrate entre dans le four à une température d'environ 50°C et avec un taux d'humidité se situant entre 10 et 15%. Après une étape de préchauffage qui s'effectue sur environ 2 à 3 mètres, l'hydrate passe par une série de transformations. La première étape, qui consiste à sécher l'humidité de surface, s'effectue à température constante du solide, la température d'évaporation se situant aux alentours de 80°C. Vers 200°C et jusqu'à environ 300°C on assiste à la première réaction du solide qui est la déshydratation du trihydrate en monohydrate. À partir de 300°C, commence ensuite la déshydratation du monohydrate en

alumine gamma, réaction se terminant vers 700°C. L'alumine gamma est une alumine qui ne contient plus d'eau, mais compte tenu de sa très grande porosité ($\approx 66\%$), elle absorbe beaucoup l'humidité et doit donc être chauffée à des températures encore plus élevées pour perdre cette porosité apparente. C'est alors que débute la transformation structurale de l'alumine gamma en alumine alpha. Mentionnons cependant que cette réaction s'avère très lente avant 1000°C, et que l'alumine gamma est complètement transformée en alumine alpha vers les 1400°C. Dans cet intervalle, l'alumine passe par une série de phases cristallines qu'on appelle plus communément les aluminés de transition, avant d'aboutir enfin à sa forme la plus stable, l'alumine alpha. Mentionnons cependant que les aluminés de transition qui incluent les aluminés delta et thêta sont souvent négligés par les auteurs car elles sont très difficilement détectables.



Le trihydrate d'alumine qui est obtenu par le procédé Bayer peut contenir une quantité plus ou moins importante d'oxyde basique de sodium (soda) (jusqu'à 37%). Il faut éliminer cet oxyde car le prix du produit que l'on vend aux industries céramiques dépend principalement de sa teneur dans l'alumine. En effet, plus l'alumine contient d'oxyde de sodium, plus les céramiques d'alumine rétrécissent lors de leur cuisson, ce qui n'est pas très intéressant pour le fabricant de céramiques. Le chlore gazeux que l'on introduit au niveau du brûleur sert principalement à extraire l'oxyde basique en réagissant avec lui pour former

du chlorure de sodium, de l'oxygène et de l'eau. Pour l'instant ce procédé n'est pas très efficace ($\approx 5\%$) puisque le contact solide-chlore est très faible, de plus le chlore réagit avec la vapeur d'eau présente dans le four pour former du chlorure d'hydrogène, HCl, un produit très nocif.

Un autre additif qui est également utilisé, mais cette fois pour le solide, est le fluorure d'aluminium, AlF_3 . Cet additif agit comme catalyseur en abaissant la température de réaction de l'alumine gamma en alumine alpha afin d'obtenir 100% d'alumine alpha à la sortie. Mentionnons qu'à la fin des années soixante le taux de production d'alumine alpha ne se situait qu'entre 20 et 60%. Depuis ce temps l'ajout de AlF_3 a permis d'améliorer grandement la production.

Un autre aspect important du procédé est le refroidissement. En effet, sans refroidissement préalable, le matériau sortant du four serait tellement chaud qu'il ne pourrait être manipulé avant plusieurs heures. Pour remédier à ce problème, un système de refroidisseurs planétaires installé à l'extérieur du four assure le refroidissement de l'alumine avant sa sortie. Le système de refroidisseurs planétaires est un ensemble de 8 à 10 cylindres, mesurant entre trois et quatre mètres de longueur et positionnés à l'extrémité chaude du four, juste après le nez du brûleur, tout autour du four et tournant avec le four. Leur principe de fonctionnement est simple: juste au niveau du brûleur, des trous d'une trentaine de centimètres sont pratiqués à travers la paroi du four, chaque trou correspondant

à un refroidisseur. Une quantité plus ou moins importante d'alumine tombe dans chacun des trous. Une fois dans un des refroidisseurs, le solide fait le tour du four dans son refroidisseur respectif avant d'en tomber après un tour complet. Son refroidissement se fait principalement par convection avec l'air secondaire qui entre à température de la pièce dans le cylindre, l'air est ainsi réchauffé avant son entrée dans le four par le solide qui se refroidit.

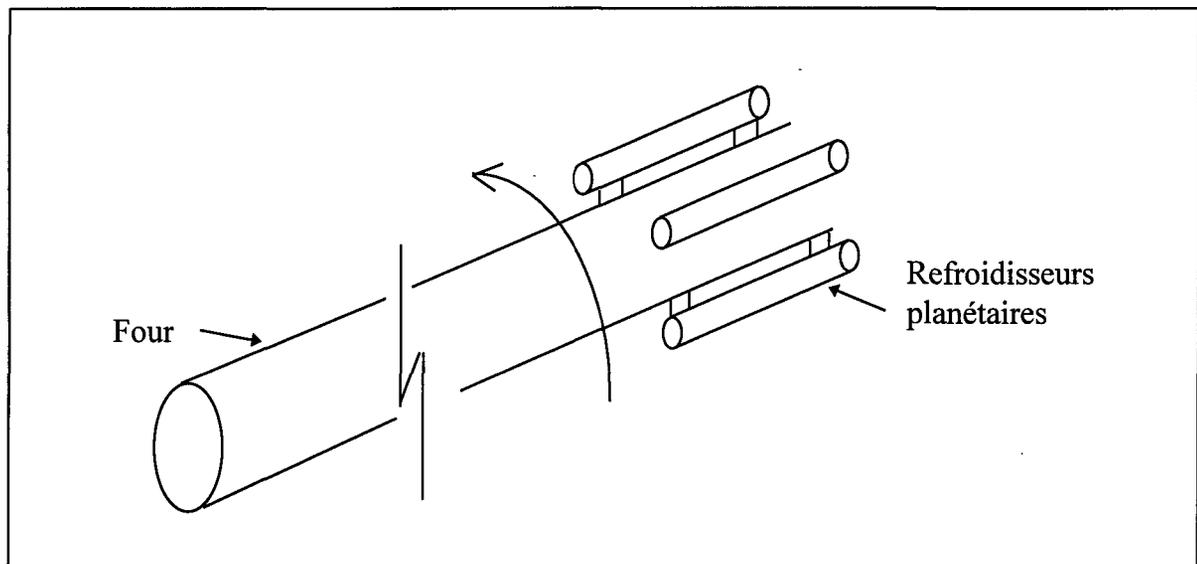


Figure 1.3 Disposition des refroidisseurs planétaires autour du four.

1.4 Travaux antérieurs

De nombreux travaux ont déjà été faits par le passé sur les fours de calcination d'alumine. En 1960, Zubrzycki effectue les bilans thermique et massique du four. Le four d'alumine est pris comme une boîte noire et seules l'entrée et la sortie sont considérées. Il rapporte que l'eau de cristallisation ne quitte pas le solide avant 176-205°C, et que les réactions dans le four suivent la séquence suivante:

- 1- évaporation de l'humidité de surface
- 2- chauffage de la gibbsite (trihydrate d'alumine)
- 3- réaction de la gibbsite en boehmite (monohydrate d'alumine)
- 4- chauffage de la boehmite
- 5- réaction de la boehmite en alumine gamma
- 6- chauffage de l'alumine gamma.

Il mentionne de plus qu'au début les vitesses de déshydratation sont assez lentes mais augmentent très rapidement à mesure que la température augmente.

Bhilotra, en 1968, étudie aussi les bilans massique et thermique du four. Le but de son étude est d'élaborer un programme informatique qui permette de calculer les bilans énergétique et massique de n'importe quel four. Cette amélioration était évidemment nécessaire puisque par le passé, le même bilan était utilisé sur n'importe quel four, malgré les caractéristiques différentes d'un four à l'autre. Bhilotra a de plus effectué une étude très

détaillée des transferts de chaleur et des aires d'échange à l'extérieur du four et au niveau des refroidisseurs planétaires. Son bilan se résume aux échanges thermiques extérieurs ainsi qu'aux masses de solide et de gaz entrant et sortant du four ainsi qu'à la consommation du fuel.

En 1968, Coupal réalise la suite logique des travaux de Zubrzycki et Bhilotra: soit l'étude de l'intérieur du four. Son analyse a été faite dans le but de faire la lumière sur des facteurs importants à la qualité de la production tels que les profils thermiques du solide et du gaz ainsi que la longueur nécessaire pour effectuer le séchage de l'hydrate. Il propose un modèle mathématique statique ainsi qu'une méthode pour l'élaboration d'un modèle dynamique mais n'a pas fait de simulation. Pour résoudre le problème, il a divisé le four de calcination en quatre sections distinctes:

- 1- préchauffage (élévation de la température de l'eau à 100°C)
- 2- vaporisation de l'eau à température constante du solide
- 3- évaporation de l'eau de cristallisation
- 4- augmentation de la température du solide et désactivation de l'alumine.

En 1970, Gordon construit un modèle statique à une dimension à propriétés variables pour le four numéro six de l'usine Vaudreuil d'Arvida. Son modèle devait servir à étudier l'effet de différentes variables de contrôle telles que les débits d'hydrate, d'air et

de fuel, et ainsi aider à améliorer l'efficacité du four. Tout comme Coupal, Gordon a divisé le four mais cette fois en six zones au lieu de quatre:

- 1- séchage de l'hydrate
- 2- transformation du trihydrate en monohydrate d'alumine
- 3- transformation du monohydrate en alumine gamma
- 4- transformation de l'alumine gamma en alumine alpha
- 5- combustion
- 6- refroidissement de l'alumine dans les refroidisseurs planétaires.

Les longueurs des trois premières zones sont inconnues, n'étant déterminées que par la température du solide. Gordon fait l'hypothèse que la zone 1 commence au début du four et se termine lorsque le solide a atteint 200°C, que la zone 2 se situe entre 200 et 300°C et que finalement la zone trois se situe entre 300 et 600°C. Pour ce qui est des trois dernières zones, leur longueur est connue mais les températures ne le sont pas. La zone 4 commence lorsque le solide atteint 600°C et se termine lorsqu'on atteint la température maximale du gaz, la zone 5 se poursuit de la température maximale du gaz et se termine au début des refroidisseurs tandis que la zone 6 couvre toute la partie des refroidisseurs planétaires (figure 1.4).

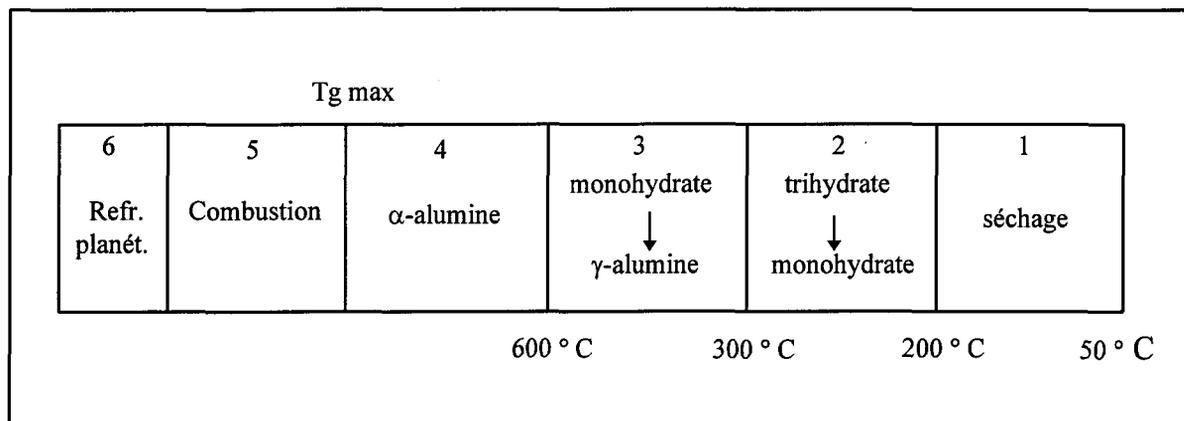


Figure 1.4 Division du four de calcination d'alumine selon Gordon.

Gordon utilise une cinétique de transformation de l'alumine simplifiée se limitant seulement au pourcentage d'eau contenue dans le solide en fonction de la température et en se fiant au fait que seulement 20% d'alumine alpha est produite. Il effectue des bilans thermique et massique sur chacune des six zones ne permettant ainsi au programme informatique que de déterminer les températures à la limite de celles-ci (7 températures pour le solide et 7 pour le gaz). Il suppose que les propriétés sont constantes dans chaque zone, la température étant prise comme constante et égale à la moyenne des deux températures limites de chacune des six régions. Le modèle a dû être calibré par l'ajustement de certains paramètres afin de rencontrer les conditions d'usine suivantes:

- la température maximale du solide doit se situer entre 1030 et 1090 °C;
- la température maximale du gaz doit se situer entre 1725 et 1840°C;
- la température d'entrée du gaz est de 38°C;
- la température de sortie du solide est de 315°C.

Les paramètres qui ont été ajustés sont les coefficients de convection dans les deux premières zones, la température du gaz pour le transfert de chaleur dans la zone de combustion et le coefficient global de transfert de chaleur dans les refroidisseurs planétaires.

Il considère la poussière en employant un profil de poussière pré-calculé et invariable quelles que soient les conditions de fonctionnement. Les pertes thermiques sont quant à elles basées sur des mesures de températures faites sur la coque, le même tableau de lectures étant utilisé lui aussi peu importe les conditions initiales de la simulation. Gordon obtient finalement des profils de température qui lui semblent raisonnables et les résultats qu'il obtient lui paraissent suffisants pour évaluer l'influence de variables de contrôle.

En 1972, Coupal s'associe avec Riffaud et Koehret et publie ensemble un article qui cette fois montre les résultats d'une simulation dynamique. Leur système d'équations différentielles est construit à partir de bilans massique et thermique et leur four n'est plus divisé en quatre mais plutôt discrétisé en très petites tranches. Leurs hypothèses de base sont:

- la chaleur massique est indépendante de la température;
- les coefficients de transfert de chaleur sont constants;
- le lit de solide est bien mélangé dû à la rotation du four, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de gradient de température dans la phase solide;

- le poussierage est négligé;
- l'émissivité est indépendante de la température;
- le transfert de chaleur axial est négligé;
- le four est pris comme un cylindre parfait;
- les vitesses sont constantes;
- la dynamique dans la phase gazeuse est négligée.

Les résultats qu'ils obtiennent sont intéressants, bien que l'approche préconisée pour la cinétique chimique soit discutable. Aucune constante de vitesse de réaction n'est proposée. De plus leur schéma réactionnel comporte une réaction endothermique de plus que la plupart des modèles existants. Or ce schéma, tiré de Paulik et Erdey (1967), n'est applicable qu'au cas où l'on a de très petites particules de trihydrate à calciner. Au surplus les auteurs posent une température de sortie des gaz provenant de lectures expérimentales, température qui ne change donc pas malgré les changements de conditions initiales.

En 1974, Manitiis et al. publient les résultats d'une simulation faite sur un four de calcination de sulfate d'aluminium $(\text{NH}_4)_2\cdot\text{O}\cdot 3\text{Al}_2\text{O}_3\cdot 4\text{SO}_3\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ qui, après chauffage, se transforme en oxyde d'aluminium Al_2O_3 . La caractéristique principale du modèle est qu'on y fait l'étude du poussierage ainsi que de l'effet de rétrécissements à l'intérieur du four. Le modèle est basé sur un ensemble d'équations différentielles ordinaires décrivant les cinétiques de réaction ainsi que les bilans thermique et massique. Contrairement au four de calcination d'alumine classique où la flamme fait partie intégrante du système, la chaleur

dans ce four est fournie par un gaz de combustion chaud ($\approx 1300^{\circ}\text{C}$), la combustion prenant place dans une chambre à part. Ils remarquent que l'intensité du poussierage augmente graduellement vers l'extrémité chaude du four, ceci étant dû au fait que des gaz plus chauds circulent plus vite et font ainsi augmenter le poussierage. Ils concluent donc que le poussierage pourrait être diminué si on réduisait la vitesse des gaz dans la partie chaude par l'augmentation du diamètre du four. De plus, ils proposent de remettre en question l'utilisation d'obstruteurs dans le four qui augmentent considérablement la production de poussières.

Viola et al. ont développé en 1986 un modèle mathématique dynamique d'un four de calcination d'alumine. Les buts étaient d'obtenir les profils de température pour le gaz, le solide et la paroi ainsi qu'étudier l'influence de certaines variables du procédé sur la performance du four et d'en expliquer ses comportements. Le modèle tient compte de la présence de poussière dans les gaz, d'obstruteurs et de cascadeurs dans le four. Pour simplifier le modèle, ils ont posé les hypothèses suivantes:

- la chaleur massique est moyenne et indépendante de la température;
- le four est cylindrique;
- le débit de solide est constant le long du four;
- l'aspect dynamique est négligé dans la phase gazeuse.

Ne connaissant pas la cinétique de transformation de l'alumine, ils utilisent le même modèle de transformation que Riffaud et al. (1972). Le four est divisé en trois zones:

- 1- préchauffage
- 2- évaporation de l'humidité
- 3- transformations du solide.

Une quatrième zone, la chambre de combustion, est indépendante du four et est donc traitée séparément. Les trois zones sont divisées en sous-zones d'environ 5 cm d'incrément avec un pas de temps de 0.001 seconde. Ils imposent dans la première zone une longueur constante et égale à trois mètres tandis que la deuxième zone mesure cinq mètres. Ils obtiennent des résultats qui coïncident bien avec les installations d'Eurallumina en Italie et concluent que leurs hypothèses de simplification sont valides. À partir des résultats du modèle ils notent que la vitesse de rotation et l'inclinaison du four ont une influence très négligeable sur le comportement du four.

Il serait peut-être intéressant de souligner que les études les plus récentes (depuis 1972) ont pratiquement toutes un point en commun. En effet lors de l'observation des profils thermiques du solide, on remarque que ceux-ci ont des paliers qui correspondent aux réactions endothermiques du solide (évaporation et déshydratation) et que lors de la transformation de l'alumine gamma en alumine alpha, qui est une réaction exothermique, le solide subit une élévation de température brusque.

En 1990, Perron élabore un modèle mathématique d'un four de calcination de coke de pétrole. Bien qu'il ne traite aucunement de l'alumine, ce modèle qui fonctionne très

bien et qui donne d'excellents résultats, a comme côtés intéressants son mode de fonctionnement ainsi que sa structure informatique. C'est un modèle statique à une dimension qui ne néglige pratiquement aucun paramètre. Le four est discrétisé en très fines tranches, à partir desquelles sont élaborées les équations différentielles qui contrôlent le four. Toutes les espèces chimiques sont considérées. Il ne faut cependant aucunement relier le fonctionnement du four de calcination du coke au four de calcination d'alumine puisque l'alumine et le coke n'ont pas la même cinétique de calcination et qu'en plus le coke est capable de fournir lui-même l'énergie aux transformations, ce qui n'est pas le cas pour l'alumine.

1.5 Contribution du présent travail

L'usine Vaudreuil d'Arvida procède à l'occasion à différents tests afin d'améliorer son produit et ses coûts de production. On y fait varier entre autres les débits d'hydrate, de gaz naturel et d'air primaire. Ces tests s'avèrent cependant longs et coûteux et ne donnent pas toujours des résultats satisfaisants sur l'alumine obtenue, ce qui peut engendrer des pertes de production importantes. Il s'avère donc intéressant pour l'industrie de posséder un bon modèle informatique du four qui pourrait aider dans l'amélioration du procédé.

Les modèles existants ne peuvent être utilisés puisque, soit qu'ils négligent certains paramètres importants comme la poussière ou la cinétique de calcination, qu'ils sont

différents des fours existants à l'usine Vaudreuil ou encore qu'ils ont été construits pour un seul mode de fonctionnement.

Le nouveau modèle du four de calcination d'alumine est un modèle général et robuste, dont il est facile de changer les conditions initiales de fonctionnement. Bien qu'il néglige encore certains paramètres comme l'ajout du fluorure d'aluminium et du chlore dans le procédé, il est en mesure de donner les effets des tests habituellement effectués en usine.

Ses principales caractéristiques sont:

- considération de la poussière dans le gaz et dans les échanges thermiques;
- propriétés variables avec la température;
- discrétisation très fine du four;
- longueurs des transformations non imposées;
- fichier d'entrée permettant les changements faciles et rapides des conditions initiales de fonctionnement;
- réitérations pour l'ajustement du débit de poussière et de sa composition;
- réitérations pour l'ajustement de la température de sortie des gaz;
- introduction des cinétiques de réaction de l'alumine.

Les travaux de Gordon ont été une des bases importantes pour l'élaboration du présent modèle. Bien qu'il soit discrétisé de façon très grossière, le modèle de Gordon a permis de comprendre parfaitement les phénomènes se produisant lors de la calcination de

l'alumine. Malgré le fait que le modèle de Gordon soit très bon, il ne peut être utilisé en industrie puisqu'il a été élaboré à partir d'un four particulier (four no.6) et il ne peut s'adapter à d'autres conditions de fonctionnement ou à d'autres fours. Le modèle de Perron a aussi été à la base des travaux. En fait, la même structure informatique a été conservée, que ce soit pour le calcul des différentes propriétés des espèces ou pour la résolution des équations différentielles, ce qui a permis de faciliter grandement l'élaboration du nouveau modèle.

Cette nouvelle étude du four de calcination d'alumine s'inscrit dans la suite logique des travaux antérieurs déjà faits sur le sujet. Elle contribuera d'une certaine façon à comprendre encore plus les phénomènes chimiques se produisant à l'intérieur du four et pourra devenir, selon l'utilisation qui en est faite, un nouvel outil de travail dans le contrôle du procédé. Le présent mémoire comporte deux parties distinctes: la théorie s'appliquant au four de calcination d'alumine et les résultats fournis par le modèle. Le chapitre qui suit traitera essentiellement de la méthode employée pour élaborer le modèle mathématique du four et de tout l'aspect théorique qui s'y rapporte. Suivra au chapitre 3 l'ensemble des résultats obtenus avec le modèle. On y présentera entre autres les comparaisons faites entre les résultats d'usine et ceux du modèle et également l'influence de différents paramètres sur le procédé. Les recommandations et la conclusion compléteront par la suite le travail au chapitre 4.

CHAPITRE 2

LE MODÈLE

2.1 Introduction

L'élaboration du modèle unidimensionnel du four de calcination d'alumine s'est faite sur la base d'équations différentielles. On a tout d'abord divisé le four en très petites tranches sur lesquelles ont été effectués des bilans massiques et thermiques. Or les tranches étant très petites, les bilans sont devenus des équations différentielles qu'il suffit d'intégrer afin d'obtenir les résultats désirés, soient les profils thermiques du solide, du gaz et de la paroi du four.

Le principal avantage d'utiliser les équations différentielles pour résoudre un tel système, réside dans la précision des résultats. En effet le système étant fortement non-linéaire, le fait d'utiliser des intervalles très petits pour décrire l'ensemble des variations dans le four, permet d'obtenir une précision optimale dans les calculs et les résultats obtenus.

Il faut cependant faire attention à l'endroit où on se situe dans le four. En effet, le four peut se diviser en six zones distinctes: le préchauffage du solide, l'évaporation de l'humidité de surface, les déshydratations de l'hydrate, la transformation cristalline de l'alumine gamma à l'alumine alpha, la combustion du gaz naturel et finalement les refroidisseurs planétaires. Il est donc important de considérer que le solide et le gaz n'échangent pas les mêmes quantités de matière et de chaleur selon la position du four, et qu'ainsi les équations différentielles seront différentes d'une zone à une autre.

Le présent chapitre décrit la méthode de détermination des équations différentielles ainsi que la méthode prise pour les résoudre. La démarche employée pour déterminer les températures des murs intérieur et extérieur du four est également décrite et on y traite des aspects particuliers devant être considérés pour la bonne marche du modèle, tels l'évaporation de l'eau, la cinétique de calcination de l'alumine, la combustion du gaz naturel, le poussierage et les transferts de chaleur.

2.2 Élaboration du modèle

2.2.1 Hypothèses simplificatrices

Comme on pourra le voir dans ce chapitre, l'élaboration du four de calcination d'alumine ne s'est pas faite sans hypothèses. En fait, l'adaptation d'hypothèses

simplificatrices était pratiquement incontournable. Premièrement, le modèle étant unidimensionnel, il faut donc négliger certains aspects comme les gradients radiaux de température pour le gaz et le solide et les poser bien mélangés. De plus on ne peut calculer les températures exactes de chaque refroidisseur planétaire et il faut ainsi supposer que les températures calculées dans cette zone sont valides pour l'ensemble des refroidisseurs. Finalement, certaines informations sur l'état actuel du four peuvent être très difficiles à connaître à chaque simulation, comme par exemple les infiltrations d'air extérieur dans le four et l'état des réfractaires. Les principales hypothèses simplificatrices posées pour l'élaboration du four, sont les suivantes:

Hypothèse 1

Tout l'air secondaire s'introduisant dans le four provient entièrement des refroidisseurs planétaires.

Hypothèse 2

Il n'y existe aucun gradient thermique radial dans le solide et dans le gaz et ceux-ci sont bien mélangés.

Hypothèse 3

La flamme est prise comme un corps cylindrique remplissant tout le four et la combustion du gaz naturel se fait de façon uniforme sur toute la longueur de la flamme.

Hypothèse 4

Un réfractaire unique est utilisé pour tout le four et il ne comporte aucune usure.

Hypothèse 5

Les refroidisseurs planétaires sont tous à la même température.

Hypothèse 6

On retrouve exactement la même quantité de solide dans chaque refroidisseur.

Hypothèse 7

La vapeur d'eau présente naturellement dans l'air primaire et l'air secondaire n'est pas considérée.

Hypothèse 8

Le chlore dans le gaz ainsi que le soda et le fluorure d'aluminium dans le solide ne sont pas considérés.

Hypothèse 9

La température est posée constante sur le contour de la paroi (intérieure et extérieure).

2.2.2 Équations différentielles

La discrétisation s'effectue selon l'axe du four, qui est appelé l'axe x . Plus les discrétisations sont grandes, plus le calcul est rapide mais du même coup plus la précision se trouve diminuée. Par contre, plus les discrétisations sont petites, plus les calculs sont précis mais plus la simulation nécessite de temps de calcul. Il est donc nécessaire d'établir ses priorités afin de choisir la discrétisation idéale. Pour le four de calcination d'alumine, où on retrouve des réactions chimiques, une flamme et un système de refroidissement, il peut s'avérer plus prudent d'utiliser une fine discrétisation. Ceci dans le but de permettre au modèle d'être le plus sensible possible à tous les petits changements de condition pouvant se produire dans le four.

Chaque tranche se compose de deux parties distinctes: le solide et le gaz (figure 2.1), sur lesquelles on réalisera des bilans d'énergie et de masse.

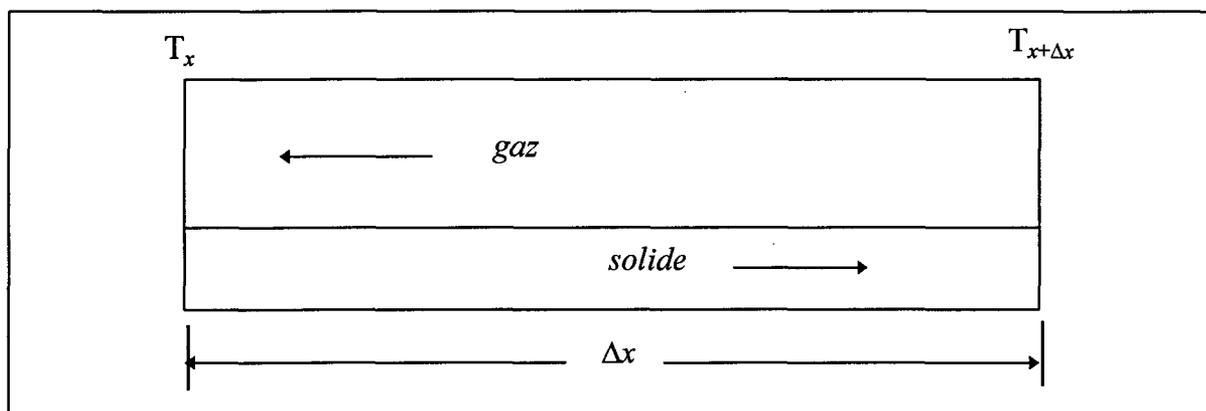


Figure 2.1 Tranche de four.

Afin de mieux comprendre la façon dont ont été effectués les bilans, prenons l'exemple d'une tranche située dans la zone d'évaporation de l'humidité de surface. Pour le solide, il faut considérer l'eau et la poussière qui s'en échappe, ainsi que les transferts de chaleur qui lui arrivent par le gaz et le mur (figure 2.2).

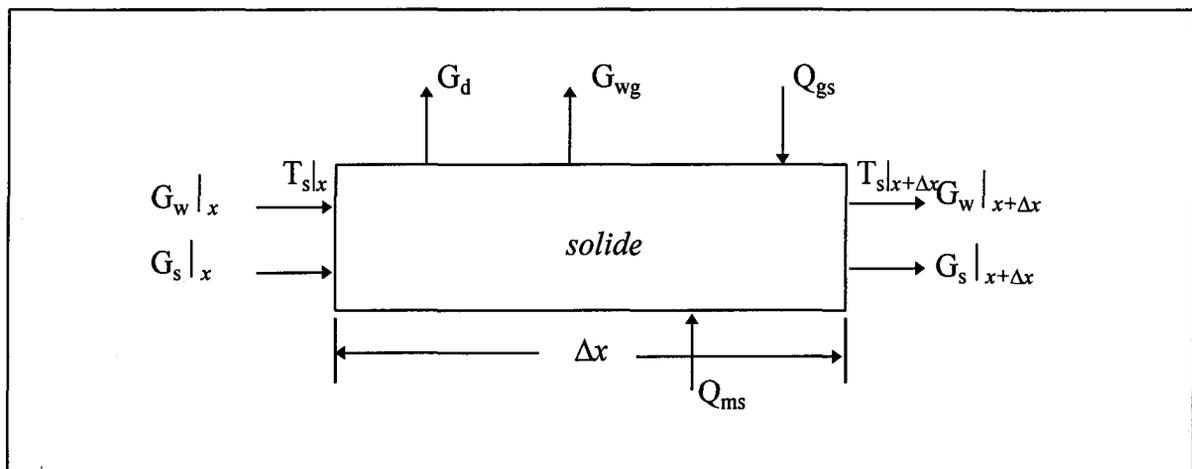


Figure 2.2 Tranche de solide dans la zone d'évaporation.

Bilan de masse

$$G_{s|x} + G_{w|x} = G_{w|x+\Delta x} + G_{s|x+\Delta x} + G_d + G_{wg} \quad (2.1)$$

Bilan de chaleur

$$G_s \cdot h_{s|x} + G_w \cdot h_{w|x} + Q_{gs} + Q_{ms} = G_w \cdot h_{w|x+\Delta x} + G_s \cdot h_{s|x+\Delta x} + G_d \cdot h_d + G_{wg} \cdot h_{wg}$$

↓

$$\Delta(G_s \cdot h_s) + \Delta(G_w \cdot h_w) + G_d \cdot h_d + G_{wg} \cdot h_{wg} - Q_{gs} - Q_{ms} = 0 \quad (2.2)$$

Bilan de solide sec

$$G_s|_x = G_d + G_s|_{x+\Delta x}$$

ou bien,

$$G_d = G_s|_x - G_s|_{x+\Delta x} = -\Delta G_s \quad (2.3)$$

Bilan d'eau

$$G_w|_x = G_w|_{x+\Delta x} + G_{wg}$$

ou bien,

$$G_{wg} = G_w|_x - G_w|_{x+\Delta x} = -\Delta G_w \quad (2.4)$$

Introduisons (2.3) et (2.4) dans (2.2)

$$\Delta(G_s \cdot h_s) + \Delta(G_w \cdot h_w) - \Delta G_s \cdot h_d - \Delta G_w \cdot h_{wg} - Q_{gs} - Q_{ms} = 0$$

Divisons par Δx

$$\frac{\Delta(G_s \cdot h_s)}{\Delta x} + \frac{\Delta(G_w \cdot h_w)}{\Delta x} - (h_d \cdot \frac{\Delta G_s}{\Delta x}) - (h_{wg} \cdot \frac{\Delta G_w}{\Delta x}) - q_{gs} - q_{ms} = 0$$

Faisons tendre Δx vers 0

$$\frac{d(G_s \cdot h_s)}{dx} + \frac{d(G_w \cdot h_w)}{dx} - h_d \cdot \frac{dG_s}{dx} - h_{wg} \cdot \frac{dG_w}{dx} - q_{gs} - q_{ms} = 0$$

Dérivons

$$G_s \cdot \frac{dh_s}{dx} + h_s \cdot \frac{dG_s}{dx} + G_w \cdot \frac{dh_w}{dx} + h_w \cdot \frac{dG_w}{dx} - h_d \cdot \frac{dG_s}{dx} - h_{wg} \cdot \frac{dG_w}{dx} - q_{gs} - q_{ms} = 0$$

En posant que la poussière et le solide sont à la même température, donc qu'ils ont la même enthalpie, on obtient,

$$G_s \cdot \frac{dh_s}{dx} + \frac{dG_s}{dx} \cdot (h_s \overset{0}{\nearrow} h_d) + G_w \cdot \frac{dh_w}{dx} + \frac{dG_w}{dx} \cdot (h_w - h_{wg}) - q_{gs} - q_{ms} = 0$$

↓

$$G_s \cdot \frac{dh_s}{dx} + G_w \cdot \frac{dh_w}{dx} - \frac{dG_w}{dx} \cdot \Delta H_w - q_{gs} - q_{ms} = 0 \quad (2.5)$$

où,

$\Delta H_w = h_{wg} - h_w$, est la chaleur latente de vaporisation.

Sachant que le solide et l'eau sont à même température T_s , posons,

$$\frac{dh_s}{dx} = Cp_s \cdot \frac{dT_s}{dx}, \quad \frac{dh_w}{dx} = Cp_w \cdot \frac{dT_s}{dx}$$

L'équation (2.5) devient donc,

$$G_s \cdot Cp_s \cdot \frac{dT_s}{dx} + G_w \cdot Cp_w \cdot \frac{dT_s}{dx} = q_{gs} + q_{ms} + \frac{dG_w}{dx} \cdot \Delta H_w \quad (2.6)$$

Or comme la quantité d'eau de x à $x+\Delta x$ diminue, la dérivée dG_w/dx est négative, ce qui fait que l'équation (2.6) devient,

$$(G_s \cdot C_{p_s} + G_w \cdot C_{p_w}) \cdot \frac{dT_s}{dx} = q_{gs} + q_{ms} - \frac{dG_w}{dx} \cdot \Delta H_w \quad (2.7)$$

L'équation (2.7) est l'équation différentielle pour la température du solide dans la zone d'évaporation. Notons que cette équation n'est valable que dans le cas où on a dépassé l'humidité critique du solide (voir section 2.3). Tant que l'humidité critique n'est pas atteinte, l'évaporation se fait à température constante et l'équation différentielle devient,

$$\frac{dT_s}{dx} = 0$$

Pour ce qui est de la zone du gaz, les éléments à prendre en considération lors du bilan, sont les débits massiques qui lui arrivent du solide (poussière et vapeur d'eau) ainsi que les transferts de chaleur vers le mur et le solide (figure 2.3).

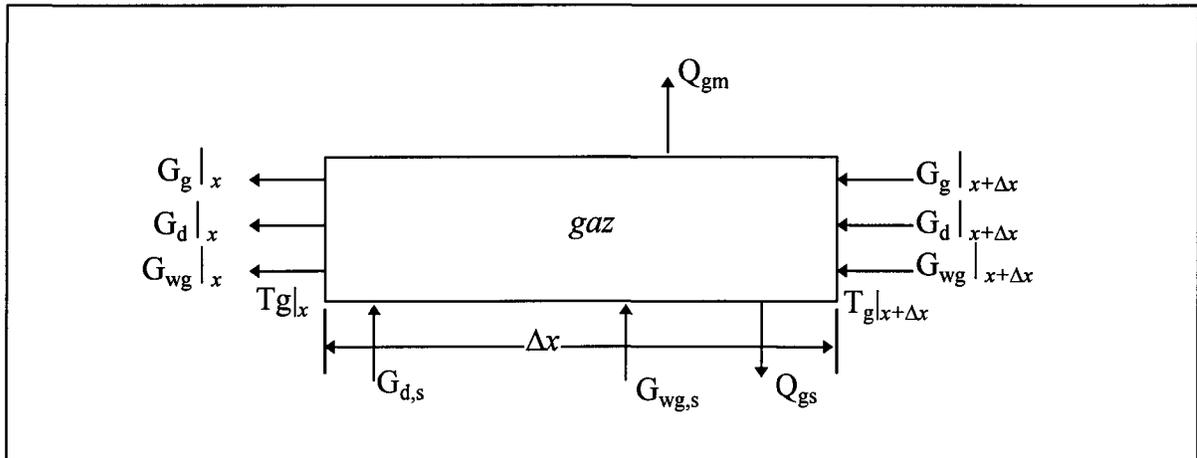


Figure 2.3 Tranche de gaz de la zone d'évaporation.

Le développement se faisant pratiquement de la même façon que précédemment, il ne sera pas repris ici. L'équation différentielle pour la température du gaz dans la zone d'évaporation devient,

$$\begin{aligned} (G_g \cdot Cp_g + G_d \cdot Cp_d + G_{wg} \cdot Cp_{wg}) \cdot \frac{dT_g}{dx} = q_{ms} + q_{gs} + \frac{dG_d}{dx} \cdot (Cp_d \cdot T_g - Cp_{d,s} \cdot T_s) \\ + \frac{dG_{wg}}{dx} \cdot (Cp_{wg} \cdot T_g - Cp_{wg,s} \cdot T_s) \quad (2.8) \end{aligned}$$

Les sous-indices "s" pour les chaleurs massiques Cp, signifient que ces dernières sont calculées à la température du solide.

Afin d'alléger le texte, l'ensemble des autres équations est présenté en annexe, mais pour aider à la compréhension, voici certaines remarques concernant ces équations. Pour ce qui est des déshydratations du trihydrate et du monohydrate, il y a évaporation d'eau, donc les

bilans dans cette zone se rapprochent beaucoup des bilans faits dans la zone d'évaporation. Par contre dans la zone où l'alumine gamma se transforme en alumine alpha, il n'y a pas de libération d'eau mais de chaleur puisque c'est une réaction exothermique qui n'implique qu'un changement cristallin. Pour la zone de la flamme, il faut tenir compte que le gaz contient de nouvelles composantes qui sont l'air primaire, le gaz naturel et les gaz de combustion. Et finalement dans la zone des refroidisseurs planétaires, le seul transfert de masse du solide au gaz est la poussière. De plus, le solide ne reçoit plus de chaleur du gaz et de la paroi mais leur transmet plutôt sa chaleur en se refroidissant. Pour toutes les tranches, sans exception, il y a perte de solide sous forme de poussière vers le gaz.

En plus des deux équations différentielles pour les températures du solide et du gaz, le modèle doit résoudre, pour chaque tranche, 11 autres équations différentielles. Ces 11 équations comprennent 6 équations de cinétique pour les espèces chimiques dans le gaz et 5 équations cinétiques pour les espèces chimiques dans le solide. Elles sont présentées ci-après.

Variation de la concentration en gaz carbonique dans la flamme

$$\frac{dY_{\text{CO}_2}}{dx} = \frac{-R_{\text{CO}_2}}{G_{\text{N}_2}} \quad (2.9)$$

Variation de la concentration en poussière dans le gaz

$$\frac{dY_d}{dx} = \frac{-R_d}{G_{N_2}} \quad (2.10)$$

Variation de la concentration en vapeur d'eau dans le gaz

$$\frac{dY_{wg}}{dx} = \frac{-R_{wg} - R_{H_2O}}{G_{N_2}} \quad (2.11)$$

Variation de la concentration en azote dans le gaz

$$\frac{dY_{N_2}}{dx} = 0 \quad (2.12)$$

Variation de la concentration en oxygène dans la flamme

$$\frac{dY_{O_2}}{dx} = \frac{R_{O_2}}{G_{N_2}} \quad (2.13)$$

Variation de la concentration en gaz naturel dans la flamme

$$\frac{dY_f}{dx} = \frac{R_f}{G_{N_2}} \quad (2.14)$$

Variation de la concentration en eau dans le solide mouillé

$$\frac{dX_w}{dx} = \frac{-R_w}{G_{lit}} \quad (2.15)$$

Variation de la concentration en trihydrate d'alumine dans le solide sec

$$\frac{dX_{Al(OH)_3}}{dx} = \frac{-R_{Al(OH)_3}}{G_s} \quad (2.16)$$

Variation de la concentration en monohydrate d'alumine dans le solide sec

$$\frac{dX_{\text{AlOOH}}}{dx} = \frac{0,77 \cdot R_{\text{Al(OH)}_3} - R_{\text{AlOOH}}}{G_s} \quad (2.17)$$

Variation de la concentration en alumine gamma dans le solide sec

$$\frac{dX_{\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3}}{dx} = \frac{0,85 \cdot R_{\text{AlOOH}} - R_{\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3}}{G_s} \quad (2.18)$$

Variation en alumine alpha dans le solide sec

$$\frac{dX_{\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3}}{dx} = \frac{R_{\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3}}{G_s} \quad (2.19)$$

Les équations (2.7) à (2.19) composent donc l'ensemble des 13 équations différentielles à résoudre par le modèle, par tranche. Les relations cinétiques R , pour les espèces chimiques, seront vues en détail dans les sections 2.3, 2.4 et 2.5 et le taux de poussierage R_d sera vu à la section 2.6.

Comme on peut le constater, les concentrations des espèces dans le gaz sont calculées par rapport au débit d'azote. Ceci est dû au fait que l'azote qui entre dans le four n'intervient dans aucune réaction et son débit demeure donc constant. Pour ce qui est des concentrations des différents constituants du lit de solide, il n'y a malheureusement pas d'espèce qui demeure constante dans le lit, comme c'est le cas pour l'azote dans le gaz. La base de comparaison considérée est donc le débit de solide initial. Pour la concentration de

l'eau dans le solide on utilise une base humide (correspondant au solide humide qui entre), et pour la concentration des différentes phases cristallines, c'est une base sèche qui est considérée. Une fois les équations différentielles résolues pour les concentrations, les nouveaux débits de chaque constituant pour le gaz et le solide deviennent,

$$G_{i(\text{gaz})} = Y_i \cdot G_{N_2}$$

$$G_{i(\text{solide})} = X_i \cdot G_s \text{ ou } X_i \cdot G_{\text{lit}}$$

où Y_i et X_i représentent respectivement les concentrations de chaque espèce dans le gaz et dans le solide.

2.2.3 Température de la paroi du four

Les températures pour les murs intérieur et extérieur sont également déterminées par un bilan, mais effectué cette fois sur la paroi du four, et ce pour chacune des tranches. Comme la résolution se fait après la détermination des températures du solide et du gaz (T_s et T_g), on se retrouve avec un système de deux équations à deux inconnues.

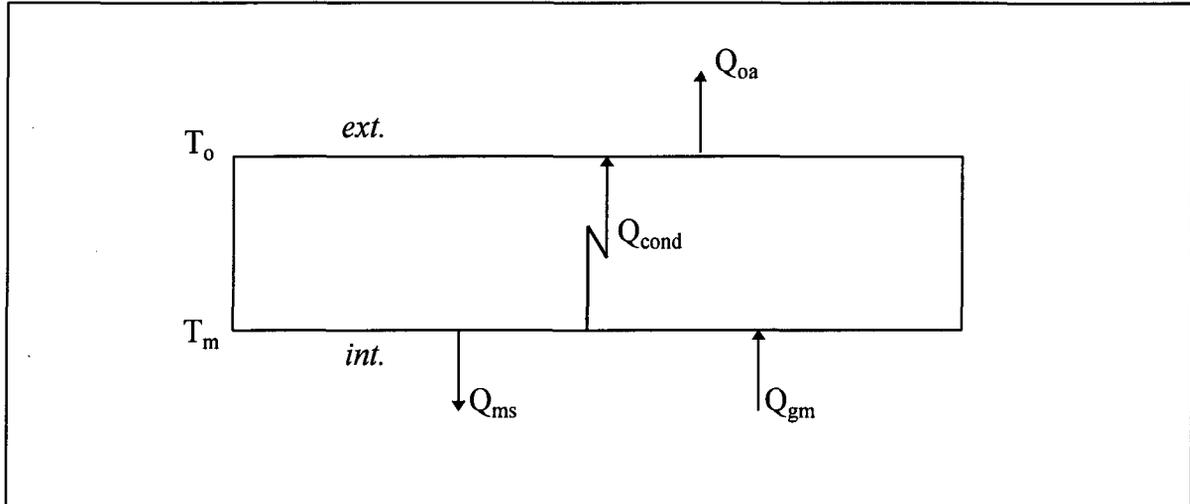


Figure 2.4 Bilan thermique sur la paroi du four.

