



HAL
open science

Modélisation de la purification de l'aluminium liquide par procédé de flottation en cuve agitée

Olivier Mirgaux

► **To cite this version:**

Olivier Mirgaux. Modélisation de la purification de l'aluminium liquide par procédé de flottation en cuve agitée. Autre. Institut National Polytechnique de Lorraine, 2007. Français. NNT : 2007INPL105N . tel-01748932

HAL Id: tel-01748932

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748932>

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

Modélisation de la purification de l'aluminium liquide par procédé de flottation en cuve agitée

THESE

Présentée et soutenue publiquement le 17 décembre 2007

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Institut National Polytechnique de Lorraine
(Science et Ingénierie des Matériaux)

par

Olivier MIRGAUX
Ingénieur Civil des Mines

Composition du jury :

<i>Frédéric GRUY</i>	<i>Ecole des Mines de Saint-Etienne</i>	<i>Rapporteurs</i>
<i>Jean Bernard GUILLOT</i>	<i>Ecole Centrale de Paris</i>	
<i>Denis ABLITZER</i>	<i>Ecole des Mines de Nancy</i>	<i>Examineurs</i>
<i>Jean-Pierre BELLOT</i>	<i>Ecole des Mines de Nancy</i>	
<i>Pierre LEBRUN</i>	<i>ALCAN CRV</i>	
<i>Michel SARDIN</i>	<i>ENSIC</i>	

A ma famille et mes amis

A Raphaëlle qui m'a donné des ailes dans la dernière ligne droite

Remerciements

Ces trois années de doctorat ont été riches en enseignements, à tout point de vue : scientifique, humain et personnel.

Pour m'avoir permis de mener à bien ce projet, je tiens à remercier chaleureusement mes directeurs de thèses, Jean-Pierre Bellot et Denis Ablitzer, ainsi que toute l'équipe de la fonderie ALCAN CRV, en particulier Pierre Lebrun et Emmanuel Waz, qui m'ont accordé leur confiance dès la deuxième année d'Ecole, et qui l'ont, chacun à leur façon, renouvelée à l'issue de ce travail.

Au cours de ces trois années passées au LSG2M, ma collègue de bureau, Valentine, a du subir au quotidien mes excès d'enthousiasme ou de non-enthousiasme, ainsi que ma vision très personnelle de l'ordre et du rangement. Sa bonne humeur, ainsi que celle de toute la « brigade féminine » du laboratoire (Anne-Marie, Laurence, Josette, Liliane, Martine et Géraldine), a sans aucun doute été une source de motivation et de soutien de premier rang tout au long de cette expérience.

A chaque fois que j'en ai eu besoin, j'ai pu compter sur les conseils avisés d'Hervé Combeau, et je souhaite lui adresser ma gratitude pour sa gentillesse et l'intérêt qu'il a porté à mon travail.

Lors de mes nombreuses montées d'adrénaline, à la suite d'évènements du type « ça marche pas », ou « ça marche plus » (ce qui est pire), ou encore « j'ai tout perdu » (ce qui est atroce), j'ai pu compter sur la diligence et les compétences de Bernard Dussoubs et de Francesco Giannangeli (dans leurs domaines respectifs), qui m'ont été d'un grand secours.

Déjà petit, j'avais le désir ardent de comprendre le monde qui m'entourait, et j'avais d'ailleurs développé une certaine habileté dans le test dit « du marteau », consistant à casser les objets pour voir ce qu'il y avait dedans (je découvrais là, sans le savoir, les bases du contrôle destructif). Voulant renouer avec mes premiers amours, j'ai tenu à intégrer dans mon travail de recherche une composante expérimentale.

Je me suis cependant rapidement aperçu que l'expérimentation scientifique était un peu plus compliquée que le « test du marteau », et l'aide de Julien Jourdan,

de David Bonina et de Robert Vernet au LSG2M ainsi que de Robert Réflandrin et de Yves Puyet au CRV, n'a pas été de trop.

En parallèle de mon travail de recherche, j'ai eu la chance de pouvoir être initié à l'enseignement dans des conditions privilégiées, à travers l'encadrement de groupes de TD et de projets étudiants à l'Ecole de Mines. Tout au long de ma thèse ces séances ont constitué pour moi de réelles bouffées d'oxygène et, pour cela, je suis infiniment reconnaissant envers messieurs Denis Ablitzer et Thierry Verdel, pour la confiance qu'ils ont bien voulu m'accorder.

Nomenclature

Lettres romaines

B	Terme de naissance	$m^{-3}.s^{-1}$
D	Terme de disparition	$m^{-3}.s^{-1}$
D_{num}, D_{mes}	Coefficients de diffusion numérique	$m^2.s^{-1}$
d_p	Diamètre des inclusions	m
d_b	Diamètre des bulles	m
d_{pb}	Diamètre collisionnel	m
E_c	Efficacité collisionnel	
E_a	Efficacité d'attachement	
g	Accélération de la pesanteur	$m^2.s^{-2}$
k_t	Energie cinétique turbulente	$m^2.s^{-2}$
M	Nombre de classes	
n	Densité numérale des inclusions	m^{-6}
N	Concentration numérale	m^{-3}
N_i	Concentration numérale dans la classe i	m^{-3}
N_b	Concentration numérale en bulles	m^{-3}
r_p	Rayon des inclusions	m
r_b	Rayon des bulles	m
t	Temps	s
t_i	Temps d'induction	s
t_{sl}	Temps de glissement des inclusions à la surface des bulles	s
$t_{contact}$	Temps de contact des inclusions à la surface des bulles	s
U	Vitesse moyenne du métal liquide	$m.s^{-1}$
U'	Vitesse fluctuante du métal liquide	$m.s^{-1}$
$\overline{U^2}$	Variance de U'	$m^2.s^{-2}$
U_b	Vitesse moyenne des bulles	$m.s^{-1}$
U'_b	Vitesse fluctuante des bulles	$m.s^{-1}$
$\overline{U_b^2}$	Variance de U'_b	$m^2.s^{-2}$
U_{bf}	Vitesse moyenne des bulles relativement au fluide	$m.s^{-1}$
U'_{bf}	Vitesse fluctuante des bulles relativement au fluide	$m.s^{-1}$
$\overline{U_{bf}^2}$	Variance de U'_{bf}	$m^2.s^{-2}$
u_p	Vitesse moyenne des inclusions	$m.s^{-1}$
u'_p	Vitesse fluctuante des inclusions	$m.s^{-1}$