Bilan mur intérieur

$$Q_{gm} = Q_{ms} + Q_{cond}$$

$$A_{gm} \cdot h_{gm} \cdot (T_g - T_m) = A_{ms} \cdot h_{ms} \cdot (T_m - T_s) + A_{cond} \cdot h_{cond} \cdot (T_m - T_o) \quad (2.20)$$

Bilan mur extérieur

$$Q_{cond} = Q_{oa}$$

$$A_{cond} \cdot h_{cond} \cdot (T_m - T_o) = A_{oa} \cdot h_{ao} \cdot (T_o - T_a) \quad (2.21)$$

En résolvant, pour chaque tranche, le système d'équations formé par les relations (2.20) et (2.21), on trouve les deux inconnues T_m et T_o . Les relations pour les transferts de chaleur seront présentées plus loin en détails à la section 2.7.

2.2.4 Méthode de résolution

Les 13 équations différentielles sont résolues à l'aide de la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4. Bien que cette méthode ne soit pas la plus rapide, sa robustesse et sa simplicité ont joué en sa faveur pour la résolution du modèle.

La méthode de Runge-Kutta est basée sur la méthode d'Euler dont la formule générale est:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta x \cdot f(x_n, y_n)$$

L'ordre 4 combine par la suite quatre étapes d'Euler en une série de Taylor pour finalement obtenir la structure de résolution suivante,

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6}$$

$$k_1 = \Delta x \cdot f(x_n, y_n)$$

$$k_3 = \Delta x \cdot f(x_n + h/2, y_n + k_2/2)$$

$$k_2 = \Delta x \cdot f(x_n + h/2, y_n + k_1/2)$$

$$k_4 = \Delta x \cdot f(x_n + h, y_n + k_3)$$

où $f = dy/dx$ et

$h =$ discrétisation.

2.2.5 Fonctionnement du programme

Comme il a été mentionné dans le chapitre précédent, le programme simulant le four de calcination d'alumine est élaboré selon la même structure informatique que le programme simulant le four de calcination du coke de Perron (1989). Le programme principal fait appel en tout à quatre sous-programmes qui servent respectivement à la lecture des conditions initiales, au calcul des propriétés, au calcul des températures de la paroi et à la résolution numérique des équations différentielles. La structure générale du programme apparaît à la figure 2.6.

La simulation s'effectue de l'extrémité froide jusqu'à l'extrémité chaude selon une incrémentation de 5 centimètres. L'extrémité froide est appelée la position $x=0$ et l'extrémité chaude la position $x=L_T$ (figure 2.5).

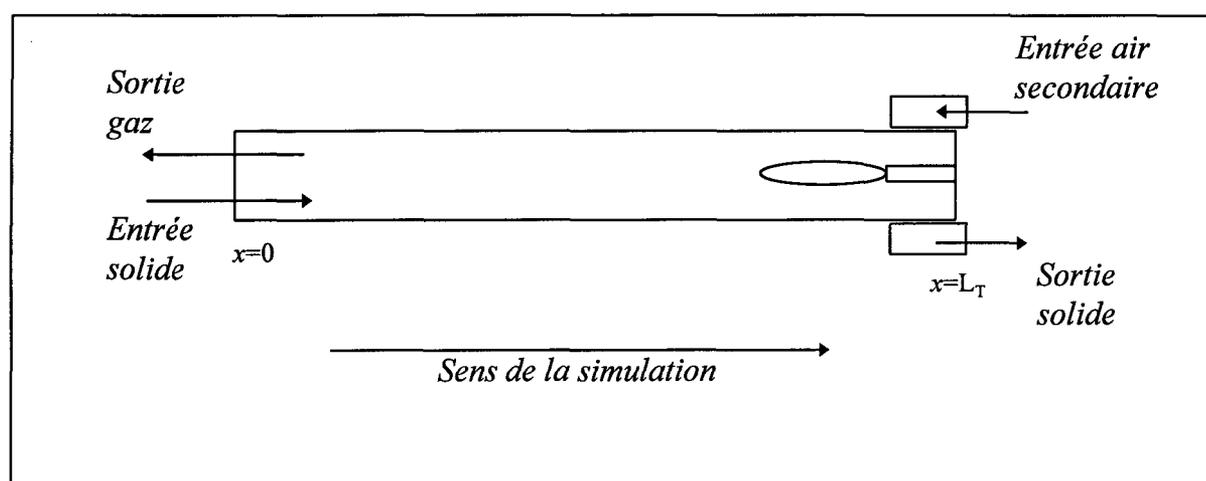


Figure 2.5 Sens de la simulation.

Les conditions limites de la simulation sont les suivantes:

- température d'entrée du solide ($x=0$);
- température du bout de la flamme ($T_{\text{fin combustion}}$);
- débit de poussière à $x=L_T$ (≈ 0 kg/s);
- température d'entrée de l'air secondaire à $x=L_T$ ($\approx 25^\circ\text{C}$).

La température du gaz ainsi que le débit et la composition de la poussière à la position de départ ($x=0$) sont inconnus. Mais comme il est nécessaire de les fournir au programme pour qu'il puisse effectuer sa simulation, on leur attribue initialement des valeurs approximatives qui seront corrigées par le programme au fur et à mesure des itérations.

Le programme réitère plusieurs fois à la position de départ afin de corriger la température du gaz selon la température qu'il a calculée pour le bout de la flamme. La réitération pour corriger le débit de poussière s'effectue quant à elle selon le débit que le programme a calculé à la position $x=L_T$. De plus, si le programme calcule un débit de poussière plus petit ou égal à 0 kg/s avant la fin de la simulation, il recommence au début en posant un débit plus élevé. Pour ce qui est de la composition de la poussière, elle est corrigée à la fin de la simulation, lorsque les longueurs de chaque transformation du solide sont déterminées.

Afin d'éviter les divergences et les erreurs informatiques, on impose des limites à la température du gaz. Si en cours de simulation, le programme note que la température du gaz atteint une valeur supérieure à 5000 kelvins, un message indique à l'opérateur de poser, à $x=0$, une température de gaz plus faible. De plus, si la température posée à la position $x=0$ est inférieure à 10°C , le programme arrête la simulation et informe l'utilisateur que les conditions initiales posées ou que les calculs sont impossibles.

L'ajustement de la température du gaz à $x=0$ se fait suivant la méthode de Bolzano. Selon cette méthode, il suffit de poser deux températures limites et de prendre comme température de départ le point central de ces deux bornes. Selon le résultat obtenu, le programme recommence à $x=0$ et établit deux autres bornes, toujours en encadrant plus étroitement la solution. Ceci s'effectue jusqu'à ce que la température obtenue au bout de la flamme soit satisfaisante.

Pour le débit de poussière cette méthode ne peut être utilisée. En effet l'ajustement de ce débit est sensible et la convergence n'est pas toujours assurée. L'augmentation ou la diminution du débit de poussière à $x=0$ se fait plutôt par petits pas successifs. Cette méthode s'avère évidemment plus longue en temps de calcul que la précédente mais elle est beaucoup plus robuste.

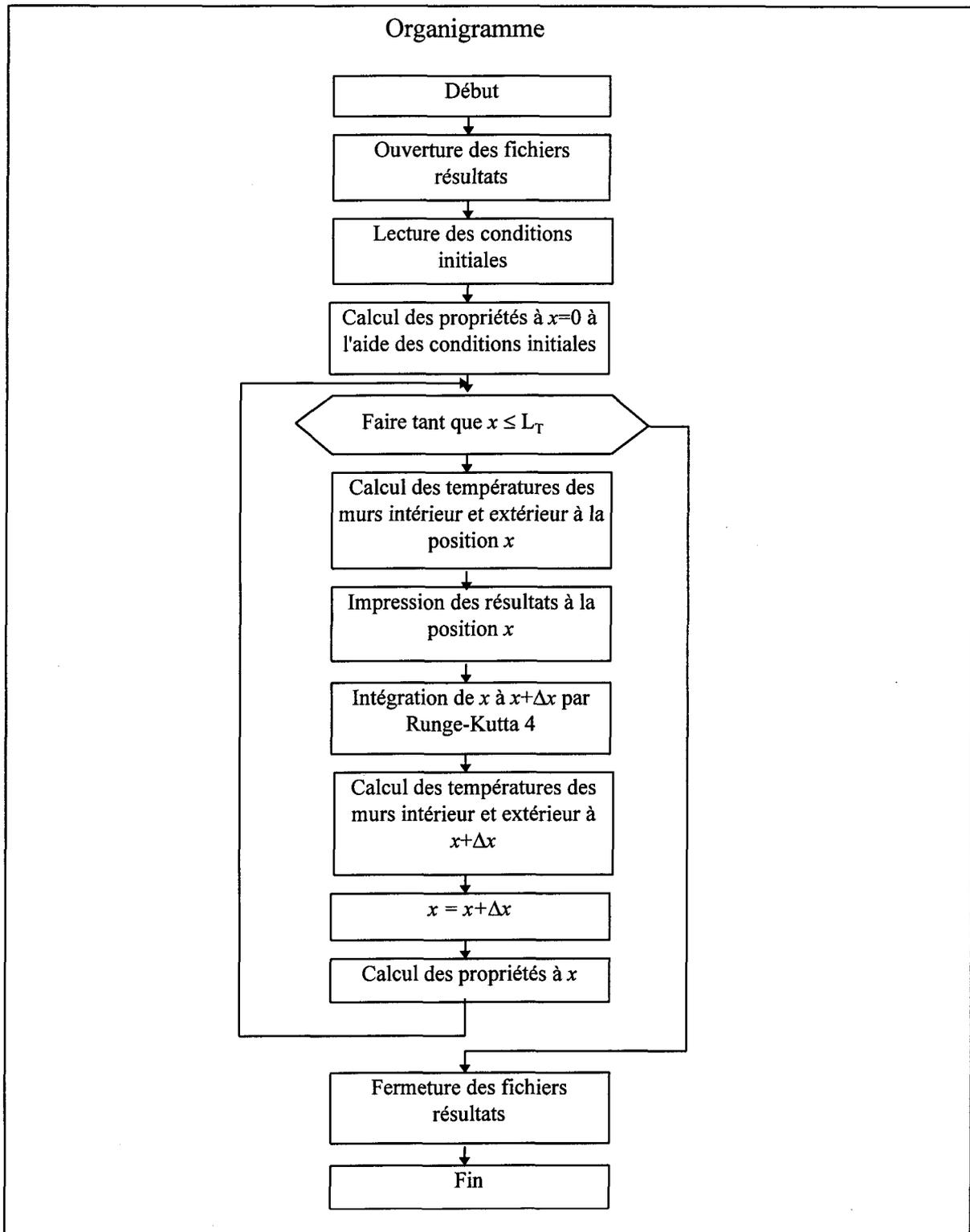


Figure 2.6 Organigramme général du programme.

2.3 Évaporation de l'eau

Lorsque l'hydrate est introduit dans le four, celui-ci contient une quantité plus ou moins importante d'humidité. La première étape à effectuer, après le préchauffage du solide, est de faire évaporer cette humidité.

2.3.1 Température d'évaporation

Contrairement à ce qu'on peut penser, l'humidité ne s'évapore pas toujours à 100°C mais parfois en dessous de cette température. En fait le phénomène de l'évaporation de l'humidité de surface est régi par la température de la surface en question, mais également par la différence d'humidité qui existe entre le solide et le gaz environnant. Si le gaz est sec par rapport au solide, le système tend à entrer en équilibre en retirant de l'humidité au solide pour la donner au gaz. La chaleur qui est apportée au solide par le gaz est alors toute prise pour évaporer l'eau de surface et le solide demeure à température constante. Si par contre le solide est entouré d'un gaz très humide, dont la pression partielle du contenu en vapeur d'eau dépasse la pression de vapeur d'eau du solide, le gaz donne de l'eau au solide et il se forme de la condensation à la surface de celui-ci.

Les matériaux, selon leur constitution, ne s'évaporent pas tous de la même façon. L'évaporation peut en effet se produire en une ou deux étapes. Prenons l'exemple d'un

solide humide, ne comportant aucune porosité. Lorsque entouré d'un gaz chaud et sec, il perd toute son humidité en demeurant à température constante et commence à se réchauffer seulement lorsque toute l'eau de surface s'est évaporée. Par contre pour un solide poreux ou encore un lit de solide poreux, comme le trihydrate d'alumine, l'évaporation s'effectue en deux étapes. La première, que l'on appelle l'évaporation à température constante, s'effectue comme dans le cas précédent à température constante du solide, et se poursuit jusqu'à ce qu'on ait atteint la teneur en humidité critique du matériau. En dessous de cette teneur en humidité critique, qui est particulière à chaque matériau, l'évaporation de l'eau continue mais le solide se réchauffe. On appelle cette deuxième étape, l'évaporation à taux décroissant.

Le surplus d'eau dans le solide qui dépasse la teneur en eau critique, est appelé humidité libre, tandis que l'eau qui se trouve en dessous de ce point est appelée humidité liée. Il existe également un autre point limite pour l'humidité, c'est le seuil d'humidité d'équilibre qui fait que lorsqu'on a atteint ce point, plus aucune évaporation n'est possible (figure 2.7).

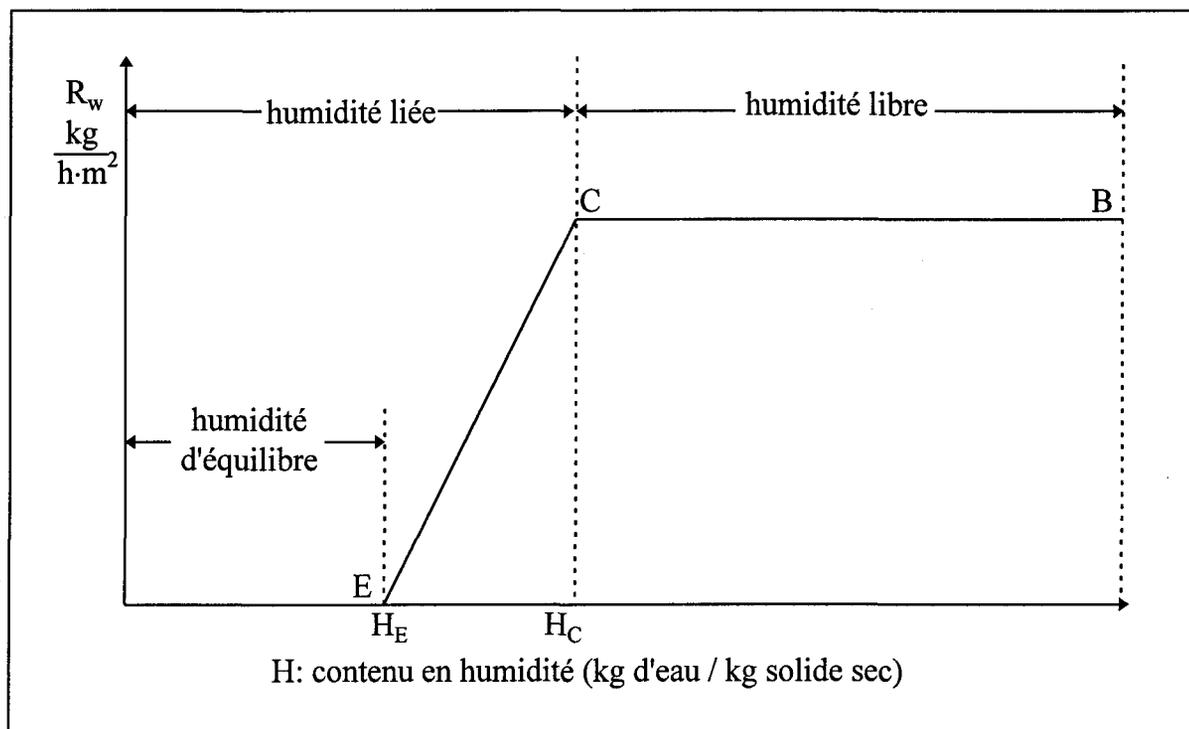


Figure 2.7 Courbe de la vitesse de séchage de l'eau en fonction du taux d'humidité (Treybal, 1980).

Pour le trihydrate d'alumine, qui subit l'évaporation en deux étapes, il est possible de déterminer à quelle température se produit l'évaporation à taux constant. Cette température se nomme la température de bulbe mouillé (ou le terme anglais: wet-bulb temperature). Cette expression provient en fait de l'expérience suivante: prenons un thermomètre au mercure, dont le bulbe a été préalablement enroulé dans un coton mouillé, et faisons-le tourner très rapidement. L'eau du coton s'évapore, le coton se refroidit et continue de se refroidir jusqu'à ce qu'il y ait équilibre entre la quantité de chaleur arrivant sur le coton par convection et la perte de chaleur causée par l'eau s'évaporant du coton. La température lue sur le thermomètre lorsque cet équilibre survient est la température de bulbe mouillé. Pour

le four de calcination d'alumine, c'est un peu la même chose qui se produit. Le solide est introduit dans un courant d'air chaud et relativement sec. Après un préchauffage adéquat du solide, il se produit un équilibre entre sa chaleur reçue et la chaleur libérée par l'évaporation de l'humidité. Comme toute la chaleur ne sert qu'à évaporer l'eau (l'eau de surface jouant le rôle d'un bouclier thermique), la température du solide demeure constante, et on a alors atteint la température de bulbe mouillé.

En 1983, Tarasiewicz et al. étudient le phénomène du séchage d'un matériau granulaire dans un séchoir rotatif. Ils rapportent que la quantité d'eau libérée durant la première étape du séchage peut être exprimée par l'équation suivante,

$$\frac{q_{lit}}{\Delta H_w} = \frac{A_{gs} \cdot h_{gs} \cdot (T_g - T_s) + q^r_{gs} + q^r_{ms}}{\Delta H_w} \quad (2.22)$$

Comme toute la chaleur qui arrive au lit granulaire est prise pour évaporer l'eau, on peut dire,

$$q_{lit} = q_{wg} \quad (2.23)$$

De plus, l'analyse du transfert de masse à la surface permet d'écrire,

$$q_{wg} = K_y \cdot A_{gs} \cdot (Y_s - Y) \cdot \Delta H_w \quad (2.24)$$

ou bien,

$$\frac{q_{lit}}{\Delta H_w} = K_y \cdot A_{gs} \cdot (Y_s - Y) \quad (2.25)$$

En combinant les équations (2.22) et (2.25) on trouve,

$$(T_g - T_s) + \frac{q_{gm}^r + q_{ms}^r}{A_{gs} \cdot h_{gs}} = \frac{(Y_s - Y) \cdot \Delta H_w}{h_{gs}/K_y} \quad (2.26)$$

L'eau de surface commence donc à s'évaporer lorsque la relation (2.26) est respectée. La variable K_y est un coefficient de transfert massique et le rapport h_{gs}/K_y peut être considéré constant et égal à,

$$h_{gs}/K_y = 950 \text{ N}\cdot\text{m} / \text{kg}\cdot\text{K}$$

La variable Y représente l'humidité de l'air en kg d'eau par kg d'air sec et Y_s représente l'humidité de l'air à saturation. Sa valeur peut être calculée de la façon suivante,

$$Y_s = \frac{P_s}{P_t - P_s} \cdot \frac{18}{29} \quad (2.27)$$

où P_s et P_t représentent respectivement la pression de saturation à une température donnée T_s et la pression totale ($\approx 100 \text{ kPa}$).

$$P_s = 50,104 \cdot 10^6 \exp(-4895,5/T_s) \quad (2.28)$$

On combine ensuite les équations (2.26) à (2.28) et on détermine ainsi la température d'évaporation T_s .

L'évaporation se poursuit donc à cette température jusqu'à ce qu'on atteigne la teneur en humidité critique du solide, H_C . La valeur H_C est particulière à chaque matériau. Toutefois, comme il a été impossible de trouver la teneur en humidité critique de l'alumine, la valeur utilisée par Tarasiewicz et al. pour le charbon, soit 0,032, a été choisie. Puisque,

par ailleurs, la teneur en humidité d'équilibre, H_E , est aussi inconnue, on suppose que l'évaporation dans la période à taux décroissant se poursuit jusqu'à ce qu'il n'y ait plus d'eau dans le solide, c'est-à-dire jusqu'à ce que H_E soit égal à 0.

2.3.2 Cinétique de l'évaporation de l'eau

La cinétique du dégagement de l'eau a été étudiée par Lyons et al. en 1962. Ces derniers ont fait l'étude du séchage dans un four de ciment. Ils ont obtenu, pour l'évaporation de l'eau, une énergie d'activation de 42 020 J/mol ainsi qu'une constante de vitesse de $7,08 \cdot 10^7/h$ ($1,967 \cdot 10^4/s$). On trouve que l'équation cinétique régissant l'évaporation de l'humidité s'exprime par,

$$R_w = k \cdot \frac{G_w}{V_{lit}} \quad (2.29)$$

où $k = 1,967 \cdot 10^4 \cdot \exp(-42\,020/RT)$.

Plus de détails sur la méthode d'obtention de l'équation (2.29) sont donnés en annexe.

2.4 La cinétique de calcination de l'alumine

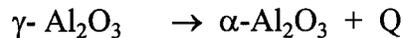
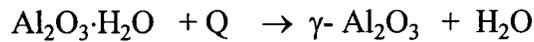
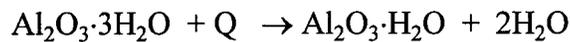
La cinétique chimique de l'alumine occupe une part importante dans le projet: c'est en fait sur cette partie qu'ont porté principalement les efforts pour améliorer les modèles existants. L'importance d'inclure une cinétique valable provient du fait que c'est celle-ci qui

détermine les longueurs prises dans le four pour effectuer les transformations ainsi que les températures atteintes par le matériau. Dans les travaux précédents, où on n'incluait pas la cinétique, les longueurs et les températures des différentes étapes de transformations devaient être imposées au programme.

Les travaux traitant du sujet étant peu nombreux, il a été difficile de faire une étude bibliographique appropriée et d'établir des bases de comparaison afin d'extraire les meilleurs résultats. Il n'existe aucune équation générale de cinétique pour l'alumine. En effet, comme la cinétique dépend des conditions initiales, il est pratiquement impossible de trouver, dans la littérature, une cinétique s'appliquant parfaitement aux conditions de l'usine Vaudreuil. Les conditions susceptibles d'affecter le plus la cinétique sont:

- type et origine de l'hydrate;
- pureté chimique de l'hydrate;
- taux de chauffage;
- durée de la calcination;
- atmosphère;
- présence d'additifs minéralisants dans l'hydrate.

La cinétique de transformation du trihydrate d'alumine en alumine alpha se fait globalement en trois étapes:



La première étape est la transformation du trihydrate d'alumine en monohydrate d'alumine. Cette réaction consiste à enlever une partie de l'eau de cristallisation du solide initial en le chauffant entre 200 et 300°C. La deuxième étape, qui est la transformation du monohydrate d'alumine en alumine gamma, consiste à extraire cette fois toute l'eau de cristallisation restante dans le solide. Cette étape, qui se produit entre 300 et 600°C, amène l'obtention d'une alumine très poreuse ne pouvant pratiquement pas être utilisée telle quelle compte tenu de son très haut degré d'absorption de l'humidité. L'alumine alpha, qui est la phase la plus stable des alumines, n'est obtenue qu'en chauffant l'alumine gamma à de très hautes températures; c'est ce qu'on appelle la calcination. L'alumine alpha possède d'excellentes propriétés telles une bonne dureté, une bonne résistance thermique ainsi qu'une température de fusion élevée.

Or avant de devenir de l'alumine alpha, l'alumine gamma passe par deux autres phases cristallines: delta (δ) et thêta (θ). Les phases gamma, delta et thêta sont appelées alumines de transition, mais en raison du fait que leurs transformations sont très rapides et

difficiles à détecter, la plupart des auteurs les négligent et ne considèrent que le passage de l'alumine de transition gamma à l'alumine alpha.

Le tableau qui suit montre le type de chacune des trois réactions ainsi que les températures théoriques moyennes auxquelles elles débutent (Gordon, 1969).

Tableau 2.1 Caractéristiques des réactions.

Réaction	Température du début de réaction	Type de réaction
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	200 °C	endothermique
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightarrow \gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$	300 °C	endothermique
$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3 \rightarrow \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	600 °C	exothermique

Selon les auteurs, les différentes phases de l'alumine peuvent porter plusieurs noms. Le tableau suivant indique les différentes nomenclatures utilisées pour chaque phase ainsi que leurs caractéristiques.

Tableau 2.2 Nomenclature et caractéristiques des différentes phases de l'alumine.

Matériau	Noms	Système cristallin	Densité vraie (kg/m ³) (Misra et Wefers, 1987)	Densité en vrac (kg/m ³)	Porosité (Dernedde, 1968)
Al ₂ O ₃ ·3H ₂ O Al(OH) ₃	Trihydrate d'alumine, Gibbsite	Monoclinique	2420	1936	20 %
Al ₂ O ₃ ·H ₂ O AlOOH	Monohydrate d'alumine, Boehmite	Orthorhombique	3010	2408	Inconnue mais posée égale à 20%
γ-Al ₂ O ₃	Alumine gamma	Tétragonal	3980	1353.2	66%
α-Al ₂ O ₃	Alumine alpha, Corindon	Hexagonal	3980	3980	≈ 0%

Selon le type de gibbsite chauffé et les conditions de chauffage, deux chemins différents peuvent être empruntés durant les transformations.

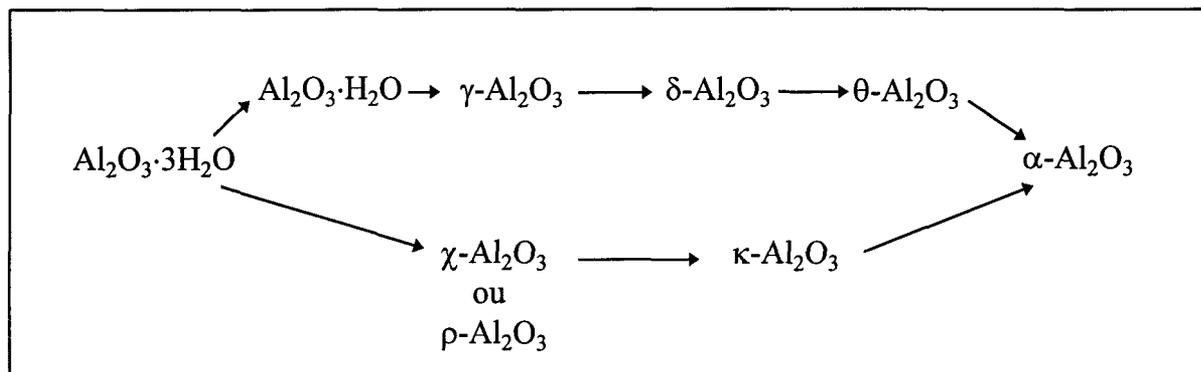


Figure 2.8 Séquences de transformation de l'alumine.

Le cheminement dépend principalement de la taille de la particule de gibbsite chauffée. En effet, plus les particules de gibbsite sont grosses, plus le trihydrate aura tendance à se transformer selon la séquence du haut, et vice versa, plus les particules de gibbsite sont petites ($< 2\mu\text{m}$), plus le trihydrate aura tendance à se transformer selon la séquence du bas (figure 2.8). Le trihydrate peut également emprunter les deux chemins, la proportionnalité dépendant de la taille des particules.

Certains auteurs se sont penchés sur ce phénomène. En 1986, Candela et Perlmutter publient ensemble les résultats d'une étude faite sur les transformations physiques de la gibbsite (trihydrate d'alumine). Ils remarquent que leur gibbsite se transforme selon les deux séquences. Ils expliquent ce phénomène par le fait que lors du chauffage de la gibbsite, la formation de poches de boehmite internes ainsi que la diffusion de la vapeur d'eau à travers les plans fondamentaux de la particule, tendent à déstabiliser la structure de la gibbsite. Les cristaux se fissurent selon leurs plus faibles plans et le matériau se divise en une série de tranches parallèles. Cette fracture des cristaux provoque ainsi l'apparition de microcristaux de gibbsite trop petits pour se décomposer en boehmite. Ces cristaux se transforment alors en hydrates d'alumine $\rho\text{-Al}_2\text{O}_3$ ou $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$.

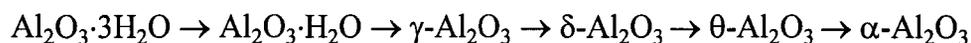
Les auteurs notent qu'à mesure que l'on réduit la pression environnante de la vapeur d'eau, la transition vers le second processus de décomposition en rho-alumine ($\rho\text{-Al}_2\text{O}_3$) survient plus tôt et on obtient ainsi un plus faible niveau de conversion en boehmite. Et à

l'inverse, à mesure que la pression de vapeur d'eau augmente la conversion en rho-alumine est complètement supprimée et le maximum de boehmite est obtenu.

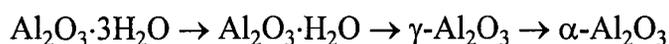
L'obtention de l'alumine ρ ou χ (khi) directement à partir de la gibbsite dépend des conditions de la réaction. L'alumine rho ou $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot (0.45-0.55)\text{H}_2\text{O}$ est obtenue lors d'un traitement sous vide à 453 kelvins, tandis que l'alumine khi ou $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ est obtenue en chauffant l'échantillon à 523 kelvins, dans l'air sec et à pression atmosphérique.

En 1991, Mehta et Kalsotra rapportent quant à eux trois hypothèses possibles pouvant expliquer le phénomène des deux séquences de transformation. Selon la première hypothèse, la gibbsite très peu cristalline se transforme en alumine alpha via la séquence χ -alumine tandis que la gibbsite bien cristallisée peut suivre les deux séquences de transformation. La deuxième hypothèse possible stipule, qu'en présence de vapeur d'eau, la gibbsite se transforme en boehmite, tandis qu'en l'absence d'une atmosphère hydrothermique, la gibbsite se transforme en χ -alumine. Finalement, la dernière hypothèse veut que l'extérieur des gros cristaux de gibbsite se transforme en χ -alumine et que cette χ -alumine contribue à la production d'une atmosphère hydrothermique dans les cristaux, ce qui provoque la transformation du noyau interne en boehmite.

Mais pour notre cas, les particules étant très grosses ($\approx 90 \mu\text{m}$) et les transformations se faisant en présence de vapeur d'eau, on peut considérer, tout comme Gordon en 1969, que la gibbsite se transforme en alumine alpha selon la première séquence seulement:



Et compte tenu du fait que la plupart des auteurs négligent les phases delta et thêta, la séquence de transformations pour l'alumine qui sera adoptée dans le présent travail est:



2.4.1 Transformations physiques de l'alumine

Transformation de la gibbsite en boehmite

En 1992, Candela et Perlmutter refont pratiquement la même étude qu'en 1986 mais cette fois sur une gibbsite qui se transforme uniquement en boehmite (première séquence sur la figure 2.8). Ils notent que les transformations chimiques sont influencées par la température, la pression de la vapeur d'eau, la taille de la particule et le contenu en impuretés. Lors de la transformation de la gibbsite en boehmite, ils remarquent l'apparition de pores. En effet lors du chauffage, ils notent que les cristaux se fissurent parallèlement à leurs plans de clivage, ce qui génère ainsi l'apparition de sites de réaction internes. À mesure que le niveau de conversion en boehmite augmente, de plus en plus de sites internes se retrouvent connectés à la surface, soit par chevauchement avec des régions déjà

connectées, soit par fracture directe vers la surface. En atteignant l'extérieur de la particule, les régions actives cessent de grossir et une fois qu'elles sont toutes connectées à l'extérieur, la conversion en boehmite cesse et les pores atteignent leur taille finale (figure 2.9).

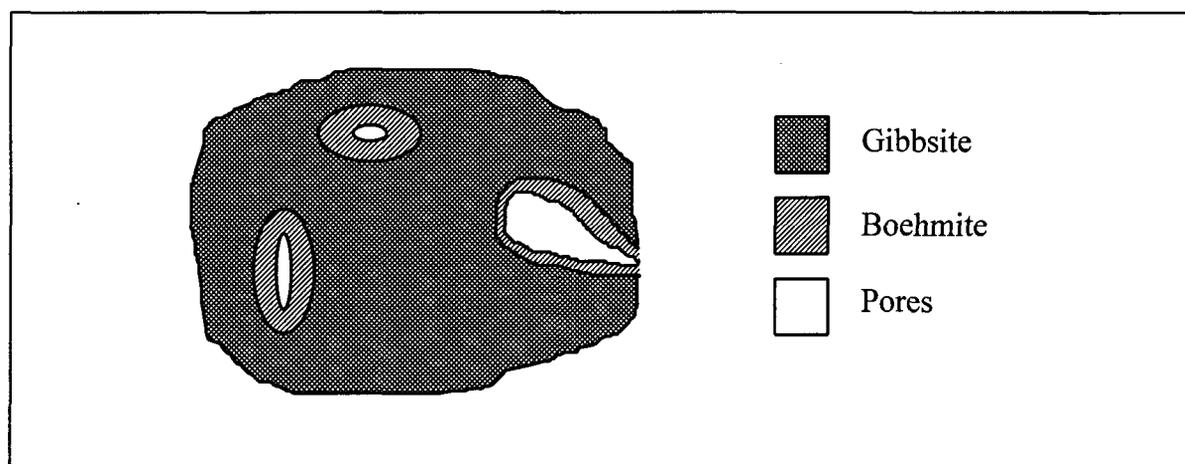


Figure 2.9 Transformation de la gibbsite en boehmite.

Les auteurs notent que le fait d'augmenter la taille de la particule de gibbsite fait augmenter le taux de formation en boehmite. Ils rapportent également que plus la pression de la vapeur d'eau entourant le matériau est élevée plus les pores ont un grand diamètre, et qu'un chauffage sous vide empêche complètement la formation de pores.

Transformation de la boehmite en alumine gamma

En 1979, Arlyuk et al., font l'étude des changements dans les propriétés et dans la taille des particules d'hydrates d'alumine durant la calcination. Ils ne donnent pas la description précise du processus de formation de l'alumine gamma mais remarquent, tout comme Candela et Perlmutter (1986,1992) que les processus de déshydratation, que ce soit pour la gibbsite ou la boehmite, sont des processus fortement intenses qui mènent à la stratification des agrégats. Ils notent que suite à ce phénomène, la phase gamma, au moment de sa formation, se retrouve avec une structure extrêmement défectueuse. Ce qui mène à une diminution de la résistance mécanique des agrégats, qui peuvent se pulvériser complètement lorsqu'on les soumet à des forces, même très faibles. Tout de suite après son apparition et jusqu'à environ 580°C, aucune nouvelle phase n'apparaît, la structure de l'alumine gamma ne faisant que se raffiner. Cette amélioration de la cristallisation fait augmenter la résistance de la structure du système cristallin et fait ainsi diminuer la tendance des agrégats à se pulvériser.

Transformation de l'alumine gamma en alumine alpha

Toujours en 1979, les mêmes auteurs (Arlyuk et al.) mentionnent que le $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ est complètement formé aux alentours de 1200-1300°C. Ils notent que la restructuration du

réseau cristallin en $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ est accompagné d'un changement de forme des agrégats, les coins pointus des cristaux de $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ s'adouciissant pour devenir des coins arrondis et lisses.

Après l'apparition de la phase alpha, il est possible, en chauffant encore plus les cristaux, de faire augmenter leur dimension. Varhegyi et al., en 1973, ont en effet étudié le phénomène en chauffant des échantillons d'alumine alpha de 1100 à 1700°C. Ils ont remarqué que le diamètre des cristaux est passé de 0.2 à 1.2 μm . Par leur étude ils ont ainsi pu établir une équation empirique pour calculer l'épaisseur, en microns, des cristaux d'alumine alpha en fonction de la température (en kelvins),

$$D_\alpha = 1070 \cdot \exp(-12780/T) \quad (2.30)$$

2.4.2 Cinétique chimique de la déshydratation du trihydrate d'alumine

Aglietti et al., en 1986, étudient les facteurs cinétiques de la déshydratation de la gibbsite en boehmite. La gibbsite commerciale a été obtenue par le procédé Bayer. Les échantillons ont été chauffés dans l'air entre 800 et 1200°C pendant une période de temps fixe à l'aide d'une fournaise électrique. Les auteurs obtiennent un facteur pré-exponentiel de $5,84 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$ ainsi qu'une énergie d'activation de 334 kJ/mol. La constante de vitesse qu'ils obtiennent est,

$$k = 5,84 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-334\,000/RT) \quad \text{h}^{-1}$$

Mehta et Kalsotra, en 1991, ont aussi étudié la cinétique de formation de la boehmite à partir de la gibbsite. La gibbsite a été chauffée à partir de 150°C dans un autoclave avec un taux de chauffage de 2 degrés à la minute. La taille de l'échantillon utilisé n'est pas donnée mais ils mentionnent que la gibbsite analysée se présente sous forme de poudre. Comme la température de chauffage de la gibbsite de cette étude correspond beaucoup plus à la température théorique de réaction (tableau 2.1), les résultats de Mehta et Kalsotra seront ceux que nous utiliserons dans le modèle.

Les auteurs obtiennent une cinétique d'ordre zéro. À partir de leurs résultats, on trouve une constante pré-exponentielle moyenne k_0 , de $2412,22 \text{ s}^{-1}$, et l'énergie d'activation obtenue est égale à $69\,416 \text{ J/mol}$. La constante de vitesse k étant exprimée en kg boehmite obtenue/kg de produit total·s, on la transforme en kg boehmite obtenue/m·s, en suivant l'explication donnée à l'annexe 3 par,

$$k(\text{adapté}) = k \cdot \rho_{\text{lit}} \cdot A_{\text{lit}} \quad (2.31)$$

où ρ_{lit} et A_{lit} sont respectivement la densité en vrac du lit et sa section transversale.

L'équation pour connaître la cinétique de formation de la boehmite à partir de la gibbsite est donc,

$$R_{\text{AlOOH formé}} = 2412,22 \cdot \exp(-69\,416/RT) \cdot \rho_{\text{lit}} \cdot A_{\text{lit}} \quad (2.32)$$

On ne peut cependant pas utiliser directement l'équation précédente pour connaître le taux de transformation de la gibbsite. En effet, la gibbsite, $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, se décompose

en une molécule de boehmite ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$) et deux molécules d'eau, de sorte que la fraction massique de gibbsite devenant de l'eau est,

$$\frac{2\text{H}_2\text{O}}{\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}} = \frac{2 \cdot (18\text{kg} / \text{kmol})}{1 \cdot (156\text{kg} / \text{kmol})} = 0,23$$

Et la fraction de gibbsite devenant de la boehmite est $1 - 0,23 = 0,77$

Donc,

$$R_{\text{AlOOH formé}} = 0,77 \cdot R_{\text{Al(OH)}_3 \text{ consommé}}$$

Ainsi, la cinétique de déshydratation de la gibbsite devient,

$$R_{\text{Al(OH)}_3 \text{ consommé}} = \frac{-R_{\text{AlOOH formé}}}{0,77} \quad (2.33)$$

Les équations (2.32) et (2.33) sont les équations utilisées dans le modèle.

2.4.3 Cinétique chimique de la déshydratation du monohydrate d'alumine

En 1965, Callister et al., étudient la décomposition de particules de boehmite (300 à 400 μm) dans une atmosphère de vapeur d'eau et d'azote entre 430 et 500°C à pression atmosphérique. Ils ne donnent aucun résultat sur les vitesses de transformation mais mentionnent l'obtention d'une énergie d'activation de 293 090 J/mol. Ils concluent que la pression a une influence sur l'énergie d'activation puisqu'en 1954, Eyraud et Goton qui ont effectué les mêmes expérimentations mais à basse pression (0,133 pascal), ont obtenu une énergie d'activation de 175 854 J/mol.

En 1987, Stacey compare la cinétique de décomposition de la gibbsite avec celle de la boehmite. Pour avoir des échantillons de même taille, la poudre de boehmite, qui était beaucoup plus fine que celle de la gibbsite, a été préalablement compressée et concassée afin de rendre les grains de la même taille que ceux de la gibbsite.

L'équation cinétique que Stacey a obtenue pour la déshydratation de la boehmite est la suivante:

$$\frac{dC}{dt} = -3,6 \cdot 10^6 \cdot \exp(-272000 / RT) \cdot C \cdot p_{H_2O}^{-0,4} \quad (2.34)$$

Il mentionne que c'est une réaction d'ordre un où C représente la concentration,

$$C = \frac{\text{kg boehmite résiduelle}}{\text{kg boehmite initiale}}$$

En appliquant le résultat présenté à l'équation (2.31), le taux de déshydratation de la boehmite devient donc,

$$R_{\text{AlOOH consommé}} = -3,6 \cdot 10^{16} \cdot \exp(-272\,000/RT) \cdot p_{H_2O}^{-0,4} \cdot \frac{G_{\text{AlOOH résiduelle}}}{G_{\text{lit}}} \cdot \rho_{\text{lit}} \cdot A_{\text{lit}} \quad (2.35)$$

On sait que le monohydrate d'alumine, en se décomposant, perd une molécule d'eau par molécule d'alumine gamma produite:



La fraction massique de boehmite devenant de l'eau est donc:

$$\frac{H_2O}{Al_2O_3 \cdot H_2O} = \frac{18 \text{ kg / kmol}}{120 \text{ kg / kmol}} = 0,15$$

Et la fraction massique de boehmite devenant de l'alumine gamma est de 0,85.

L'équation de formation de l'alumine gamma devient donc:

$$R_{\gamma-Al_2O_3 \text{ formé}} = -0,85 \cdot R_{AlOOH \text{ consommé}} \quad (2.36)$$

Les équations (2.35) et (2.36) sont les équations utilisées dans le modèle.

2.4.4 Cinétique chimique de transformation de l'alumine gamma en alumine alpha

En 1971, Steiner et al. étudient la cinétique de réaction de la phase gamma à la phase alpha. Ils ont utilisé un échantillon d'alumine gamma pur à 99,95 % ne contenant initialement aucune trace d'alumine alpha. Les tests ont été effectués à différentes températures dans un four préalablement chauffé à la température désirée. Ils obtiennent une cinétique de réaction d'ordre zéro où k est exprimé en kg/kg.s.

$$k = \frac{\text{kg } \alpha - Al_2O_3 \text{ form}}{\text{kg solide total} \cdot \text{s}}$$

Ils obtiennent également une constante pré-exponentielle moyenne de $2,04 \cdot 10^{14}$ /s et une énergie d'activation de 485 692 J/mol. L'équation pour la cinétique de formation de l'alumine alpha est donc,

$$R_{\alpha-Al_2O_3 \text{ formé}} = 2,04 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-485 \ 692/RT) \cdot \rho_{lit} \cdot A_{lit} \quad (2.37)$$

Et l'équation pour la vitesse de consommation de l'alumine gamma devient directement,

$$R_{\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3 \text{ consommé}} = -R_{\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3 \text{ formé}} \quad (2.38)$$

Les équations (2.37) et (2.38) sont les équations utilisées dans le modèle.

Le tableau suivant résume l'ensemble des équations de cinétique utilisées dans le modèle pour chaque réaction, ainsi que les énergies d'activation et les constantes pré-exponentielles. Afin de compléter le tout, la cinétique de l'évaporation de l'eau a été ajoutée.

Tableau 2.3 Paramètres cinétiques utilisés dans le modèle.

Réactions	Constante pré-exponentielle k_0 (s^{-1})	Énergie d'activation E (J/mol)	Équation cinétique (kg/m·s)
$H_2O_{(l)} \rightarrow H_2O_{(g)}$	$1,967 \cdot 10^4$	42 020	$R_w = -k \cdot \frac{G_w}{V_{lit}}$
$Al_2O_3 \cdot 3H_2O \rightarrow Al_2O_3 \cdot H_2O + 2 H_2O_{(g)}$	2 412,22	69 416	$R_{Al(OH)_3} = \frac{-k \cdot \rho_{lit} \cdot A_{lit}}{0,77}$
$Al_2O_3 \cdot H_2O \rightarrow \gamma\text{-}Al_2O_3 + H_2O_{(g)}$	$3,6 \cdot 10^{16}$	272 000	$R_{AlOOH} = -k \cdot \frac{G_{AlOOH}}{G_{lit}} \cdot \rho_{lit} \cdot A_{lit}$
$\gamma\text{-}Al_2O_3 \rightarrow \alpha\text{-}Al_2O_3$	$2,04 \cdot 10^{14}$	485 692	$R_{\gamma\text{-}Al_2O_3} = -k \cdot \rho_{lit} \cdot A_{lit}$

où $k = k_0 \cdot \exp(-E/RT)$

2.4.5 Chaleurs de réaction

La chaleur d'une réaction, ΔH , représente la différence d'enthalpie entre les produits et les réactifs d'une réaction chimique. Lorsque la somme des enthalpies des produits est plus élevée que la somme des enthalpies des réactifs, la réaction est endothermique, c'est-à-dire qu'elle nécessite constamment un apport de chaleur pour pouvoir s'effectuer complètement. Et lorsque la somme des enthalpies des produits est plus faible que la somme des enthalpies des réactifs, la réaction est exothermique, c'est-à-dire qu'une fois initiée par une étincelle ou une flamme vive, la réaction se produit d'elle-même en libérant une certaine quantité de chaleur tout au long de son évolution.

$\Delta H > 0$; réaction endothermique

$\Delta H < 0$; réaction exothermique

La chaleur d'une réaction est rarement trouvée telle quelle dans la littérature. C'est plutôt la chaleur de réaction standard à 25°C, ΔH^0 , qui est rencontrée. Lorsque la chaleur de réaction à 25°C est connue, la chaleur de réaction à une température T_1 se calcule par,

$$\Delta H = \Delta H^0 + \int_{T_0}^{T_1} \Delta C_p \cdot dT \quad (2.39)$$

où,

$$\Delta H^0 = \sum H^0_{\text{produits}} - \sum H^0_{\text{réactifs}}$$

$$\Delta C_p = \sum C_p_{\text{produits}} - \sum C_p_{\text{réactifs}} \quad , \quad T_0 = 25^\circ\text{C}$$

ΔC_p représente la chaleur massique de la réaction et H^0 l'enthalpie standard d'une liaison chimique.

Pour ce qui est de l'évaporation de l'eau, Lyons et al.(1962) donnent un ΔH constant et égal à 2257 kJ / kg. Mais pour ce qui est des transformations du solide, Gordon rapporte les chaleurs massiques C_p de chaque constituant et les chaleurs de réactions à 25°C, ΔH^0 (tableaux 2.4 et 2.5), à partir desquelles les chaleurs de réaction corrigées, ΔH , peuvent être obtenues.

Tableau 2.4 Chaleur massique des différentes phases de l'alumine.

Éléments	C_p (cal/gmol·K) (T en kelvins)
$Al_2O_3 \cdot 3H_2O$	$17,3 + 0,0912T$
$Al_2O_3 \cdot H_2O$	$28,87 + 0,0084T$
Al_2O_3	$27,49 + 0,00282T - 838\ 000/T^2$
$H_2O_{(g)}$	$7,219 + 2,374 \cdot 10^{-3}T + 2,67 \cdot 10^{-7}T^2$

Tableau 2.5 Chaleurs de réaction à 25 °C.

Réactions	ΔH^0 (cal/gmol)
1- $Al_2O_3 \cdot 3H_2O \rightarrow Al_2O_3 \cdot H_2O + 2 H_2O_{(g)}$	27 100
2- $Al_2O_3 \cdot H_2O \rightarrow \gamma-Al_2O_3 + H_2O_{(g)}$	28 370
3- $\gamma-Al_2O_3 \rightarrow \alpha-Al_2O_3$	-2 850

La chaleur massique pour la déshydratation du trihydrate en monohydrate d'alumine se calcule par,

$$\begin{aligned}\Delta C_p &= C_{p_{AlOOH}} + 2C_{p_{H_2O(g)}} - C_{p_{Al(OH)_3}} \\ &= 26,01 - 78,02 \cdot 10^{-3}T + 5,34 \cdot 10^{-7}T^2\end{aligned}$$

$$\int_{T_0=298,15}^{T_1} \Delta C_p \cdot dT = 26,01(T_1-298,15) - 0,03901(T_1^2-298,15^2) + 1,78 \cdot 10^{-7}(T_1^3-298,15^3)$$

La chaleur de réaction devient donc, pour une température quelconque T_1 ,

$$\begin{aligned}\Delta H_1 &= 27\,100 + 26,01(T_1-298,15) - 0,03901(T_1^2-298,15^2) + 1,78 \cdot 10^{-7}(T_1^3-298,15^3) \quad (2.40) \\ &\quad \text{(cal/gmol)} \\ &\quad \text{(T en K)}\end{aligned}$$

Note: $J/kg = \text{cal/gmol} \cdot 4,184 J/\text{cal} \cdot x \text{ gmole/g} \cdot 1000 \text{ g/kg}$

Pour ce qui est de la déshydratation du monohydrate d'alumine en alumine gamma, on obtient à T_2 l'intégrale suivante pour la chaleur massique,

$$\begin{aligned}\Delta C_p &= C_{p_{Al_2O_3}} + C_{p_{H_2O(g)}} - C_{p_{AlOOH}} \\ \int_{T_0=298,15}^{T_2} \Delta C_p \cdot dT &= 5,839(T_2-298,15) - 1,603 \cdot 10^{-3}(T_2^2-298,15^2) + 0,89 \cdot 10^{-7}(T_2^3-298,15^3) \\ &\quad + 8,38 \cdot 10^5(T_2^{-1} - 298,15^{-1})\end{aligned}$$

Et la chaleur de réaction pour cette deuxième transformation devient,

$$\begin{aligned}\Delta H_2 &= 28\,370 + 5,839(T_2-298,15) - 1,6 \cdot 10^{-3}(T_2^2-298,15^2) + 8,9 \cdot 10^{-6}(T_2^3-298,15^3) \\ &\quad + 8,38 \cdot 10^5(T_2^{-1}-298,15^{-1}) \quad (2.41) \\ &\quad \text{(cal/gmol)}\end{aligned}$$

Pour ce qui est finalement de la troisième et dernière transformation dans le lit de solide, on remarque que sa chaleur de réaction ne change pas avec la température. En effet, comme Gordon pose la même chaleur massique pour l'alumine gamma et l'alumine alpha, la chaleur massique de la réaction est nulle,

$$\Delta C_p = C_{p_{\alpha-Al_2O_3}} - C_{p_{\gamma-Al_2O_3}} = 0$$

Donc,

$$\Delta H_3 = -2\,850 \text{ (cal/gmol)} \quad (2.42)$$

2.4.6 Techniques utilisées pour augmenter les vitesses de réaction

Concassage de la gibbsite

Aglietti et al., en 1986, ont fait l'étude de l'influence de prétraitements mécaniques sur les transformations de la gibbsite. Ils ont moulu la gibbsite et ont remarqué que ceci contribuait à la formation d'un matériau très actif capable de se transformer en $\alpha-Al_2O_3$ à moins de 1100 kelvins. Ils notent que le mécanisme de la réaction et l'énergie d'activation sont peu affectés, mais que le facteur pré-exponentiel d'Arrhénius et la séquence de phases intermédiaires le sont davantage.

Le premier échantillon étudié, G^0 , est un échantillon de gibbsite sous forme cristalline obtenue par le procédé Bayer. Le deuxième échantillon, G^* , est un échantillon obtenu après un concassage de G^0 pendant 18 minutes. Le tableau suivant montre les caractéristiques de chacun des matériaux ainsi que les effets sur les facteurs cinétiques de ce prétraitement.

Tableau 2.6 Effets d'un prétraitement mécanique sur la cinétique.

Caractéristiques	G^0	G^*
Analyse chimique: % Al(OH) ₃	97	97
% Na ₂ O	0,60	0,63
% SiO ₂	0,05	0,05
Taille de la particule (µm)	59	25
Facteur pré-exponentiel k_0 (h ⁻¹)	$5,84 \cdot 10^{12}$	$11,65 \cdot 10^{12}$
Énergie d'activation (kJ/mol)	334	310

On remarque donc que le fait de moudre les particules de gibbsite avant le chauffage, permet d'augmenter la vitesse de réaction en faisant légèrement diminuer l'énergie d'activation et en faisant considérablement augmenter la constante pré-exponentielle, k_0 . Les auteurs expliquent ce phénomène par le fait que la grande concentration des défauts structuraux provoqués par le traitement mécanique peut fournir un plus grand nombre de sites favorables aux réactions.

Ajout de fluorure d'aluminium

En 1979, Zivkovic et al., publient un article traitant de l'effet du fluorure d'aluminium, AlF_3 , sur la calcination des hydrates d'alumine. Ils y mentionnent que l'ajout de AlF_3 dans le solide, accélère légèrement les réactions de déshydratation en abaissant la température à laquelle ces réactions se terminent. L'effet le plus notable est cependant localisé au niveau de la transformation de l'alumine gamma en alumine alpha. En effet la température du début de cette réaction se trouve abaissée de 200°C , et ce pour un ajout de 1% de AlF_3 dans l'hydrate. Par contre, une augmentation de AlF_3 de plus de 1% n'a plus aucun effet sur cette température. Cet abaissement de température serait causé par l'apparition d'une nouvelle phase vers 700 kelvins, la phase bêta. Selon les auteurs, il est possible que cette phase influence de façon catalytique la cristallisation du $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, lequel se retrouve de plus avec une surface modifiée après sa calcination.

Les énergies d'activation pour les déshydratations du trihydrate et du monohydrate se retrouvent légèrement abaissées lorsqu'on passe de 0 à 1% de AlF_3 , mais elles sont moins affectées à des pourcentages supérieurs. Pour ce qui est des chaleurs de réaction, les auteurs ne remarquent, à toute fin pratique, aucune influence suite à l'addition de AlF_3 .

Tableau 2.7 Effet du AlF_3 sur les énergies d'activation des phases de déshydratation.

	0% AlF_3	1% AlF_3	5% AlF_3	10% AlF_3
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ E(kJ/mol)	204	180	175	171
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ E(kJ/mol)	140	109	132	126

Tableau 2.8 Effet du AlF_3 sur les chaleurs de réaction.

	0% AlF_3	1% AlF_3	5% AlF_3	10% AlF_3
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ΔH^0 (kJ/mol)	64	66	64	66
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ΔH^0 (kJ/mol)	42	41	41	43

Avec l'ajout de fluorure d'aluminium, les températures auxquelles les déshydratations débutent ne sont aucunement influencées. Ce sont seulement les températures auxquelles celles-ci se terminent qui le sont. En ajoutant jusqu'à 1% de AlF_3 , on abaisse les énergies d'activation et les températures de fin de réaction se trouvent par le fait même diminuées. Par contre, au-delà de 1% de AlF_3 , les températures se stabilisent ou reviennent à leur valeur initiale.

Tableau 2.9 Effet du AlF_3 sur les températures de fin de réaction.

	0% AlF_3	1% AlF_3	5% AlF_3	10% AlF_3
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ T fin réaction (K)	536	528	527	529
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ T fin réaction (K)	726	711	715	727

2.5 La combustion du gaz naturel

La combustion dans le four de calcination d'alumine est aussi un aspect important du modèle, car le four a constamment besoin d'être chauffé pour que les transformations du solide aient lieu. Ceci est en somme une des plus grandes différences avec le four de calcination de coke. En effet, dans ce dernier, il faut chauffer jusqu'à ce que les réactions débutent. Par la suite, les réactions exothermiques fournissent assez de chaleur au système pour que celui-ci finisse par s'autosuffire en énergie.

La chaleur nécessaire aux transformations dans le four de calcination d'alumine est fournie par une flamme de gaz naturel qui est produite juste au-dessus du solide. L'oxygène requis pour brûler le gaz naturel provient de l'air secondaire qui entre librement dans le four ainsi que de l'air primaire introduit avec le gaz naturel au niveau du brûleur.

Les brûleurs actuellement utilisés pour les fours de calcination à l'usine Vaudreuil, sont des brûleurs concentriques d'environ 30 centimètres de diamètre, où le gaz naturel est injecté par un trou annulaire de $2,922 \text{ cm}^2$, et l'air primaire par une série de trous disposés autour de l'entrée du gaz naturel (figure 2.10). L'aire totale par laquelle entre l'air primaire est de $90,63 \text{ cm}^2$.

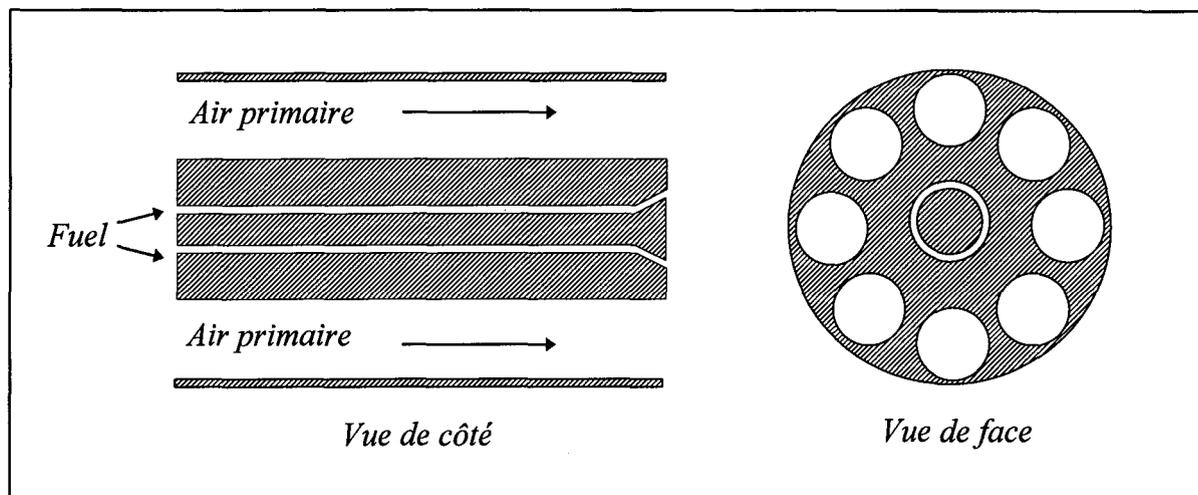
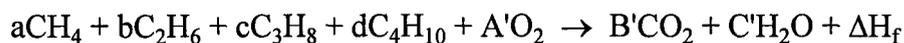


Figure 2.10 Schéma du brûleur.

Le gaz naturel est composé principalement de méthane, mais aussi, en quantités moindres, d'éthane, de propane et de butane. On suppose que la combustion est complète avec formation de gaz carbonique et de vapeur d'eau.



où,

$$A' = 2a + 7/2 b + 5c + 13/2 d$$

$$B' = a + 2b + 3c + 4d$$

$$C' = 2a + 3b + 4c + 5d$$

La composition du gaz naturel utilisé pour le chauffage du four d'alumine étant la même que pour le four de coke, on utilisera ici les mêmes valeurs de coefficients que Perron (1989),

$$a = 0,962 \quad c = 0$$

$$b = 0,014 \quad d = 0$$

La chaleur de combustion devient alors,

$$\Delta H_f = a\Delta H_a + b\Delta H_b + c\Delta H_c + d\Delta H_d$$

où,

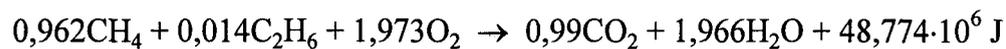
$$\Delta H_a = 50,01 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$$

$$\Delta H_b = 47,484 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$$

$$\Delta H_c = 46,353 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$$

$$\Delta H_d = 45,714 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$$

et la réaction de combustion,



Comme il a déjà été mentionné, l'oxygène pris pour brûler le gaz naturel provient de l'air primaire et de l'air secondaire. Il peut donc s'avérer intéressant de calculer la quantité d'air nécessaire à la réaction. Sachant que l'air atmosphérique est composé, sur une base massique, de 23% d'oxygène et de 77% d'azote, et sur une base molaire, de 21% d'oxygène et de 79% d'azote, on trouve que le nombre de moles d'air nécessaires à la réaction est,

$$N_a = 1,973 / 0,21 = 9,395 \text{ moles}$$

On sait de plus que l'azote qui entre avec l'air n'intervient dans aucune réaction, de sorte que tout l'azote qui entre se retrouve dans les gaz de combustion avec le gaz carbonique et la vapeur d'eau. Le nombre de moles d'azote dans les gaz de combustion devient donc,

$$N_{N_2} = 0,79 \times 9,395 \text{ moles d'air} = 7,422 \text{ moles}$$

Notons qu'afin de réduire les quantités d'azote, l'usine opte de plus en plus pour l'ajout d'oxygène liquide avec le gaz naturel.

Il peut s'avérer souvent plus commode d'exprimer les quantités sur une base massique. Les masses de chaque espèce rapportées à celle du gaz naturel deviennent alors,

$$\begin{aligned} \frac{\text{kg O}_2}{\text{kg gaz naturel}} &= \frac{N_{O_2} \cdot M_{O_2}}{N_{CH_4} \cdot M_{CH_4} + N_{C_2H_6} \cdot M_{C_2H_6}} \\ &= \frac{1,973 \times 31,9988}{(0,962 \times 16,0426) + (0,014 \times 30,0694)} = 3,982 \end{aligned}$$

$$\frac{\text{kg CO}_2}{\text{kg gaz naturel}} = \frac{N_{CO_2} \cdot M_{CO_2}}{N_{CH_4} \cdot M_{CH_4} + N_{C_2H_6} \cdot M_{C_2H_6}} = 2,748$$

$$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg gaz naturel}} = \frac{N_{H_2O} \cdot M_{H_2O}}{N_{CH_4} \cdot M_{CH_4} + N_{C_2H_6} \cdot M_{C_2H_6}} = 2,234$$

Comme on a besoin de 3,982 kg d'oxygène pour brûler 1 kg de gaz naturel et que l'on sait que l'air est constitué, sur la base massique, de 23% d'oxygène, la quantité d'air nécessaire pour brûler 1 kg de fuel devient donc,

$$\frac{\text{kg air}}{\text{kg gaz naturel}} = \frac{\text{kg O}_2}{0,23} = \frac{3,982}{0,23} = 17,313$$

Ce ratio, qui représente la quantité d'air minimale à fournir au gaz naturel pour obtenir une combustion complète, s'appelle le ratio stoechiométrique air/fuel.

En usine, cependant, on est pratiquement toujours en surplus d'air, c'est-à-dire que le ratio air/fuel dépasse le ratio stoechiométrique de 17,313. Ceci est dû au fait que la quantité d'air secondaire qui entre dans le four est incontrôlable. Il est alors plus prudent d'injecter plus d'air primaire que requis pour ainsi éviter d'être sous le ratio stoechiométrique et du même coup obtenir une combustion incomplète. Il faut par contre bien doser la quantité d'air primaire introduite car trop d'air fait diminuer la température de la flamme et peut même, à la limite, l'inhiber complètement.

À partir de la quantité d'air brûlant avec le gaz naturel, on peut déterminer la richesse ϕ de la flamme par,

$$\phi = (G_f / G_a) \cdot R_s \quad (2.43)$$

où R_s représente le ratio stoechiométrique air/fuel.

$\phi = 1$: flamme stoechiométrique

$\phi < 1$: flamme pauvre en gaz naturel

$\phi > 1$: flamme riche en gaz naturel

$\phi < 0,5$ ou $\phi > 1,5$: pas de flamme

La richesse est déterminante pour la température de fin de combustion de la flamme. Le graphique 2.11 montre l'effet de la richesse sur la température.

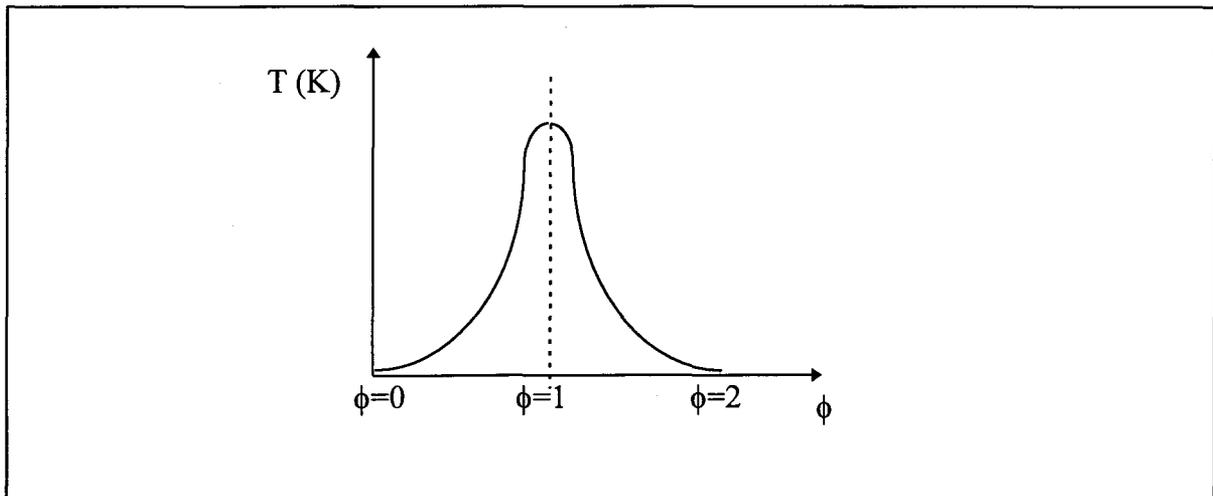


Figure 2.11 Graphique de la température de fin de combustion en fonction de la richesse.

On voit donc tout l'intérêt d'introduire le gaz naturel et l'air à un ratio le plus près possible du ratio stoechiométrique afin d'obtenir le chauffage maximal. La quantité totale n'influence pas la température de fin de combustion, c'est le rapport de chaque espèce qui importe.

Pour ce qui est du gradient de température dans une flamme, il peut être observé expérimentalement que les températures les plus chaudes sont obtenues sur le pourtour de la flamme et diminuent en direction du centre (figure 2.12).

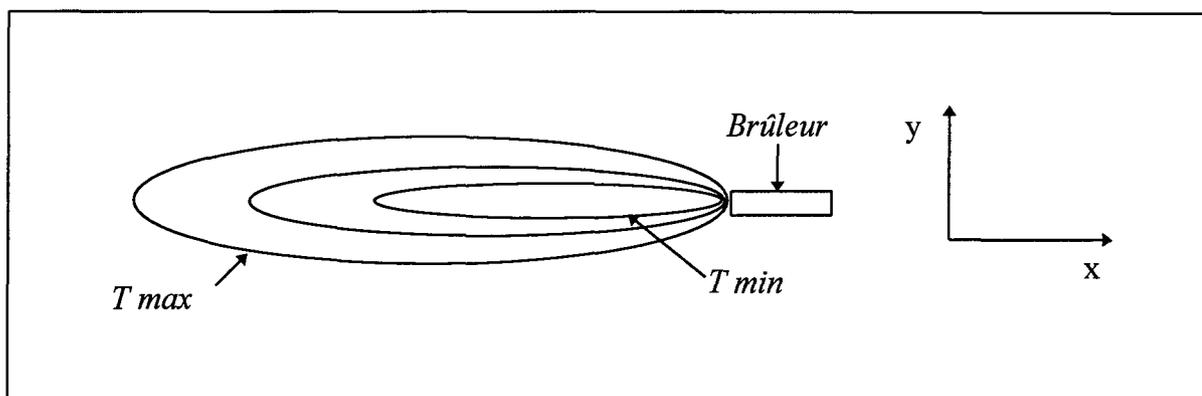


Figure 2.12 Gradient de température dans une flamme.

Pour un modèle à une dimension, suivant l'axe x , la distribution de températures le long de la flamme varie d'une température très élevée au nez de la flamme pour diminuer progressivement jusqu'au brûleur. Selon Metghalchi et Keck (1981), la température au nez de la flamme, qui est aussi appelée température de fin de combustion, se calcule par:

$$T_{\text{fin combustion}} = 870 + \phi \cdot R_2 \quad (2.44)$$

où,

$$R_2 = 15 + \phi \cdot (3631 - 2257 \cdot \phi)$$

Et la température de flamme adiabatique, qui représente la température de la flamme dans le cas où celle-ci ne transmet aucune chaleur, est, pour le gaz naturel, de 2000°C.

Dans les fours actuellement en opération à l'usine Vaudreuil, les flammes rencontrées sont des flammes de diffusion turbulentes, c'est-à-dire des flammes où l'air et le gaz naturel ne sont pas mélangés avant leur entrée dans le four.

Chigier et Beér (1972), rapportent que la longueur d'une flamme de diffusion turbulente dépend principalement du type de combustible utilisé ainsi que du diamètre du brûleur. Ils citent l'équation semi-empirique suivante de Guenther (1966),

$$L_f = 6 \cdot d_b \cdot (Rs+1) \cdot (\rho_f/\rho_{pc})^{1/2} \quad (2.45)$$

où d_b est le diamètre du brûleur et ρ_f et ρ_{pc} les densités respectives du combustible et des produits de combustion. Ils mentionnent que pour une flamme de gaz naturel le rapport L_f/d_b se situe autour de 200. La relation (2.45) ne tient cependant pas compte de l'allongement de la flamme provoqué par l'air primaire.

Gorog, en 1983, utilise la même équation que Beér et Chigier mais tient compte de l'effet de l'air primaire en remplaçant la densité du gaz naturel ρ_f par la densité équivalente ρ_{eq} , et le diamètre du brûleur d_b par le diamètre équivalent d_{eq} .

$$\rho_{eq} = \frac{G_f + G_{ap}}{\frac{G_f}{\rho_f} + \frac{G_{ap}}{\rho_{ap}}} \quad (2.46)$$

$$d_{eq} = \frac{G_f + G_{ap}}{((U_f^2 + U_{ap}^2) \cdot \pi \cdot \rho_{eq})^{1/2}} \quad (2.47)$$

L'équation pour la détermination de la longueur de la flamme devient donc,

$$L_f = 6 \cdot d_{eq} \cdot (Rs+1) \cdot (\rho_{eq}/\rho_{pc})^{1/2} \quad (2.48)$$

Cette équation de flamme est celle utilisée dans le modèle.

L'effet de confinement d'une flamme peut également influencer la longueur totale de celle-ci. En effet, lorsqu'une flamme de diffusion turbulente se trouve confinée dans une enceinte, la longueur de la flamme augmente lorsqu'elle touche à la paroi du four. Tucker et Rhine (1991) donnent une relation pour l'allongement d'une flamme confinée dans une enceinte.

$$\frac{L_{f,c}}{L_f} = 0,32 \cdot (\eta)^{1/2} + 0,48 \quad (2.49)$$

où le paramètre de Craya-Curtet, η , s'exprime de la façon suivante:

$$\eta = \frac{G_f}{G_{pc}} + \frac{G_a}{2 \cdot G_{pc}} - \frac{1}{2} \quad (2.50)$$

Les auteurs donnent cependant certaines conditions pour l'utilisation de ce paramètre:

- le jet est simple et s'étend le long d'un axe d'une chambre de combustion cylindrique;
- l'excès d'air se situe entre 2 et 5%;
- $4 \leq \eta \leq 25$;
- $0,2 \leq \frac{r_{brûleur}}{r_{four}} \leq 0,35$.

Si une seule de ces conditions n'est pas respectée, la relation (2.49) pour le confinement d'une flamme peut donner des erreurs significatives et doit être utilisée avec précaution.

Dans le modèle, le jet de combustible se compose en fait de deux jets concentriques (air et gaz naturel), les excès d'air sont de 18 et de 10% pour les fours 3 et 5 respectivement, les paramètres de Craya-Curtet sont de 309,4 et de 450,3 et finalement les rapports rayon brûleur / rayon four sont de 0,055 et de 0,0477. On voit donc qu'aucune des quatre conditions n'est respectée. L'effet du confinement ne sera donc pas considéré et l'équation pour la longueur de la flamme demeure, pour le modèle, la relation (2.48).

Pour ce qui est du taux de combustion du gaz naturel, on supposera qu'il est constant sur toute la longueur de la flamme. Il en sera de même pour le taux de consommation de l'oxygène et les taux de production du gaz carbonique et de la vapeur d'eau. Les équations de cinétique de combustion utilisées dans le modèle, qui ne sont valides que dans la zone de flamme, sont donc,

$$R_f = \frac{G_f}{L_f} \quad (2.51)$$

$$R_{O_2} = \frac{G_{O_2}}{L_f} \quad (2.52)$$

$$R_{CO_2} = \frac{G_{CO_2}}{L_f} \quad (2.53)$$

$$R_{H_2O} = \frac{G_{H_2O}}{L_f} \quad (2.54)$$

$$R_{N_2} = 0 \quad (2.55)$$

2.6 La poussière

Les modèles mathématiques pour le four de calcination d'alumine élaborés auparavant négligeaient, pour la plupart, l'effet du poussiérage. Or, selon le taux de poussière présent dans le gaz, celle-ci peut faire augmenter considérablement toutes les propriétés du gaz telles que la chaleur massique, la conductivité thermique, la densité ainsi que l'émissivité.

Deux modèles de production de poussière reliés à l'alumine ont pu être tirés de la littérature. Le premier, élaboré par Manitius et al. en 1974, provient d'un mélange d'équations élaborées par Khodorov (1961) et Pysiak (1965) et d'observations expérimentales.

$$R_d = \frac{1}{L_T} \cdot \frac{A_{gs}}{A_{gs,i}} \cdot 0.4 \cdot \left(\frac{V_g^2}{g \cdot D_i} \right)^{0.75} \cdot \left(\frac{V_g \cdot \mu_g \cdot \rho_g}{10^6 \cdot g \cdot d_z^2 \cdot \rho_s} \right)^{1.5} \cdot \left(\frac{G_g}{N} \right) \quad (2.56)$$

Le taux de poussiérage R_d , est exprimé en kg de poussière/m.s. Le sous-indice i pour l'aire d'échange entre le gaz et le solide représente l'aire d'échange initiale (à l'entrée du four), et le paramètre de distribution des particules, N , est donné par Manitius et al. comme étant égal à 3,75.

Le second modèle, élaboré par Tackie et al. en 1989, provient entièrement de données expérimentales. Or, en plus de tenir compte de la vitesse du gaz, le modèle tient

compte de la vitesse de rotation du four, ce qui n'est pas le cas pour le modèle de Manitius et al.(1974). La relation de poussierage, qui est applicable au four actuel, provient de tests expérimentaux faits sur de l'alumine ayant une densité en vrac de 1025 kg/m^3 (porosité de 74%).

$$R_d = \frac{k \cdot V_g^a \cdot \omega^b \cdot C_f^c \cdot A_{gs}^d}{L_T} \quad (2.57)$$

Le tableau 2.10 donne les paramètres de la relation.

Tableau 2.10 Tableau de poussierage de Tackie et al. (1989).

Type de mur	Paramètres de l'équation (2.57)				
	$k \cdot 10^6$	a	b	c	d
Doux	53,81	4,45	0,055	1,0	2,14
Rude	20,50	4,70	0,264	1,0	1,68

Afin d'établir une comparaison entre les deux modèles, les relations (2.56) et (2.57) ont toutes les deux été utilisées dans le modèle. La discussion des résultats obtenus sera faite au chapitre suivant.

2.7 Transferts de chaleur

Le solide qui est chauffé dans le four reçoit sa chaleur du gaz et du mur. Comme on pourra le voir sur la prochaine figure (figure 2.13), le gaz transfère sa chaleur au solide et au

mur par rayonnement et convection, tandis que le mur transfère sa chaleur au solide par rayonnement et par conduction. Puisque le four tourne, le solide n'est pas toujours en contact avec la même portion de mur. Chaque portion de mur ne peut donc transférer sa chaleur par rayonnement et par conduction de façon simultanée. La portion en contact avec le solide échange donc de la chaleur par conduction avec le fond du solide et l'autre portion échange de la chaleur par rayonnement avec la surface de solide exposée. Afin de simplifier le modèle, on supposera que la température rencontrée sur le contour de la paroi est constante.

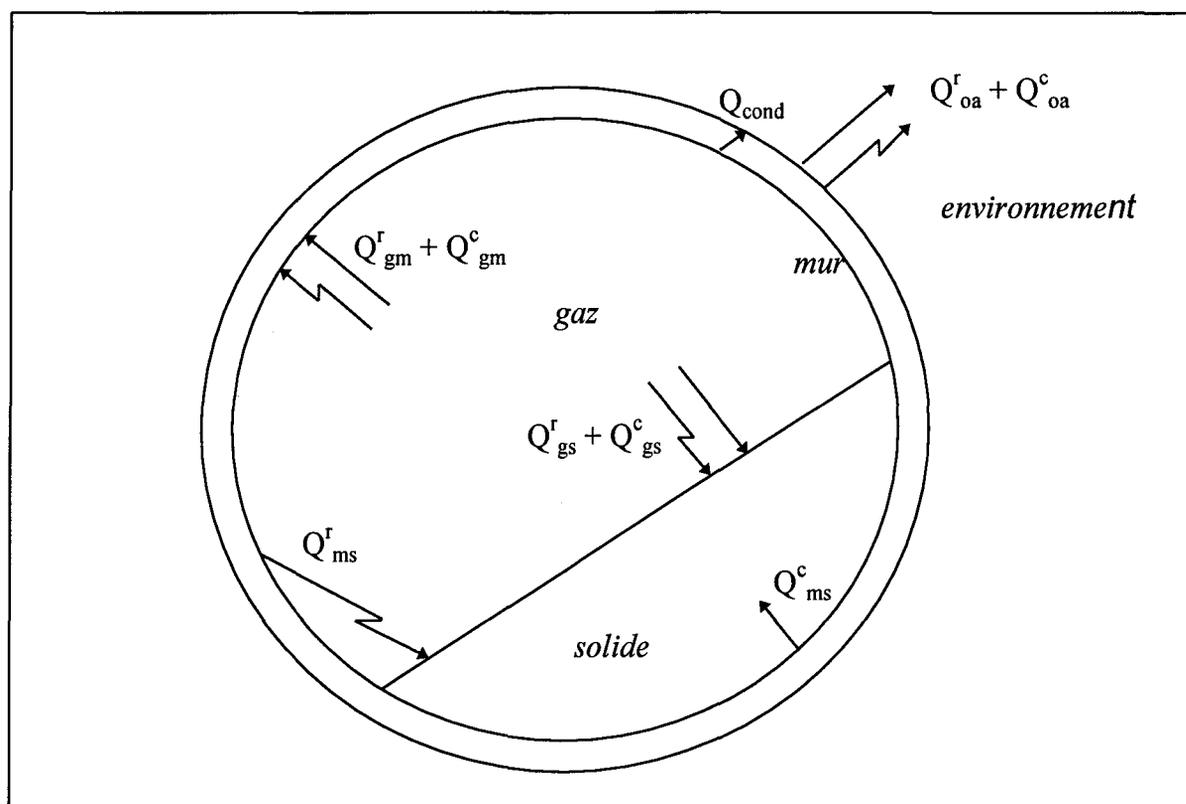


Figure 2.13 Transferts de chaleur dans le four.

Comme on peut le voir sur la figure précédente, le four subit également des pertes de chaleur vers l'extérieur, les pertes étant plus ou moins importantes selon l'isolation thermique du four. La chaleur traverse la paroi par conduction pour être ensuite perdue vers l'environnement par rayonnement et par convection.

Il peut s'avérer difficile de déterminer des coefficients de transfert de chaleur adéquats, compte tenu du fait que le four étudié est tournant et que le solide à l'intérieur est en continu mouvement. Viola et al., en 1986, utilisent pour leur modèle de four rotatif de calcination d'alumine, des coefficients de transfert de chaleur globaux qui tiennent compte à la fois du rayonnement et de la convection (ou de la conduction selon le cas). Puisque ces coefficients ont été utilisés pour un modèle très semblable au nôtre, les équations de Viola et al. seront utilisées ici. Or, afin de calculer adéquatement les coefficients de transfert de chaleur ainsi que les aires d'échange, il est auparavant primordial de connaître certains paramètres reliés au solide, au gaz et à la paroi. Ces paramètres sont énumérés dans le tableau qui suit.

Tableau 2.11 Paramètres reliés au solide.

Paramètres	Équations	Sources
Temps de résidence du solide dans le four (min)	$\tau = \frac{0,19 \cdot L_T}{N \cdot d_i \cdot S}$	Riffaud et al. (1972)
Fraction de solide dans le four	$X = \frac{0,154 \cdot G_{lit} \cdot (\varphi + 24)}{\pi \cdot r_i^3 \cdot S \cdot N \cdot \rho_{lit}}$	Friedman et Marshall (1949)
Hauteur du lit de solide (m)	$h = r_i \cdot (2 \cdot X)^{1/4}$	Kramers et Croockewit (1952)
Angle de remplissage (deg)	$\alpha = 2 \cdot \cos^{-1}(1 - h/r_i)$	—
Vitesse du lit d'alumine (m/s)	$V_{lit} = \frac{100 \cdot N \cdot S \cdot d_i}{0,308 \cdot 60 \cdot (\varphi + 24)}$	Viola et al. (1986)
Émissivité du lit	$\epsilon_{lit} = (-7,051 \cdot 10^{-4} \cdot T_s) + 1,164$	Gordon (1969)

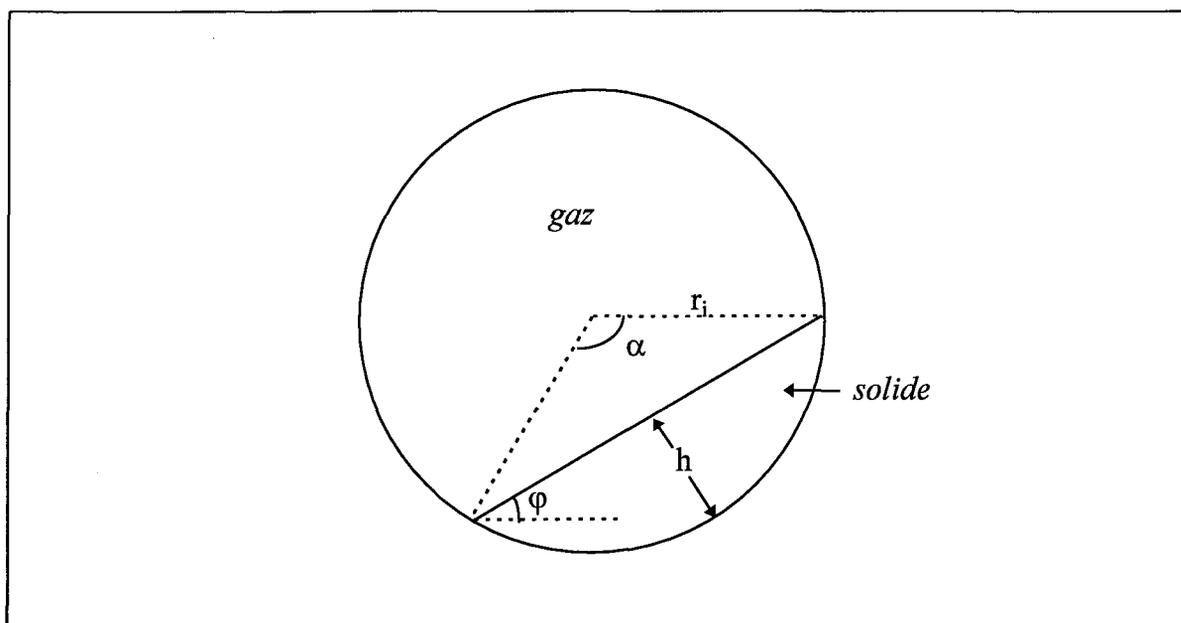


Figure 2.14 Coupe transversale du four.

Tableau 2.12 Paramètres reliés au gaz (Perron, 1989)

Paramètres	Équations
Chaleur massique (J/kg·K)	$C_{p_g} = \sum_{i=1}^6 (G_i \cdot C_{p_i}) / G_g$
Densité (kg/m ³)	$\rho_g = \sum_{i=1}^6 (G_i \cdot \rho_i) / G_g$
Conductivité thermique (W/m·K)	$k_g = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \cdot k_i}{\sum_{j=1}^n x_j \cdot \Phi_{ij}}$
Viscosité dynamique (kg/m·s)	$\mu_g = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \cdot \mu_i}{\sum_{j=1}^n x_j \cdot \Phi_{ij}}$
Vitesse moyenne des gaz au-dessus du lit (m/s)	$V_g = \frac{R \cdot T_g}{A_g \cdot P} \cdot G_{N_2} \cdot \left[\frac{1}{M_{N_2}} + \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{M_i} \right]$

Les équations pour la conductivité thermique et la viscosité dynamique sont celles établies par Wilke en 1949 pour les mélanges de gaz. Selon Wilke, la constante Φ_{ij} se calcule de la façon suivante,

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \cdot \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \cdot \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (2.58)$$

De plus,

$$x_i = (G_i/G_g) \cdot M_{tot}/M_i$$

Pour ce qui est de l'émissivité du gaz, il faut tenir compte de l'émissivité du gaz seul et de l'émissivité de la poussière. Pour un gaz transparent comme l'air, la chaleur ne peut

être transmise que par convection, car ses constituants (O_2 et N_2) n'émettent pas de rayonnement. Par contre dans un four, où les gaz de combustion contiennent du gaz carbonique et de la vapeur d'eau, les gaz transfèrent de la chaleur par convection mais aussi par rayonnement, car le CO_2 et le H_2O émettent (milieu participant). L'émissivité du gaz seul est fonction des pressions partielles de la vapeur d'eau et du gaz carbonique, de la longueur de parcours moyen et de la température du gaz.

$$\varepsilon'_g = f(p_{H_2O}, p_{CO_2}, L_m, T_g)$$

La longueur de parcours moyen pour un four cylindrique avec charge se calcule, selon Perron (1989), par,

$$L_m = 0,95 \cdot (2 \cdot r_i - h) \quad (2.59)$$

où h est défini à la figure 2.14. Les abaques de Hottel pour l'émissivité du gaz en fonction des pressions partielles de la vapeur d'eau et du gaz carbonique ont été introduits dans le programme et la résolution se fait suivant un sous-programme établi par Modak (1978).

L'ajout de particules en suspension dans un gaz, même transparent, peut faire considérablement augmenter son émissivité. Gouffé, en 1968, rapporte que pour les grosses poussières ($\geq 30 \mu m$), le facteur d'émission total s'exprime par,

$$\varepsilon_d = \alpha_d \cdot [1 - \exp(-k \cdot d_i)] \quad (2.60)$$

où le facteur d'absorption total de l'alumine α_d est de 0,135 (Touloukian, 1972) et le coefficient d'absorption k est égal à,

$$k = \frac{1,5 \cdot G_d \cdot \rho_g}{d_z \cdot \rho_d \cdot G_g} \quad (2.61)$$

L'émissivité totale du gaz devient donc,

$$\varepsilon_g = \varepsilon'_g + 0,135 \cdot [1 - \exp(-k \cdot d_i)] \quad (2.62)$$

Et pour ce qui est de la zone de la flamme, Gouffé rapporte que l'émissivité de celle-ci s'exprime par,

$$\varepsilon_{pc} = 1 - (1 - \varepsilon_d) \cdot (1 - \varepsilon_g) \quad (2.63)$$

Quant à la paroi, on pose que sa conductivité thermique est constante sur toute la longueur du four compte tenu du manque d'informations sur les types de réfractaires utilisés dans le four réel. En effet plusieurs types de réfractaires sont utilisés dans le four selon la position, et la complication provient du fait qu'on ne connaît pas à quels endroits il y a changements de réfractaire. De plus, leur usure influence la conductivité thermique. Or comme il est pratiquement impossible d'évaluer à quels endroits le réfractaire est usé et le taux d'usure, cet aspect sera négligé.

La conductivité thermique utilisée pour le modèle provient de la fiche technique de deux réfractaires actuellement utilisés à l'usine. Le premier, le PLICAST NRC 70 de PLIBRICO, a une conductivité thermique moyenne de 67,703 W/m²·K/pouce. Le second, le KAOCRETE HPM 450, a une conductivité thermique moyenne de 60,57 W/m²·K/pouce.

La moyenne effectuée sur les deux réfractaires donne une conductivité thermique constante et égale à $64,137 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K/pouce}$. La conductivité thermique de la paroi devient,

$$k_m = \frac{64,137 \text{ W / m}^2 \text{K / po}}{39,37 \text{ po / m}} = 1,629 \text{ W / m} \cdot \text{K}$$

Tableau 2.13 Paramètres reliés à la paroi.

Paramètres	Équation	Source
Conductivité thermique (W/m·K)	$k_m = 1,629$	Usine Vaudreuil (1996)
Émissivité du réfractaire	$\epsilon_m = 0,75$	Gordon (1969)
Émissivité de la coque extérieure	$\epsilon_o = 9 \cdot 10^{-5} \cdot T_o + 0,912$	Bhilotra (1968)

2.7.1 Transfert de chaleur entre le gaz et le mur intérieur

La quantité de chaleur échangée entre le gaz et le mur intérieur du four peut être exprimée par,

$$q_{gm} = A_{gm} \cdot h_{gm} \cdot (T_g - T_m) \quad (2.64)$$

où h_{gm} est un coefficient global de transfert de chaleur (convection et rayonnement).