$\overline{u_p'^2}$	Variance de u_p'	$m^2.s^{-2}$
u_{pf}	Vitesse moyenne des inclusions relativement au fluide	$m.s^{-1}$
u_{pf}'	Vitesse fluctuante des inclusions relativement au fluide	$m.s^{-1}$
$\overline{u_{pf}'^2}$	Variance de u_{pf}'	$m^2.s^{-2}$
v	Volume des inclusions	m^3
v_i	Borne d'une classe d'inclusions	m^3
w	Vitesse relative moyenne inclusion-inclusion ou inclusion-bulle	$m.s^{-1}$
w'	Vitesse relative fluctuante inclusion-inclusion ou inclusion-bulle	$m.s^{-1}$
$\overline{w'^2}$	Variance de w'	$m^2.s^{-2}$
x_i	Volume représentatif d'une classe d'inclusions	m^3
Z	Vitesse d'évolution volumique	$m^3.s^{-1}$
Z_{bp}, Z_i	Vitesse d'élimination volumique par flottation	$m^3.s^{-1}$
Z_{12}	Vitesse d'évolution volumique par agglomération	$m^3.s^{-1}$

Lettres grecques

β	Noyau collisionnel	$m^6.s^{-1}$
$\beta_{i,k}$	Noyau collisionnel entre deux inclusions des classes i et k	$m^6.s^{-1}$
β_{bp}	Noyau collisionnel bulle-inclusion	$m^6.s^{-1}$
ε	Vitesse de dissipation de l'Ec turbulente	$m^2.s^{-3}$
η_k	Echelle de Kolmogorov	m
θ_{contact}	Angle de contact	$^\circ$
μ	Viscosité dynamique	$kg.m.s^{-1}$
ν	Viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$
ρ_p	Masse volumique des inclusions	$kg.m^{-3}$
ρ_f	Masse volumique du métal liquide	$kg.m^{-3}$
σ	Tension interfaciale	$N.m^{-1}$
τ_p	Temps de relaxation des inclusions	s
φ_i	Densité de flux de matière à l'interface i	$m^{-2}.s^{-1}$

Nombres adimensionnels

Co	Nombre de courant
Q_{pf}	Ratio des masses volumiques inclusion / fluide
Mo	Nombre de Morton

Pe	Nombre de Peclet
Re _b	Nombre de Reynolds des bulles
Re _p	Nombre de Reynolds des inclusions
St	Nombre Stokes
Ta	Nombre de Tadaki

Abréviation

CRV	Centre de Recherches de Voreppe
EBP	Equation de Bilan de Population
TVD	Total Variation Diminishing
MFN	Mécanique des Fluides Numérique
LIMCA	Liquid Metal Cleanliness Analyzer
PODFA	POrous Disk Filtration Apparatus

SOMMAIRE

1	INTRODUCTION GENERALE.....	1
1.1	QUALITE DES ALLIAGES ET PROCEDES DE TRAITEMENT DU METAL LIQUIDE.....	2
1.1.1	<i>La filière de l'aluminium.....</i>	2
1.1.2	<i>La qualité des alliages</i>	6
1.1.2.1	Les critères	6
1.1.2.2	Origines et nature des inclusions.....	7
1.1.3	<i>Les procédés de purification de l'aluminium liquide</i>	11
1.2	LA PURIFICATION DE L'ALUMINIUM PAR FLOTTATION.....	14
1.2.1	<i>Une poche multi-fonctions</i>	15
1.2.2	<i>Le procédé de flottation</i>	15
1.2.2.1	Généralités.....	15
1.2.2.2	Application à la purification de l'aluminium.....	16
1.3	OBJECTIFS	18
2	MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE 23	
2.1	IDENTIFICATION DES PARAMETRES CLEFS ET DES PROCESSUS PHYSIQUES FONDAMENTAUX	23
2.1.1	<i>Système d'étude.....</i>	23
2.1.2	<i>Paramètres opératoires.....</i>	24
2.2	MODELISATION DU REACTEUR	26
2.2.1	<i>Critère d'influence des phases dispersées sur l'écoulement du métal liquide</i>	27
2.2.2	<i>Modélisation du comportement inclusionnaire</i>	29
2.2.2.1	Approche Lagrangienne	29
2.2.2.2	Méthode des Bilans de Populations.....	30
2.2.2.3	Approche de type cuve homogène.....	40
2.2.2.4	Division du système d'étude en zones.....	41
2.2.2.5	Approche Eulérienne.....	42
2.3	BILAN : DEMARCHE ADOPTEE.....	43
2.3.1	<i>Récapitulatif.....</i>	43
2.3.2	<i>Mise en œuvre</i>	45
3	METHODES NUMERIQUES	47
3.1	HYDRODYNAMIQUE DE L'ECOLEMENT DIPHASIQUE METAL LIQUIDE – BULLES	47
3.1.1	<i>Généralités.....</i>	47
3.1.2	<i>Mise en œuvre</i>	48
3.1.3	<i>Conditions aux limites.....</i>	49
3.1.3.1	Parois de l'agitateur (phase continue).....	49
3.1.3.2	Parois de la cuve et surface du bain (phase continue).....	50
3.1.3.3	Parois de l'agitateur (bulles).....	50

3.1.4	<i>Limitation de la modélisation au régime dispersé</i>	53
3.1.5	<i>Résultats du modèle hydrodynamique et récupération du champ de vitesses</i>	54
3.2	DISCRETISATION DE L'EQUATION DE BILAN DE POPULATION (EBP)	55
3.2.1	<i>Méthodes d'ordre zéro</i>	56
3.2.1.1	Méthode de Hounslow.....	59
3.2.1.2	Méthode du pivot fixe de Kumar & Ramkrishna.....	60
3.2.2	<i>Méthode « Parallel Parent and Daughter Classes »</i>	62
3.2.3	<i>Méthodes d'ordre élevé</i>	65
3.2.4	<i>Méthodes des moments</i>	65
3.2.5	<i>Choix de la méthode de résolution de l'EBP</i>	67
3.2.6	<i>Validation du programme de résolution de l'EBP</i>	68
3.3	COUPLAGE MFN – EBP	71
3.3.1	<i>Les équations à résoudre</i>	71
3.3.1.1	Séparation des opérateurs.....	72
3.3.1.2	Séparation dimensionnelle.....	73
3.3.1.3	Conditions initiales et aux limites	74
3.3.2	<i>Volumes finis et schéma de discrétisation</i>	75
3.3.2.1	Préambule.....	75
3.3.2.2	Schémas de discrétisation classiques.....	76
3.3.2.3	Diffusion numérique.....	78
3.3.2.4	Limitation de la diffusion numérique	83
3.3.2.5	Schéma adopté.....	85
3.3.2.6	Choix du pas de temps.....	87
3.3.2.7	Efficacité du schéma TVD d'ordre 3.....	87
3.4	RECAPITULATIF.....	88
4	AGGLOMERATION ET FLOTTATION.....	91
4.1	PHENOMENES D'AGGLOMERATION.....	91
4.1.1	<i>Comportement des inclusions au sein d'un écoulement turbulent</i>	92
4.1.2	<i>Modèle de Saffman & Turner</i>	96
4.1.3	<i>Modèle de Abrahamson</i>	100
4.1.4	<i>Modèle de Kruis & Kusters</i>	101
4.1.5	<i>Comparaison des modèles</i>	104
4.1.6	<i>Efficacité d'attachement et stabilité de l'agglomérat</i>	108
4.2	PHENOMENE DE FLOTTATION.	109
4.2.1	<i>Caractéristiques des bulles</i>	109
4.2.2	<i>Zone d'écoulement laminaire</i>	111
4.2.2.1	Mise en évidence expérimentale.....	111
4.2.2.2	Fréquence de flottation et efficacité de collision	122
4.2.2.3	Efficacité d'attachement.....	127
4.2.3	<i>Zone d'écoulement turbulent</i>	132
4.2.3.1	Introduction.....	132
4.2.3.2	Démarche combinée de Kostoglou.....	134
4.3	INFLUENCE DU CHLORE SUR L'EFFICACITE DE LA FLOTTATION	139
4.3.1	<i>Introduction</i>	139
4.3.1.1	Aspects thermodynamiques.....	140
4.3.1.2	Comportement des chlorures formés au niveau des bulles	141
4.3.1.3	Influence sur l'efficacité de la flottation.....	142
4.4	RECAPITULATIF.....	149

5	EXPLOITATION ET RESULTATS.....	151
5.1	PRESENTATION DE L'ETUDE DE CAS	151
5.1.1	<i>Distribution en taille des inclusions.....</i>	<i>151</i>
5.1.2	<i>Caractéristiques du dispositif.....</i>	<i>153</i>
5.1.3	<i>Conditions opératoires.....</i>	<i>154</i>
5.2	CALCULS HYDRODYNAMIQUES	154
5.2.1	<i>Ecoulement du métal liquide.....</i>	<i>154</i>
5.2.2	<i>Turbulence</i>	<i>156</i>
5.2.3	<i>Comportement des bulles</i>	<i>158</i>
5.2.4	<i>Gaz alimentant le film gazeux en surface du rotor.....</i>	<i>165</i>
5.3	EFFICACITE DU PROCEDE DE FLOTTATION	166
5.3.1	<i>Fréquence de flottation</i>	<i>166</i>
5.3.1.1	<i>Distribution spatiale dans la cuve.....</i>	<i>166</i>
5.3.1.2	<i>Pertinence du modèle de flottation adopté.....</i>	<i>168</i>
5.3.2	<i>Fréquence d'agglomération.....</i>	<i>169</i>
5.3.3	<i>Influence du débit de gaz.....</i>	<i>171</i>
5.3.4	<i>Influence de l'agitation</i>	<i>172</i>
5.3.5	<i>Agitation vs Débit de gaz</i>	<i>174</i>
5.3.6	<i>Influence de la décantation</i>	<i>175</i>
5.3.7	<i>Influence du temps de traitement en cuve fermée.....</i>	<i>177</i>
5.3.7.1	<i>Observations.....</i>	<i>177</i>
5.3.7.2	<i>Critère de décision.....</i>	<i>179</i>
5.3.8	<i>Conclusions.....</i>	<i>180</i>
5.4	COMPARAISON AVEC LE MODELE EN CUVE HOMOGENE.....	181
5.4.1	<i>Introduction.....</i>	<i>181</i>
5.4.2	<i>Mise en œuvre</i>	<i>181</i>
5.4.3	<i>Fréquences de flottation.....</i>	<i>182</i>
5.4.4	<i>Efficacité du procédé.....</i>	<i>183</i>
5.4.5	<i>Distribution en taille</i>	<i>184</i>
5.4.6	<i>Conclusions.....</i>	<i>185</i>
5.5	SYSTEME OUVERT	186
5.5.1	<i>Principe.....</i>	<i>186</i>
5.5.2	<i>Entrée et sortie de matière en système homogène.....</i>	<i>187</i>
5.5.2.1	<i>Principe</i>	<i>187</i>
5.5.2.2	<i>Résultats.....</i>	<i>188</i>
5.5.2.3	<i>Distribution en taille des inclusions.....</i>	<i>190</i>
5.5.2.4	<i>Conclusions.....</i>	<i>191</i>
	CONCLUSIONS & PERSPECTIVES	193
	BIBLIOGRAPHIE.....	199
	ANNEXES	205
	A.1 LES SCHÉMAS TVD.....	207
	A.2 POINTS ET COEFFICIENTS DES POLYNOMES DE HERMITE.....	211

1 INTRODUCTION GENERALE

Encore inconnu au milieu du 19^{ème} siècle l'aluminium est aujourd'hui un matériau indispensable et omniprésent dans notre vie. En l'espace d'un siècle l'industrie de l'aluminium est passée d'une production marginale de 2500 à plus de 33 millions de tonnes en 2006 ; et une augmentation annuelle, comprise entre 5 et 10 %, de la production d'aluminium de première fusion est prévue jusqu'à l'horizon 2010 ... L'industrie de l'aluminium se porte donc bien. De part ses nombreuses qualités, les domaines d'utilisation de l'aluminium sont extrêmement variés. De la construction à la haute technologie aéronautique, en passant par les films alimentaires et les objets « design », l'aluminium trouve ainsi une multitude d'applications.