L'aire d'échange entre le gaz et le mur intérieur est égale à l'aire intérieure totale moins l'aire d'échange entre le mur et le solide. L'aire d'échange entre le mur intérieur et le solide est rapportée par Viola et al. comme étant,

$$A_{ms} = 2,44 \cdot \left(\frac{G_{lit} \cdot \tau}{L_T \cdot \rho_{lit}} \right)^{0.35} \quad (2.65)$$

Donc l'aire d'échange entre le gaz et le mur intérieur devient,

$$A_{gm} = \pi \cdot d_i - A_{ms} \quad (2.66)$$

Le coefficient global de transfert de chaleur, alliant rayonnement et convection, s'exprime donc par,

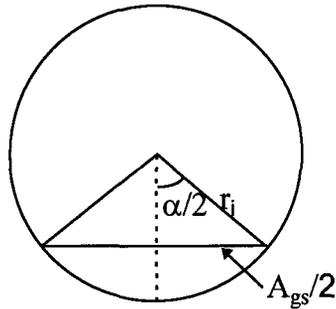
$$h_{gm} = 0,036 \cdot \frac{k_g}{d_i} \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{0.32} \cdot \left(\frac{d_i}{L_T} \right)^{0.055} + \frac{\sigma \cdot \epsilon_g}{T_g - T_m} \cdot (T_g^4 - T_m^4) \quad (2.67)$$

2.7.2 Transfert de chaleur entre le gaz et le solide (lit de particules)

La même équation générale sert à représenter l'échange de chaleur entre le gaz et le lit de particules,

$$q_{gs} = A_{gs} \cdot h_{gs} \cdot (T_g - T_s) \quad (2.68)$$

L'aire d'échange entre le gaz et le solide dépend principalement du pourcentage de remplissage de solide dans le four. En effet, plus le pourcentage de remplissage est élevé, plus l'angle de remplissage α est élevé, et plus la surface de solide exposée au gaz est grande.



$$\frac{A_{gs}}{2} = r_i \cdot \sin(\alpha / 2)$$

$$A_{gs} = 2 \cdot r_i \cdot \sin(\alpha / 2) \quad (2.69)$$

Le coefficient global de transfert de chaleur devient dans ce cas,

$$h_{gs} = 0,4 \cdot \left(\frac{G_g \cdot 3600}{A_g} \right)^{0.62} + \frac{\sigma \cdot \epsilon_g}{T_g - T_s} \cdot (T_g^4 - T_s^4) \quad (2.70)$$

2.7.3 Transfert de chaleur entre le mur et le solide

Le mur et le solide échangent de la chaleur au niveau de leur surface de contact sur le fond du lit, et par rayonnement à la surface du lit. L'équation générale devient,

$$q_{ms} = A_{ms} \cdot h_{ms} \cdot (T_m - T_s) \quad (2.71)$$

L'aire d'échange globale entre le mur et le solide a déjà été donnée à l'équation (2.65). Pour ce qui est du coefficient global de transfert de chaleur, Viola et al. le donnent comme étant égal à,

$$h_{ms} = \frac{11,6 \cdot k_{lit}}{d_i \cdot \psi} \left(\frac{(N / 60) \cdot d_i^2 \cdot \rho_{lit} \cdot Cp_{lit} \cdot \psi}{120 \cdot k_{lit}} \right)^{0,3} \quad (2.72)$$

où ψ est le demi-angle de remplissage.

2.7.4 Transfert de chaleur entre le mur extérieur et l'air ambiant

Toujours selon le même principe que précédemment on a,

$$q_{oa} = A_{oa} \cdot h_{oa} \cdot (T_o - T_a) \quad (2.73)$$

L'aire d'échange entre le mur extérieur et l'environnement est tout simplement l'aire d'un cylindre,

$$A_{oa} = \pi \cdot d_e \quad (2.74)$$

Et le coefficient global de transfert de chaleur est égal à,

$$h_{oa} = 0,11 \cdot \frac{k_a \cdot Pr^{0,35}}{d_e} \cdot (0,5 \cdot Re_w^2 + Re^2 + Gr)^{0,35} + \frac{\sigma \cdot \epsilon_o}{T_o - T_a} \cdot (T_o^4 - T_a^4) \quad (2.75)$$

Notons que toutes les propriétés de l'air environnant sont calculées à la température de film

T_{film} qui s'exprime par,

$$T_{\text{film}} = \frac{T_o + T_a}{2} \quad (2.76)$$

2.7.5 Transfert de chaleur à travers la paroi

Le transfert de chaleur par conduction à travers la paroi peut être représenté, par analogie avec le transfert convectif, selon,

$$q_{\text{cond}} = A_{\text{cond}} \cdot h_{\text{cond}} \cdot (T_m - T_o) \quad (2.77)$$

Tout dépendant de l'isolation du four, une quantité plus ou moins importante de chaleur traverse la paroi pour se retrouver à l'extérieur. L'aire d'échange s'exprime par,

$$A_{\text{cond}} = \frac{\pi \cdot (d_e - d_i)}{\ln(d_e / d_i)} \quad (2.78)$$

Et le coefficient de conduction par,

$$h_{\text{cond}} = \frac{k_m}{r_e - r_i} \quad (2.79)$$

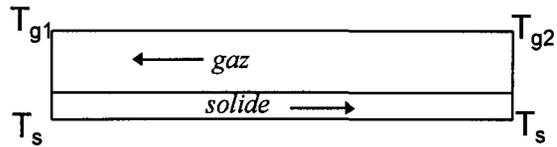
2.7.6 Transferts de chaleur au niveau des refroidisseurs planétaires

Les refroidisseurs planétaires peuvent être assimilés à des échangeurs gaz-solide à contre-courant avec comme équation d'échange,

$$q_{\text{gs}} = A_{\text{gs}} \cdot h_{\text{gs}} \cdot \Delta T \quad (2.80)$$

où,

$$\Delta T = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln(\Delta T_1 / \Delta T_2)}$$



$$\Delta T_1 = T_{s1} - T_{g1}$$

$$\Delta T_2 = T_{s2} - T_{g2}$$

Gordon (1969) pose pour le produit $A_{gs} \cdot h_{gs}$ une valeur de 4038,16 W/m·K, mais ne mentionne pas la valeur de l'aire d'échange. Nous avons donc évalué cette aire d'échange en comparant les conditions d'opération de Gordon et les nôtres (débit d'alumine, taille des refroidisseurs, etc.), ce qui nous a permis d'estimer le coefficient de transfert de chaleur entre le gaz et le solide comme étant de,

$$h_{gs} = 48\,541 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$$

Comme on peut le remarquer le coefficient de transfert de chaleur entre le solide et le gaz est très élevé dans les refroidisseurs planétaires. Dans le four, ce coefficient varie en effet entre 105 et 85 W/m²K du bout froid au bout chaud du four, ce qui est nettement plus faible que dans les refroidisseurs planétaires. Si on se fie à la relation (2.70) pour le coefficient de transfert de chaleur global entre le gaz et le solide, on voit que celui-ci est d'autant plus grand si la section transversale occupée par le gaz est faible et si la différence de température entre le gaz et le solide est grande. Or, comme on le sait, les refroidisseurs planétaires ont un diamètre intérieur nettement inférieur à celui du four, soit environ 1,8 fois plus faible. On voit donc que la section transversale occupée par le gaz sera beaucoup

plus petite que dans le four. De plus, on sait que le solide est très chaud dans les refroidisseurs ($\approx 1200^\circ\text{C}$) et que le gaz présent dans les refroidisseurs est en fait de l'air à température ambiante ($\approx 25^\circ\text{C}$). On voit donc que la différence de température entre le solide et le gaz sera très élevée. C'est ce qui peut donc expliquer que le coefficient de transfert de chaleur entre le gaz et le solide est très important au niveau des refroidisseurs planétaires.

Pour ce qui est de la capacité radiative du gaz, notons que celle-ci est beaucoup plus faible dans les refroidisseurs que dans le four. En effet, le gaz, qui est en fait de l'air, est transparent au rayonnement. Cependant, la poussière qui s'y trouve peut contribuer à émettre du rayonnement. L'émissivité du gaz est donc égale à l'émissivité de la poussière,

$$\varepsilon_g = 0,135 \cdot (1 - \exp(-k \cdot d_{ic})) \quad (2.81)$$

où k est donné par la relation (2.61).

Gordon ne donne cependant pas de coefficient de transfert de chaleur entre le mur et le gaz, et le mur et le solide. On supposera ici que les mêmes coefficients de transfert de chaleur trouvés pour l'enceinte du four peuvent s'appliquer aux refroidisseurs. Dans ce cas, les équations qui seront utilisées sont les équations (2.64) et (2.71).

Le transfert de chaleur à travers la paroi d'un refroidisseur est plus élevé que dans le cas du four puisqu'il n'y a pas d'isolation, il s'exprime cependant de la même façon que dans le four,

$$q_{\text{cond}} = A_{\text{cond}} \cdot h_{\text{cond}} \cdot (T_{\text{ic}} - T_{\text{c}}) \quad (2.82)$$

où T_{ic} et T_{c} sont respectivement les températures des murs intérieurs et extérieurs des refroidisseurs.

En considérant que les parois sont en acier inoxydable AISI 304, on obtient, à partir des données d'Incropera et DeWitt (1990),

$$k_{\text{c}} = 0,01888 \cdot \frac{T_{\text{ic}} + T_{\text{c}}}{2} + 9,5 \quad (2.83)$$

On pose que l'émissivité du mur extérieur est la même que pour le four, dont la coque est également posée en acier inoxydable. De plus, contrairement au four, les refroidisseurs planétaires ne sont pas recouverts de réfractaire à l'intérieur, on pose donc que le mur intérieur est également en acier inoxydable et on obtient ainsi,

$$\varepsilon_{\text{ic}} = \varepsilon_{\text{c}} = 9 \cdot 10^{-5} \cdot T_{\text{ic,c}} + 0,912 \quad (2.84)$$

Pour ce qui est maintenant des échanges thermiques avec l'environnement, le problème est un peu plus complexe que dans le cas de l'enceinte du four. En effet, chaque refroidisseur ne voit pas seulement l'air extérieur, mais aussi les refroidisseurs environnants et le four (figure 2.15). Le coefficient global de transfert de chaleur utilisé pour le four ne

peut plus être utilisé ici, car les aires d'échange pour le rayonnement et la convection sont différentes. La convection se fait uniformément tout autour du refroidisseur mais le transfert radiatif se fait vers l'environnement et vers le four. L'échange thermique d'un refroidisseur à un autre est négligé puisqu'on suppose la même température pour chaque refroidisseur.

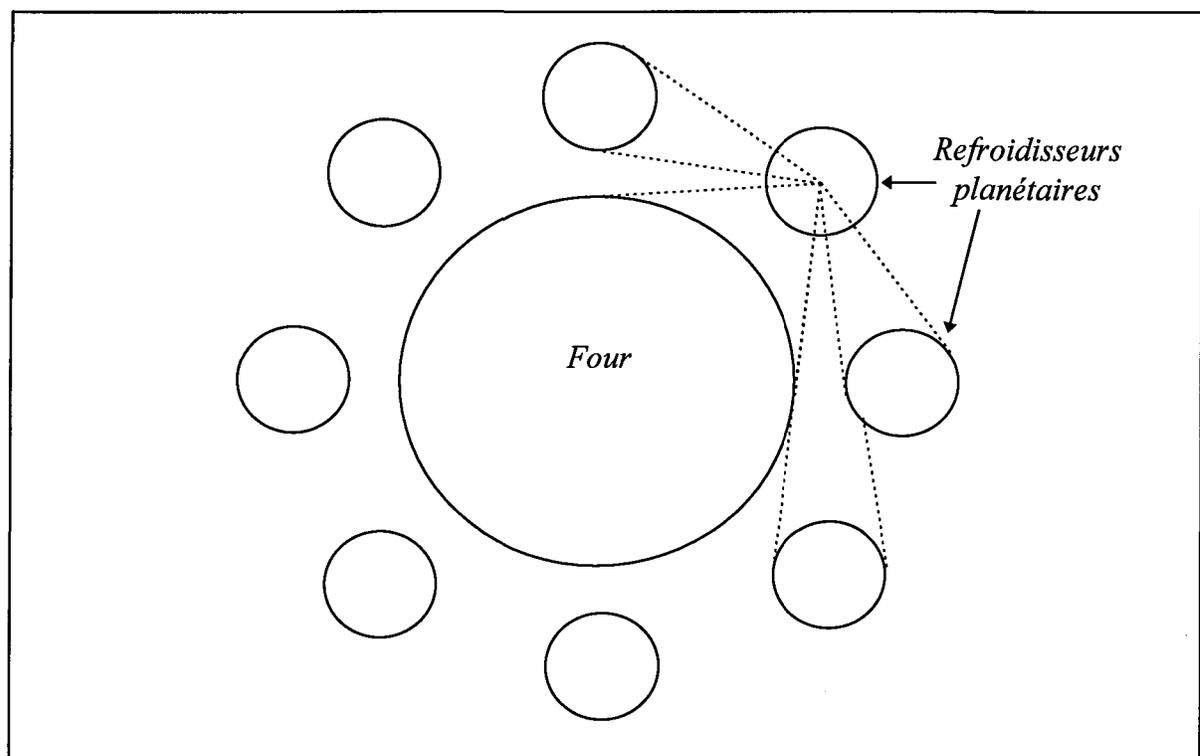


Figure 2.15 Disposition des refroidisseurs planétaires autour du four (coupe radiale).

Le transfert de chaleur entre chaque refroidisseur et l'air ambiant s'exprime par,

$$q_{ca} = A_{ca}^c \cdot h_{ca}^c \cdot (T_c - T_o) + A_{ca}^r \cdot \sigma \cdot \epsilon_c \cdot (T_c^4 - T_o^4) \quad (2.85)$$

où A_{ca}^c et A_{ca}^r sont respectivement les aires d'échange par convection et rayonnement entre le mur extérieur d'un refroidisseur et l'air ambiant, avec

$$A_{ca}^c = \pi \cdot d_c \quad (2.86)$$

La valeur du coefficient de transfert de chaleur par convection est donnée par les relations suivantes, telles que proposées par Bhilotra en 1968,

$$Ra \leq 1 \cdot 10^9 \quad h_{ca}^c = \frac{k_a}{d_c} \cdot 0,53 \cdot Ra^{0,25} \quad (2.87)$$

$$Ra > 1 \cdot 10^9 \quad h_{ca}^c = \frac{k_a}{d_c} \cdot 0,13 \cdot Ra^{0,33} \quad (2.88)$$

Pour ce qui est cette fois du rayonnement entre chaque refroidisseur et le four, on se base sur un échange entre corps gris. Le transfert de chaleur s'exprime par,

$$q_{co}^r = A_{co}^r \cdot \sigma \cdot \frac{1}{1 - (1 - \epsilon_c) \cdot (1 - \epsilon_o)} \cdot (T_c^4 - T_o^4) \quad (2.89)$$

Bhilotra, en 1968, a fait une étude très détaillée en ce qui concerne les aires d'échange en rayonnement à l'extérieur des refroidisseurs planétaires. La figure suivante illustre toute la géométrie devant être prise en considération lors du calcul des aires d'échange.

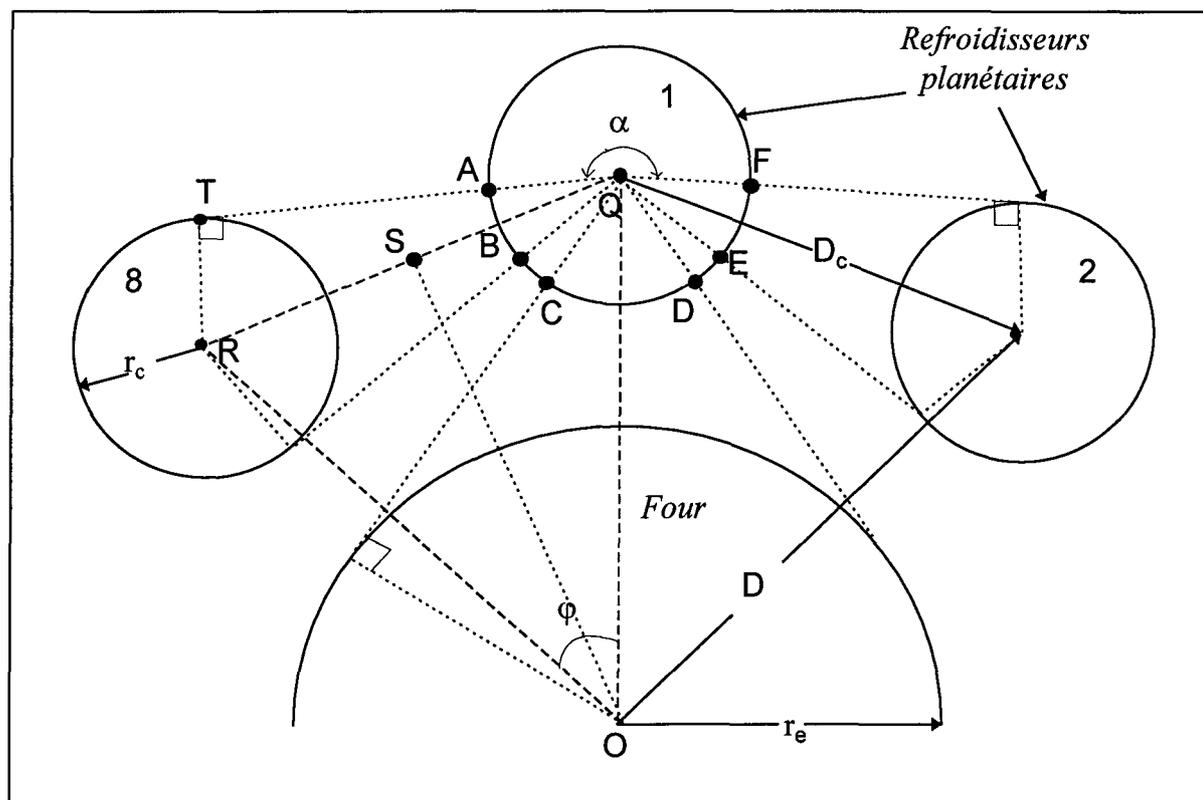


Figure 2.16 Géométrie liée aux refroidisseurs planétaires.

Afin de déterminer les aires d'échange, il est nécessaire de connaître:

- le rayon extérieur du four, r_e ;
- la distance centre à centre four-refroidisseur, D ;
- le rayon extérieur des refroidisseurs, r_c ;
- le nombre total de refroidisseurs, N_c .

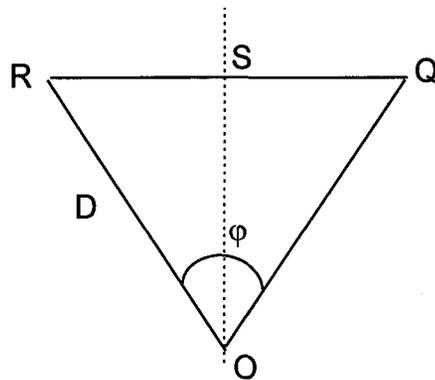
À l'aide de la figure 2.16 on remarque que les arcs AB et EF échangent du rayonnement avec les refroidisseurs voisins (8 et 2 respectivement). L'arc CD échange du

rayonnement avec le four, l'arc BC voit les refroidisseurs 7 et 6 tandis que l'arc ED voit les refroidisseurs 3 et 4 (les refroidisseurs 3, 4, 6 et 7 ne sont pas montrés). L'arc AF échange quant à lui du rayonnement avec l'environnement.

L'angle φ , qui est l'angle formé par la liaison des points R, O et Q situés respectivement aux centres du refroidisseur 8, du four et du refroidisseur 1, s'exprime par,

$$\varphi = \frac{360^\circ}{N_c} \quad (2.90)$$

La distance centre à centre, D_c entre deux refroidisseurs se calcule par,

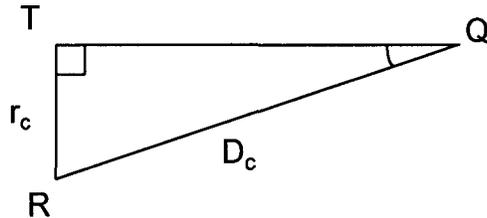


$$SR = D \cdot \sin(\varphi/2)$$

$$D_c = QR = 2 \cdot SR$$

$$D_c = 2 \cdot D \cdot \sin(\varphi/2) \quad (2.91)$$

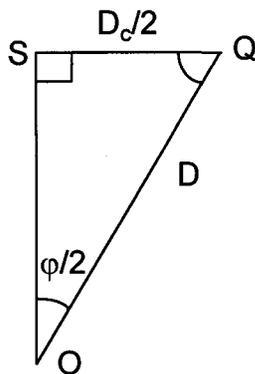
L'angle formé par TQR, qui représente le demi-angle sous lequel le refroidisseur numéro 1 voit les deux refroidisseurs voisins (2 et 8) se détermine quant à lui par,



$$r_c = D_c \cdot \sin(\widehat{TQR})$$

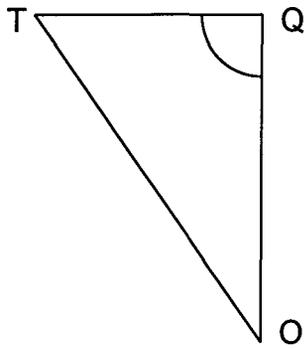
$$\widehat{TQR} = \sin^{-1}(r_c/D_c)$$

Et l'angle formé par SQO se calcule par,



$$\widehat{SQO} = 180^\circ - (90^\circ + \phi/2)$$

Ainsi la moitié de tout l'angle sous lequel un refroidisseur ne voit pas l'environnement devient donc,



$$\widehat{TQO} = \widehat{TQR} + \widehat{SQO}$$

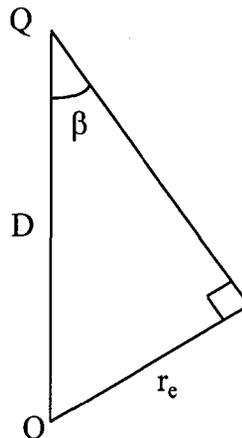
$$\widehat{TQO} = \sin^{-1}(r_c/D_c) + (180^\circ - (90^\circ + \varphi/2))$$

Finalement l'angle α , sous lequel l'arc AF ne voit que l'environnement devient,

$$\alpha = 360^\circ - 2 \cdot [\sin^{-1}(r_c/D_c) + (180^\circ - (90^\circ + \varphi/2))] \quad (2.92)$$

Et l'angle β , sous lequel l'arc d'un refroidisseur voit le four est,

$$\beta = 2 \cdot \sin^{-1}(r_e/D) \quad (2.93)$$



Maintenant que les angles associés à chacun des arcs sont connus, les aires d'échange, qui représentent en fait les longueurs des arcs AF et CD peuvent être calculées. L'aire d'échange en rayonnement entre un refroidisseur et l'environnement devient donc,

$$A_{ca}^r = r_c \cdot \alpha \cdot (\pi/180) \quad (2.94)$$

Et l'aire d'échange entre un refroidisseur et le four s'exprime par,

$$A_{co}^r = r_c \cdot \beta \cdot (\pi/180) \quad (2.95)$$

où α et β sont donnés respectivement par les équations (2.92 et 2.93).

2.8 Conclusion

Les hypothèses simplificatrices énoncées au début de ce chapitre, nous ont conduits à établir un ensemble de 13 équations différentielles ordinaires non-linéaires, du premier ordre. Une fois les équations différentielles établies, nous avons ensuite introduit tous les aspects théoriques nécessaires à la bonne marche du modèle, soient les cinétiques des réactions chimiques, la combustion du gaz naturel, le poussierage et les transferts de chaleur.

Tout en appliquant la théorie pertinente, le modèle calcule ensuite les profils thermiques du lit granulaire et du gaz, en résolvant les équations différentielles par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, par petits intervalles successifs, sur toute la longueur du

four. Les températures des murs intérieur et extérieur du four sont pour leur part calculées par de simples bilans thermiques effectués sur la paroi du four.

Bien que le modèle ait été élaboré en premier lieu pour calculer les différents profils thermiques, il peut de plus fournir une quantité de renseignements intéressants tels la composition du lit de solide en chaque point du four, la longueur de la flamme ou encore la vitesse du gaz. L'ensemble des résultats obtenus sera discuté au chapitre suivant.

CHAPITRE 3

RÉSULTATS

3.1 Introduction

Le nouveau modèle du four de calcination d'alumine est général, simple et robuste. Quelles que soient en fait les dimensions ou les conditions de fonctionnement du four réel, le modèle est capable de s'y adapter et de fournir des résultats satisfaisants sur les profils thermiques du four.

Le présent chapitre renferme les principaux résultats obtenus à l'aide du modèle pour les deux fours actuellement en opération à l'usine Vaudreuil d'Arvida, soient les fours numéro 3 et numéro 5. On y présente notamment l'ensemble des différences entre les deux fours calculées par le modèle ainsi que les différences entre les mesures d'usine et les résultats du modèle. L'ensemble des paramètres de fonctionnement susceptibles d'affecter la production est par la suite présenté et une discussion sur la solidité du modèle clôture finalement le chapitre.

3.2 Conditions d'opérations actuelles

Les deux fours actuellement en opération à l'usine Vaudreuil d'Arvida diffèrent essentiellement dans leurs dimensions et dans leurs conditions d'opération. Le tableau suivant montre l'ensemble des caractéristiques des fours 3 et 5.

Tableau 3.1 Caractéristiques des fours numéro 3 et numéro 5.

Caractéristiques	Four 3	Four 5
Longueur (m)	61,6	61,9
Diamètre intérieur (m)	1,981	2,286
Diamètre extérieur (m)	2,438	2,744
Vitesse de rotation (rpm)	1,154	1,364
Angle d'inclinaison (deg)	6,0	6,0
Nombre de refroidisseurs	8	10
Longueur des refroidisseurs (m)	3,05	3,05
Diamètre extérieur des refroidisseurs (m)	1,22	1,22
Débit d'hydrate introduit (kg/s)	1,306	1,917
Humidité de l'hydrate (%)	10,0	10,0
Débit de gaz naturel (kg/s)	0,163	0,175
Débit d'air primaire (kg/s)	0,379	0,379
Débit d'air secondaire (kg/s)	2,951	2,951

Le modèle a été élaboré à partir de ces conditions. Le brûleur, posé identique pour les deux fours, correspond quant à lui à la description faite au chapitre précédent à la section 5, et les deux fours fonctionnent tous les deux selon le même principe présenté à la section 3 du chapitre 1.

3.3 Résultats fournis par le modèle

Le modèle permet d'obtenir de nombreux renseignements sur les fours. En plus des profils de température pour le solide, le gaz et la paroi, on peut avoir accès au profil de vitesse pour le gaz, les concentrations des différentes espèces dans le lit et dans le gaz ainsi que les profils de transfert de chaleur. Plusieurs autres résultats, dont la liste apparaît en annexe à la fin de cet ouvrage, sont également accessibles grâce au modèle. Les figures suivantes montrent les profils de température obtenus par le modèle pour les deux fours.

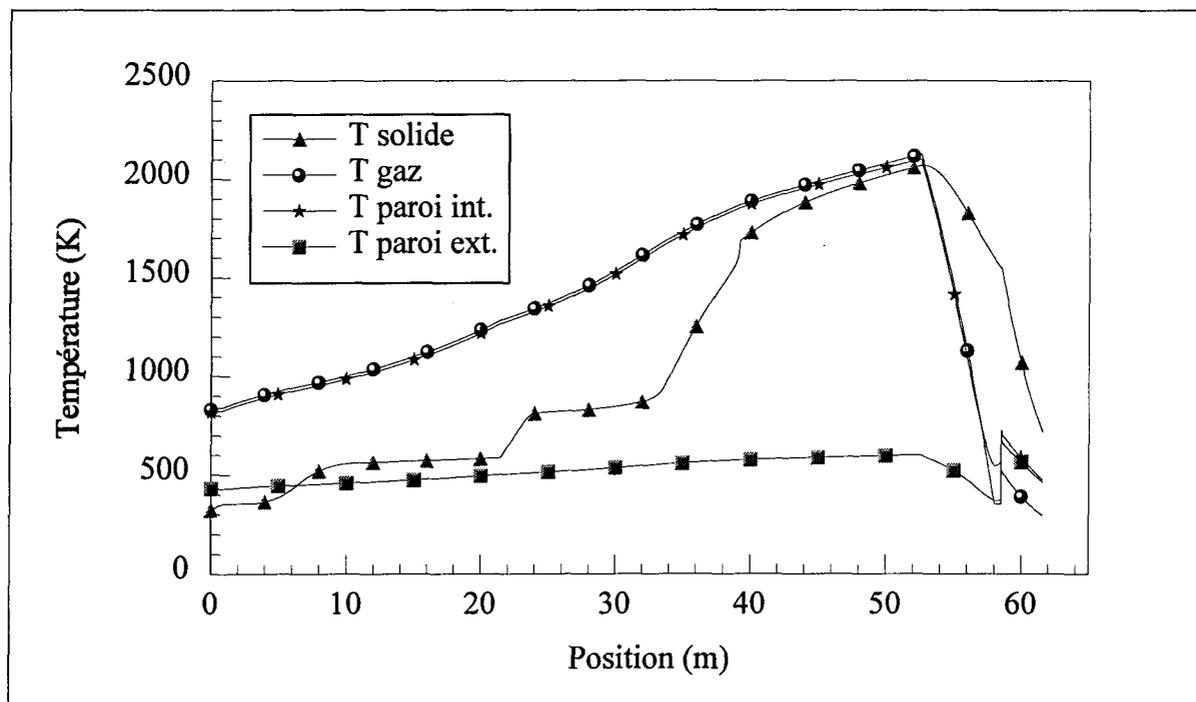


Figure 3.1 Profil de températures pour le four numéro 3.

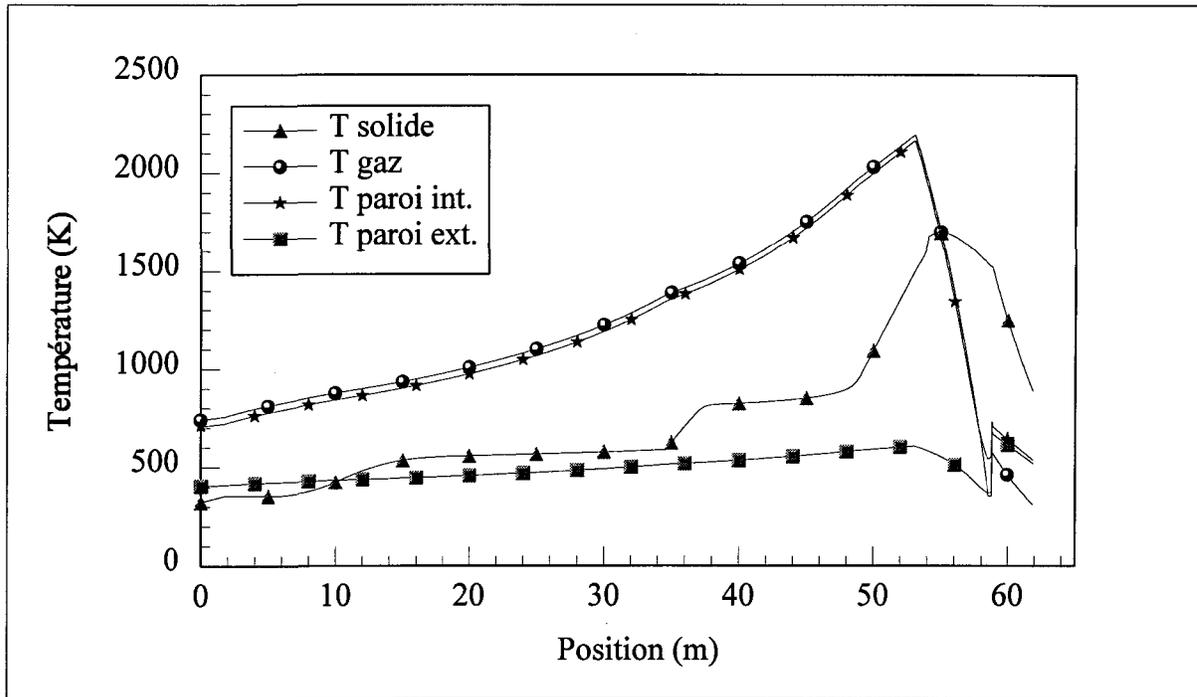


Figure 3.2 Profil de températures pour le four numéro 5.

La position $x=0$ m, est la position où entre le solide et où sort le gaz. La position où le gaz atteint sa température maximale représente le bout de la flamme. L'étendue de la flamme dans le four peut être observée par la diminution brusque de la température à partir de ce point jusqu'à l'atteinte du brûleur. Or, l'emplacement du nez du brûleur, pour le modèle, correspond également à l'entrée du solide dans les refroidisseurs planétaires. Ainsi, les températures se situant au-delà du nez du brûleur, c'est à dire au-delà de 58,5 mètres sur les figures 3.1 et 3.2, représentent les températures rencontrées dans les refroidisseurs planétaires. La température du gaz dans le four devient alors la température de l'air

secondaire dans les refroidisseurs, et les températures des murs intérieur et extérieur du four deviennent respectivement les températures des murs intérieur et extérieur des refroidisseurs. Le four et l'ensemble des refroidisseurs planétaires sont deux éléments tout à fait différents qu'il faut dissocier. Le seul lien qui existe entre les deux est le solide qui sort du four pour se retrouver dans les refroidisseurs planétaires. Afin de simplifier la simulation, on suppose que le solide sortant du four se trouve divisé de façon égale entre chaque refroidisseur et comme il y a plus qu'un refroidisseur autour du four, on suppose qu'ils sont tous à la même température.

À partir des figures 3.1 et 3.2, on peut remarquer que la température de la paroi extérieure des refroidisseurs (de 58,5 à 60 mètres) est plus élevée que celle du four (avant 58,5 mètres). Ceci est tout simplement dû au fait que les refroidisseurs ne sont pas isolés de réfractaires comme le four, ce qui permet à la chaleur de traverser plus facilement la paroi. De plus, comme l'échange vers l'environnement est en partie voilé par la présence du four et des autres refroidisseurs (figure 2.15) le mur extérieur ne peut se refroidir totalement et demeure ainsi plus chaud.

En comparant maintenant les profils de température des fours 3 et 5, on remarque une différence assez évidente de leur aspect général. En effet dans le four 5, le solide

atteint des températures beaucoup moins élevées que dans le four 3. La différence dans l'évolution de la température du solide s'explique principalement par le fait que le débit d'hydrate à l'alimentation du four 3 est plus faible que celui du four 5. Sa température croîtra donc plus rapidement pour atteindre une température presque identique à celle du gaz au bout de la flamme (ce qui s'explique par un coefficient de transfert de chaleur très élevé à cet endroit). Pour atteindre, avec le four 5, des températures semblables à celle du four 3, il aurait fallu augmenter la longueur du four, ou du moins réduire le débit d'hydrate introduit. De plus on remarque, à partir du tableau 3.1, que le diamètre du four 5 est plus grand que celui du four 3. Pour un même débit, la vitesse du gaz dans le four 5 sera donc plus faible que dans l'autre four, ce qui induit un coefficient de transfert de chaleur plus faible. Les profils de températures du gaz et du solide peuvent se prêter à une étude des transferts de chaleur dans le four, tel que présenté ci-dessous.

3.3.1 Transferts de chaleur dans le four

Pour qu'un four de calcination d'alumine soit efficace, il faut que la chaleur qui arrive au solide soit la plus élevée possible et que les pertes vers l'extérieur soient les plus faibles possible. Le principal facteur de réchauffement est évidemment le gaz. Or le gaz n'échange pas toute sa chaleur vers le solide mais également vers la paroi intérieure du four. Dans le but de récupérer le plus de chaleur possible, la paroi se doit donc d'être la mieux isolée afin de minimiser les pertes vers l'extérieur. Lorsque cette dernière est bien isolée,

elle devient alors très chaude et contribue, comme le gaz, au réchauffement du solide. Les figures suivantes montrent les profils obtenus pour les transferts de chaleur dans les fours numéro 3 et numéro 5.

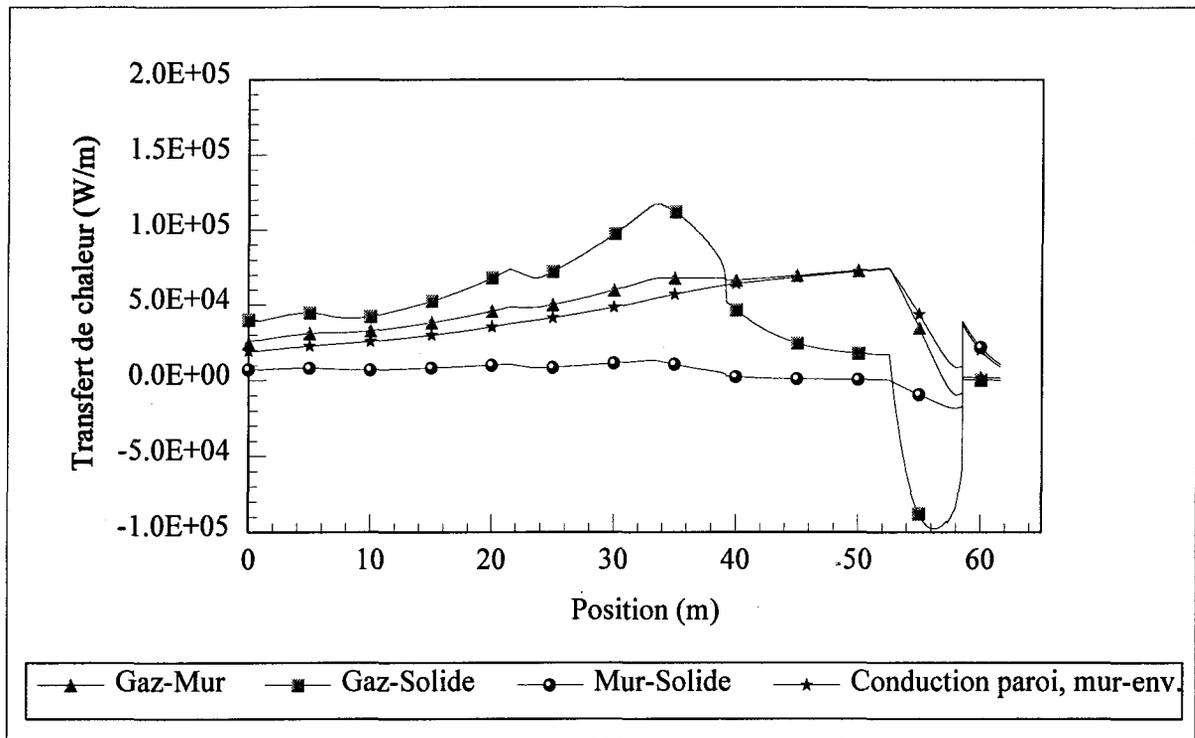


Figure 3.3 Transferts de chaleur dans le four numéro 3 (avec poussière).

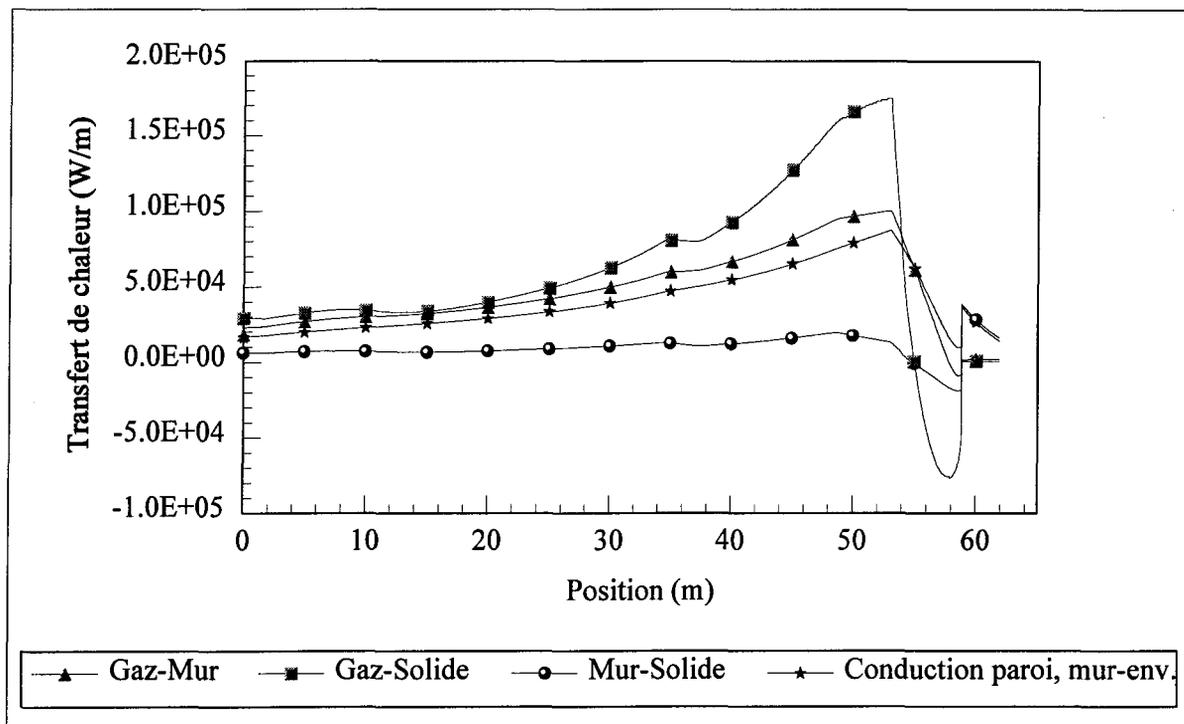


Figure 3.4 Transferts de chaleur dans le four numéro 5 (avec poussière).

Avant de commenter les deux figures précédentes, il serait important d'apporter une remarque au sujet des transferts de chaleur "mur-environnement" et "conduction paroi". Comme il n'y a aucune accumulation de chaleur dans la paroi du four, toute la chaleur qui traverse la paroi par conduction est échangée avec l'environnement lors de son arrivée sur le mur extérieur. C'est ce qui explique leur superposition dans les deux figures précédentes. Rappelons aussi que les transferts de chaleur se situant au-delà de 58,5 mètres, sur les deux figures précédentes et sur toutes les figures qui suivront, représentent les transferts de chaleur dans les refroidisseurs planétaires.

On note que le plus grand transfert de chaleur à se produire dans le four est celui s'effectuant du gaz au solide. On remarque cependant qu'au niveau de la flamme, endroit où le gaz est le plus chaud, ce transfert de chaleur est plus important dans le four 5 que dans le four 3 (de 51,5 à 58,5 mètres, approximativement). Rappelons que l'intensité du transfert de chaleur dépend entre autres de la différence de température entre deux corps. En effet, plus cette différence est grande, plus le transfert de chaleur est important. Il est donc évident que le transfert de chaleur au niveau de la flamme sera plus élevé dans le four 5 puisque son solide est plus froid que dans le four 3 à cet endroit (figures 3.1 et 3.2).

Dans les refroidisseurs planétaires, c'est-à-dire au delà de 58,5 mètres, les transferts de chaleur sont pour la plupart inversés. En effet, c'est maintenant le solide qui est chaud et le gaz qui est froid. On remarque cette fois que le plus grand transfert de chaleur s'effectue du solide à la paroi et que le transfert de chaleur mur-gaz est très faible

3.3.2 Réactions chimiques

La vitesse d'une réaction chimique dépend de la température et des concentrations des réactifs. Que ce soit pour l'évaporation de l'humidité ou les transformations cristallines, plus le lit d'alumine sera chaud plus les réactions s'effectueront rapidement dans le four.

Le temps avec lequel chaque réaction chimique s'effectue dans le four peut être facilement observé par l'allure du profil de température du solide. Compte tenu du fait que le solide avance continuellement dans le four, plus une réaction prendra de temps à se compléter, plus elle occupera une partie importante du four (direction axiale). C'est pourquoi on parlera souvent, dans les lignes qui suivront, de la longueur des transformations ou des réactions.

Les paliers observés sur le profil de température du solide aux figures 3.1 et 3.2 correspondent en fait aux trois réactions endothermiques se produisant dans le lit, soient l'évaporation de l'humidité de surface, la déshydratation du trihydrate et la déshydratation du monohydrate. On sait qu'une réaction endothermique est une réaction nécessitant un certain apport de chaleur pour se produire. Alors, comme pour l'évaporation de l'humidité de surface (chapitre 2, section 3), l'apparition de paliers s'explique par le fait que la chaleur qui arrive au solide ne sert principalement qu'à produire les transformations, donc le solide ne peut se réchauffer de façon importante et demeure ainsi à une température pratiquement constante. Les élévations de températures entre les paliers indiquent quant à elles le réchauffement du solide entre les transformations. Notons que l'apparition de paliers sur le profil de température du solide pour les transformations endothermiques a également été observée par Zubrzycki (1957), Riffaud et al., (1972), Manitius et al. (1974) et Viola et al. (1986).

La dernière réaction à se produire dans le four est la transformation de l'alumine gamma en alumine alpha. Cette réaction peut être remarquée sur le profil de température du solide par une élévation brusque de la température. En effet cette dernière réaction ne montre pas de palier de température puisque c'est une réaction exothermique, c'est-à-dire qui libère de la chaleur lors de son évolution.

Comme il a été vu précédemment, les températures atteintes par le solide dépendent directement de la chaleur qui lui est transmise par le gaz et la paroi. Or la quantité de chaleur reçue par le solide peut dépendre de plusieurs facteurs tels que le volume de solide dans le four, les aires d'échange, la conductivité thermique du lit et le temps de résidence du solide. Les figures 3.1 et 3.2 montrent bien que les deux premières réactions, à savoir l'évaporation de l'humidité et la transformation du trihydrate en monohydrate, se font moins rapidement dans le four 5 que dans le four 3. En effet, les longueurs des deux premiers paliers de température sont plus importantes dans le four 5. Or on a vu précédemment que le transfert de chaleur gaz-solide est beaucoup moins important dans le four 5 que dans le four 3 pour ce qui est de la première partie du four (figures 3.3 et 3.4). Ceci peut donc expliquer la lenteur des deux premières réactions dans le four 5. On sait de plus que le four 5 tourne plus vite que le four 3 (tableau 3.1). Or selon l'équation donnée dans le tableau 2.11 du chapitre précédent pour la vitesse du lit de solide, on remarque que plus le four tourne vite, plus le solide se déplace rapidement d'un bout à l'autre du four. Le lit a donc

moins de temps pour recevoir de la chaleur et les réactions chimiques s'effectuent ainsi sur de plus grandes distances. Selon le modèle, le lit avance de 2,3 cm/s dans le four 3 et de 3,2 cm/s dans le four 5, ce qui donne des temps de résidence respectifs de 48 et 35 minutes pour le lit. Le tableau suivant montre les longueurs obtenues pour chaque réaction dans les deux fours.