Dans un contexte industriel fort, où les deux tiers du marché mondial sont l'apanage d'une dizaine de producteurs, la production d'alliages de qualité irréprochable est une préoccupation de premier plan pour les industriels.

Cet enjeu majeur de « qualité des alliages » a motivé le projet CIPAL :

Capture des Inclusions pour la Purification de l'Aluminium

dans lequel s'inscrit la présente étude.

Mené par l'industriel ALCAN, ce projet sous tutelle du Ministère de l'Economie, de l'Industrie et des Finances, regroupe trois laboratoires universitaires autour de la thématique de la purification de l'aluminium en phase liquide :

- Le Laboratoire de Génie des Procédés et des Matériaux (LGPM) de l'Ecole Centrale de Paris a mené une étude sur la filtration en profondeur de l'aluminium.
- Le Laboratoire de Thermodynamique et Physico-Chimie Métallurgique (LTPCM) de l'INPG s'est intéressé aux interactions physico-chimiques inclusions-parois et inclusions-bulles.
- Le Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie (LSG2M) de l'Ecole des Mines de Nancy a mené l'étude présentée dans ce mémoire, sur la purification de l'aluminium par flottation en cuve agitée.

INTRODUCTION GENERALE

Avant d'entrer dans le détail et la technique de la purification de l'aluminium par flottation, dont ce manuscrit fait l'objet, il est important de faire quelques brefs rappels généraux sur l'aluminium, afin de mieux appréhender le contexte de cette étude.

1.1 Qualité des alliages et procédés de traitement du métal liquide

1.1.1 La filière de l'aluminium

En passant par la Provence ...

Bien qu'étant le troisième constituant le plus présent dans l'écorce terrestre, dont il constitue 8 %, l'aluminium n'a été produit que relativement récemment. Cette exploitation tardive, par rapport à celle des autres métaux usuels, s'explique par le fait que l'aluminium ne se trouve à l'état naturel que sous forme d'oxyde très stable.



Découvert en 1831 par Pierre Berthier aux Baux de Provence, le minerai d'aluminium prendra le nom de Bauxite. Composé de 40 à 60 % d'oxydes d'aluminium hydratés, mélangés à de la silice et de l'oxyde de fer lui conférant une couleur rouge orangée intense, la bauxite doit subir plusieurs transformations avant de libérer le métal recherché.

Dans une première étape l'oxyde d'aluminium est isolé du reste du minerai par le procédé développé par Karl-Joseph Bayer en 1887 : le procédé Bayer.

Au cours de cette étape, la bauxite est broyée, puis mélangée sous pression et à haute température à de la soude. L'aluminate de sodium ainsi formé est alors purifié, puis dilué et refroidi afin d'amorcer la précipitation de l'oxyde d'aluminium hydraté. Ce dernier est finalement calciné afin d'isoler l'alumine, qui est le produit du procédé de Bayer.

L'alumine doit ensuite être réduite. Ceci est réalisé par le procédé Héroult-Hall développé en 1886, plus connu sous le terme générique d'électrolyse de l'alumine. Dans un creuset garni de carbone, formant une cathode, l'alumine est dissoute dans de la cryolithe fondue à 1000°C. L'introduction d'anodes en carbone dans le bain permet le passage d'un courant à haute intensité qui dissocie l'alumine en aluminium et en oxygène. Ce dernier réagit avec le

INTRODUCTION GENERALE

carbone des anodes pour former du CO et du CO₂, tandis que l'aluminium, plus lourd que l'électrolyte, se dépose au fond de la cuve.

Un cycle perpétuel

Outre la filière de production d'aluminium primaire décrite précédemment, une grande partie de l'aluminium provient du recyclage (près de 30 % sur le marché européen). Une des propriétés fondamentales de l'aluminium réside en effet dans sa capacité à être recyclé indéfiniment, sans perte de qualité. Cette filière de production est moins coûteuse en énergie, puisqu'un gain de 95 %, par rapport à la filière primaire peut être réalisé ; les émissions de CO₂ sont également fortement réduites. Ceci s'inscrit tout à fait dans la démarche actuelle de développement durable.



Du métal aux produits

L'aluminium ainsi produit peut prendre différentes formes suivant l'usage auquel il est destiné : billettes de filage pour la fabrication de châssis de véhicules et la construction, fil à usage électrique ou mécanique, lingots pour le moulage et plaques de laminage pour la fabrication de tôles.

Pour chacune de ces applications, différentes propriétés de l'aluminium sont exploitées.

L'aluminium en question

L'aluminium est un métal d'aspect argent-gris mat dont l'une des propriétés majeure est la légèreté. L'aluminium a en effet une densité environ trois fois plus faible que celle de l'acier ou du cuivre, ce qui en fait un matériau de premier choix pour l'industrie aéronautique notamment.

C'est un excellent conducteur thermique et électrique, ce qui justifie son emploi dans les câbles électriques, les radiateurs et les ustensiles de cuisine.

Généralisant naturellement une couche d'oxyde, de 5 à 10 nm d'épaisseur, à sa surface, il est protégé de la corrosion de l'air et de l'eau. Différents types de traitement de surface peuvent encore améliorer cette résistance. L'aluminium est le deuxième métal le plus malléable et le sixième le plus ductile, ce qui en fait l'un des métaux les plus faciles à façonner par laminage, moulage, forgeage, étirage, emboutissage ...

Ses bonnes propriétés de surface permettent de réaliser des surfaces réfléchissantes bien la lumière ce qui, ajouté à son faible poids, en fait un matériau idéal pour les réflecteurs dans les éclairages ou les couvertures de survie. Il se prête de plus facilement aux traitements de surface (mécaniques ou chimiques), ce qui lui confère des propriétés décoratives.

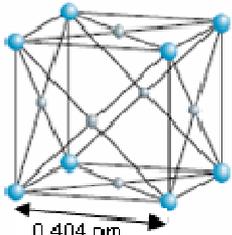
INTRODUCTION GENERALE

La feuille d'aluminium, même très mince (épaisseur de 0,006 mm), est complètement imperméable et ne laisse passer ni odeurs ni goût. De plus le métal lui-même a une grande stabilité chimique, ce qui en fait un métal particulièrement adapté à la protection et la conservation des produits alimentaires (emballages).

Carte d'identité

Les principales propriétés physiques de l'aluminium sont récapitulées dans le tableau 1.

Tableau 1. Principales propriétés physiques de l'aluminium.

Réseau cristallin CFC	
Masse molaire	27 g.mol ⁻¹
Température de fusion	660°C
Point d'ébullition	2056°C
Densité à 20°C	2,7
Résistivité électrique	2,7.10 ⁻⁸ Ω.m
Conductivité thermique	220 W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Chaleur spécifique massique	9,102 J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
Coefficient de dilatation (état solide)	24.10 ⁻⁶ K ⁻¹
Module d'élasticité	69 000 MPa

A l'état liquide, l'aluminium a la propriété d'avoir une viscosité dynamique voisine de celle de l'eau. Pour une température de maintien de 700°C, celle-ci vaut en effet 1,286 mPa.s⁻¹, contre 1 mPa.s⁻¹ pour l'eau. Cette propriété est importante, car elle permet, expérimentalement, de prévoir, dans une bonne mesure, le comportement de l'aluminium liquide, à partir de maquettes à eau. A cette température la masse volumique de l'aluminium est de 2357 kg.m⁻³.

INTRODUCTION GENERALE

Les évolutions de la viscosité dynamique et de la masse volumique de l'aluminium en fonction de la température sont représentées sur la Figure 1.

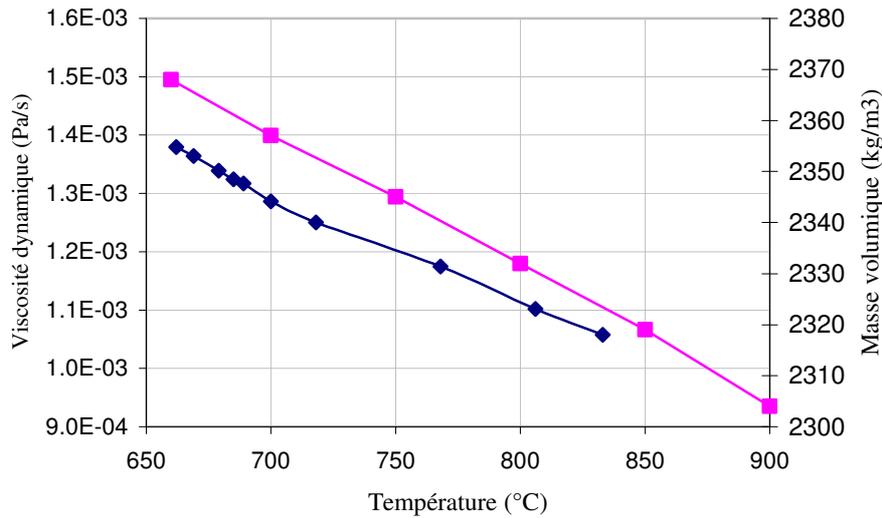


Figure 1. Variation de la viscosité dynamique (◆) et de la masse volumique (■) de l'aluminium liquide en fonction de la température.

La tension superficielle de l'aluminium liquide est quant à elle beaucoup plus forte que celle de l'eau, ce qui limite la similitude eau/aluminium évoquée précédemment. Cette dernière est fortement dépendante de la pureté du métal et de l'atmosphère environnante. Pour un aluminium pur à 99,986 % sous argon, la tension superficielle de l'aluminium est donnée par la formule suivante [1]:

$$\sigma = 868 - 0,152(T - T_f) \quad (\sigma \text{ en mN/m}) \quad \text{éq. 1}$$

L'ajout d'éléments d'addition tend généralement à diminuer la tension superficielle de l'aluminium comme on peut le voir sur la Figure 2. Pour un alliage à 1 % de magnésium, la tension superficielle de l'aluminium sous argon est ainsi voisine 660 mN.m^{-1} , dans la gamme de température 700-740°C.

En présence de gaz réactifs, tel le chlore, les valeurs précédentes sont sujettes à des variations plus ou moins importantes, selon la nature du gaz.

Notons enfin que les mesures de tension superficielle sont relativement délicates à mener en raison de la formation de films d'oxydes à la surface du métal liquide.

INTRODUCTION GENERALE

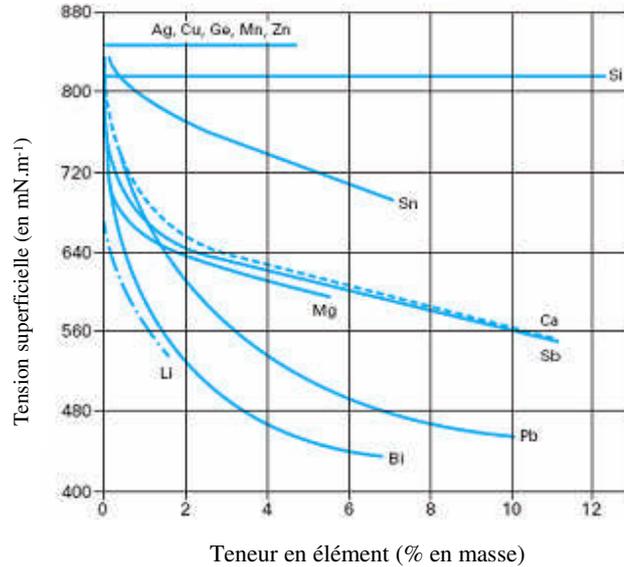


Figure 2. Influence de l'ajout d'éléments d'addition sur la tension superficielle de l'aluminium entre 700 et 740°C, d'après [1].