Tableau 3.2 Longueur de four occupée par chaque réaction.

Réactions	Four 3	Four 5
$\text{H}_2\text{O}_{(l)} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_{(g)}$	6,50 m	10,10 m
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	15,95 m	22,95 m
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightarrow \gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$	19,05 m	21,35 m
$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3 \rightarrow \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	8,10 m	7,15 m

En général les transformations s'effectuent sur de plus courtes distances dans le four 3. Cependant, on remarque que la dernière réaction, qui est la transformation de l'alumine gamma en alumine alpha, s'effectue sur une distance légèrement plus courte dans le four 5. Ceci s'explique par le fait que comme les deux premières réactions s'effectuent sur de plus longues distances dans le four 5, les deux dernières réactions sont amenées à se produire plus loin dans le four, donc très près de la flamme. Or selon la figure 3.4, on remarque que le transfert de chaleur gaz-solide dans cette zone est très important dans le four 5, ce qui a pu faire produire la dernière réaction plus rapidement. Cependant, comme les transformations s'effectuent sur de plus courtes distances dans le four 3, l'alumine alpha se

forme beaucoup plus tôt dans le four et peut donc se réchauffer davantage avant de sortir du four, ce qui n'est pas le cas pour le four 5. On peut donc supposer, d'après l'équation (2.30) du chapitre précédent, que les cristaux d'alumine alpha obtenus avec le four 3 seront plus gros que ceux obtenus avec le four 5.

Dans l'ensemble on peut dire que les intervalles de températures de réactions prédits par le modèle respectent bien la théorie. Évidemment les températures pour les débuts des transformations ont été imposées, mais les températures de fin de transformation ont été obtenues par le programme, lorsque toutes traces de réactifs étaient disparues. Le tableau suivant compare les intervalles théoriques des températures de réactions et ceux obtenus par le modèle.

Tableau 3.3 Intervalles des températures de réactions théoriques et ceux obtenus par le modèle.

Réactions	Températures théoriques (Misra et Wefers, 1987)	Températures obtenues par le modèle
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	200 - 300 °C	200 - 315 °C
$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightarrow \gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$	300 - 600 °C	300 - 715 °C
$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3 \rightarrow \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	600 - 1100 °C	600 - 1390 °C

Notons cependant que selon la taille des particules et les conditions de chauffage, les températures de fin de transformation peuvent changer. Pyzalski et Wojcik (1990) obtiennent par exemple une température pour la fin de transformation de l'alumine gamma

en alumine alpha de 1350°C, ce qui se rapproche beaucoup de la température obtenue par le modèle.

À partir des réactions de cinétique, le modèle est capable de prédire la composition du lit selon la position axiale dans le four. Il est donc possible de savoir par exemple à quel endroit l'humidité est complètement évaporée, la composition du solide à la sortie des refroidisseurs ou encore, si c'est le cas, à quel endroit dans le four l'alumine alpha est obtenue. Les figures qui suivent montrent la composition du solide à chaque position du four pour les fours 3 et 5 respectivement.

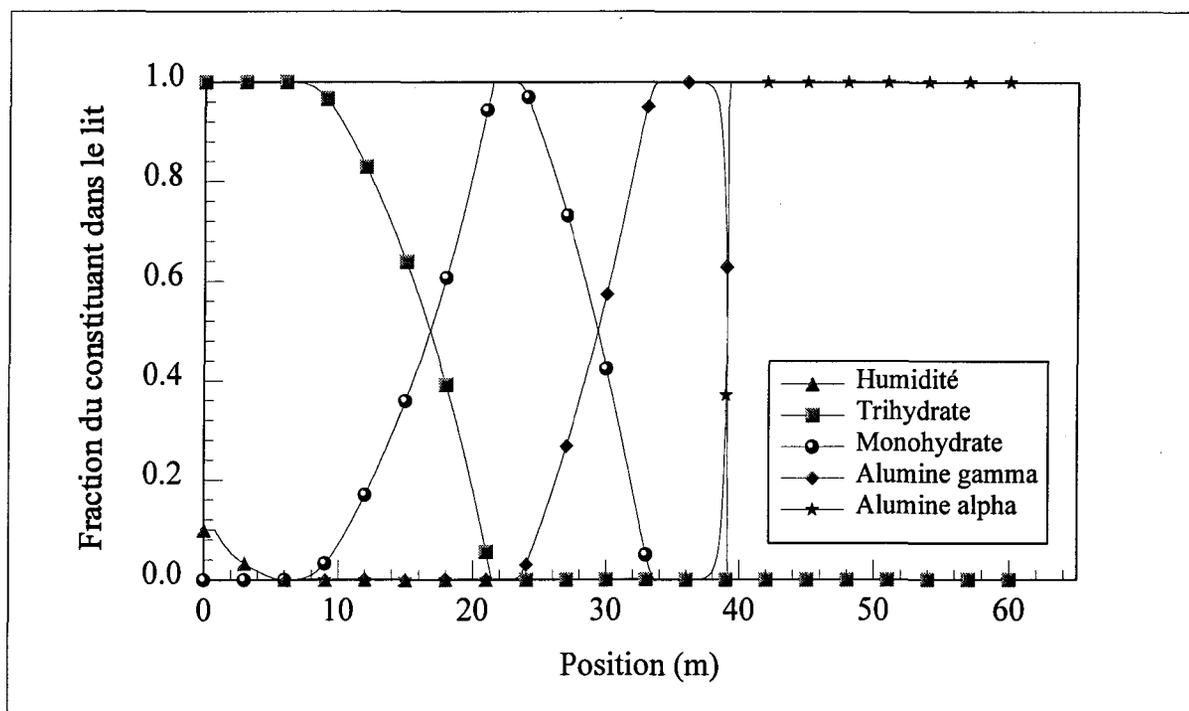


Figure 3.5 Fractions des constituants dans le lit de solide du four 3.

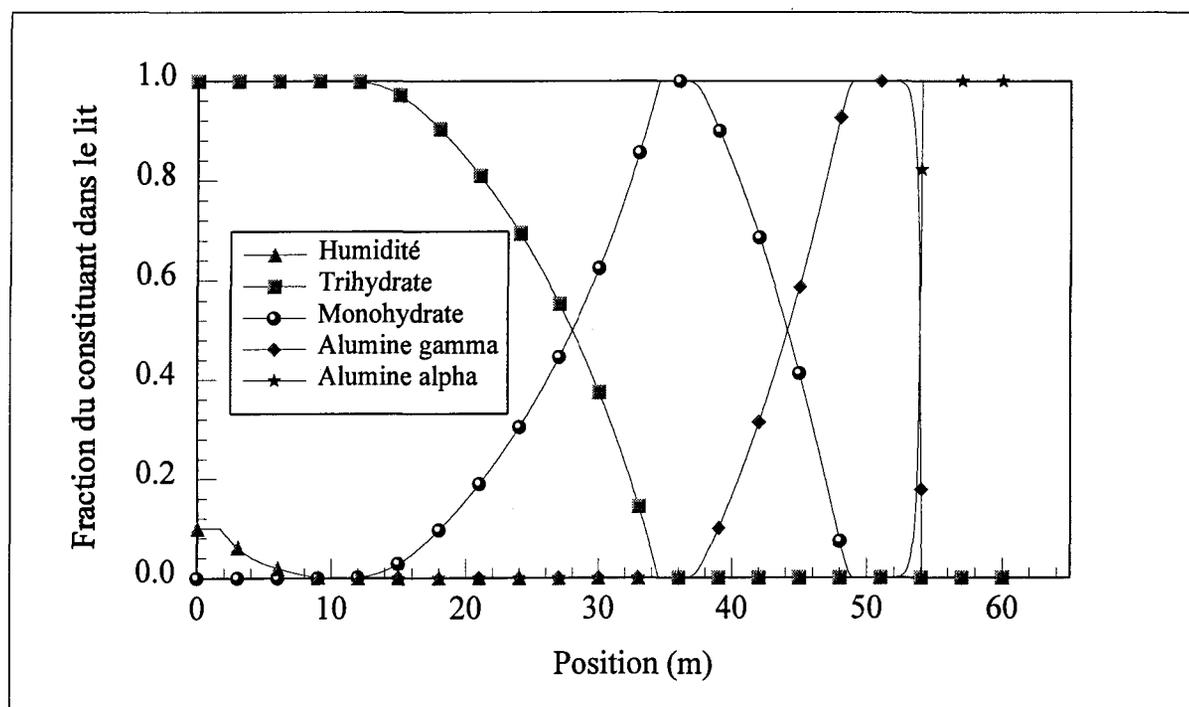


Figure 3.6 Fractions des constituants dans le lit de solide du four 5.

3.3.3 Effets de la poussière

Un phénomène important qui a pu être étudié grâce au modèle est l'effet de la poussière sur les profils thermiques. Deux modèles de poussierage ont été utilisés. Le premier modèle, proposé par Manitius et al. en 1974 (équation 2.56), a produit si peu de poussière que la quantité obtenue est tout à fait négligeable, il a donc été utilisé pour les simulations dites 'sans poussière'. Le deuxième modèle proposé quant à lui par Tackie et al. en 1989 (équation 2.57) a produit beaucoup plus de poussière que le précédent et a pu être utilisé afin de déterminer les différents effets que celle-ci pouvait produire à l'intérieur du four. Le tableau suivant compare les pourcentages de poussière obtenus dans le gaz par chacun des deux modèles de poussière et pour chacun des deux fours.

Tableau 3.4 Pourcentage de poussière dans le gaz.

Modèle	Four 3	Four 5
Manitius et al. (1974)	< 0,02 %	< 0,02 %
Tackie et al. (1989)	0,86 %	0,23 %

On remarque avec le modèle de Tackie et al. que la quantité de poussière est beaucoup plus importante dans le four 3 que dans le four 5, soit près de quatre fois plus.

Rappelons que ce modèle de poussierage tient compte principalement de trois facteurs:

- la vitesse de rotation du four;
- la vitesse du gaz;
- l'aire d'échange entre le gaz et le solide.

Pour ce qui est de la vitesse de rotation du four, on sait que celle-ci est plus élevée pour le four 5 (tableau 3.1). Quant à la vitesse du gaz et à l'aire d'échange, les figures suivantes montrent les résultats fournis par le modèle pour les deux fours.

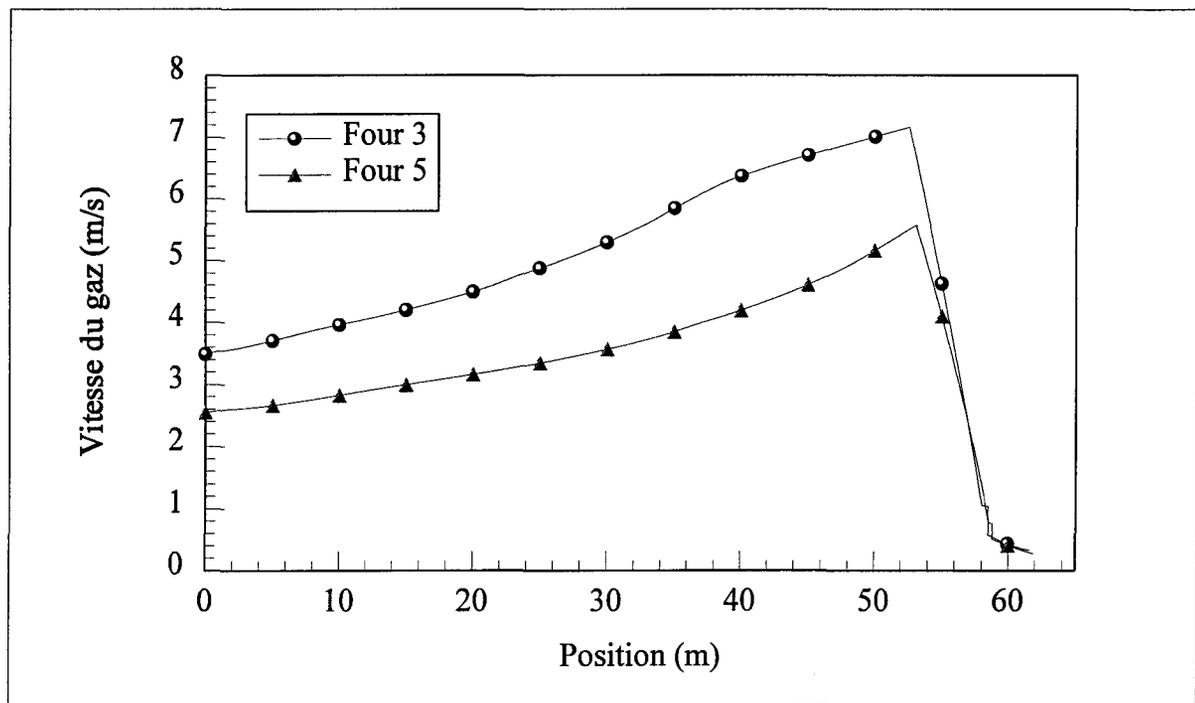


Figure 3.7 Comparaison de la vitesse du gaz pour les fours 3 et 5.

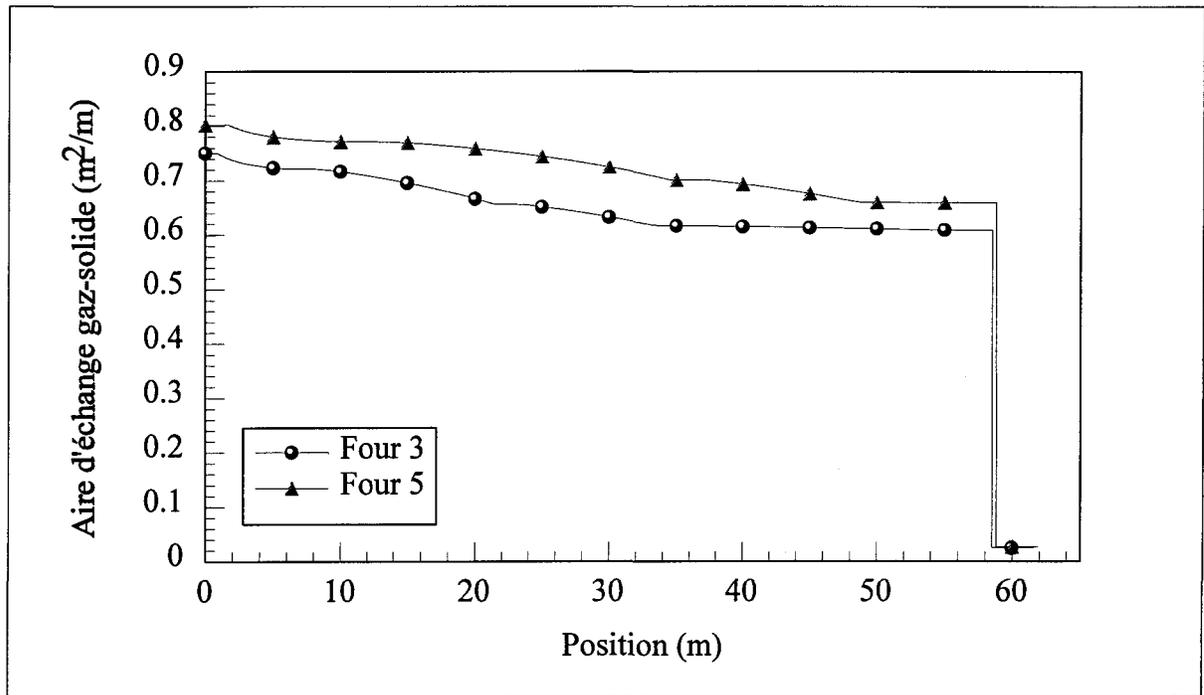


Figure 3.8 Comparaison de l'aire d'échange entre le gaz et le solide pour les fours 3 et 5.

Bien que le four 5 tourne plus vite que le four 3 (1,364 contre 1,154 rpm) et que son aire d'échange gaz-solide soit plus grande (figure 3.8), la vitesse du gaz est plus élevée dans le four 3 compte tenu de son plus petit diamètre intérieur (figure 3.7). Or, d'après le modèle de poussière de Tackie et al. (équation 2.57), on voit que c'est la vitesse du gaz qui influence le plus le taux de poussierage, avec une puissance de 4,45. Alors le seul changement de vitesse du gaz, même très faible, peut faire changer de façon considérable la quantité de poussière produite dans le four. La figure 3.9 montre l'évolution axiale des taux de poussière produite pour chacun des fours.

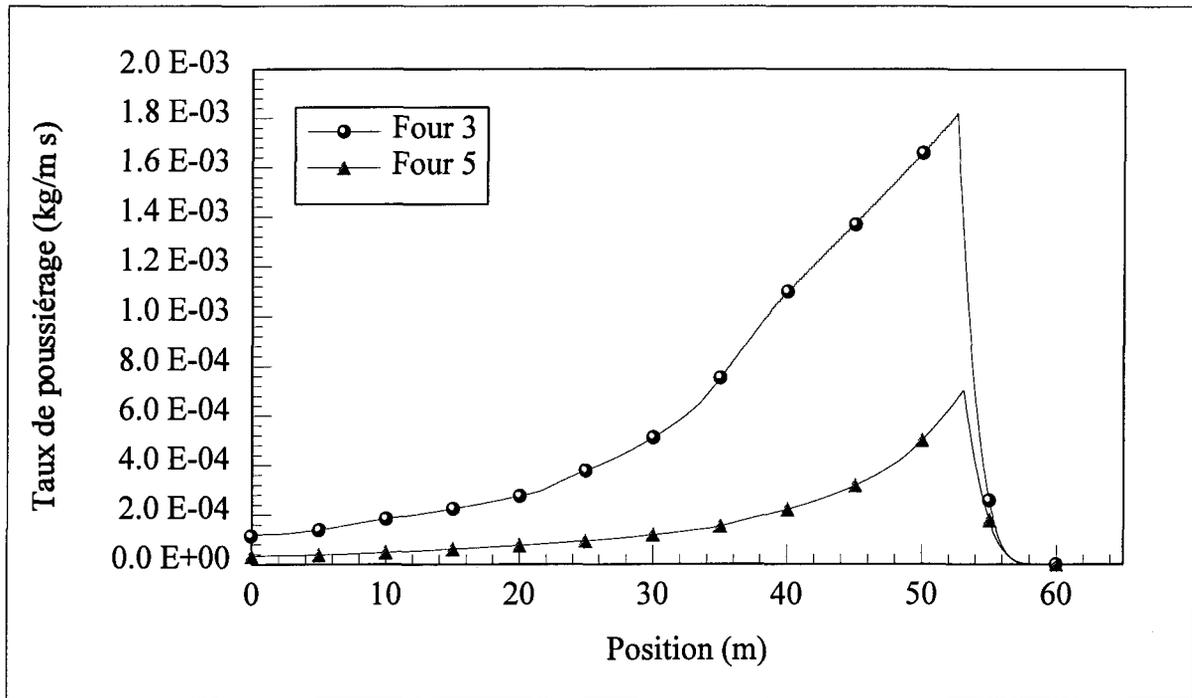


Figure 3.9 Taux de poussierage pour les fours 3 et 5.

Comme on peut le voir sur cette figure, le poussierage le plus intense est celui qui se produit au niveau du nez de la flamme, endroit où le gaz est généralement le plus chaud. Il suffit en effet de vérifier l'équation pour la vitesse du gaz donnée au tableau 2.12 du chapitre précédent pour constater que celle-ci est directement proportionnelle à la température du gaz.

Afin d'observer maintenant l'influence de la poussière sur les profils thermiques, les deux modèles de poussierage ont été utilisés sur chacun des deux fours. Comme il a été mentionné précédemment, le modèle de Manitiis et al. (1974) a été utilisé pour une

simulation sans poussière et le modèle de Tackie et al. (1989) pour une simulation avec poussière. Les figures qui suivent montrent l'influence de la poussière sur les profils de températures.

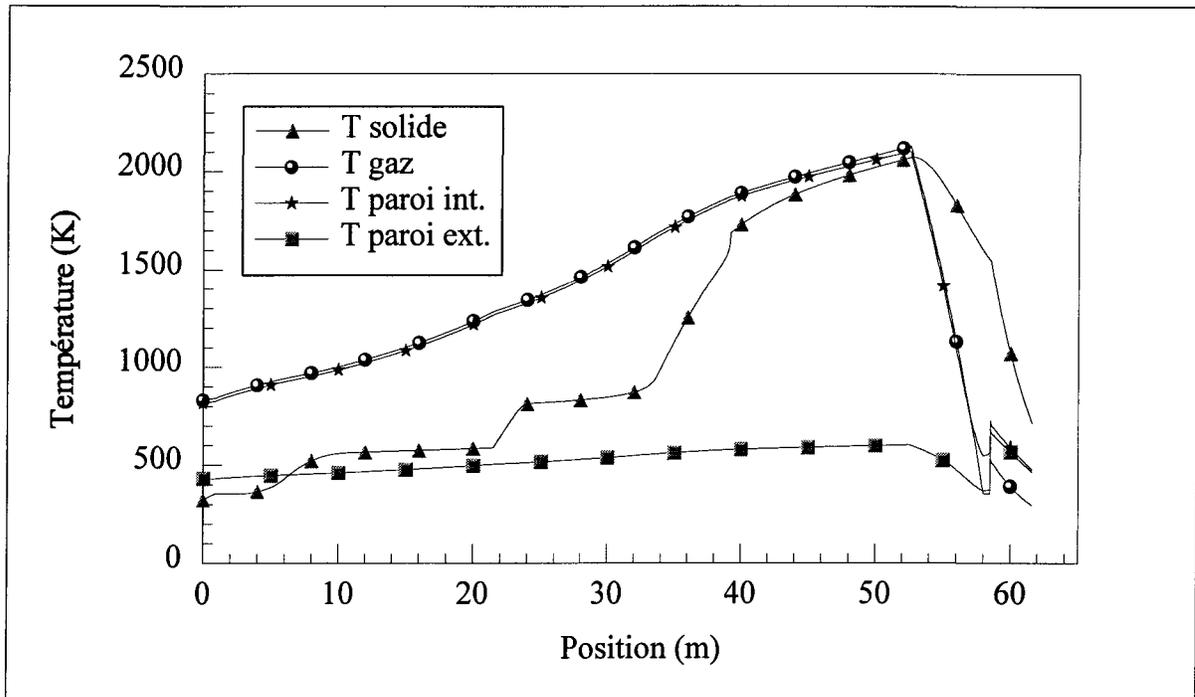


Figure 3.10 Profil de températures pour le four 3 avec poussière.

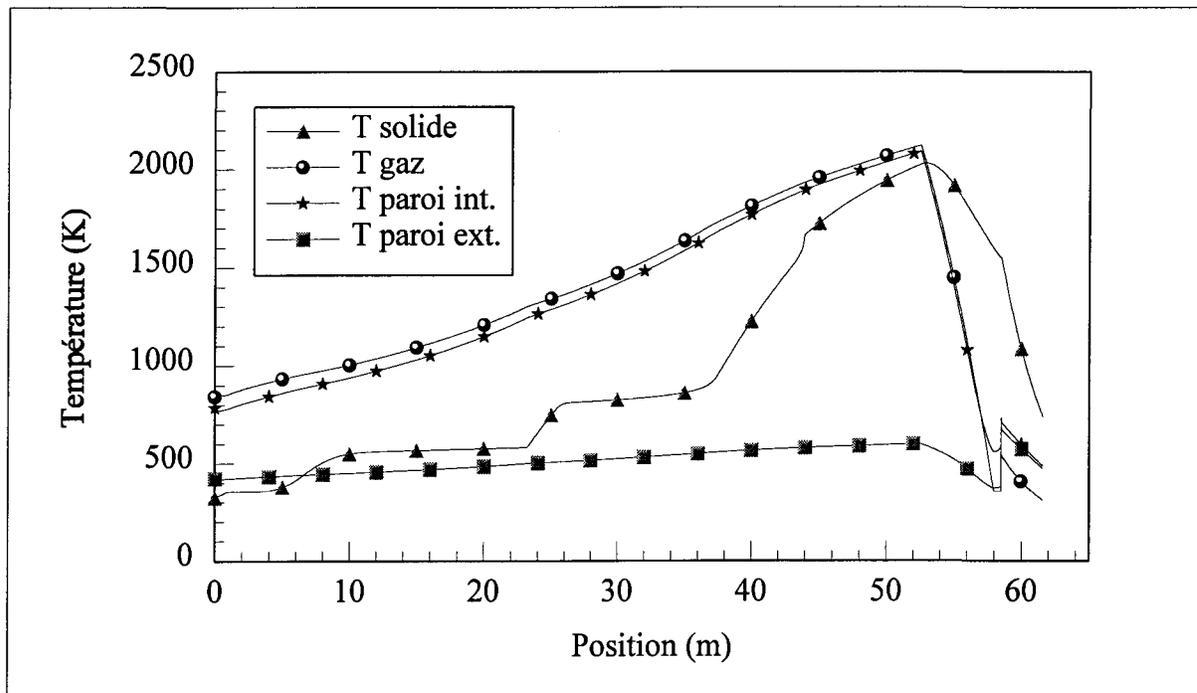


Figure 3.11 Profil de températures pour le four 3 sans poussière.

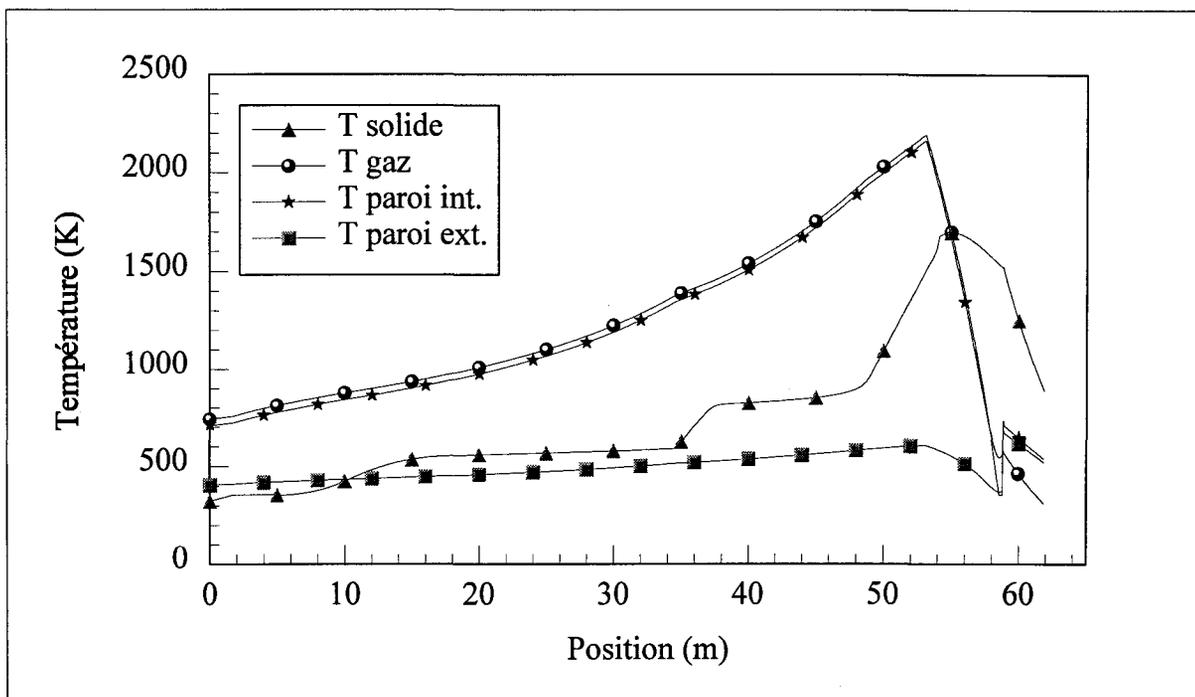


Figure 3.12 Profil de températures pour le four 5 avec poussière.

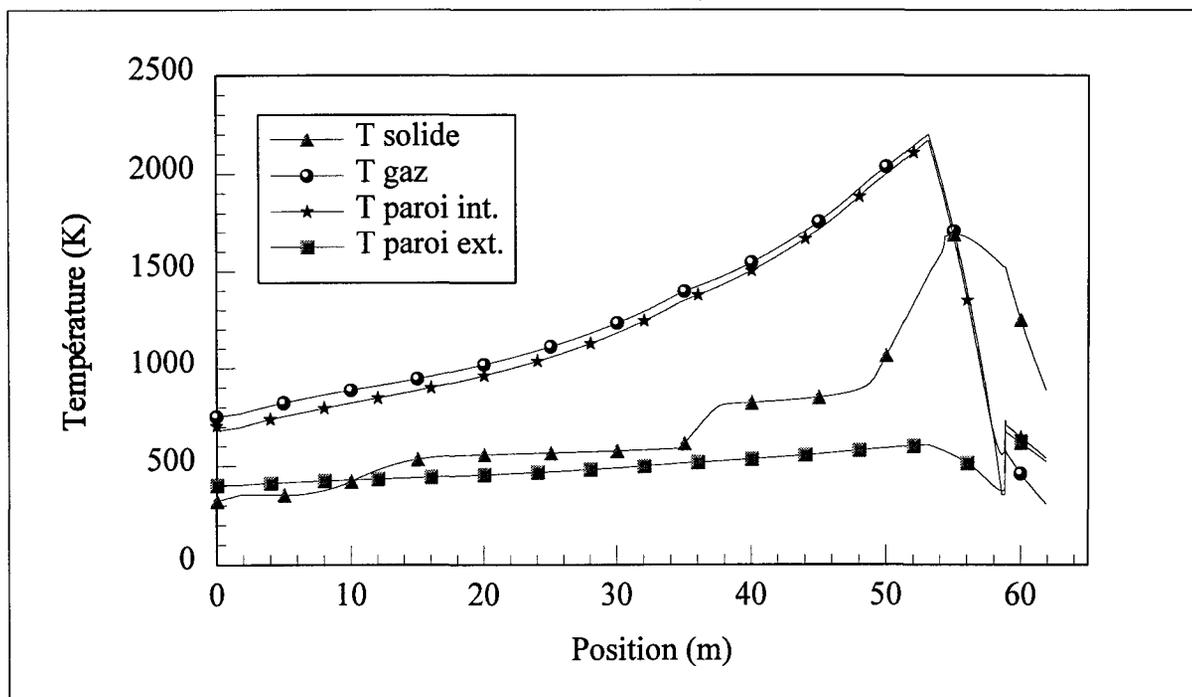


Figure 3.13 Profil de températures pour le four 5 sans poussière.

Compte tenu de leur concentration plus élevée dans le four 3, l'influence des poussières est plus importante dans ce four. On remarque en effet qu'en présence de poussière, il se produit un rapprochement considérable entre la température de la paroi intérieure et celle du gaz ainsi qu'une augmentation plus rapide de la température du solide, ce qui est dû à un meilleur transfert de chaleur de la part du gaz. Afin d'expliquer comment la poussière peut favoriser les échanges thermiques, observons les variations des propriétés du gaz lorsque s'ajoute de la poussière.

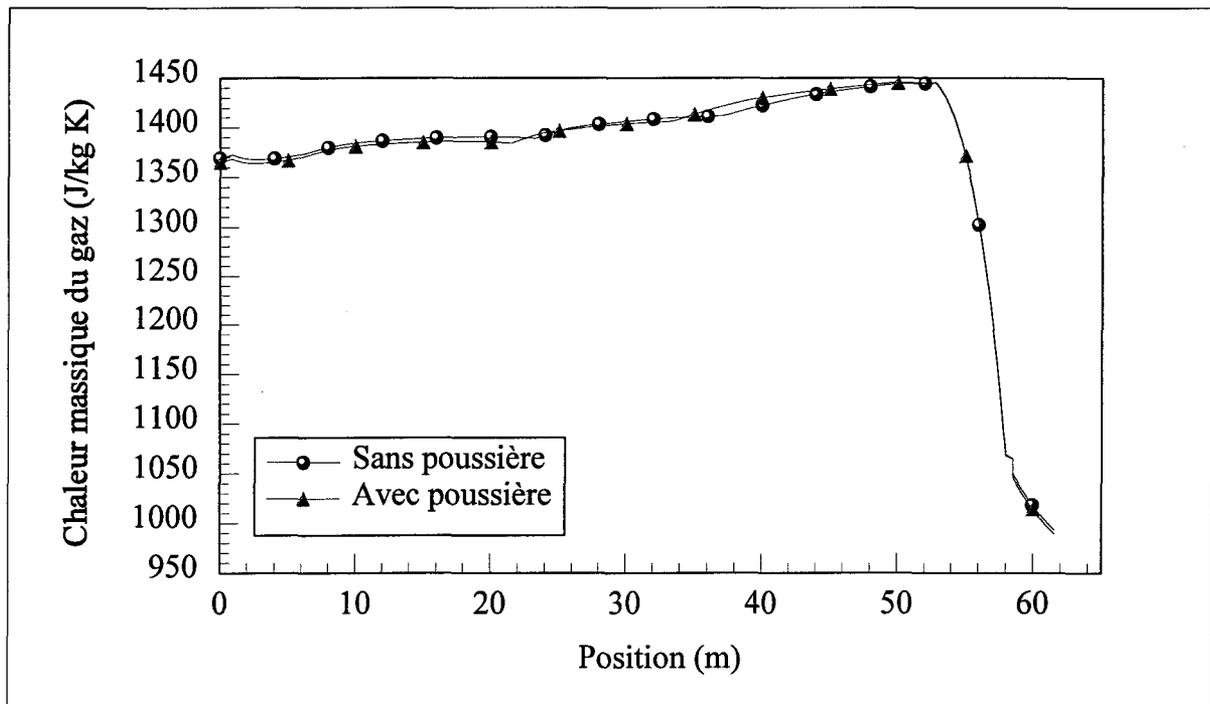


Figure 3.14 Comparaison de la chaleur massique du gaz avec et sans poussière (four 3).

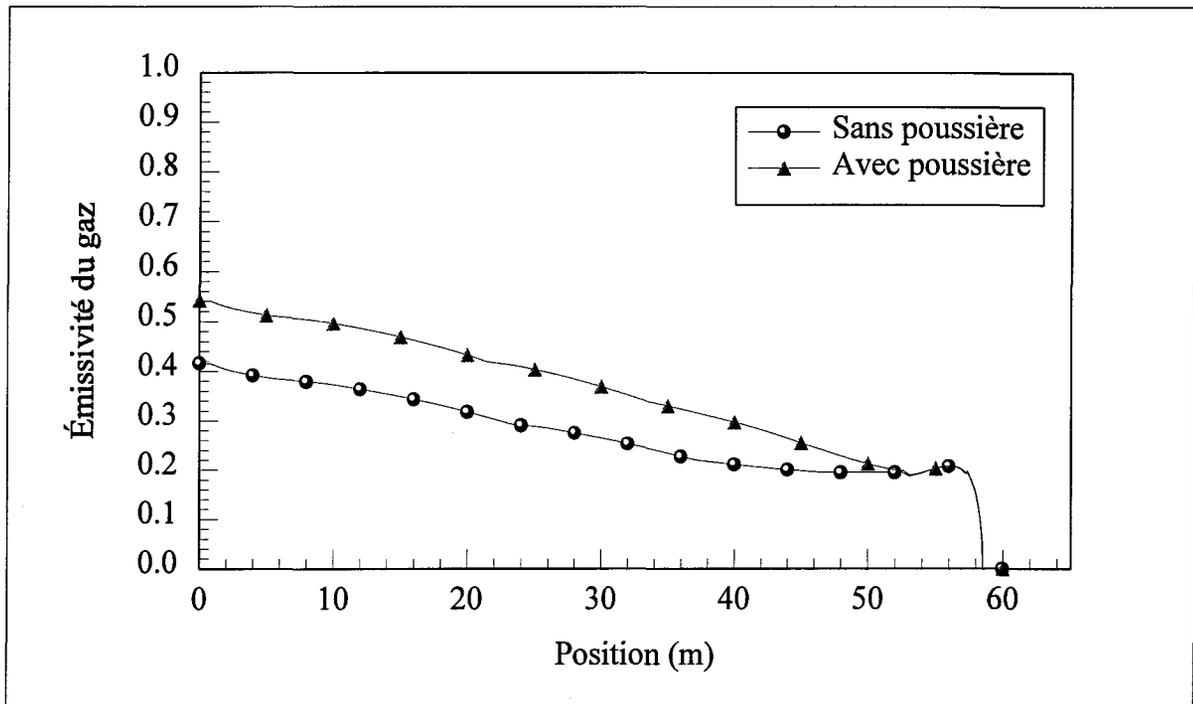


Figure 3.15 Comparaison de l'émissivité du gaz avec et sans poussière (four 3).

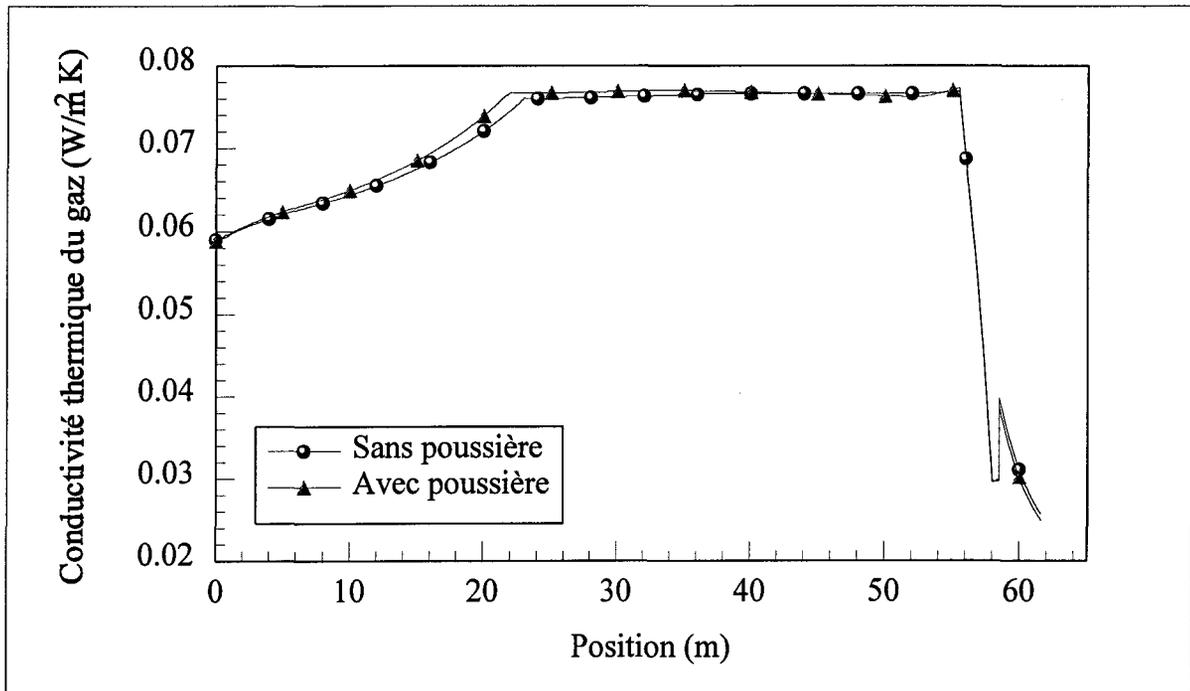


Figure 3.16 Comparaison de la conductivité thermique du gaz avec et sans poussière (four 3).

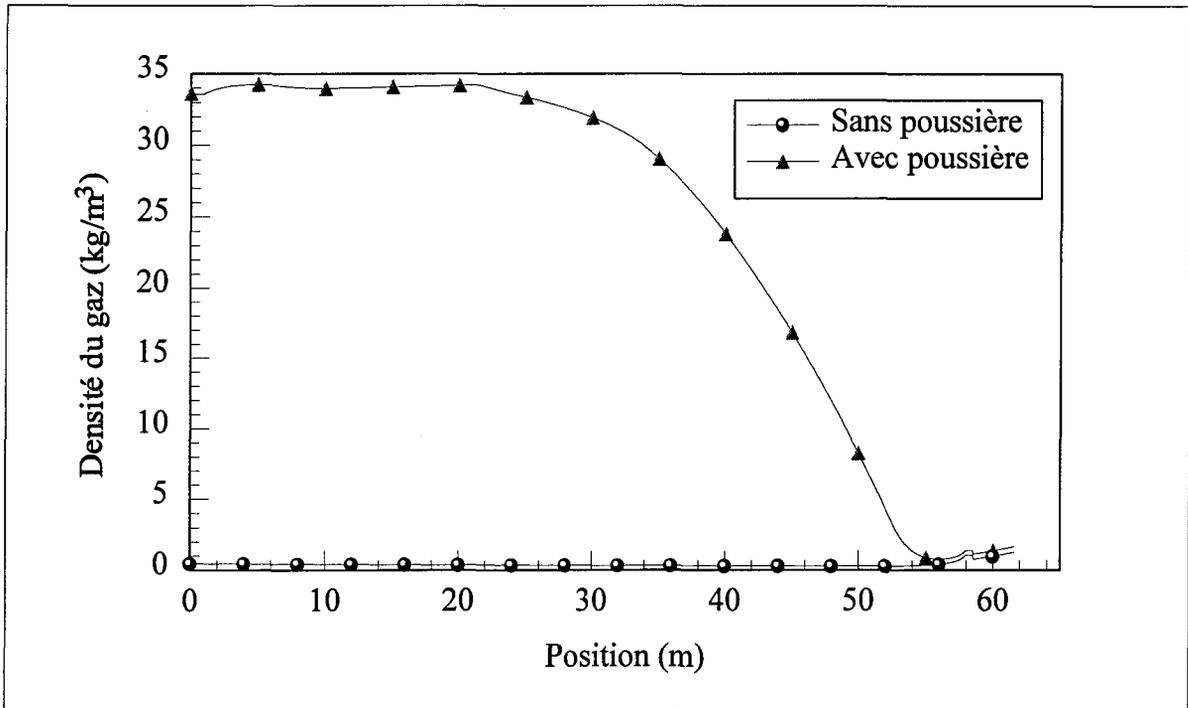


Figure 3.17 Comparaison de la densité du gaz avec et sans poussière (four 3).

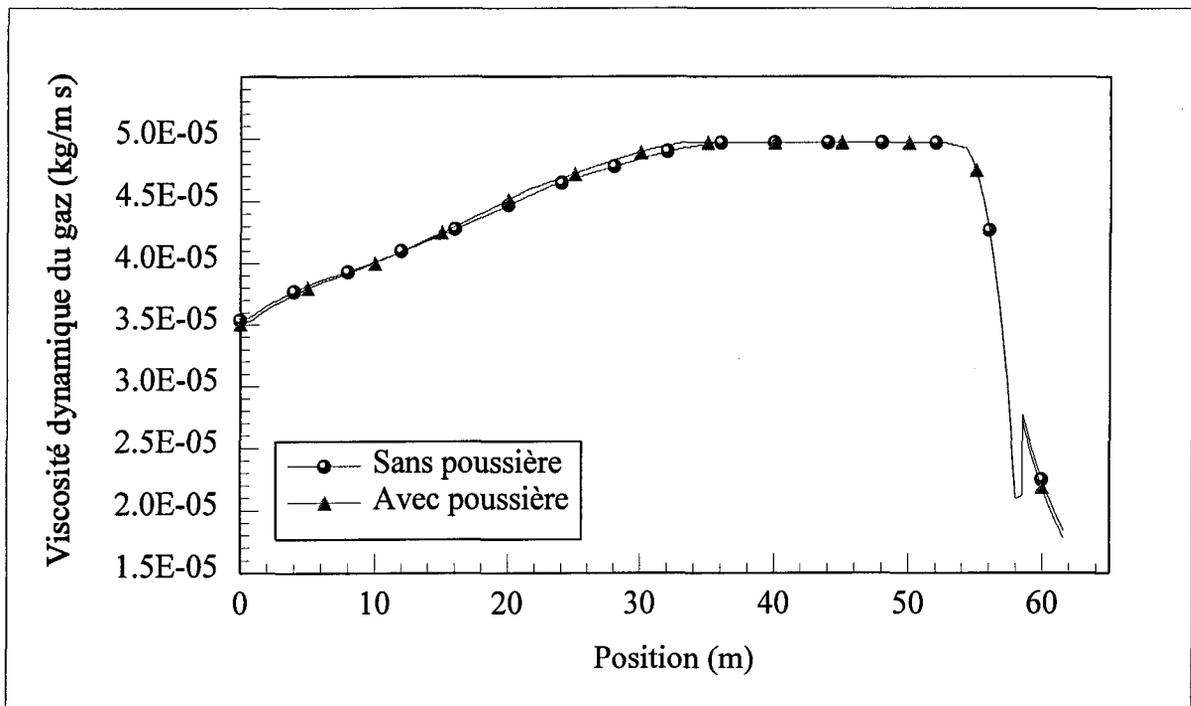


Figure 3.18 Comparaison de la viscosité dynamique du gaz avec et sans poussière (four 3).