1.1.2 La qualité des alliages

1.1.2.1 Les critères

La pureté d'un alliage, dans l'industrie de l'aluminium, se caractérise par trois données essentielles que sont les teneurs en hydrogène, alcalins et inclusions parasites [2].

Lors de la solidification, la présence de ces éléments peut en effet avoir des conséquences très néfastes quant aux propriétés physiques et mécaniques du métal.

Les alcalins et métaux alcalino-terreux

En provenance de l'électrolyse et parfois des métaux de recyclage, les alcalins, et notamment le sodium, peuvent entraîner principalement un risque de déchirement lors du travail à chaud, ainsi qu'une altération des propriétés de surface de certains produits.

INTRODUCTION GENERALE

L'hydrogène

L'aluminium liquide non allié contient entre 0,5 et 1,2 cm³ d'hydrogène pour 100 g de métal – ces deux valeurs correspondant au seuil de solubilité de l'hydrogène dans l'aluminium, respectivement à 660°C et à 800°C [3]. A la solidification, ce seuil de solubilité tombe brutalement à 0,05 cm³ / 100 g. L'hydrogène dissous dans le métal passe alors sous forme moléculaire et engendre une microporosité (Figure 3) qui peut avoir des conséquences catastrophiques lors de la réalisation de fins laminés pour le boîtage par exemple.

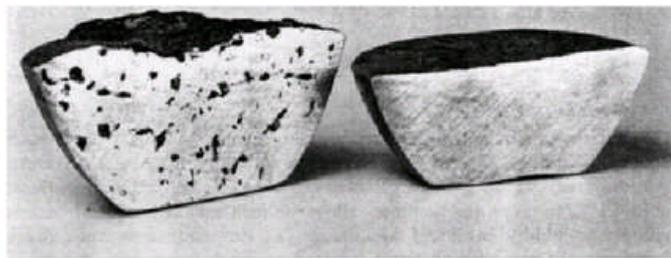


Figure 3. Effet de l'hydrogène dissous. A gauche un métal non dégazé, à droite un métal dégazé [4].

Les inclusions

De même, la présence d'inclusions lors de la mise en forme augmente de façon importante le risque d'endommagement du produit et des outils.

Outre les difficultés de mise en forme, la présence d'impuretés au sein du métal a également des conséquences néfastes directes sur ses propriétés physico-chimiques. On recense ainsi un risque d'augmentation du module d'élasticité, une réduction de la ductilité et de la résistance à la fatigue, une augmentation du taux de corrosion et une réduction des conductivités thermique et électrique [5].

La nature, la forme, la quantité, et la taille des inclusions sont très variables selon le type d'alliage réalisé, la provenance du métal (primaire ou secondaire) et les conditions opératoires (état des réfractaires, humidité de l'air, ...).

1.1.2.2 Origines et nature des inclusions

Altenpohl [3], présente de façon synthétique les différents types d'inclusions rencontrées dans l'aluminium. Comme on peut le voir sur la Figure 4, les inclusions ont trois origines principales : le procédé d'élaboration du métal (électrolyse / recyclage), la préparation de l'alliage en fonderie (fusion, mise à la

INTRODUCTION GENERALE

nuance, traitement et affinage) et enfin les incidents de parcours, notamment lors de la coulée (génération de peaux d'oxydes). Les principaux types d'inclusions rencontrées dans l'aluminium liquide sont présentés dans les paragraphes suivants et un tableau (tableau 3) récapitulatif des différents types d'inclusions est présenté en fin de chapitre.

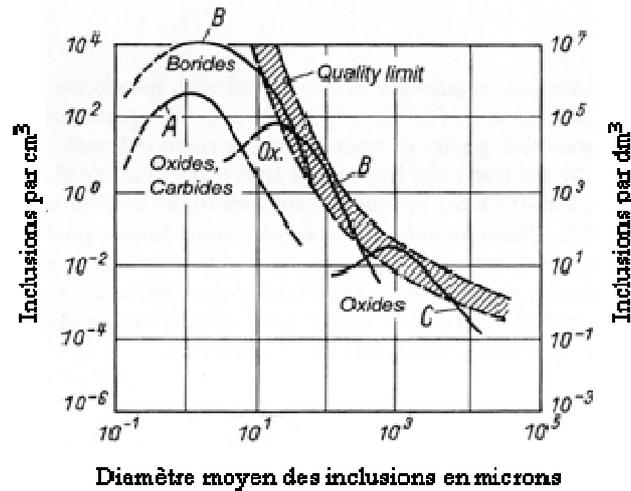


Figure 4. Schéma synthétique des différents types d'inclusions rencontrés dans l'aluminium de coulée : A – en provenance de l'électrolyse, B – résultant des différentes opérations de fonderie, C – dus à des défauts de process [3].

Inclusions d'oxydes

L'abondance des inclusions d'oxydes dans l'aluminium liquide est principalement due à la forte propension qu'a l'aluminium liquide à s'oxyder. En effet, à l'état liquide, l'aluminium se recouvre quasi-instantanément d'une couche d'oxyde de 10 à 15 μm d'épaisseur. L'agitation du métal liquide, son transvasement ou sa coulée engendrent des remous qui tendent à froisser et à fractionner cette couche d'oxyde. Le métal mis à nu par ce fractionnement de la peau d'oxyde est, à son tour, immédiatement oxydé. La répétition de ce processus engendre la formation de petites peaux d'oxyde qui sont susceptibles d'être dispersées en profondeur dans le bain et d'y rester en suspension. La morphologie de ces inclusions est principalement de type « papier froissé », mais on peut également trouver des inclusions d'oxydes se présentant sous forme compacte (Figure 5).