On remarque que les propriétés du gaz les plus touchées par la présence de poussière sont l'émissivité et la densité. Une augmentation de l'émissivité favorise directement les échanges de chaleur par rayonnement du gaz vers le solide et du gaz vers le mur. Le mur intérieur devient alors plus chaud et les transformations chimiques du solide s'effectuent plus précocement dans le four.

Pour ce qui est de la densité du gaz, sa très forte augmentation est attribuable à la forte densité des particules d'alumine (tableau 2.2). Une augmentation de la densité favorise un meilleur transfert de chaleur par convection entre le gaz et le mur en faisant augmenter le nombre de Reynolds du gaz (équation 2.67), c'est ce qui explique l'élévation de la température du mur lorsqu'il y a présence considérable de poussière dans le gaz. Dans le four sans poussière, le transfert de chaleur par convection entre le gaz et le mur représente environ 15% du transfert de chaleur total du gaz au mur (convection et rayonnement). Par contre, avec poussière, le transfert de chaleur par convection représente environ 75% de ce transfert de chaleur total.

Les figures qui suivent montrent maintenant l'influence de la poussière sur l'intensité des différents transferts de chaleur se produisant dans le four numéro 3.

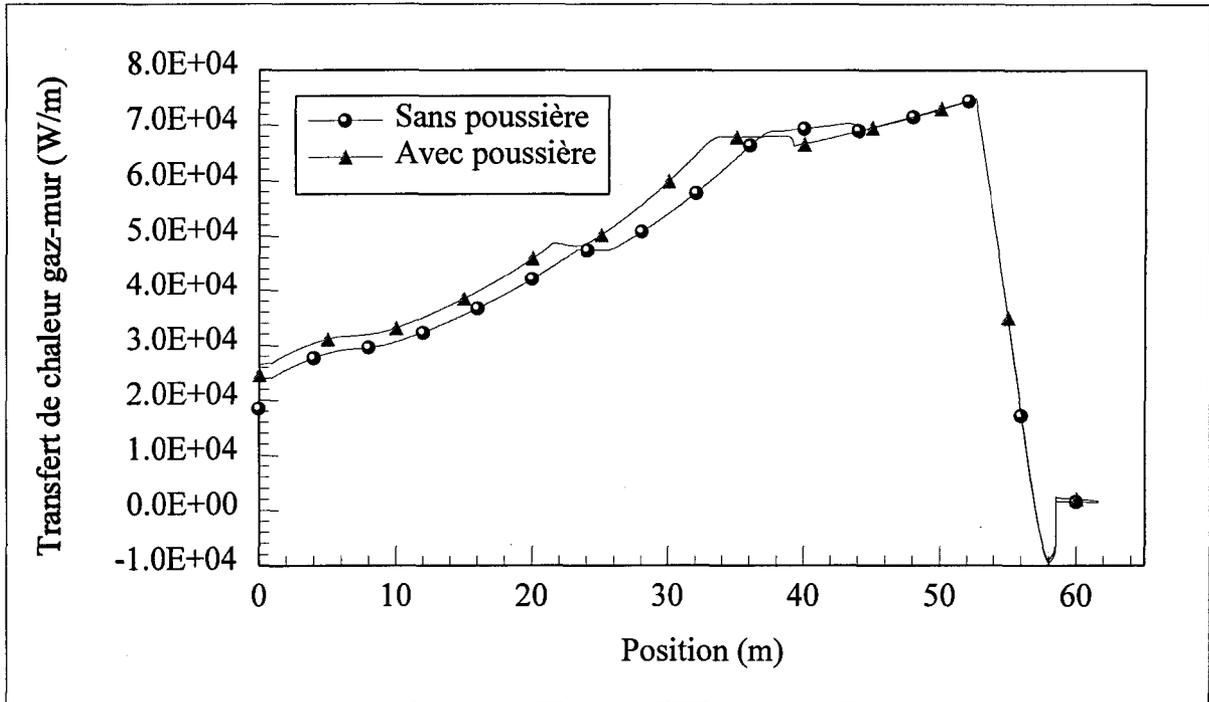


Figure 3.19 Transfert de chaleur entre le gaz et le mur, avec et sans poussière (four 3).

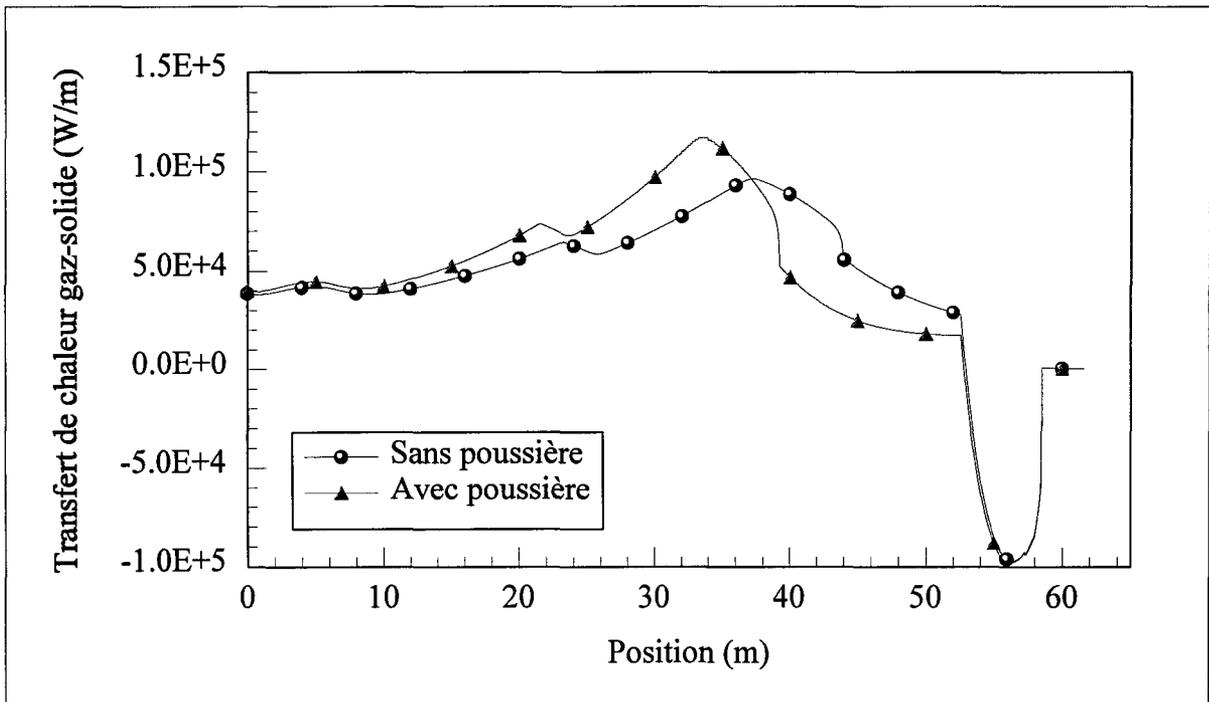


Figure 3.20 Transfert de chaleur entre le gaz et le solide, avec et sans poussière (four 3).

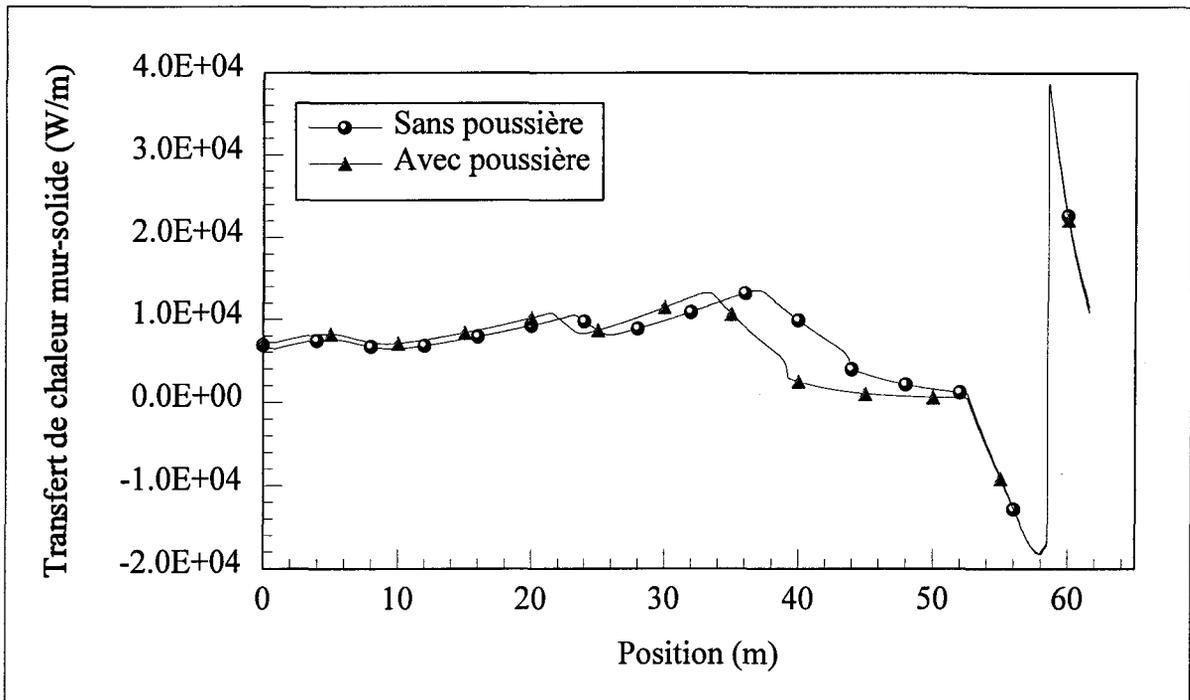


Figure 3.21 Transfert de chaleur entre le mur et le solide, avec et sans poussière (four 3).

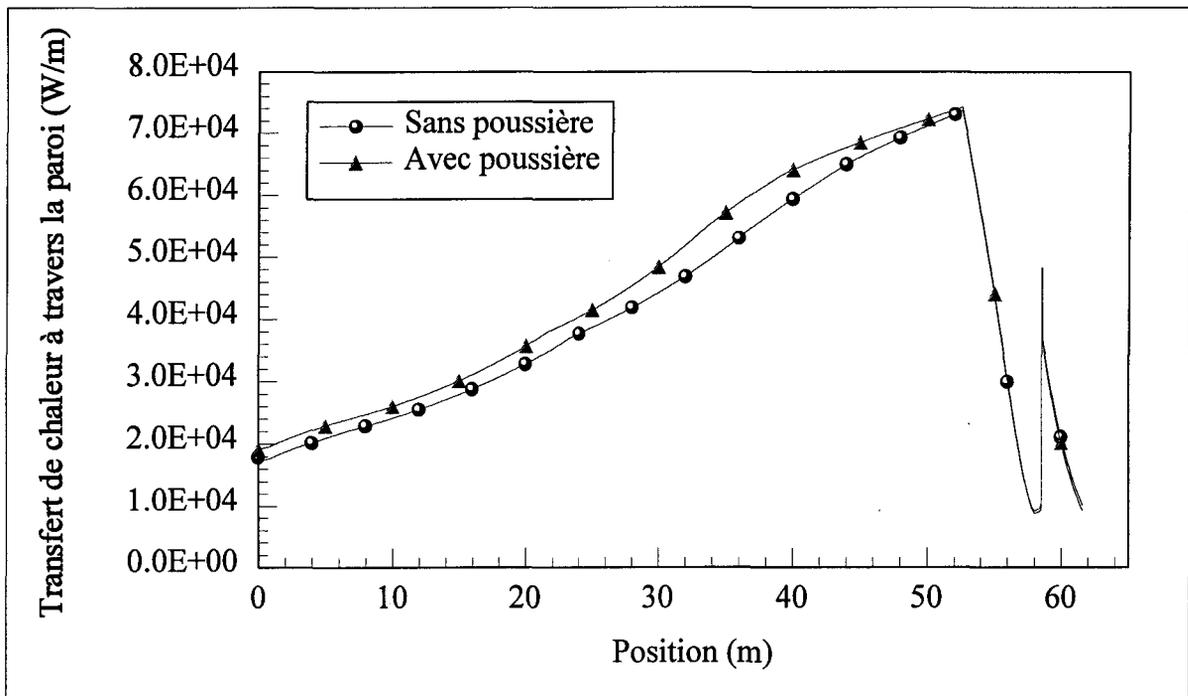


Figure 3.22 Transfert de chaleur par conduction à travers la paroi, avec et sans poussière (four 3).

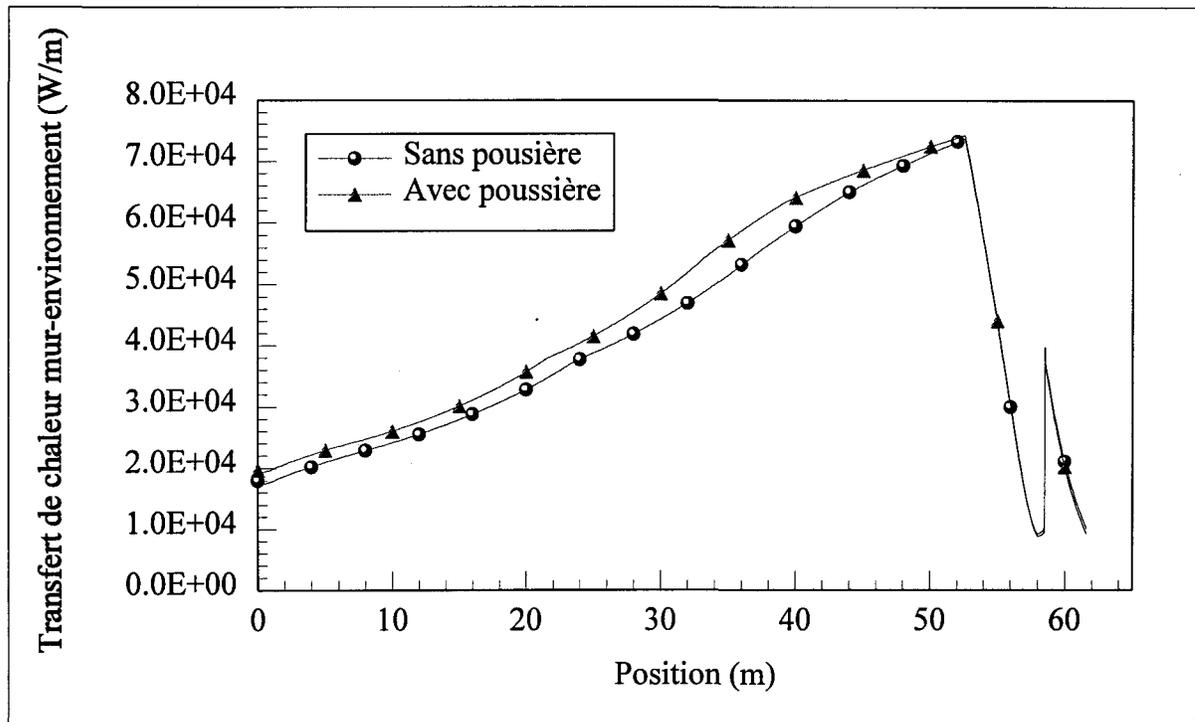


Figure 3.23 Transfert de chaleur entre le mur extérieur et l'environnement, avec et sans poussière (four 3).

On remarque à partir des figures 3.20 et 3.21 que les transferts de chaleur vers le solide sont améliorés par la poussière seulement dans la première partie du four. À partir d'environ 35 mètres, les transferts de chaleur se trouvent même diminués par la présence de poussière, ceci étant dû à un solide plus chaud (figures 3.10 et 3.11). Le phénomène est également rencontré au niveau du transfert de chaleur entre le gaz et la paroi intérieure mais de façon moins prononcée (figure 3.19). Pour ce qui est du transfert de chaleur par conduction à travers la paroi celui-ci se trouve augmenté sur toute la longueur du four. Et en ce qui a trait finalement aux refroidisseurs planétaires, la poussière n'influence

pratiquement pas les échanges thermiques puisque sa concentration y est très faible (< 0,02%).

3.4 Validation du modèle

Des mesures en usine ont déjà été effectuées sur les fours 3 et 5. Or afin de vérifier si les résultats du modèle coïncident avec les mesures réelles, des comparaisons ont été effectuées avec des mesures d'usine réalisées entre 1994 et 1996. Les résultats apparaissent aux tableaux 3.5 et 3.6 ainsi qu'à la figure 3.24. Notons cependant que compte tenu des valeurs expérimentales rares, la validation ne peut être complète.

Tableau 3.5 Comparaison des résultats du modèle avec les mesures d'usine pour le four 3.

Four #3	Usine	Modèle sans poussière	Modèle avec poussière
Température solide sortie (K)	773,15	740,8	713,12
Température gaz sortie (K)	600 à 755	843,75	828,44
Température calcination * (K)	1755	2027,76	2058,38
Température coque ext. bout froid (K)	478 à 511	419,3	428,06
Température coque ext. bout chaud (K)	522	379,29	369,43
Température coque ext. maximale (K)	644	597,92	600,37
Longueur flamme (m)	3,962 à 6,096	5,99	5,99
Débit de solide sortie (kg/s)	0,861	0,769	0,735
Débit de gaz sortie (kg/s)	5,565	4,0299	4,065
Composition du gaz sec sortie (%)			
CO ₂	9,3	14,3	14,15
O ₂	6,5	3,73	3,69
N ₂	83,1	81,97	81,03
Pourcentage d'humidité dans le gaz sur base sèche sortie (%)	43,0	22,35	22,16

* Température maximale atteinte par le solide

Tableau 3.6 Comparaison des résultats du modèle avec les mesures d'usine pour le four 5.

Four #5	Usine	Modèle sans poussière	Modèle avec poussière
Température solide sortie (K)	773,15	888,27	885,97
Température gaz sortie (K)	N/D	753,13	741,88
Température calcination * (K)	1755	1680,9	1692,3
Température coque bout froid (K)	N/D	402,02	405,11
Température coque bout chaud (K)	N/D	375,4	371,73
Température coque maximale (K)	N/D	609,0	608,38
Longueur flamme (m)	4,572 à 7,01	5,75	5,75
Débit de solide sortie (kg/s)	1,25	1,13	1,12
Débit de gaz sortie (kg/s)	N/D	4,293	4,303
Composition du gaz sec sortie (%)			
CO ₂	N/D	15,4	15,39
O ₂	N/D	2,21	2,2
N ₂	N/D	82,34	82,1
Pourcentage d'humidité dans le gaz sur base sèche sortie (%)	N/D	27,46	27,39

* Température maximale atteinte par le solide

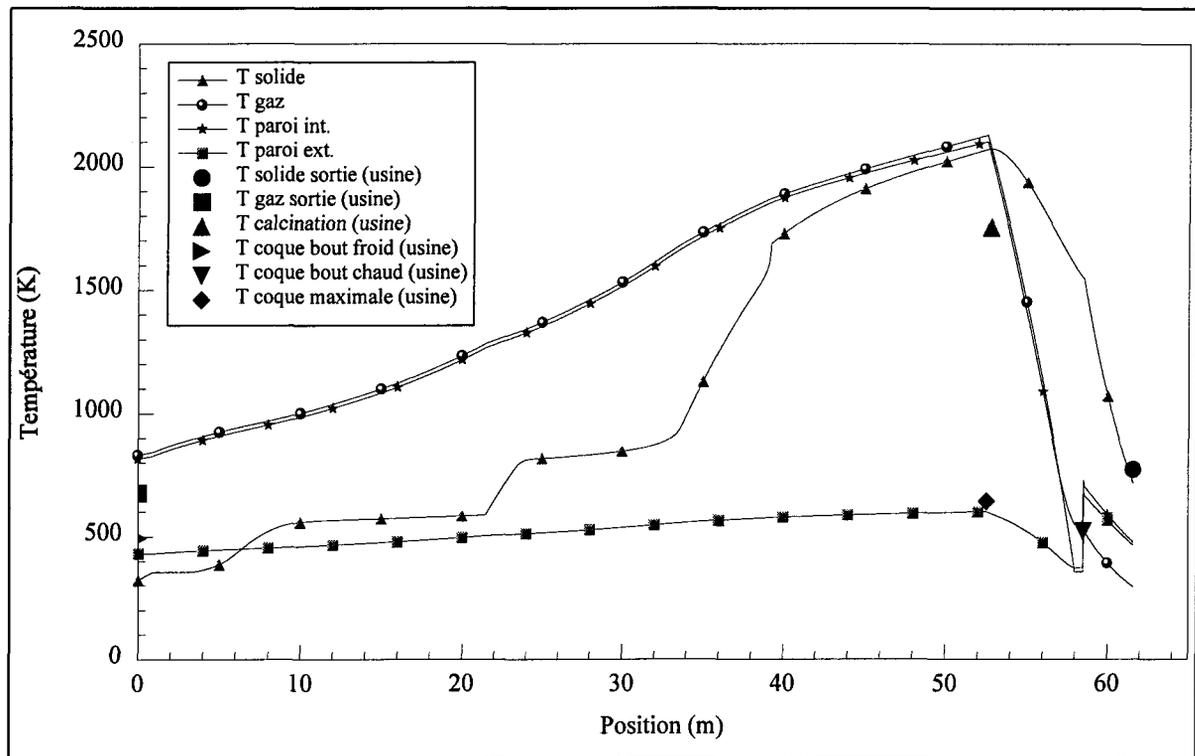


Figure 3.24 Comparaison entre les températures obtenues par le modèle et les mesures d'usine (four 3, avec poussière).

À partir du tableau 3.5, on remarque tout de suite les grandes différences entre le modèle et le four réel en ce qui concerne le contenu en vapeur d'eau dans le gaz ainsi que le contenu en oxygène. Ceci peut être expliqué par le fait que dans le cas réel, l'air primaire et l'air secondaire contiennent une certaine humidité, ce qui n'est pas considéré dans le modèle. De plus, dans les fours réels, du chlore gazeux, Cl_2 , est injecté à l'extrémité chaude du four, juste au niveau du brûleur.

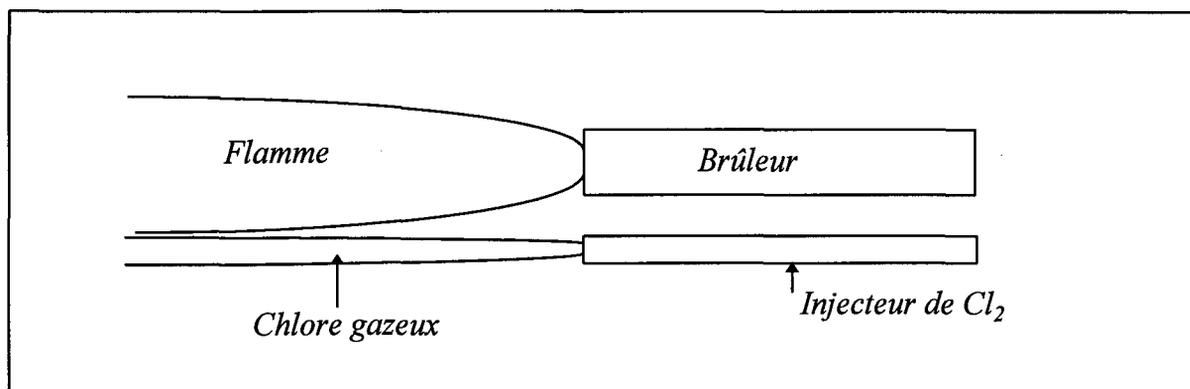
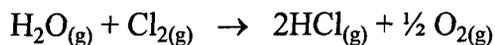


Figure 3.25 Injection du chlore dans le four de calcination.

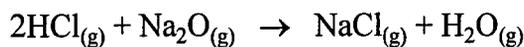
On injecte actuellement 15 livres à la minute de chlore dans les fours de calcination (0,113 kg/s). Le rôle du chlore est d'éliminer l'oxyde basique de sodium (soda) présent dans le solide (environ 0,37%) en réagissant avec lui pour former du chlorure de sodium et de l'oxygène,



Par contre la vapeur d'eau présente dans le four réagit également avec le chlore pour former cette fois de l'acide chlorhydrique et de l'oxygène,



Et l'acide chlorhydrique formé réagit avec le soda pour former du NaCl et de la vapeur d'eau,



Il est donc fort probable que les différences en vapeur d'eau et en oxygène entre le modèle et le four réel proviennent de ces réactions, qui, rappelons-le, ne sont pas considérées dans le modèle.

Pour ce qui est de la température de calcination du solide, une différence de 300 K est observée dans le cas du four 3, alors que pourtant la prédiction du modèle est très bonne pour le four 5. Parmi les raisons qui peuvent expliquer la différence obtenue, on peut en citer deux: a) le modèle ne considère pas l'addition de fluorure d'aluminium (AlF_3) comme c'est le cas en pratique; les études tendent en effet à démontrer que la présence de AlF_3 contribue à abaisser la température à laquelle débute la réaction de transformation de l'alumine gamma en alumine alpha, cette baisse pouvant aller jusqu'à 200°C selon Zivkovic et al. (1979); b) le modèle suppose que toute la chaleur libérée par la réaction exothermique de l'alumine gamma en alumine alpha est absorbée par le solide.

La légère différence de température pour la coque extérieure est quant à elle attribuable en grande partie à l'isolation du four. Pour le four réel, on retrouve, sur toute sa longueur, plusieurs types de réfractaires de conductivité thermique différente. De plus, l'usure des réfractaires contribue à réduire la résistance au transfert de chaleur à travers la paroi donc à faire augmenter sa température extérieure. Par contre, il est aussi fréquent de voir l'apparition de croûte d'alumine sur la paroi intérieure du four, juste avant l'entrée dans les refroidisseurs, ce qui ajoute une résistance thermique à la paroi et du même coup fait diminuer les températures dans le mur. Compte tenu du manque d'informations sur la disposition et l'usure des réfractaires dans le four, le modèle ne considère qu'un seul réfractaire de conductivité thermique et d'épaisseur uniformes. Il ne tient pas compte non plus de la formation de croûte sur la paroi interne. Par contre, vu les différences tout de

même raisonnables entre les résultats expérimentaux et ceux du modèle, on peut dire que la conductivité thermique utilisée dans le modèle est acceptable.

Le débit de solide à la sortie est plus faible que pour le four réel. Il est difficile d'expliquer ce phénomène puisque même si on regarde les résultats pour un four sans poussière (c'est-à-dire sans perte de solide vers le gaz), le débit est quand même plus faible, que ce soit pour le four 3 ou le four 5. Il semble donc y avoir inconsistance au niveau des valeurs expérimentales rapportées à l'entrée et à la sortie du four.

Le débit de gaz à la sortie du four est également plus faible dans le modèle. Ceci peut être expliqué en partie par la présence de chlore dans le four réel qui contribue à faire augmenter le débit de gaz. De plus, plus le débit de gaz est élevé, plus sa vitesse augmente et ainsi plus le poussierage est favorisé, ce qui contribue à faire augmenter davantage le débit de gaz à la sortie du four. Mais même en ajoutant ces différences au modèle, on n'obtient toujours pas le même débit qu'à l'usine.

On peut toutefois remarquer les valeurs très rapprochées entre le modèle et le four réel pour ce qui est des températures de sortie du gaz et du solide, ainsi que pour les longueurs de flamme. Ce qui montre que le modèle, dans son état actuel, est assez représentatif de la situation réelle. Les écarts entre les mesures du four réel et les résultats du modèle, comme le débit de gaz et la température de calcination du solide, pourront

certainement être réduits par l'ajout du chlore dans les gaz, ainsi que du fluorure d'aluminium dans le solide.

3.5 Étude paramétrique

Comme il a déjà été mentionné précédemment, l'usine Vaudreuil d'Arvida procède à l'occasion à différents tests sur les conditions d'entrée de ses fours dans le but d'augmenter la production d'alumine et d'améliorer le produit obtenu. On y fait généralement varier les débits d'hydrate à l'entrée, de gaz naturel et d'air primaire. Les autres variables telles que la vitesse de rotation ou la longueur du four sont des paramètres fixes qui ne peuvent, en pratique, être modifiés.

Afin de démontrer l'efficacité du modèle et aussi pour comprendre comment les conditions d'entrées peuvent influencer la production, une étude paramétrique a été effectuée avec le modèle. Les débits de gaz naturel, d'air primaire et d'hydrate ont alors été modifiés, et ce pour les deux fours. Les variations ont été exagérées à dessein pour bien montrer leur influence sur les profils thermiques des fours 3 et 5. Le tableau 3.7 montre les conditions prévalant présentement à l'usine Vaudreuil en ce qui a trait aux quantités de solide, de gaz naturel et d'air primaire injectés, tandis que les tableaux 3.8 et 3.9 montrent les différents résultats fournis par le modèle lorsqu'on fait varier ces conditions d'entrée. Il faut préciser que lorsqu'un paramètre est changé, toutes les autres conditions sont gardées à

leur valeur normale d'opération. De plus, on notera que les longueurs des transformations font place, à certains endroits, à des pourcentages. Ceci signifie que ces transformations ne se sont pas complétées et que le solide à la sortie des refroidisseurs planétaires n'est pas composé à 100% d'alumine alpha mais plutôt selon la composition qui est mentionnée dans le tableau.

Tableau 3.7 Conditions d'opération actuelles des fours 3 et 5.

Four	Débit d'hydrate G_s (kg/s)	Débit de gaz naturel G_f (kg/s)	Débit d'air primaire G_{ap} (kg/s)
3	1,306	0,163	0,379
5	1,917	0,175	0,379

Tableau 3.8 Tests paramétriques effectués sur le four numéro 3 (sans poussière).

	Normal	$G_s / 2$ 0,653 kg/s	$G_s \times 2$ 2,612 kg/s	$G_f / 2$ 0,0815 kg/s	$G_f \times 2$ 0,326 kg/s	$G_{ap} / 2$ 0,1895 kg/s	$G_{ap} \times 2$ 0,758 kg/s
T_g sortie (K)	843,75	1093,75	684,38	662,50	568,75	818,75	881,25
T_s sortie (K)	740,34	484,57	605,21	386,10	323,52	797,95	667,19
T_s max. (K)	2029,58	2086,06	1077,50	819,71	544,95	2098,20	1896,80
T_g max. (K)	2121,44	2119,67	2107,95	1354,35	865,70	2182,90	2000,70
L évapo. (m)	6,50	3,85	9,95	9,80	11,45	6,75	6,20
L tri-mono (m)	15,95	7,55	26,05	30,65	13,4 % tri	16,70	14,95
L mono-gamma (m)	19,05	15,85	14,85	46,6 % mono	86,6 % mono	18,35	20,25
L gamma-alpha (m)	8,10	7,85	100 % gamma	53,4 % gamma	0 % gamma	7,80	8,80
T fin tri (K)	584,97	615,95	571,92	566,57	—	582,50	585,90
T fin mono (K)	985,77	990,54	981,48	—	—	983,90	983,00
T fin gamma (K)	1663,85	1654,17	—	—	—	1674,16	1659,24
T évapo. (°C)	80,95	86,00	81,60	74,70	77,17	81,20	81,03
L flamme (m)	5,99	5,99	5,99	9,04	4,10	4,10	9,04
Richesse flamme	0,85	0,85	0,85	0,42	1,70	0,89	0,76
Excès d'air (%)	17,99	17,99	17,99	136,00	Défaut d'air	11,30	31,40

Tableau 3.9 Tests paramétriques effectués sur le four numéro 5 (sans poussière).

	Normal	G _s / 2 0,959 kg/s	G _s x 2 3,834 kg/s	G _r / 2 0,0875 kg/s	G _r x 2 0,350 kg/s	G _{ap} / 2 0,1895 kg/s	G _{ap} x 2 0,758 kg/s
T _g sortie (K)	753,13	956,26	678,91	650,0	568,75	725,00	796,88
T _s sortie (K)	886,55	669,69	576,57	454,83	355,04	912,35	773,09
T _s max. (K)	1680,99	2137,46	849,40	811,57	544,90	1693,91	1515,65
T _g max. (K)	2197,24	2187,40	2182,05	1424,29	875,35	2243,05	2078,17
L évapo. (m)	10,05	6,20	13,05	13,00	15,35	10,50	9,35
L tri-mono (m)	22,95	12,35	28,60	30,55	47,2 % tri	24,15	21,35
L mono-gamma (m)	21,35	22,50	20,1 % mono	78,6 % mono	52,8 % mono	20,55	22,80
L gamma-alpha (m)	7,15	8,45	79,9 % gamma	21,4 % gamma	0 % gamma	6,70	47,9% gam 52,1% alph
T fin tri (K)	590,95	612,35	590,40	582,48	—	589,11	591,29
T fin mono (K)	998,28	1001,59	—	—	—	994,16	993,26
T fin gamma (K)	1669,98	1681,52	—	—	—	1685,52	—
T évapo. (°C)	81,26	84,26	84,20	77,48	79,22	81,57	81,04
L flamme (m)	5,75	5,75	5,75	8,72	3,96	3,96	8,72
Richesse flamme	0,91	0,91	0,91	0,45	1,82	0,96	0,82
Excès d'air (%)	9,90	9,90	9,90	119,81	Défaut d'air	3,65	22,41

3.5.1 Effets du débit de gaz naturel

À partir des tableaux 3.8 et 3.9 on remarque que le paramètre qui peut influencer le plus la production est sans contredit le débit de gaz naturel. En le diminuant de moitié, le modèle indique une flamme longue, pauvre et froide. Or, selon la théorie présentée à la section 5 du chapitre précédent, on voit que sous ces conditions, il ne devrait pas y avoir de flamme puisque sa richesse est inférieure à 0,5, et ce pour les deux fours. Par contre, si on double le débit de gaz naturel, la flamme manque d'air, raccourcit et le gaz naturel ne brûle pas complètement. La flamme devient encore plus froide que précédemment, avec 1300°C de moins qu'une flamme stoechiométrique. La figure suivante montre les différents profils de températures obtenus lors de la variation du débit de gaz naturel pour les fours 3 et 5.

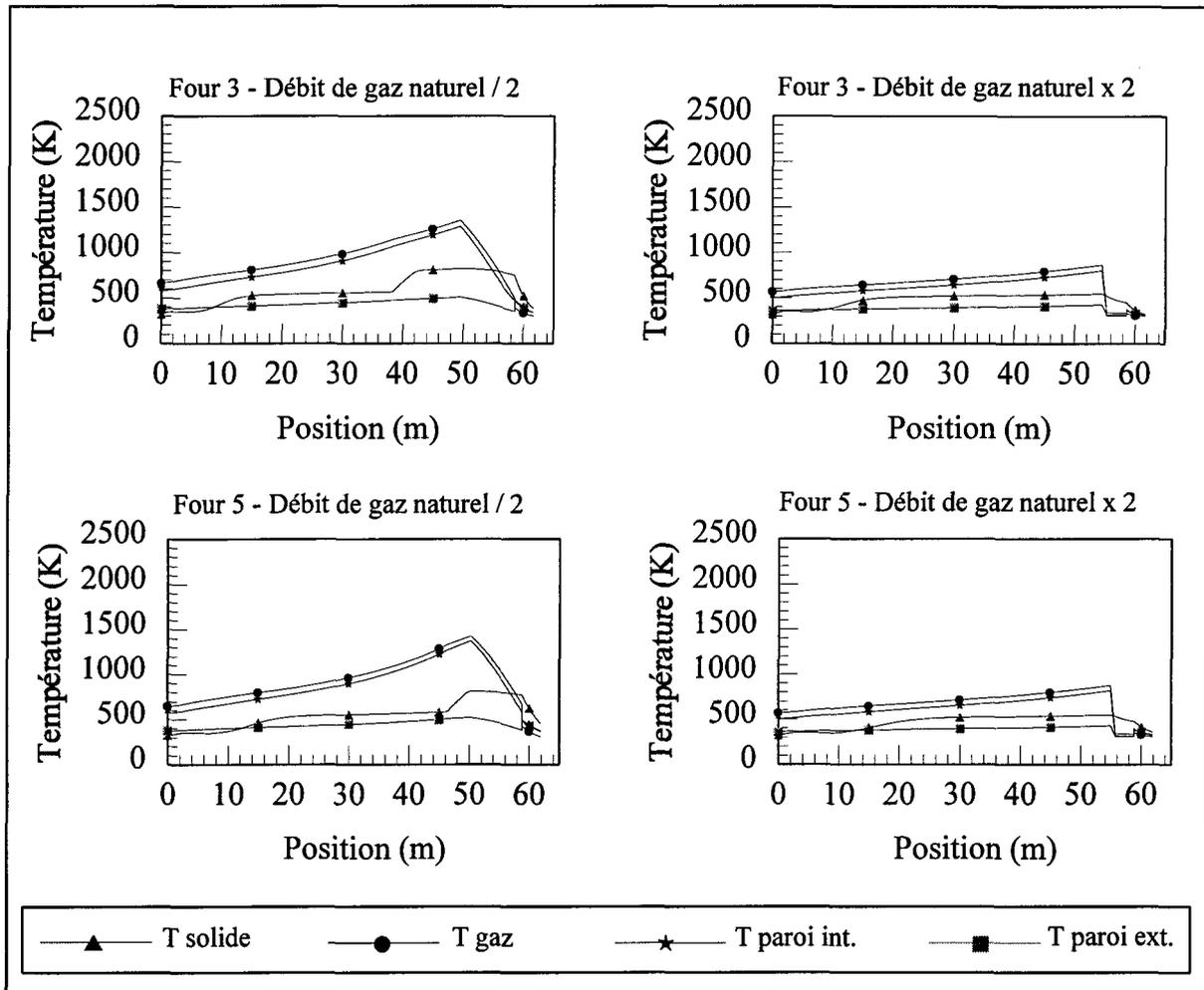


Figure 3.26 Effet du débit de gaz naturel sur les profils thermiques.

Comme les températures à l'intérieur du four sont plus froides qu'en fonctionnement normal, le solide ne reçoit pas suffisamment de chaleur et les transformations se font sur de plus longues distances dans le four. Certaines, même, ne réussissent tout simplement pas à se compléter. Le tableau qui suit montre la composition du solide obtenu à la sortie des refroidisseurs planétaires lorsqu'on fait varier le débit de gaz naturel.

Tableau 3.10 Influence de la quantité de gaz naturel sur la composition du solide à la sortie.

Four	Normal	$G_f / 2$	$G_f \times 2$
3	100 % $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	46,6 % $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	13,4 % $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
		53,4 % $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$	86,6 % $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$
5	100 % $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	78,6 % $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	47,2 % $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
		21,4 % $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$	52,8 % $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

On voit donc que le fait de trop diminuer ou de trop augmenter le débit de gaz naturel a exactement le même effet sur les transformations chimiques de l'alumine. Le gaz étant ainsi moins chaud, le solide ne reçoit pas assez de chaleur et ne peut compléter la totalité de ses transformations. On voit donc toute l'importance d'introduire l'air et le gaz naturel sous un ratio stoechiométrique (section 5, chapitre 2). Toutefois, en pratique, pour s'assurer d'obtenir une combustion complète du gaz naturel, il est préférable d'opérer avec un léger excès d'air.

3.5.2 Effets du débit d'hydrate

Un autre paramètre qui influence passablement les profils thermiques du four est l'alimentation en hydrate. Lorsqu'on diminue le débit d'hydrate, le volume de solide à transformer par tranche de four se trouve diminué et les transformations chimiques se font plus rapidement, donc sur une distance plus courte dans le four. Le gaz sort du four

également plus chaud puisqu'il a moins de chaleur à fournir au solide (figure 3.28). L'inverse a évidemment l'influence contraire. En augmentant le débit d'hydrate à l'entrée du four on augmente le volume de solide à transformer et les transformations se font sur de plus longues distances. En plus des tableaux 3.8 et 3.9, la figure suivante montre l'ensemble des profils thermique obtenus lorsque le débit d'hydrate à l'entrée est changé.

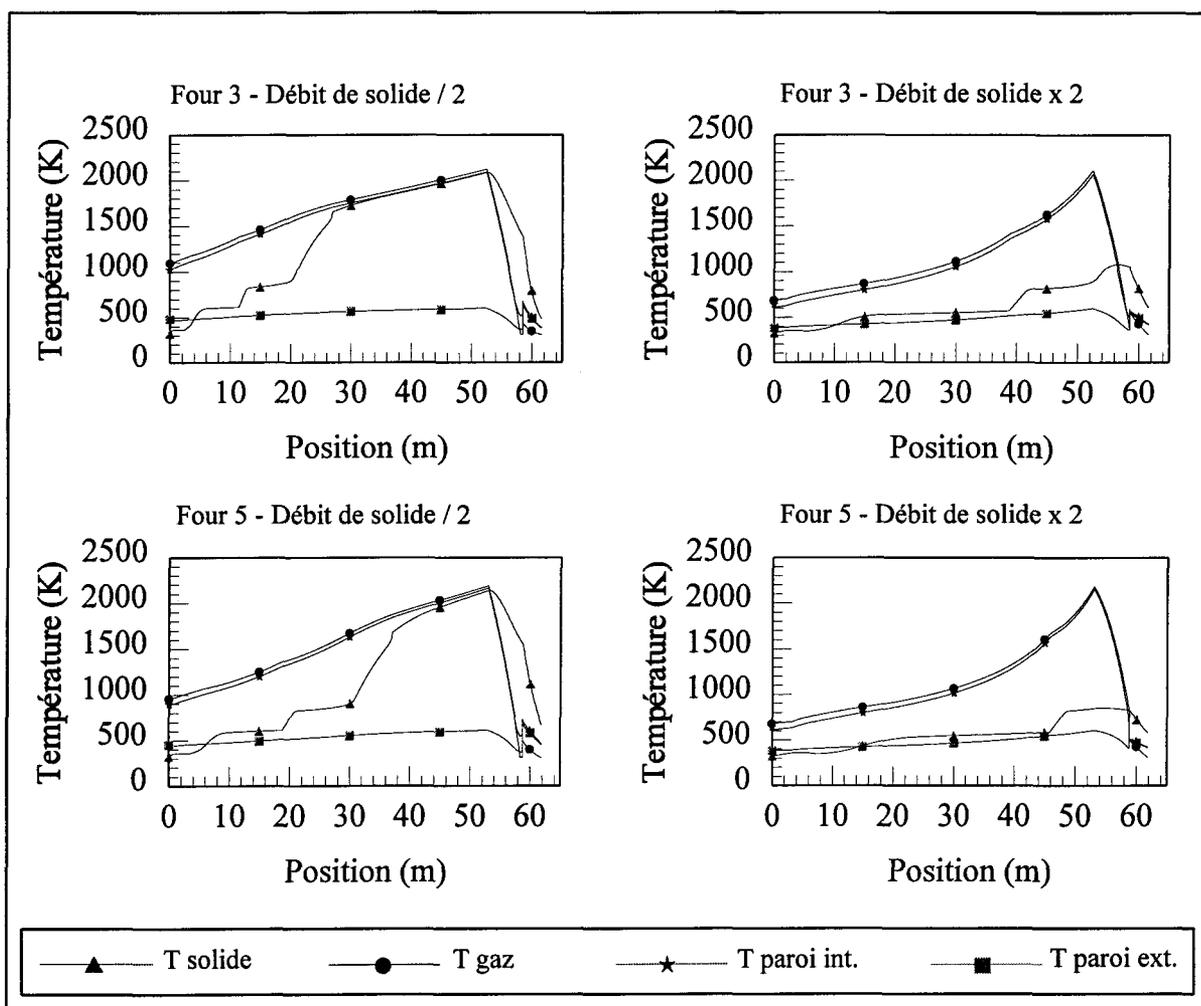


Figure 3.27 Effet du débit de solide initial sur les profils thermiques.

À partir de la figure précédente on remarque que le solide atteint des températures élevées beaucoup plus tôt dans le four lorsqu'on diminue le débit d'hydrate à l'entrée. On remarque aussi que la différence entre le profil thermique du four 3 et du four 5 observée entre les figures 3.1 et 3.2 résiderait en grande partie dans le débit de solide qui est plus élevé dans le four 5. On peut voir en effet qu'en diminuant de moitié le débit de solide dans le four 5, l'allure de son profil thermique se rapproche énormément de l'allure du profil thermique du four 3 en conditions normales (figures 3.1 et 3.11). En doublant maintenant le débit d'hydrate à l'entrée, le solide ne peut suffisamment se réchauffer et les vitesses de réaction se trouvent ainsi affectées. Les longueurs prises par les transformations s'allongent, et le solide sortant des refroidisseurs planétaires ne contient aucune trace d'alumine alpha. Le tableau qui suit montre la composition du solide obtenue par le modèle à la sortie des refroidisseurs planétaires lorsque le débit d'hydrate est doublé par rapport à sa valeur actuelle.

Tableau 3.11 Influence de l'augmentation du débit d'hydrate sur la composition du solide à la sortie des refroidisseurs planétaires.

Four	$G_s \times 2$	
3	100 %	$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$
5	78,6 %	$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$
	21,4 %	$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$

Pour bien montrer comment la chaleur fournie par le gaz au solide est influencée par la quantité de solide dans le four, la figure suivante montre la variation de la température du

gaz à la sortie du four en fonction du débit d'hydrate dans le four. On verra que plus la quantité d'hydrate introduite dans le four est grande plus le gaz doit fournir de chaleur au solide et plus il sort froid du four.

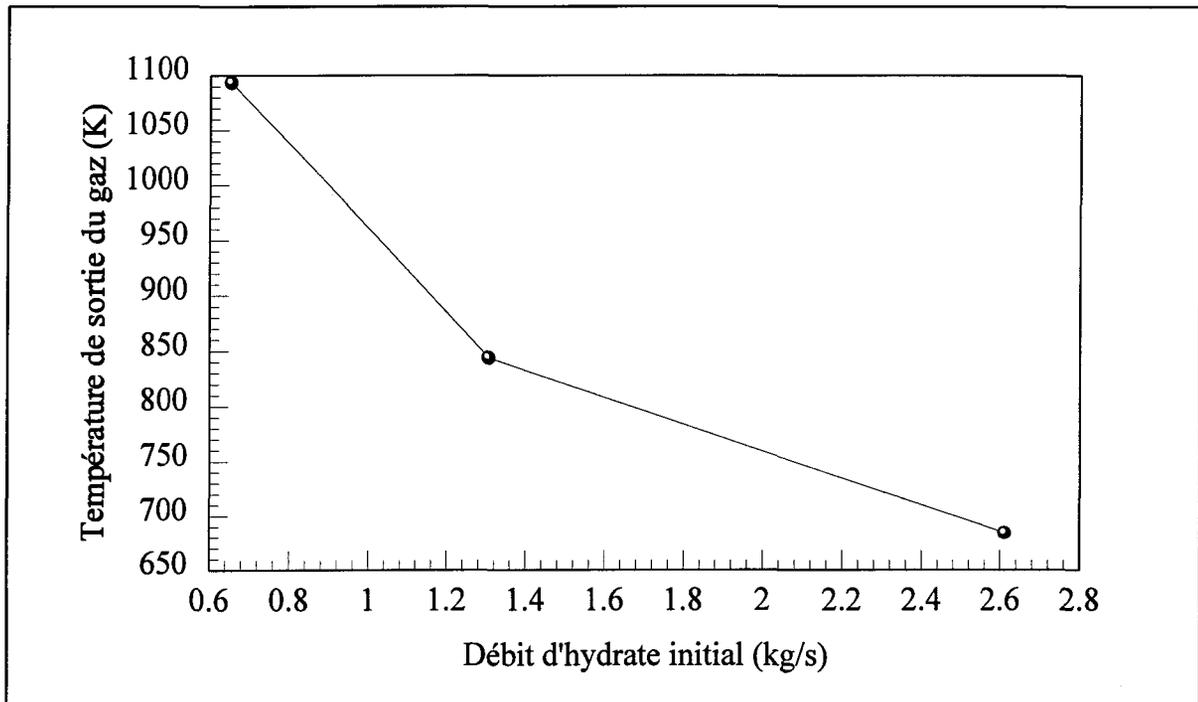


Figure 3.28 Température de sortie du gaz en fonction du débit d'hydrate initial (four 3).

3.5.3 Effets du débit d'air primaire

La dernière variable de contrôle sur laquelle l'usine peut jouer pour améliorer la production est le débit d'air primaire introduit au niveau du brûleur. On remarque en premier lieu que la plus grande influence de ce paramètre réside essentiellement dans la longueur de la flamme (tableaux 3.8 et 3.9). En effet, l'allure générale des profils

thermiques des fours 3 et 5 ne se trouvent que très légèrement changée lors de la variation du débit d'air primaire, c'est plutôt la longueur de la flamme qui change. La figure suivante montre les profils thermiques obtenus lors de la variation du débit d'air primaire.

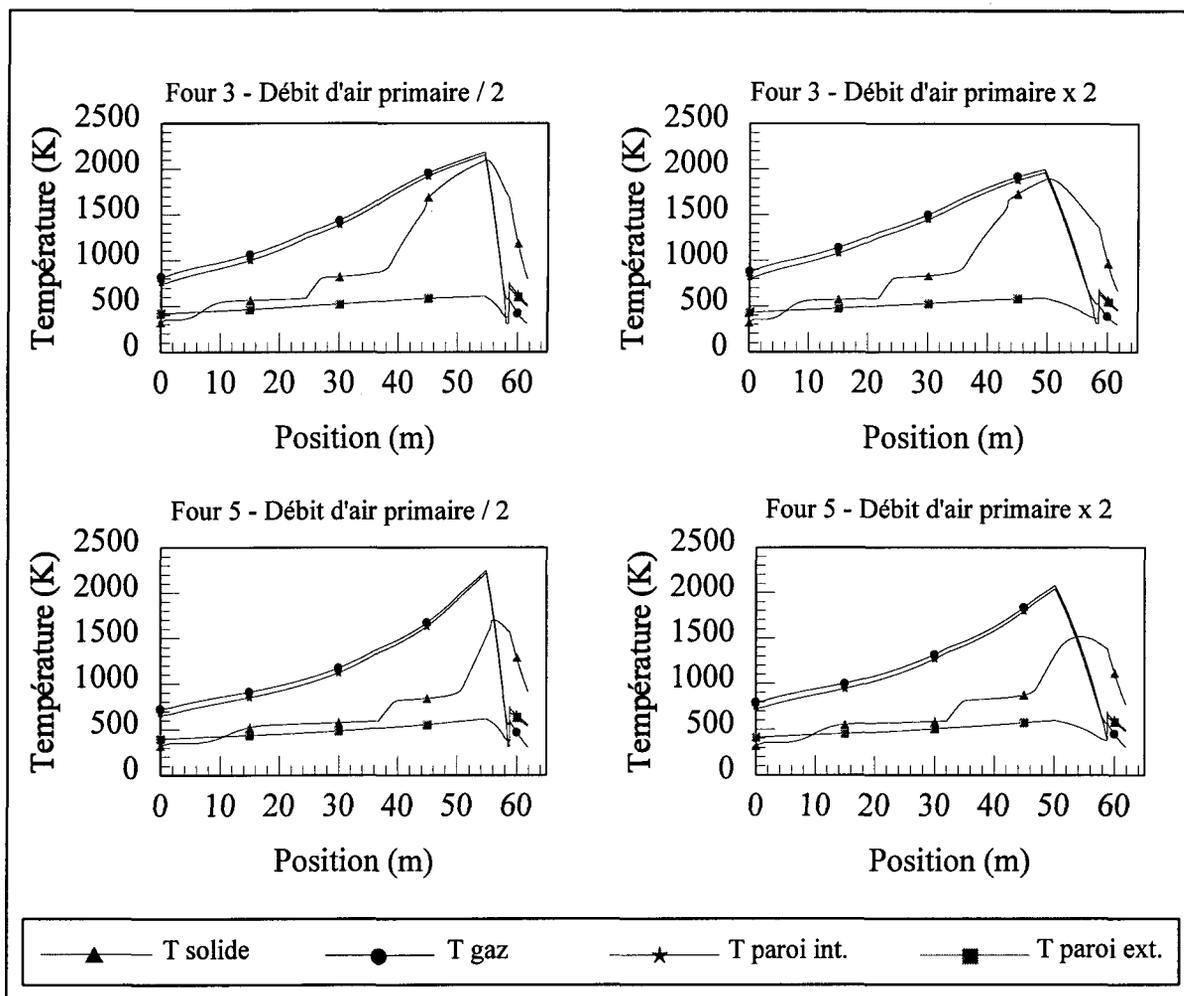


Figure 3.29 Effet du débit d'air primaire sur les profils thermiques.

On peut voir à partir de la figure précédente et des tableaux 3.8 et 3.9 que le fait de diminuer le débit d'air primaire a un bon effet sur le procédé de calcination. En effet la

richesse de la flamme se rapproche encore plus de l'unité (flamme stoechiométrique) et les gaz sont ainsi plus chauds. La flamme est cependant plus courte puisque que la quantité d'air est diminuée. Compte tenu de cette flamme plus courte, les premières transformations occupent une part plus importante du four, mais les dernières transformations, qui se trouvent plus près de la flamme se font plus rapidement. Le fait maintenant d'augmenter le débit d'air primaire du double de sa valeur actuelle, fait augmenter la longueur de la flamme, mais fait diminuer la température du gaz au niveau de la flamme. Comme la flamme est plus longue, les premières transformations se font plus rapidement, mais étant donné que la flamme est aussi moins chaude, les dernières transformations se font moins rapidement que normalement. On remarque même, dans le four 5, que les transformations ne sont pas complètes lorsqu'on augmente le débit d'air primaire. On obtient en effet à la sortie 48 % d'alumine gamma et 52 % d'alumine alpha.

3.5.4 Autres effets des débits de gaz naturel, d'hydrate et d'air primaire.

Les débits de gaz naturel et d'air primaire influencent en premier lieu la richesse de la flamme en faisant varier l'excès d'air. Or l'excès d'air influence directement la production en agissant directement sur la longueur de la flamme et la température de fin de combustion. Le débit d'hydrate introduit initialement dans le four influence quant à lui les longueurs prises par les transformations en changeant la quantité de solide à transformer.

Les figures suivantes montrent comment les paramètres les plus importants sur la production à savoir les longueurs de four occupées par les réactions chimiques, la longueur de la flamme et la température de fin de combustion, sont affectées par le débit d'hydrate introduit, la quantité d'air dans le four ainsi que la richesse de la flamme.

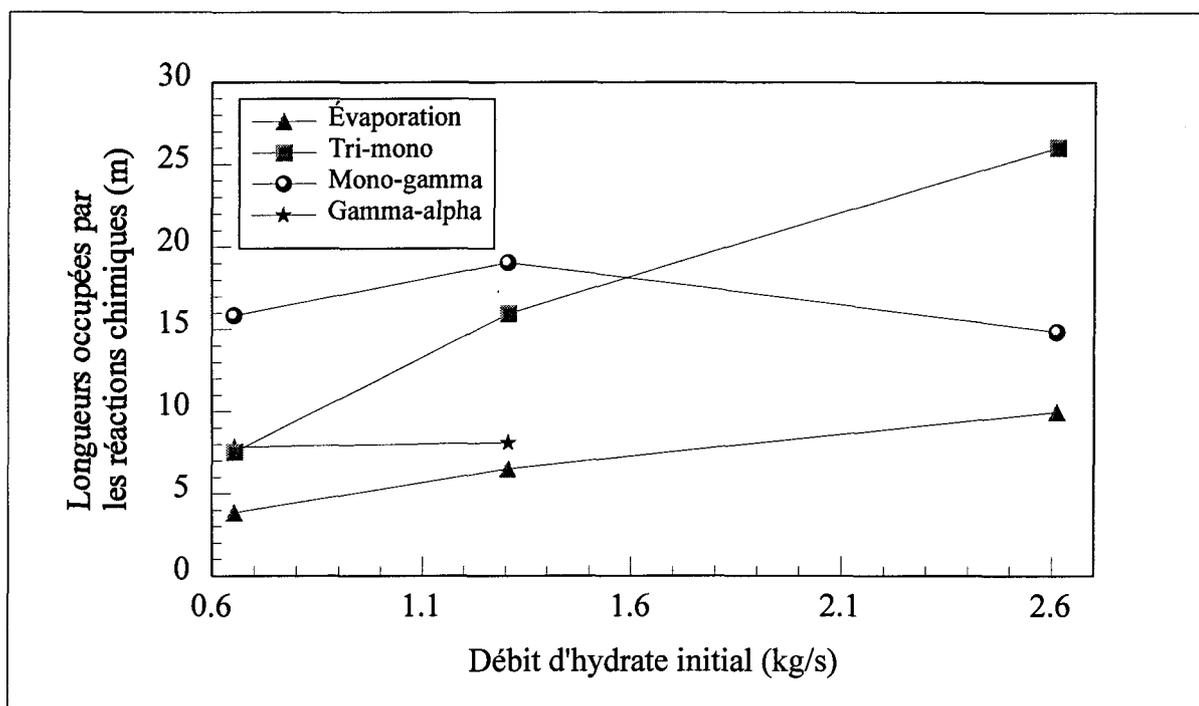


Figure 3.30 Variations des longueurs occupées par chacune des réactions chimiques en fonction du débit de solide initial (four 3).

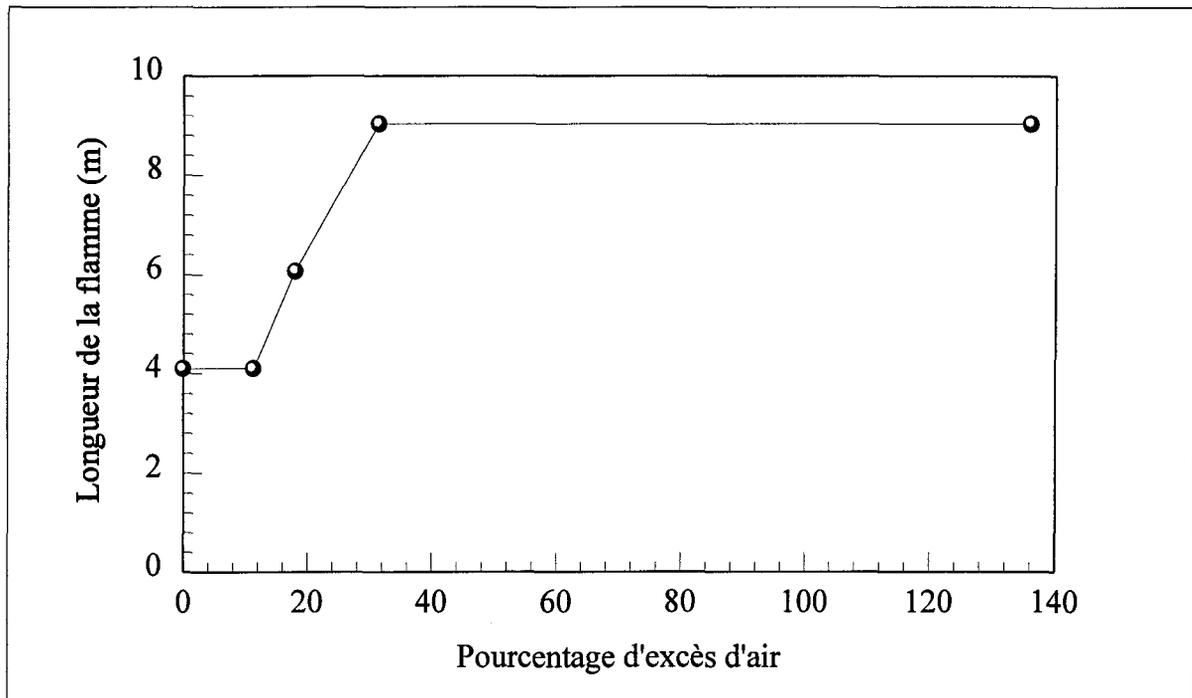


Figure 3.31 Variation de la longueur de la flamme en fonction de l'excès d'air (four 3).

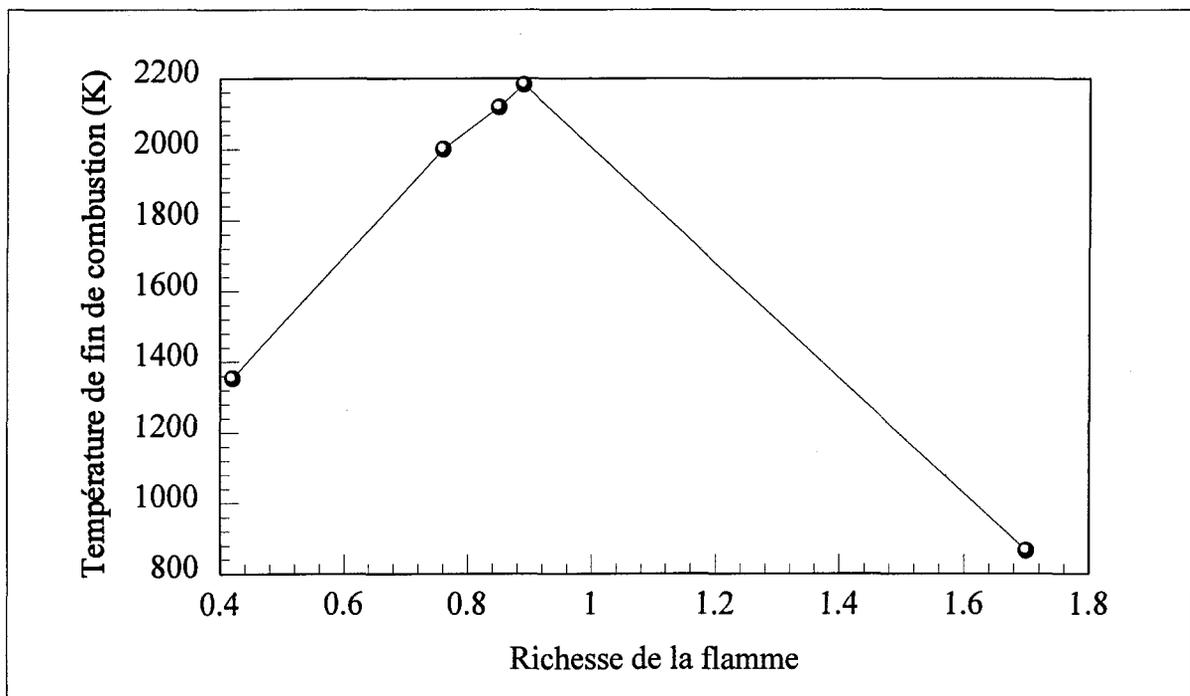


Figure 3.32 Variation de la température de fin de combustion en fonction de la richesse de la flamme (four 3).

Il est intéressant de voir comment le débit d'hydrate initial influence les longueurs prises par les réactions dans le four. Les deux premières réactions, à savoir l'évaporation et la transformation du trihydrate en monohydrate sont les plus touchées. Pour ce qui est des deux dernières réactions, leurs longueurs semblent moins affectées, soit parce qu'elles se produisent plus près de la flamme lorsque les deux premières réactions sont plus longues ou soit qu'elles ne se complètent tout simplement pas lorsqu'on augmente le débit d'hydrate. La longueur de la flamme est quant à elle restreinte entre les deux valeurs limites de 4 et de 9 mètres, et ce pour les deux fours. Par exemple, pour le four 3, on voit qu'entre 12 et 32 % d'excès d'air, la longueur varie de façon linéaire, mais qu'en dessous de 12 % et au-dessus de 32 % d'excès d'air la longueur de la flamme ne varie pratiquement plus. Pour ce qui est finalement de la température de fin de combustion obtenue avec le modèle, on voit que sa variation en fonction de la richesse respecte bien la théorie (figure 2.11) qui stipule que la température de fin de combustion maximale est obtenue lorsque la flamme est stoechiométrique, c'est-à-dire lorsque sa richesse est égale à 1. Dans le modèle, la valeur maximale de la température est obtenue pour une richesse d'environ 0,90. La figure 3.30 a été tracée à l'aide des données du tableau 3.8. On n'obtient pas, dans ce tableau, de richesse égale à 1, mais on voit bien que plus cette dernière s'approche de l'unité, plus la température de fin de combustion est élevée.

3.5.5 Influences des autres paramètres de fonctionnement

Ce qui est intéressant avec le modèle, c'est que l'on peut facilement faire varier n'importe laquelle condition d'entrée, ce qui n'est pas possible avec le four réel. Donc en plus des débits d'hydrate, de gaz naturel et d'air primaire, il a été possible de modifier une multitude d'autres paramètres afin d'observer leur influence sur le procédé de calcination de l'alumine. Ces paramètres sont:

- la longueur du four;
- le diamètre;
- l'épaisseur de la paroi;
- l'angle d'inclinaison;
- la vitesse de rotation;
- le débit d'air secondaire;
- la température d'entrée de l'hydrate;
- la température d'entrée du gaz naturel;
- la température d'entrée de l'air primaire.

Les tests qui suivent ont été effectués sur le four 3 seulement (sans poussière). Le tableau 3.12 résume l'ensemble des valeurs actuellement utilisées à l'usine pour chacun des paramètres énumérés ci-haut et les tableaux 3.13 à 3.15 présentent les résultats obtenus à l'aide du modèle lors de la variation de ces conditions d'opération.

Tableau 3.12 Conditions de fonctionnement actuelles pour le four 3.

Angle d'inclinaison	6 °
Longueur totale	61,6 m
Rayon extérieur	1,23 m
Rayon intérieur	0,99 m
Rayon moyen	1,11 m
Épaisseur de la paroi	0,24 m
Vitesse de rotation	1,154 rpm
Débit d'air secondaire	2,95 kg/s
Température d'entrée de l'hydrate	50°C
Température d'entrée du gaz naturel	15°C
Température d'entrée de l'air primaire	150°C

Note: La température de l'air primaire utilisée dans les tests qui suivent est de 60°C (sauf pour les deux dernières colonnes du tableau 3.15).

Tableau 3.13 Tests paramétriques reliés aux dimensions du four 3.

	Normal	$L_T / 2$ 30 m	$L_T \times 2$ 120 m	$R_{moyen} / 2$ 0,57 m	$R_{moyen} \times 2$ 2,06 m	Épais. / 2 0,12 m	Épais. $\times 2$ 0,48 m
T_g sortie (K)	843,75	1162,50	584,38	893,75	654,69	681,25	887,50
T_s sortie (K)	740,34	507,48	738,72	687,55	535,00	719,31	736,85
T_s max. (K)	2029,58	1341,86	2052,14	2073,38	1449,97	1798,43	2043,14
T_g max. (K)	2121,44	2109,24	2112,42	2120,69	2110,02	2119,85	2110,84
L évapo. (m)	6,50	4,10	11,50	3,20	14,70	8,85	6,10
L tri-mono (m)	15,95	8,10	36,00	8,95	23,65	22,20	14,70
L mono-gamma (m)	19,05	14,55	26,45	11,00	26,15	15,90	19,85
L gamma-alpha (m)	8,10	99,8 % γ 0,2 % α	13,05	7,25	97,7% γ 2,3% α	6,60	8,15
T fin tri (K)	584,97	613,33	559,45	565,38	625,74	577,30	588,22
T fin mono (K)	985,77	991,77	983,41	959,73	1017,37	988,35	985,72
T fin gamma (K)	1663,85	—	1630,87	1626,90	—	1701,98	1659,80
T évapo. (°C)	80,95	87,07	75,15	79,76	79,00	77,43	81,96
L flamme (m)	6,072	6,072	6,072	6,072	6,072	6,072	6,072
Richesse flamme	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85
Excès d'air (%)	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99
Vitesse du lit (m/s)	0,0232	0,0232	0,0232	0,0116	0,0464	0,0232	0,0232
Temps de résidence du solide (min)	48,69	23,71	94,84	97,42	24,36	48,71	48,71
Vitesse du gaz sortie (m/s)	3,53	4,86	2,44	16,81	0,68	2,85	3,72

Tableau 3.14 Tests paramétriques reliés aux conditions d'opération du four 3.

	Normal	Angle / 2 3°	Angle x 2 12°	N / 2 0,577 rpm	N x 2 2,308 rpm	G _{as} / 2 1,476 kg/s	G _{as} x 2 5,902 kg/s
T _g sortie (K)	843,75	825,00	871,88	756,25	806,25	554,69	812,50
T _s sortie (K)	740,34	709,19	747,29	713,42	735,71	381,06	420,31
T _s max. (K)	2029,58	2071,66	1886,33	2050,83	1820,42	813,00	1080,68
T _g max. (K)	2121,44	2120,96	2117,53	2125,20	2117,59	1348,60	1415,56
L évapo. (m)	6,50	4,40	9,70	5,10	10,45	12,10	7,05
L tri-mono (m)	15,95	13,60	17,90	16,15	19,40	31,15	18,90
L mono-gamma (m)	19,05	12,90	29,90	14,00	30,40	83,7% mono	25,00
L gamma-alpha (m)	8,10	6,80	9,80	6,75	9,25	16,3% γ	100% γ
T fin tri (K)	584,97	559,83	615,32	553,52	611,99	574,17	573,13
T fin mono (K)	985,77	961,83	1007,94	965,77	1010,31	—	982,21
T fin gamma (K)	1663,85	1634,50	1704,91	1642,41	1723,01	—	—
T évapo. (°C)	80,95	80,36	82,19	78,44	80,80	80,15	75,40
L flamme (m)	6,072	6,072	6,072	6,072	6,072	6,072	6,072
Richesse flamme	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	1,52	0,45
Excès d'air (%)	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99	Défaut d'air	122,56
Vitesse du lit (m/s)	0,0232	0,0116	0,047	0,0116	0,0464	0,0232	0,0232
Temps de résidence du solide (min)	48,69	97,64	24,07	97,42	24,36	48,71	48,71
Vitesse du gaz sortie (m/s)	3,53	3,50	3,62	3,21	3,35	1,71	5,64

Tableau 3.15 Tests paramétriques reliés aux températures des espèces introduites dans le four 3.

	Normal	T _s / 2 25°C	T _s x 1,5 75°C	T _f / 2 7,5°C	T _f x 2 30°C	T _{ap} / 2 30°C	T _{ap} x 2 120°C
T _g sortie (K)	843,75	775,00	850,00	843,75	843,75	850,00	843,75
T _s sortie (K)	740,34	733,77	740,43	735,39	741,36	742,59	739,79
T _s max. (K)	2029,58	1963,74	2038,96	2024,96	2030,96	2049,74	2029,14
T _g max. (K)	2121,44	2117,19	2126,38	2117,36	2122,46	2136,5	2120,42
L évapo. (m)	6,50	7,20	6,5	6,50	6,50	6,40	6,5
L tri-mono (m)	15,95	17,95	16,00	15,95	15,95	15,75	15,95
L mono-gamma (m)	19,05	17,90	19,05	19,05	19,05	19,05	19,05
L gamma-alpha (m)	8,10	7,75	8,1	8,10	8,10	8,00	8,1
T fin tri (K)	584,97	580,63	584,71	584,97	584,97	585,51	584,97
T fin mono (K)	985,77	988,58	987,47	985,77	985,77	983,16	985,77
T fin gamma (K)	1663,85	1671,37	1663,26	1663,85	1663,85	1673,24	1663,85
T évapo. (°C)	80,95	79,87	81,33	80,95	80,95	81,42	80,95
L flamme (m)	6,072	6,072	6,072	6,15	5,94	6,10	6,02
Richesse flamme	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85
Excès d'air (%)	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99	17,99
Vitesse du lit (m/s)	0,0232	0,0232	0,0232	0,0232	0,0232	0,0232	0,0232
Temps de résidence du solide (min)	48,69	48,69	48,69	48,69	48,69	48,69	48,69
Vitesse du gaz sortie (m/s)	3,53	3,25	3,56	3,53	3,53	3,56	3,53

La longueur totale du four a premièrement été diminuée de moitié, soit de 30 mètres. Avec cette diminution de longueur, on voit à partir du tableau 3.13 qu'il n'a pas été possible d'obtenir 100% d'alumine alpha à la sortie des refroidisseurs. Comme le temps de résidence se trouve diminué, on n'obtient pratiquement que de l'alumine gamma et une très faible portion d'alumine alpha. Et étant donné que la flamme occupe maintenant une partie plus importante du four, le gaz sort très chaud. Avec une température du gaz plus uniforme, on en conclut que sa vitesse est également plus uniforme, ce qui laisse supposer que le poussierage s'effectue de façon plus régulière sur toute la longueur du four. Si par contre on double la longueur du four, le temps de résidence du solide augmente considérablement et toutes les transformations chimiques s'effectuent au complet. Les longueurs des transformations sont plus longues puisque la flamme se trouve maintenant plus loin de l'entrée du solide que dans le four normal et le gaz sort du four plus froid étant donné qu'il a plus de temps pour se refroidir avant sa sortie.

Le rayon du four a également été modifié. À partir du tableau 3.13, il est surprenant de voir que ce paramètre peut grandement influencer les résultats. En diminuant le rayon du four, on remarque que le solide atteint des températures plus élevées qu'à la normale et que ses transformations se font ainsi plus rapidement. Ceci peut être attribuable en fait à deux facteurs: le temps de résidence et le transfert de chaleur gaz-solide. Le solide circule en effet moins vite lorsqu'on diminue le rayon du four, ce qui fait augmenter son temps de résidence. Comme le solide passe plus de temps dans le four, il peut ainsi

recevoir plus de chaleur et les transformations se font plus efficacement. Le fait de diminuer le rayon du four fait également augmenter la vitesse du gaz puisque sa section de passage se trouve diminuée. D'après l'équation (2.70) du chapitre précédent, on remarque que plus la section de passage du gaz est petite plus le transfert de chaleur gaz-solide est grand. En circulant plus rapidement, la convection provenant du gaz est augmentée, ce qui induit le solide à se transformer plus rapidement. On peut de plus affirmer que, comme le gaz circule plus vite, le poussierage sera plus important (équation 2.57). Le fait maintenant d'augmenter le rayon du four provoque les effets contraires. En effet la vitesse du solide augmente, ce qui fait diminuer son temps de résidence. Le gaz circulant moins vite, les échanges thermiques vers le solide s'en trouvent diminués.

On a aussi fait varier **l'épaisseur de la paroi**. L'épaisseur qui est actuellement de 24 cm a été diminuée à 12 cm et augmentée jusqu'à 48 cm. On remarque que plus l'épaisseur est faible, moins le solide atteint des températures élevées et plus les premières transformations chimiques sont lentes. Ceci étant dû au fait que les pertes vers l'extérieur sont plus grandes et que l'apport de chaleur du mur au solide se trouve ainsi diminué. Ceci pourrait peut-être aider à expliquer le fait que le solide atteint une température moins élevée en usine que dans le modèle. En effet, l'usure éventuelle du réfractaire qui contribue à la diminution de l'épaisseur de la paroi, donc à l'augmentation du transfert de chaleur en conduction, n'a pas été considérée dans le modèle. On remarque qu'en diminuant de moitié l'épaisseur de la paroi du modèle, le transfert de chaleur par conduction vers l'extérieur

augmente et la température de calcination du solide calculée par le modèle se rapproche énormément de la température de calcination du solide dans le four réel, soit 1798 K pour le modèle contre 1755 K pour le four réel. On peut prouver que les pertes thermiques sont plus importantes pour le four réel que pour le modèle puisque la paroi du four réel est plus chaude (tableau 3.5). Le fait par contre de doubler l'épaisseur de la paroi actuelle n'a pas une très grande influence sur les profils thermiques, les transformations n'étant accélérées que légèrement et le solide n'atteignant une température de calcination que de 20°C supérieur à la normale. On peut donc conclure que la température atteinte par le solide ne peut être indéfiniment haussée par l'augmentation de l'épaisseur de la paroi, et que celle-ci plafonne en fait après un certain point. La figure suivante (3.33) montre l'influence de l'épaisseur de la paroi du four sur la température maximale atteinte par le solide.

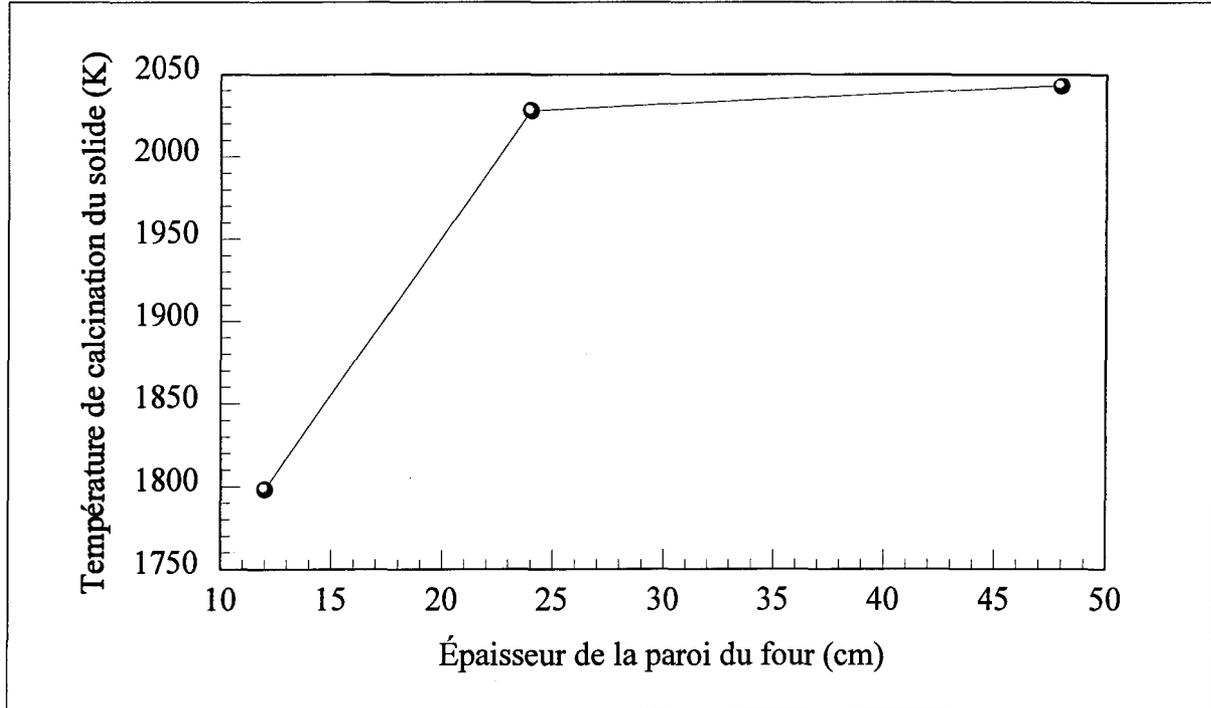


Figure 3.33 Variation de la température de calcination du solide en fonction de l'épaisseur de la paroi du four (four 3).

Pour ce qui est de **l'inclinaison du four**, on remarque au tableau 3.14 que plus celle-ci est faible, moins le solide circule vite et plus les transformations chimiques s'effectuent près de l'extrémité froide du four. Comme le solide avance moins vite, il a plus de temps pour recevoir de la chaleur et les transformations s'effectuent sur une plus courte distance. Le gaz sort aussi moins chaud du four compte tenu de son plus grand apport de chaleur au solide. Le temps de résidence du solide dans le four augmente aussi du double et le solide peut alors atteindre des températures très élevées. Notons que les effets contraires sont évidemment observés lorsqu'on double l'inclinaison du four. Les figures suivantes

montrent l'influence de l'angle d'inclinaison d'une part sur les longueurs prises par chacune des transformations dans le four et d'une autre part sur le temps de résidence du solide dans le four.

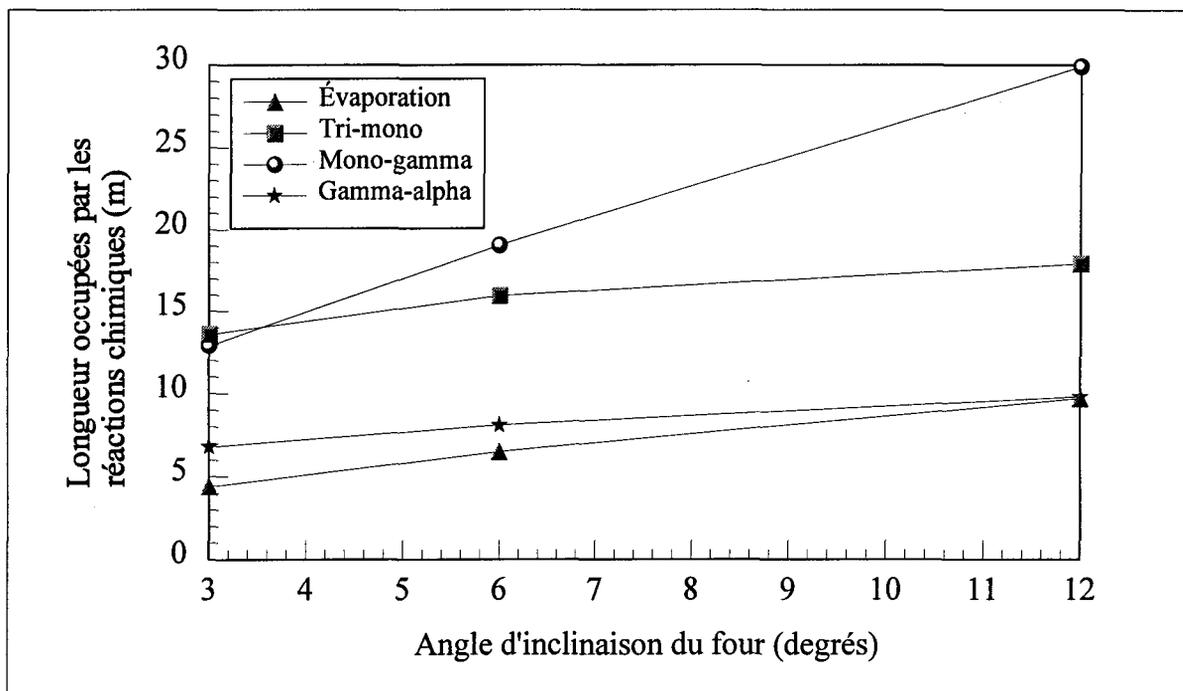


Figure 3.34 Variation des longueurs occupées par chacune des réactions chimiques en fonction de l'angle d'inclinaison du four (four 3).

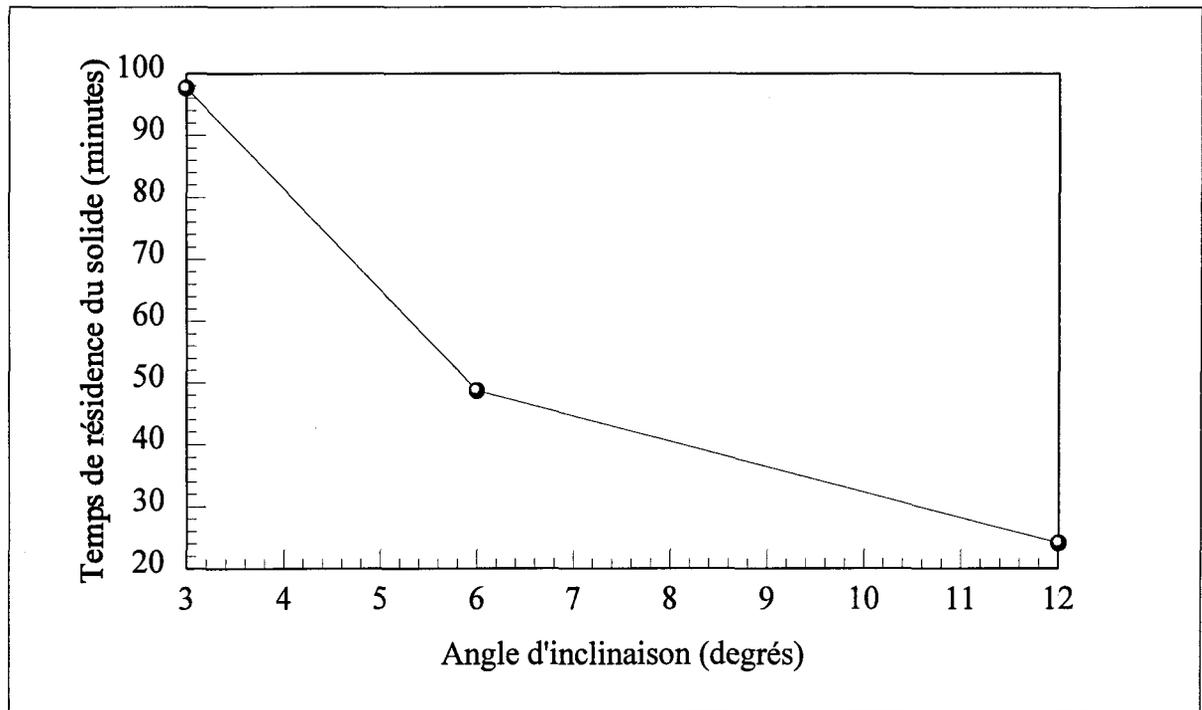


Figure 3.35 Variation du temps de résidence du solide en fonction de l'angle d'inclinaison du four (four 3).

L'influence de la **vitesse de rotation** du four sur le procédé a également été vérifiée. On remarque au tableau 3.14 que plus le four tourne vite, plus le solide avance rapidement dans le four et les transformations s'effectuent ainsi sur de plus grandes distances. Son temps de résidence étant diminué, le solide atteint des températures beaucoup moins élevées qu'à la normale. Le raisonnement inverse s'applique lorsqu'on augmente la vitesse de rotation du four. Le graphique qui suit montre l'influence de la vitesse de rotation sur le temps de résidence du solide dans le four.

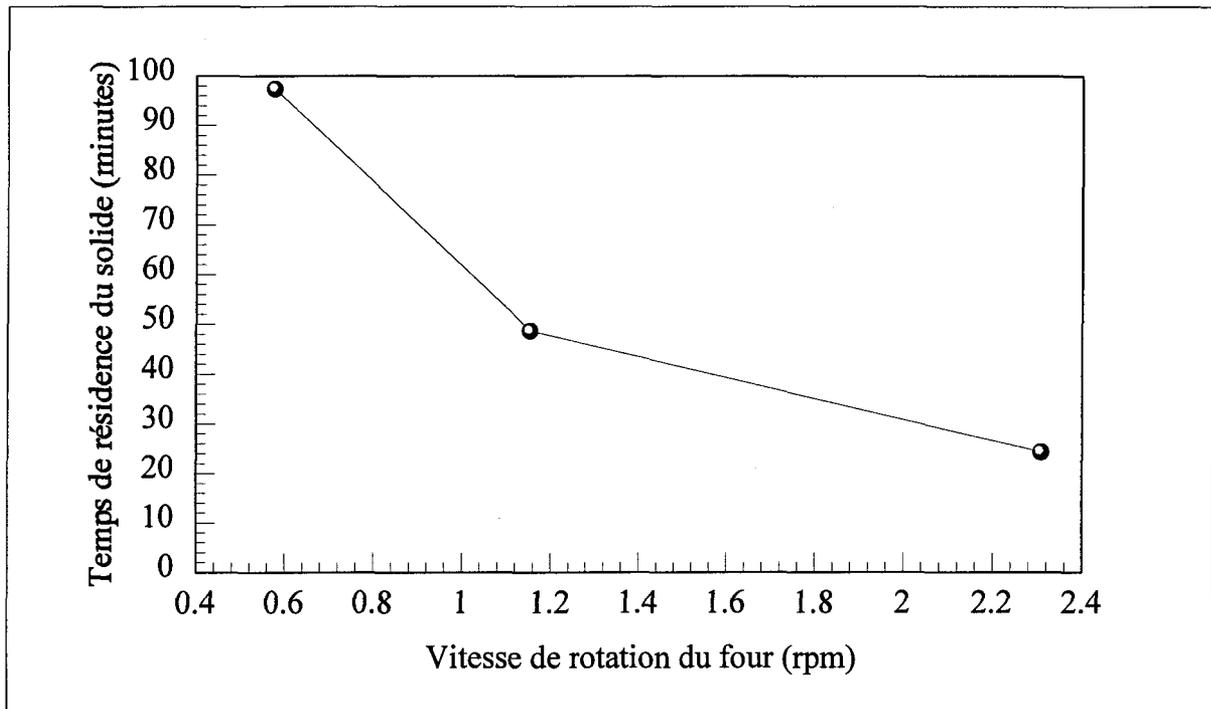


Figure 3.36 Variation du temps de résidence du solide en fonction de la vitesse de rotation du four (four 3).

Le débit d'air secondaire qui s'infiltré a également une influence sur le comportement du four. Mais contrairement aux paramètres précédents qui influençaient en premier lieu le solide et ses transformations, la quantité d'air secondaire affecte principalement la combustion du gaz naturel. Avec le modèle de flamme présentement utilisé, la longueur de la flamme n'est pas affectée, mais sa richesse et sa température de fin de combustion changent. Lorsqu'il n'y a pas assez d'air secondaire, on devient en défaut d'air et le gaz naturel n'est pas tout brûlé. On se retrouve donc avec du gaz naturel dans les produits de combustion et la température de la flamme diminue. La température de flamme

ainsi diminuée, il n'est pas possible pour le gaz de transmettre toute la chaleur nécessaire au solide et ce dernier sort des refroidisseurs planétaires composé essentiellement de monohydrate d'alumine et d'un peu d'alumine gamma. Lorsqu'on double cette fois le débit d'air secondaire, on se retrouve avec un excès d'air beaucoup trop important et la température de fin de combustion se retrouve diminuée et le solide sort du four sous forme d'alumine gamma. Mais en théorie, comme la richesse de la flamme est inférieure à 0,5, il ne devrait pas y avoir apparition de flamme.