INTRODUCTION GENERALE

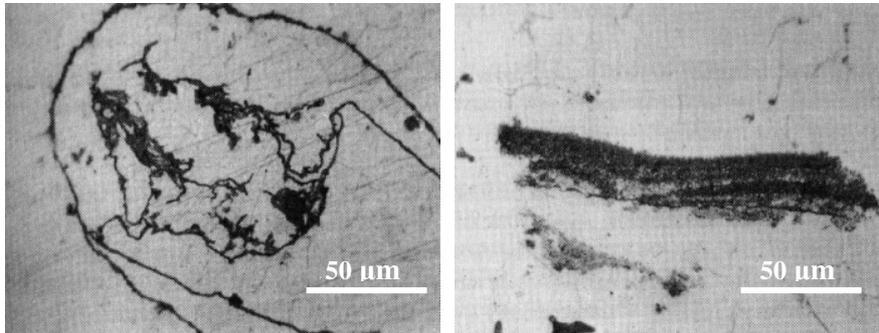


Figure 5. Peaux d'oxydes de morphologie « papier froissé » (à gauche) et « chips » (à droite), d'après [3].

Ces inclusions créent souvent des amorces de rupture dans les pièces soumises à des contraintes mécaniques et parfois un manque d'étanchéité des pièces.

Inclusions métalliques

Lors de la mise à nuance d'un alliage, des composés métalliques sont ajoutés au bain d'aluminium liquide. L'excès de certains éléments d'alliages peut entraîner la formation d'inclusions endogènes. Ce phénomène se produit notamment avec le titane, le fer et le manganèse. Ces inclusions, pouvant atteindre 200 µm, sont souvent à l'origine de casse d'outil à l'usinage et de rayures sur les surfaces usinées, connues sous le nom de « queues de comète ».

Inclusions de flux

L'utilisation de flux liquides ou gazeux¹ (ajout de matière pour traiter le métal à l'état liquide) en trop forte quantité peut engendrer la formation d'inclusions lors de la solidification. Ces inclusions sont connues dans le jargon de la fonderie sous le nom de « boue séchée » (Figure 6), en référence à leur morphologie. Ces inclusions étant fortement instables en présence d'humidité, il est impossible de les observer après polissage en phase aqueuse. Lors d'un tel traitement, les inclusions sont en effet dissoutes et apparaissent sous forme de cavités. On parle alors de « chlorures potentiels » (Figure 7).

¹ Les flux sont principalement utilisés pour éliminer les métaux réactifs tels que les alcalins.

Sodium, calcium, magnésium et lithium sont éliminés par du chlore ou du fluor sous forme gazeuse (chlore) ou solides (chlorures et fluorures). Phosphore et antimoine peuvent s'éliminer par réaction avec un mélange de chlorure et fluorure de potassium.

INTRODUCTION GENERALE

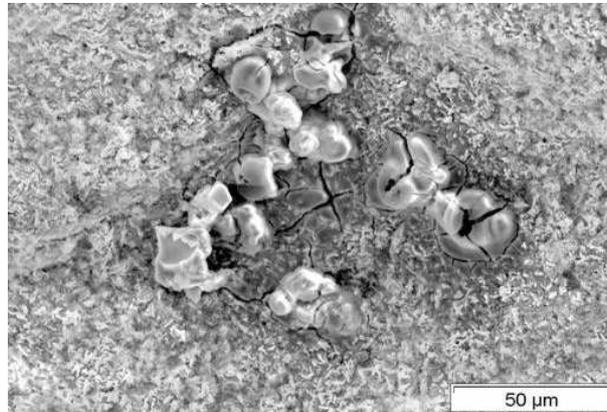


Figure 6. Morphologie de boue séchée caractéristique à la surface d'un échantillon ayant été traité au chlore [6].

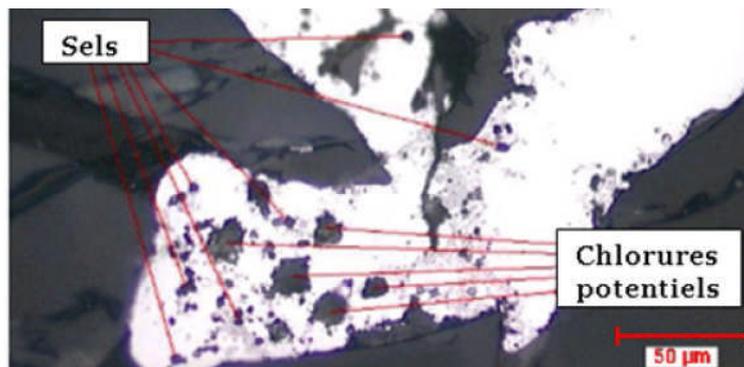


Figure 7. Micrographie mettant en évidence la présence de sels et de chlorures potentiels [7].

Inclusions non métalliques

La dégradation des réfractaires des parois des fours constitue la source principale d'inclusions non métalliques (principalement du SiC). Les réfractaires peuvent de plus réagir avec l'aluminium liquide (réduction de la silice) et former des agrégats complexes. Ce type d'inclusions dures n'altère a priori pas les propriétés mécaniques des alliages, mais sont souvent responsables de la rupture d'outils de coupe.

1.1.3 Les procédés de purification de l'aluminium liquide

Afin d'éliminer les inclusions parasites et d'assurer une qualité inclusionnaire optimale, divers procédés de purification de l'aluminium existent dans les fonderies d'aluminium.

De façon synthétique, la fonderie d'aluminium est le lieu, où le métal issu de l'électrolyse ou du recyclage, est transformé en un alliage répondant à un cahier des charges précis, puis dirigé vers les métiers de coulée (Figure 8).

La mise à la nuance de l'alliage est réalisée dans un four de fusion, dont la capacité peut atteindre plusieurs dizaines de tonnes. Le métal est ensuite transféré vers un four, dit de maintien, qui permet un contrôle précis de la température avant la coulée. Un affinant est introduit dans le métal liquide sous forme de tablettes, directement dans le four, ou sous forme de fil dans les goulottes, en sortie de four.