Pour ce qui est des **températures d'entrée de l'hydrate, du gaz naturel et de l'air primaire**, celles-ci n'ont pas une grande influence sur les profils thermiques (tableau 3.15). Un solide qui entre plus froid dans le four a besoin de plus de chaleur et de temps pour débiter ses premières réactions. On le voit par le gaz qui sort plus froid et les premières transformations qui s'effectuent sur une plus longue distance. Par contre les deux dernières transformations se font plus près de la flamme et s'effectuent normalement. Lorsque par contre le solide est introduit plus chaud, le gaz fournit moins de chaleur pour initier les premières réactions chimiques. Le gaz sort alors plus chaud du four et les longueurs des premières transformations raccourcissent légèrement. Afin de mettre davantage en évidence l'influence de la température d'entrée du solide dans le four, on a introduit celui-ci à une température légèrement plus élevée que la température d'évaporation de l'humidité qui se situe aux environs de 80°C, soit à 85°C. On a pu remarquer que l'évaporation de l'humidité débute immédiatement lorsque le solide fait son entrée dans le four, mais

contrairement à ce qu'on pouvait s'attendre, le gaz sort plus froid du four qu'à la normale et les deux premières réactions chimiques se font sur de plus longues distances. Ce qui est difficilement explicable. Les résultats reliés à cette température d'entrée de 85°C apparaissent plus loin au tableau 3.17.

Les températures d'entrée du gaz naturel et de l'air primaire n'ont quant à elles qu'une très faible influence sur le fonctionnement du four. En diminuant leur température on fait légèrement augmenter la longueur de la flamme et inversement. Le tableau suivant montre les variations de la longueur de la flamme lorsqu'on fait varier les températures d'entrées du gaz naturel et de l'air primaire.

Tableau 3.16 Variations de la longueur de la flamme en fonction de la température d'entrée des réactifs.

Température	ΔL_f (cm)
$T_f / 2$	+ 7,8
$T_f \times 2$	-13,2
$T_{ap} / 2$	+2,8
$T_{ap} \times 2$	-5,2

La variation de la longueur de la flamme étant si faible, on peut conclure que les profils thermiques ne sont pratiquement pas influencés par les températures d'entrée de l'air primaire et du gaz naturel.

Tous les tests qui précèdent (sauf les tests avec l'air primaire), ont été effectués avec une température d'entrée de l'air primaire de 60°C. Or à l'usine, l'air primaire est introduit à une température de 150°C, ce qui devrait logiquement donner une flamme plus courte que celles montrées aux tableaux 3.13 à 3.15. Or comparativement à une température de 60°C le modèle n'a donné qu'une diminution de 8 cm pour la longueur de la flamme lorsqu'on passe de 60 à 150°C pour la température d'entrée de l'air primaire. On peut donc conclure que l'ensemble des tests effectués précédemment sont toujours valables pour l'usine. Le tableau qui suit montre les résultats obtenus lorsqu'on introduit le solide à 85°C et lorsque l'air primaire est injecté à 150°C.

Tableau 3.17 Tests paramétriques sur la température d'entrée du solide et de l'air primaire.

	Normal $T_{ap} = 60^{\circ}\text{C}$ $T_s = 50^{\circ}\text{C}$	$T_s = 85^{\circ}\text{C}$	$T_{ap} = 150^{\circ}\text{C}$
T_g sortie (K)	843,75	784,38	843,75
T_s sortie (K)	740,79	735,13	740,34
T_s max. (K)	2027,80	1981,09	2029,58
T_g max.(K)	2119,50	2116,58	2121,44
L évapo.(m)	6,50	6,85	6,50
L tri-mono (m)	15,95	18,8	15,95
L mono-gamma (m)	19,05	17,8	19,05
L gamma-alpha (m)	8,10	7,95	8,10
T fin tri (K)	584,90	580,55	584,97
T fin mono (K)	987,70	987,73	985,77
T fin gamma (K)	1663,01	1689,61	1663,85
T évapo.($^{\circ}\text{C}$)	80,95	85,00	80,95
L flamme (m)	6,072	6,072	5,99
Richesse flamme	0,85	0,85	0,85
Excès d'air (%)	17,99	17,99	17,99
Vitesse du lit (m/s)	0,0232	0,0232	0,0232
Temps de résidence du solide (min)	48,69	48,71	48,69
Vitesse du gaz sortie(m/s)	3,53	3,28	3,53

À partir de cette étude paramétrique il a été possible d'isoler l'ensemble des conditions qui influencent le procédé ainsi que leur ampleur. En premier lieu on remarque que les températures de fin de transformations, c'est-à-dire les températures auxquelles chaque réaction se termine, ne sont pratiquement pas influencées par les différents changements de conditions de fonctionnement. On remarque en effet que l'évaporation de

l'eau s'effectue toujours très près de 80°C, que le trihydrate d'alumine est complètement transformé en monohydrate d'alumine aux alentours de 315°C, que le monohydrate d'alumine est complètement déshydraté en alumine gamma vers 715°C et que finalement l'alumine gamma est complètement transformée en alumine alpha vers 1400°C. Si le solide reçoit beaucoup de chaleur, les températures de fin de transformations sont atteintes plus rapidement et les réactions s'effectuent ainsi sur de plus courtes distances dans le four.

On a pu également remarquer que ce qui influence le plus directement les transformations du solide, si on exclut évidemment la température du gaz, c'est son temps de résidence dans le four. En effet, plus le solide est longtemps dans le four, plus il peut recevoir de chaleur, et plus les réactions chimiques se font sur de courtes distances. Il est possible d'augmenter le temps de résidence du solide dans le four, en diminuant l'inclinaison de celui-ci, son diamètre intérieur ainsi que sa vitesse de rotation.

En diminuant l'épaisseur de la paroi du four on augmente la conduction à travers le mur et on perd ainsi plus de chaleur vers l'extérieur, ce qui fait que moins de chaleur est disponible pour le solide. L'usure éventuelle des réfractaires dans le four réel peut expliquer les différences entre celui-ci et le modèle pour ce qui est de la température maximale atteinte par le solide (température de calcination) et la température extérieure de la coque du four.

Bien qu'il soit impossible pour l'usine de contrôler le débit d'air secondaire s'infiltrant dans le four, il est tout de même important de connaître le débit approximatif d'air qui peut s'y infiltrer. Les débits de gaz naturel et d'air primaire doivent donc être ajustés selon la quantité d'air secondaire estimée. En effet, on a pu voir dans les résultats précédents, que si la quantité d'air dans le four est trop grande, la température de fin de combustion diminue et l'apparition d'une flamme peut même à la limite être empêchée. Et si la quantité d'air est trop faible, le gaz naturel n'est pas tout brûlé et on retrouve du gaz naturel dans les produits de combustion. Dans ce cas également, la température de fin de combustion se trouve diminuée.

Les températures auxquelles sont injectés le gaz naturel et l'air primaire ne font que modifier très légèrement la longueur de la flamme, ce qui s'avère très négligeable sur les profils thermiques obtenus. On note par contre que la quantité de chaleur nécessaire pour initier les premières réactions dépend de la température à laquelle le solide est introduit dans le four.

Pour ce qui est finalement du poussierage dans le four, on sait que la vitesse du gaz est le facteur déterminant. En effet plus le gaz circule vite, plus le poussierage est important. À partir de l'étude paramétrique effectuée on remarque que le fait de diminuer le diamètre du four et d'augmenter le débit d'air fait augmenter considérablement la vitesse du gaz, ce qui peut contribuer à un poussierage plus important dans le four.

3.6 Robustesse du modèle

En général le modèle s'avère assez robuste pour pouvoir être utilisé immédiatement en usine. Mais en pratique, il est bien évident qu'il nécessite encore certains ajustements qui pourront être déterminés lors d'une validation plus poussée.

Son utilisation est assez simple. Un fichier d'entrée permet à l'utilisateur d'insérer les conditions initiales de la simulation, conditions qui seront par la suite lues par le programme. La convivialité du modèle pourrait par contre être améliorée par la mise au point d'une interface graphique. Le modèle est de plus adapté pour simuler un four à rayon variable. En tout, dix rayons et dix longueurs de sections différents peuvent être introduits par l'utilisateur dans le programme principal.

Le modèle a été élaboré en langage Fortran sur une station Sun Spark 1+. Le temps de calcul peut varier entre une et sept heures, tout dépendant de l'estimation faite des conditions initiales. Le programme doit en effet ajuster, par itérations successives, les trois conditions suivantes:

- la température du gaz à sa sortie du four (à la position $x=0$, figure 2.5);
- la température de l'air secondaire à son entrée dans le four (position $x=L_T-L_c$);
- le débit de poussière à la sortie du gaz (position $x=0$).

Le modèle doit donc constamment réitérer aux positions susmentionnées afin d'ajuster l'ensemble de ces trois paramètres. L'explication pour la méthode d'ajustement apparaît dans le chapitre précédent à la section 2.4.

Il est important de noter que lorsqu'on ne considère pas le poussierage, les simulations ne prennent qu'entre une et dix minutes de temps de calcul. Ceci est dû au fait que le débit de poussière et la température du gaz sont interdépendants. Donc lors d'une simulation avec poussière, le programme doit atteindre un équilibre parfait entre la température du gaz et le débit de poussière, ce qui peut s'avérer assez long dans certains cas.

3.7 Conclusion

Le but de ce chapitre était de présenter l'ensemble des résultats pouvant être obtenus à l'aide du modèle du four de calcination d'alumine. Le modèle a notamment permis de comparer les profils thermiques obtenus pour les fours 3 et 5 et de voir que les deux fours ont un profil de températures très différent. Cette différence semble provenir essentiellement du temps de résidence qui est plus élevé dans le four 3 que dans le four 5 et également du fait que le four 3 a un diamètre intérieur plus faible, ce qui favorise les transferts de chaleur gaz-solide.

Il a aussi été possible de comparer les mesures d'usine avec les résultats du modèle. On a vu que, dans l'ensemble, le modèle soutient bien la comparaison. Les plus grandes différences entre le modèle et le four réel résident dans la température de calcination de l'alumine et la composition du gaz. Ces différences ont toutefois pu être expliquées par le fait que le modèle néglige les additions de chlore et de fluorure d'aluminium.

Une étude paramétrique a par la suite permis d'observer la très grande utilité du modèle en ce qui a trait à l'optimisation du procédé. À partir de ce qui a été simulé on a pu remarquer que la température du gaz et le temps de résidence du solide dans le four ont une influence déterminante sur les transformations cristallines.

Sous sa forme actuelle, on peut dire que le modèle se montre déjà très efficace. Son temps de calcul est très raisonnable et il peut déjà permettre à l'usine Vaudreuil de vérifier l'ensemble des paramètres pouvant influencer le procédé de calcination et de mesurer l'étendue de leur influence.

CHAPITRE 4

CONCLUSION

Le but de ce projet était d'élaborer un modèle mathématique, statique et à une dimension, pour la simulation d'un four de calcination d'alumine actuellement en opération à l'usine Vaudreuil d'Arvida. Le modèle devait être capable de déterminer les profils thermiques du gaz, du solide et des parois intérieures et extérieures du four.

Les objectifs premiers du projet ont été atteints et ont même été dépassés puisque le modèle a permis d'obtenir beaucoup plus de renseignements que prévu. Il a en effet été possible, par exemple, d'obtenir la composition du lit de solide à n'importe quel endroit dans le four et de montrer que la présence de poussière influence, de façon non négligeable, le comportement global du four en faisant augmenter le rayonnement et la convection en provenance du gaz.

Les comparaisons effectuées avec les mesures d'usine se sont révélées satisfaisantes. On note en effet un grand rapprochement entre le modèle et le four réel pour ce qui est des températures de sortie du gaz et du solide et pour les longueurs de flamme. Par contre, la

composition du gaz à la sortie du four ne coïncide pas avec les mesures d'usine. Ceci peut toutefois être expliqué par le fait que le modèle ne considère pas la présence de chlore.

Bien qu'il donne déjà des résultats très satisfaisants, le modèle laisse place à améliorations. Comme il a fréquemment été mentionné dans ce travail, une des premières améliorations qui pourrait être apportée au modèle serait l'introduction du chlore dans le gaz ainsi que l'oxyde basique de sodium et le fluorure d'aluminium dans le solide. La composition du gaz en vapeur d'eau et en oxygène ainsi que la température de calcination de l'alumine se rapprocheraient ainsi plus des valeurs réelles.

En ce qui concerne la cinétique chimique de l'alumine, des tests en laboratoire respectant toutes les conditions de l'usine Vaudreuil pourraient être faits. Contrairement aux paramètres cinétiques utilisés dans ce travail, les paramètres cinétiques obtenus en laboratoire proviendraient tous de la même étude, et respecteraient les mêmes conditions que l'usine Vaudreuil, que ce soit pour la taille des échantillons ou le taux de chauffage.

Un modèle de génération de poussière adapté aux conditions et à l'alumine de l'usine Vaudreuil pourrait également être établi sur la base de mesures en laboratoire. Il serait ainsi possible de comparer les résultats obtenus avec ceux fournis par le modèle utilisé dans ce travail (Tackie et al., 1989) et d'en évaluer la validité pour notre cas.

Par ailleurs, une meilleure connaissance des différents réfractaires recouvrant la paroi intérieure du four améliorerait les résultats obtenus par le modèle. Les pertes de chaleur au milieu ambiant représentent en moyenne soixante-dix pour-cent de la chaleur communiquée à l'alumine. Une évaluation correcte de ces pertes risque donc d'avoir un impact non négligeable sur le modèle.

Une autre amélioration qui pourrait être apportée au modèle serait l'adaptation d'une interface graphique qui augmenterait la convivialité du programme. Ainsi, au lieu d'ouvrir le fichier de lecture à chaque simulation pour y changer la ou les conditions de fonctionnement désirées, l'interface graphique faciliterait la tâche de l'utilisateur en faisant le lien machine-utilisateur par des fenêtres et des menus, ce qui permettrait de changer plus rapidement et surtout plus facilement les conditions d'entrée de la simulation.

BIBLIOGRAPHIE

Aglietti, E.F., Scian, A.N., Sacchi, J.M., Porto Lopez, M., Pereira, E., Influence of grinding on the kinetics of transformation of gibbsite into α -Al₂O₃, Lat. am. j. chem. eng. appl. chem., vol. 16, pp. 33-43, 1986.

Apps, J.A., Neil, J.M., Solubilities of aluminium hydroxides and oxihydroxides in alkaline solutions. Correlation with thermodynamic properties of Al(OH)₄⁻, Chemical modelling of aqueous system II, recueil de conférences, chap. 32, pp. 414-428, 1990.

Arlyuk, T.A., Firfarova, I.B., Telyatnikov, G.V., Change in the properties and particle size of alumina hydrates during calcination, Tsvet. Met., vol. 7, pp. 59-62, 1979.

Arora, B.R., Banerjee, R.K., Prasad Rao, T.S.R., Mandal, N.K., Ganguli, N.C., Sen, S.P., Mechanism and kinetics of thermal decomposition of precipitates of the zinc oxide - aluminium oxide system from non-isothermal TG curves, Thermochemic Acta, vol. 7, pp. 25-40, 1973.

Badger, W.L., Banchemo, J.T., Introduction to chemical engineering, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1955.

Beaudoin, G.J., Tremblay, R.P., Traité de chimie des solutions, éditions le Griffon d'argile, Sainte-Foy, 1987.

Becker, M., Heat transfer: a modern approach, Plenum Press, New York, 1986.

Beér, J.M., Chigier, N.A., Combustion aerodynamics, Applied Science Publisher Ltd, England, 1972.

Bhilotra, K.R.K., Alumina kiln mass and heat balances. Volume I: Theoretical background and calculations, Report no. AW-32-52-1, Aluminium Company of Canada: Arvida, 1968.

Bhilotra, K.R.K., Alumina kiln mass and heat balances. Volume II: Applications, Report no. AW-32-52-1, Aluminium Company of Canada: Arvida, 1968.

Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., Transport phenomena, John Wiley & Sons Inc., New York, 1960.

Brindley, G.W., Choe, J.O., The reaction series, gibbsite - chi-alumina - kappa-alumina - corundum, The American Mineralogist, vol.46, no.7 & 8, pp. 771-785, 1961.

Callister, D., Cutler, W.Jr., Gordon, R.S., Thermal decomposition kinetics of boehmite, Journal of the American Ceramic Society, vol.49, no.8, pp. 419-422, 1965.

Candela, L., Perlmutter, D.D., Pore structures and kinetics of the thermal decomposition of $\text{Al}(\text{OH})_3$, AIChE Journal, vol. 32, no. 9, pp. 1532-1545, 1986.

Candela, L., Perlmutter, D.D., Kinetics of boehmite formation by thermal decomposition of gibbsite, Ind. Eng. Chem. Res., vol. 31, no. 3, pp. 694-700, 1992.

Charette, A., Kocaeffe, Y., Compléments de transfert de chaleur, Notes de cours, Université du Québec à Chicoutimi.

Coupal, B., Mathematical modelling of an alumina kiln, Report no. AW-32-52-TM-4, Aluminium Company of Canada, 1968.

Dernedde, E., The rate equations of the chemical reactions and heat transfer processes in the AlF_3 converter, Report no. AW-108-57-2, Aluminium Company of Canada: Arvida, 1968.

Dion, Y., Évolution thermique d'une gibbsite industrielle contenant 1% d'impureté, projet de fin d'études, Université du Québec à Chicoutimi, 1992.

Ervin, J.R., Osborn, E.F., The system $\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{H}_2\text{O}$, Journal of Geology, vol. 59, pp. 381-394, 1951.

Friedman, S.J., Marshall, W.R. Jr., Studies in rotary drying, part I-holdup and dusting, Chemical Engineering Progress, vol. 45, no. 8, pp. 482-493, 1949.

Friedman, S.J., Marshall, W.R. Jr., Studies in rotary drying, part II-heat and mass transfer, Chemical Engineering Progress, vol. 45, no. 9, pp. 573-588, 1949.

Gordon, R.A., Alumina kiln control study. Volume I - Steady-state model, report no. AWT-70-A-1.5-2, Aluminium Company of Canada: Arvida, 1970.

Gorog, J.P., Adams, T.N., Brimacombe, J.K., Regenerative heat transfer in rotary kilns, Metallurgical Transactions B, vol. 13B, june, pp. 153-163, 1982.

Gorog, J.P., Adams, T.N., Brimacombe, J.K., Heat transfer from flames in a rotary kiln, Metallurgical Transactions B, vol. 14B, september, pp. 411-424, 1983.

Gouffé, A., Transmission de la chaleur par rayonnement, cahier 1, Éditions Eyrolles, Paris, 1968.

Heiligenstaedt, W., Thermique appliquée aux fours industriels, tome 1, Notions fondamentales, Éditions Dunod, Paris, 1971.

Heiligenstaedt, W., Thermique appliquée aux fours industriels, tome 2, Calcul des fours récupérateurs, régénérateurs, Éditions Dunod, Paris, 1971.

Henein, H., Brimacombe, J.K., Watkinson, A.P., The modeling of transverse solids motion in rotary kilns, Metallurgical Transactions B, vol. 14B, june, pp. 207-220, 1983.

Himmelblau, D.M., Basic principles and calculations in chemical engineering, 2ième édition, Prentice Hall, New Jersey, 1967.

Hocart, R., Kern, R., Problèmes et calculs de chimie générale et cristallographie, 2ième édition, Gauthier-Villars, Paris, 1967.

Incropera, F.P., DeWitt, D.P., Introduction to heat transfer, 2ième édition, John Wiley & Sons, New York, 1990.

Ingénieurs du Groupe Pechiney, L'aluminium, tome 1, Éditions Eyrolles, Paris, 1964.

Jacob, M., Perlmutter, D.D., The mixing of granular solids in a rotary cylinder, AIChE Journal, vol. 26, no. 6, pp. 928-934, 1980.

Kays, W.M., Convective heat and mass transfer, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1966.

Khan, J.A., Beasley, D.E., Alatas, B., Evaporation from a packed bed of porous particles into a superheated vapor, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 34, no. 1, pp. 267-280, 1991.

Kramers, H., Croockewit, P., The passage of granular solids through inclined rotary kilns, Chemical Engineering Science, vol. 1, no. 6, pp. 259-265, 1952.

Kreith, F., Black, W.Z., Basic heat transfer, Harper and Row Publisher, New York, 1980.

LeRoy, D.H., Alumina chemicals, science and technology handbook, The American Ceramic Society, 1990.

Kuo, K.K-Y., Principles of combustion, John Wiley & Sons, New York, 1986.

Kuo-Ching, Y., Tung-Shen, Y., Kinetics of phase transformation of alumina (abstract), Kuei Suan Yen Hsueh Pao, vol.5, no.1, pp.1-11, 1966.

Lyons, J.W., Min, H.S., Parisot, P.E., Paul, J.F., Experimentation with a wet-process rotary cement kiln via the analog computer, I&EC Process Design and Development, vol. 1, no. 1, pp. 29-33, 1962.

Manitius, A., Kurcyiusz, E., Kawecki, W., Mathematical model of the aluminum oxide rotary kiln, Ind. Eng. Chem., Process Des. Develop., vol. 13, no. 2, pp. 132-142, 1974.

Marsili, M., Computer chemistry, CRC Press, USA, 1990.

McAdams, W.H., Heat transmission, 3ième édition, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1954.

McArdle, J.L., Messing, G.L., Seeding with γ -alumina for transformation and microstructure control in boehmite-derived α -alumina, Journal of the american ceramic society, vol.69, no.5, pp. C98-C101, 1986.

Mehta, S.K., Kalsotra, A., Kinetics and hydrothermal transformation of gibbsite, Journal of thermal analysis, vol. 367, pp. 267-275, 1991.

Metghalchi, M., Keck, J.C., Combustion and flame, vol. 38, pp. 143-154, 1980.

Misra, C., Wefers, K., Oxides and hydroxides of aluminium, Alcoa Technical Paper no.19 revised, Alcoa Laboratories, 1987.

Modak, A.T., Radiation from products of combustion, Fire Research, vol. 1, pp. 339-361, 1978.

Paulik, F., Paulik, J., Erdey, L., Combined thermo-dilatometric and derivatographic examination of hydrargillite and barium chloride dihydrate, Anal. Chim. Acta, vol. 41, pp. 170-172, 1968.

Perron, J., Modélisation mathématique d'un four de calcination du coke de pétrole, Thèse de Doctorat, Université de Montréal, 1989.

Perry, R.H., Chilton, C.H., Kirkpatrick, S.D., Perry's chemical engineering handbook, 4^{ème} édition, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1963.

Press, W.H., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., Numerical recipes in Fortran, the art of scientific computing, 2^{ème} édition, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.

Pyzalski, M., Wojcik, M., The deshydroxilation of aluminium hydroxides and the kinetics of α -Al₂O₃ formation, Journal of Thermal Analysis, vol. 36, pp. 2147-2151, 1990.

Riffaud, J.B., Koehret, B., Coupal, B., Modeling and simulation of an alumina kiln, Brit. Chem. Eng. And Proc. Tech., vol.17, no.5, pp. 413-418, 1972.

Rhine, J.M., Tucker, R.J., Modeling of gas-fired furnaces and boilers, McGraw-Hill Book Company Inc., London, 1991.

Sato, T., Hydrothermal reaction of alumina trihydrate, Journal of Applied Chemistry, Vol. 10, october, pp. 414-417, 1960.

Sato, T., Infra-red study of hydrothermal conversion of alumina trihydrate into alumina monohydrate, Journal of Applied Chemistry, vol. 13, pp. 316-319, 1963.

Siegel, R., Howell, J.R., Thermal radiation heat transfer, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1972.

Smith, J.M., Chemical engineering kinetics, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1956.

Stacey, M.H., Kinetics of decomposition of gibbsite and boehmite and the characterization of the porous products, American Chemical Society (Langmuir), vol. 3, pp. 681-686, 1987.

Stambuleanu, A., Flame combustion processes in industry, Abacus Press, England, 1976.

Steiner, C. J.-P., Hasselman, D.P.H., Spriggs, R.M., Kinetics of the gamma-to-alpha alumine phase transformation, Journal of the American Ceramic Society, vol. 54, no. 8, pp. 412-413, 1971.

Tackie, E.N., Watkinson, A.P., Brimacombe, J.K., Experimental study of the elutriation of particles from rotary kilns, The Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 67, pp. 806-817, 1989.

Tarasiewicz, S., Charette, A., Bui, R.T., Modeling the direct continuous dryer, Comptes rendus de la 14^{ième} Pittsburgh Conference on Modeling and Simulation, avril 1983.

Thring, M.W., The science of flames and furnaces, Chapman and Hall Ltd, Great Britain, 1962.

Treybal, R.E., Mass-transfer operations, 3^{ième} édition, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1980.

Tsuchida, T., Furuichi, R., Ishii, T., Kinetics of the dehydration of boehmites prepared under different hydrothermal conditions, Thermochemic Acta, 39, pp. 103-115, 1980.

Van Wylen, G.J., Sonntag, R.E., Desrochers, P., 2^{ième} édition, Thermodynamique appliquée, Éditions du renouveau pédagogique Inc., Montréal, 1981.

Varhegyi, G., Fekete, J., Gémesi, M., Reaction kinetics and mechanism of α -Al₂O₃ formation, I.C.S.O.B.A., 3^e congrès, Nice, 1973.

Viola, A., Baratti, R., Teodosi, A., Analysis and simulation of the alumina calcination process in a rotary kiln, *Light Metals*, pp. 179-189, 1986.

Wilson, S.J., McConnell, J.D.C., Kinetic study of the system γ -AlOOH/Al₂O₃, *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 34, pp. 315-322, 1980.

Zablotny, W.W., The movement of the charge in rotary kilns, *International Chemical Engineering*, vol. 5, no. 2, pp. 360-366, 1965.

Zhang, P.H., Chang, R.Z., Wei, Z., Cao, H., Zhou, X.N., The melting point, latent heat of solidification, and enthalpy for both solid and liquid α -Al₂O₃ in the range 550-2400 K, *International Journal of Thermophysics*, vol. 7, no. 4, pp. 811-819, 1986.

Zivkovic, Z.D., Pacovic, N., Filipovic, M., The effect of AlF₃ on the calcination of aluminium hydroxide, Faculty of mining and metallurgy in Bor, University of Beograd, Yugoslavia, 1979.

Zubrzycki, B.J., Some thermal aspects of rotary kiln operation, *Chemistry in Canada*, february, pp. 33-37, 1957.

ANNEXE 1
CONSTANTES

Constante gravitationnelle	g	$9,81 \text{ m/s}^2$
Pression totale	P_t	$101,3 \text{ kPa}$
Constante universelle des gaz	R	$8,314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$
Pi	π	$3,1416$
Constante de Stefan-Boltzmann	σ	$5,67\cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$

ANNEXE 2

RELATIONS MATHÉMATIQUES

Quantité de mouvement d'un fluide f $U = \frac{G_f^2}{(\rho_f \cdot A_f)}$ (N)

Nombre de Reynolds $Re = \frac{\rho_g \cdot V_g \cdot D_h}{\mu_g}$

Nombre de Prandtl $Pr = \frac{Cp_g \cdot \mu_g}{k_g}$

Diamètre hydraulique $D_h = \frac{4 \cdot A_g}{P_g}$ (m)

Nombre de Reynolds en rotation $Re_w = \frac{d_e^2 \cdot N}{60 \cdot \nu_a}$

Nombre de Grashof $Gr = \frac{d_e \cdot g \cdot \beta \cdot \rho_a \cdot (T_o - T_a)}{\mu_a^2}$

Coefficient de dilatation $\beta \approx 1 / T_{film}$ (K^{-1})

Nombre de Rayleigh $Ra = Gr \cdot Pr$

ANNEXE 3

THÉORIE SUR LA CINÉTIQUE CHIMIQUE

La vitesse d'une réaction, R, représente la quantité de matière transformée par unité de temps et par unité de volume (ou de masse ou encore de surface). L'équation générale pour une vitesse de réaction s'exprime par la constante de vitesse k multipliée par la ou les concentrations C du ou des réactifs.

Prenons l'exemple d'une réaction chimique à trois réactifs A, B et C,

$$R = k_{\alpha+\beta+\gamma} \cdot C_A^\alpha \cdot C_B^\beta \cdot C_C^\gamma$$

L'ordre de la réaction est la somme des exposants de chacun des réactifs, soit,

$$\text{Ordre } n \text{ de la réaction} = \alpha + \beta + \gamma$$

Les unités de la constante de vitesse k dépendent quant à elles de l'ordre de la réaction et elles s'expriment de la façon suivante,

$$(\text{gmol})^{1-\gamma-\beta-\alpha} \cdot (\text{m}^3)^{\alpha+\beta+\gamma-1} \cdot \text{sec}^{-1} \quad (\text{A.3.1})$$

Pour une réaction d'ordre un, où $\alpha=1$ et $\beta=\gamma=0$, on a,

$$R = k \cdot C^1 \quad (\text{A.3.2})$$

En suivant la formule générale présentée en (A.3.1), les unités de k deviennent s^{-1} , et sachant que la concentration est exprimée en gmol/m^3 , on obtient pour la vitesse de réaction des $\text{gmol/m}^3 \cdot \text{s}$. Si par contre la réaction est d'ordre zéro les unités de k deviennent tout simplement $\text{gmol/m}^3 \cdot \text{s}$.

Pour les fins de la simulation, il a été adopté comme convention d'exprimer la vitesse de réaction en kg de produit formé/ $\text{m} \cdot \text{s}$. Or pour la réaction d'un solide, la vitesse de réaction s'exprime la plupart du temps, dans la littérature, en kg de produit formé/ kg réactif initial $\cdot \text{s}$. La façon de transformer les unités est présentée ci-dessous.

Prenons un lit de solide, où un réactif A se transforme en un produit B. La transformation des unités de la vitesse de réaction en $\text{kg/m} \cdot \text{s}$ peut se faire de deux façons:

Première méthode

$$\frac{\text{masse de B}_{\text{formé}} (\text{kg})}{\text{masse de A}_{\text{initial}} (\text{kg}) \cdot \text{s}} \times \text{densité } \rho_{\text{vrac}} \text{ de A}_{\text{initial}} (\text{kg} / \text{m}^3) \times \text{section A du lit (m}^2)$$

où

$$\rho_{\text{vrac}} = \rho \cdot (1-\varepsilon)$$

$$\varepsilon = \text{porosité}$$

Deuxième méthode

$$\frac{\text{masse de B}_{\text{formé}} \text{ (kg)}}{\text{masse de A}_{\text{initial}} \text{ (kg)} \cdot s} \times \frac{\text{dé bit massique de A}_{\text{initial}} \text{ (kg / s)}}{\text{vitesse du lit (m / s)}}$$

Les deux méthodes donnent finalement,

$$\frac{\text{masse de B formé (kg)}}{m \cdot s}$$

La constante de vitesse k s'exprime selon la relation d'Arrhénius, $k = k_0 \cdot \exp(-E/RT)$.

ANNEXE 4

ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES
POUR CHAQUE ZONE DU FOUR

La figure suivante représente la division du four de calcination d'alumine qui a été utilisée pour établir les équations différentielles. Toutes les équations qui suivent réfèrent à cette figure.

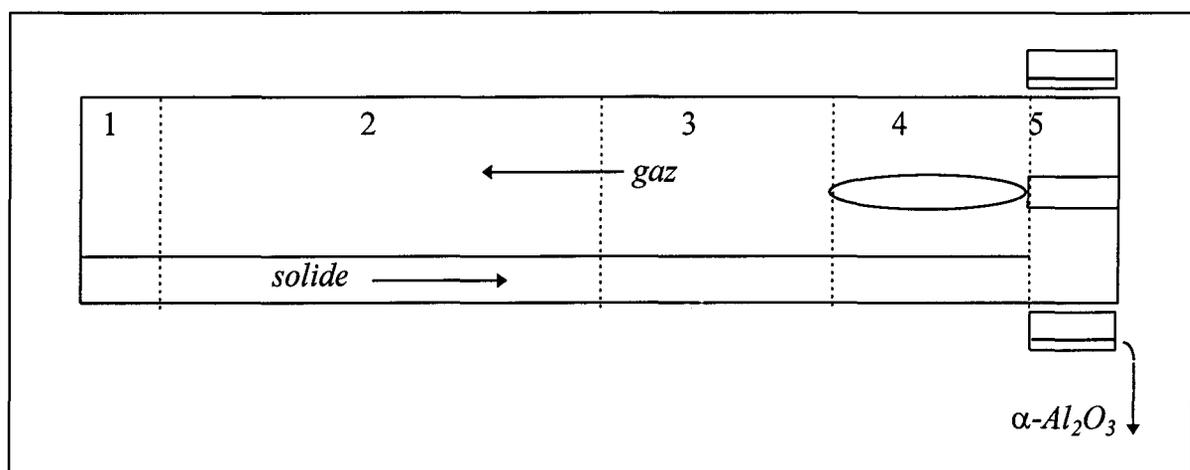


Figure A.4.1 Zones du four.

Zone de préchauffage (zone 1)

Dans cette zone il ne se produit aucune réaction. C'est l'étape de préchauffage du solide, juste avant que ne débute l'évaporation de l'humidité de surface.

Solide

$$(G_s \cdot Cp_s + G_w \cdot Cp_w) \frac{dT_s}{dx} = q_{gs} + q_{ms}$$

Gaz

$$(G_g \cdot Cp_g + G_d \cdot Cp_d) \frac{dT_g}{dx} = q_{gm} + q_{gs} + \frac{dG_d}{dx} (Cp_d \cdot T_g - Cp_{d,s} \cdot T_s)$$

Zone des réactions endothermiques (zone 2)

Cette zone comprend l'évaporation de l'eau, la déshydratation du trihydrate en monohydrate d'alumine et la déshydratation du monohydrate en alumine gamma. Le réactif est représenté par l'indice A.

Solide

$$(G_s \cdot Cp_s + G_w \cdot Cp_w) \frac{dT_s}{dx} = q_{gs} + q_{ms} - \frac{dG_A}{dx} \cdot \Delta H_A$$

Gaz

$$(G_g \cdot Cp_g + G_d \cdot Cp_d) \frac{dT_g}{dx} = q_{gm} + q_{gs} + \frac{dG_d}{dx} (Cp_d \cdot T_g - Cp_{d,s} \cdot T_s) \\ + \frac{dG_{wg}}{dx} \cdot (Cp_{wg} \cdot T_g - Cp_{wg,s} \cdot T_s)$$

Zone de la transformation de l'alumine gamma en alumine alpha (zone 3)

Cette zone est une zone de réaction exothermique et contrairement aux réactions endothermiques mentionnées ci-haut, il n'y a aucune libération d'eau vers le gaz. On suppose que la libération de chaleur venant du caractère exothermique de la réaction ne contribue qu'à chauffer le solide. Le réactif est toujours identifié par l'indice A.

Solide

$$(G_s \cdot Cp_s) \frac{dT_s}{dx} = q_{gs} + q_{ms} + \frac{dG_A}{dx} \cdot \Delta H_A$$

Gaz

$$(G_g \cdot Cp_g + G_d \cdot Cp_d) \frac{dT_g}{dx} = q_{gm} + q_{gs} + \frac{dG_d}{dx} (Cp_d \cdot T_g - Cp_{d,s} \cdot T_s)$$

Zone de la flamme (zone 4)

L'équation pour le solide dans cette zone dépend du stade d'avancement des transformations. Supposons que toutes les transformations cristallines sont complètes.

Solide

$$(G_s \cdot Cp_s) \frac{dT_s}{dx} = q_{gs} + q_{ms}$$

Gaz

$$(G_g \cdot Cp_g + G_d \cdot Cp_d + G_a \cdot Cp_a + G_f \cdot Cp_f) \frac{dT_g}{dx} = q_{gm} + q_{gs} + \frac{dG_d}{dx} (Cp_d \cdot T_g - Cp_{d,s} \cdot T_s) \\ + \frac{dG_A}{dx} (Cp_{a,g} \cdot T_g - Cp_a \cdot T_a) + \frac{dG_f}{dx} (Cp_{f,g} \cdot T_g - Cp_f \cdot T_f) - \frac{dG_f}{dx} \cdot \Delta H_f$$

Note: Les indices s et g indiquent que la propriété de l'espèce en question est évaluée à la température du solide et du gaz respectivement.

Zone des refroidisseurs planétaires (zone 5)*Solide*

$$(G_s \cdot Cp_s) \frac{dT_s}{dx} = -q_{gs} - q_{ms}$$

Gaz

$$(G_g \cdot Cp_g + G_d \cdot Cp_d) \frac{dT_g}{dx} = -q_{gm} - q_{gs} + \frac{dG_d}{dx} \cdot (Cp_d \cdot T_g - Cp_{d,s} \cdot T_s)$$

ANNEXE 5
PROPRIÉTÉS DES GAZ

Gaz carbonique, CO₂

Chaleur massique à pression constante (J/kg·K) (Perron, 1989)
527°R ≤ T_g ≤ 3731°R

$$C_{p_{CO_2}} = (0,6531 + 4,5216 \cdot 10^{-4} \cdot T_g - 7,2639 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^2) \cdot 1000$$

Densité (kg/m³)

$$\rho_{CO_2} = \frac{101300}{188,92 \cdot T_g}$$

Conductivité thermique (W/m·K) (Incropera et DeWitt, 1990)

$$\text{Si } (T_g < 280 \text{ K}), k_{CO_2} = 0,0152$$

$$\text{Si } (T_g > 800 \text{ K}), k_{CO_2} = 0,0551$$

$$\text{Si } (280 \leq T_g \leq 800 \text{ K}), k_{CO_2} = (0,078403 \cdot T_g - 6,90083) / 1000$$

Viscosité dynamique (kg/m·s) (Perron, 1989)
527°R ≤ T_g ≤ 3011°R

$$\mu_{CO_2} = (2,2794 \cdot 10^{-2} + 3,0202 \cdot 10^{-2} \cdot T_g - 4,6067 \cdot 10^{-6} \cdot T_g^2 + 9,3918 \cdot 10^{-12} \cdot T_g^3) \cdot 1 \cdot 10^{-6}$$

Vapeur d'eau, H₂O

Chaleur massique à pression constante (J/kg·K) (Perron, 1989)
 $527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3731^{\circ}\text{R}$

$$C_{p_w} = (1,5993 + 4,2280 \cdot 10^{-4} \cdot T_g - 2,4617 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^2) \cdot 1000$$

Densité (kg/m³)

$$\rho_w = \frac{101300}{461,52 \cdot T_g}$$

Conductivité thermique (W/m·K) (Incropera et DeWitt, 1990)

Si ($T_g < 380$ K), $k_w = 0,0246$

Si ($T_g > 850$ K), $k_w = 0,0637$

Si ($380 \leq T_g \leq 850$ K), $k_w = (0,0830333 \cdot T_g - 7,48667) / 1000$

Viscosité dynamique (kg/m·s) (Perron, 1989)

$527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 2831^{\circ}\text{R}$

$$\mu_w = (5,0615 + 4,1498 \cdot 10^{-3} \cdot T_g + 1,3543 \cdot 10^{-5} \cdot T_g^2 - 3,1354 \cdot 10^{-9} \cdot T_g^3) \cdot 1 \cdot 10^{-6}$$

Azote, N₂

Chaleur massique à pression constante (J/kg·K) (Perron, 1989)

$$527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3731^{\circ}\text{R}$$

$$C_{p_{N_2}} = (0,9399 + 1,5072 \cdot 10^{-4} \cdot T_g - 1,5909 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^2) \cdot 1000$$

Densité (kg/m³)

$$\rho_{N_2} = \frac{101300}{296,8 \cdot T_g}$$

Conductivité thermique (W/m·K) (Incropera et DeWitt, 1990)

$$\text{Si } (T_g < 100 \text{ K}), k_{N_2} = 0,00958$$

$$\text{Si } (T_g > 1300 \text{ K}), k_{N_2} = 0,081$$

$$\text{Si } (100 \leq T_g \leq 1300 \text{ K}),$$

$$k_{N_2} = (0,043484 + 0,101859 \cdot T_g - 5,97649 \cdot 10^{-5} \cdot T_g^2 + 2,26688 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^3) / 1000$$

Viscosité dynamique (kg/m·s) (Perron, 1989)

$$527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3011^{\circ}\text{R}$$

$$\mu_{N_2} = (2,8982 + 3,1133 \cdot 10^{-2} \cdot T_g - 6,5688 \cdot 10^{-6} \cdot T_g^2 + 4,1525 \cdot 10^{-10} \cdot T_g^3) \cdot 1 \cdot 10^{-6}$$

Oxygène, O₂

Chaleur massique à pression constante (J/kg·K) (Perron, 1989)

$$527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3731^{\circ}\text{R}$$

$$C_{p_{O_2}} = (0,8017 + 2,1770 \cdot 10^{-4} \cdot T_g - 3,2614 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^2) \cdot 1000$$

Densité (kg/m³)

$$\rho_{O_2} = \frac{101300}{259,83 \cdot T_g}$$

Conductivité thermique (W/m·K) (Incropera et DeWitt, 1990)

$$\text{Si } (T_g < 100 \text{ K}), k_{O_2} = 0,00925$$

$$\text{Si } (T_g > 1300 \text{ K}), k_{O_2} = 0,087$$

$$\text{Si } (100 \leq T_g \leq 1300 \text{ K}),$$

$$k_{O_2} = (0,196736 + 0,096927 \cdot T_g - 3,85719 \cdot 10^{-5} \cdot T_g^2 + 1,19573 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^3) / 1000$$

Viscosité dynamique (kg/m·s) (Perron, 1989)

$$527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3011^{\circ}\text{R}$$

$$\mu_{O_2} = (2,4902 + 3,7616 \cdot 10^{-2} \cdot T_g - 7,5387 \cdot 10^{-6} \cdot T_g^2 + 4,1283 \cdot 10^{-10} \cdot T_g^3) \cdot 1 \cdot 10^{-6}$$

Méthane, CH₄

Chaleur massique à pression constante (J/kg·K) (Perron, 1989)
 $527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3731^{\circ}\text{R}$

$$C_{p_{\text{CH}_4}} = (0,9579 + 1,3832 \cdot 10^{-3} \cdot T_g - 1,0068 \cdot 10^{-7} \cdot T_g^2) \cdot 1000$$

Densité (kg/m³)

$$\rho_{\text{CH}_4} = \frac{101300}{518,35 \cdot T_g}$$

Conductivité thermique (W/m·K) (Incropera et DeWitt, 1990)

$$k_{\text{CH}_4} = 0,03$$

Viscosité dynamique (kg/m·s) (Incropera et DeWitt, 1990)

$$\mu_{\text{CH}_4} = 1,59 \cdot 10^{-5}$$

Air atmosphérique

Chaleur massique à pression constante (J/kg·K) (Perron, 1989)
 $527^{\circ}\text{R} \leq T_g \leq 3731^{\circ}\text{R}$

$$C_{p_a} = (0,9064 + 1,6746 \cdot 10^{-4} \cdot T_g - 2,0472 \cdot 10^{-8} \cdot T_g^2) \cdot 1000$$

Densité (kg/m³)

$$\rho_a = \frac{101300}{287 \cdot T_g}$$

Conductivité thermique (W/m·K) (Incropera et DeWitt, 1990)

Si ($T_g < 100$ K), $k_a = 0,00934$

Si ($T_g > 3000$ K), $k_a = 0,486$

Si ($100 \leq T_g \leq 3000$ K),

$$k_a = (18,9345 - 0,0151513 \cdot T_g + 1,50498 \cdot 10^{-4} \cdot T_g^2 - 1,09261 \cdot 10^{-7} \cdot T_g^3 + 2,59856 \cdot 10^{-11} \cdot T_g^4) / 1000$$

Viscosité dynamique (kg/m·s) (Incropera et DeWitt, 1990)
 (T en K)

$$\mu_a = (4,11298 + 5,0523 \cdot 10^{-2} \cdot T_g - 1,43462 \cdot 10^{-5} \cdot T_g^2 + 2,5914 \cdot 10^{-9} \cdot T_g^3) \cdot 1 \cdot 10^{-6}$$

ANNEXE 6

LISTE DES RÉSULTATS FOURNIS PAR LE MODÈLE

Paramètres reliés au solide

- Température
- Temps de résidence du solide dans le four
- Débit de solide
- Vitesse moyenne du lit
- Pourcentage de remplissage
- Hauteur du lit
- Angle de remplissage
- Propriétés (chaleur massique, densité, émissivité)
- Composition du lit
- Débit de chaque composante

Paramètres reliés au gaz

- Température
- Section de four occupée par le gaz
- Vitesse
- Propriétés (chaleur massique, densité, émissivité, conductivité thermique, viscosité dynamique)
- Débits et propriétés de chaque composante du gaz
- Nombres de Reynolds et de Prandtl

Paramètres reliés à la paroi

- Température
- Émissivité

Paramètres reliés aux transferts de chaleur

- Transferts de chaleur (gaz-mur, gaz-solide, mur-solide, mur-environnement, conduction à travers la paroi)
- Aires d'échange
- Coefficients de transfert de chaleur

Paramètres reliés à la cinétique

- Taux de poussierage
- Vitesses des quatre réactions se produisant dans le lit (évaporation, déshydratation du trihydrate en monohydrate, déshydratation du monohydrate en alumine gamma, transformation de l'alumine gamma en alumine alpha)
- Chaleurs de réaction

Paramètres reliés à la combustion

- Longueur de la flamme
- Pourcentage d'air en excès
- Quantité d'air minimale à fournir
- Taux de combustion du fuel
- Taux de consommation de l'oxygène
- Taux de production du gaz carbonique
- Taux de production de la vapeur d'eau
- État de la flamme (pauvre, riche ou stoechiométrique)

Note: Tous les résultats sont obtenus en chaque point du four, sauf ceux reliés à la combustion, ainsi que le temps de résidence du solide et la vitesse moyenne du lit.