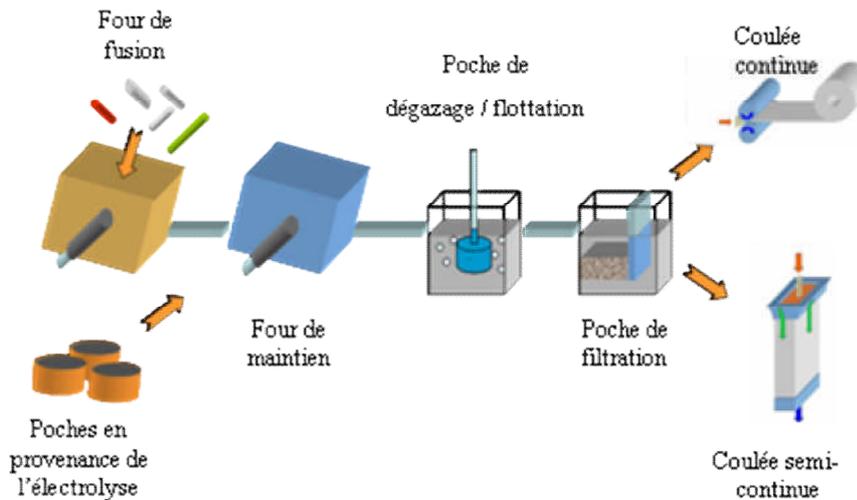


Figure 8. Représentation schématique d'une ligne de coulée dans une fonderie d'aluminium.

Le métal a besoin d'être purifié avant d'être dirigé vers le métier de coulée. Il passe ainsi successivement dans une poche de dégazage et de flottation (qui fait l'objet du paragraphe suivant), puis dans une poche de filtration. En amont de ces dispositifs, des traitements préliminaires sont déjà réalisés dans les fours de fusion et de maintien.

La figure 9 présente un exemple d'évolution de la propreté inclusionnaire du métal liquide au cours de sa progression dans la fonderie.

INTRODUCTION GENERALE

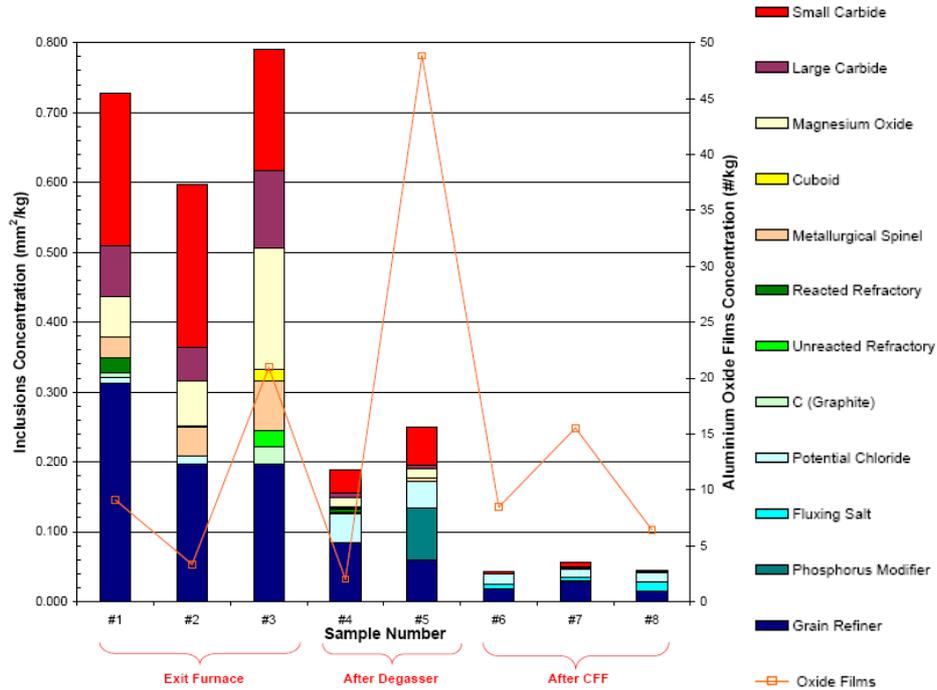


Figure 9. Exemple de résultats obtenus par mesure Podfa² à différents endroits de la chaîne de coulée, d'après [7].

Séparation gravitaire « vers le haut » dans les fours de maintien

Dans les fours de maintien, le métal liquide est brassé par de gros rotors de type IRMA. Ces rotors agitent le bain et favorisent ainsi la remontée des inclusions parasites, plus légères que le métal, vers la surface du bain. Il se forme alors en surface un amoncellement constitué d'un mélange d'inclusions et de peaux d'oxydes, couramment appelé « crasses ». Ces crasses sont éliminées mécaniquement par raclage de la surface. Ce raclage étant réalisé de façon sommaire (racloire fixé sur un chariot élévateur), une quantité importante de métal est perdue lors de cette étape. Les crasses sont ainsi recyclées, afin d'en extraire le maximum de métal exploitable.

Le brassage dans les fours de maintien dure approximativement une heure, et s'accompagne d'un prétraitement au chlore.

² Le Podfa est un appareil permettant de filtrer une petite quantité d'aluminium. La surface du filtre est ensuite polie et un comptage des inclusions est réalisé par analyse d'images.

INTRODUCTION GENERALE

Séparation gravitaire « vers le bas » dans les fours de maintien

A l'issu du brassage, le métal séjourne en principe jusqu'à deux heures dans le four de maintien, période durant laquelle le métal est mis à température, et où la décantation des inclusions plus denses que le métal s'effectue.

Le tableau 2 donne, à 700°C, les valeurs des vitesses de Stokes pour des particules de densité proche du métal liquide et des particules de densité plus importante (respectivement CaO et alumine). Il apparaît clairement que pour des particules de petite taille, la vitesse de décantation de Stokes est trop faible pour permettre aux inclusions d'atteindre le fond de la cuve. Ceci est d'autant plus vrai que la masse volumique des inclusions est voisine de celle du métal liquide. Les distances parcourues en 60 minutes, présentées dans ce tableau, ne tiennent compte ni de la force de traînée, ni des modifications de l'écoulement induites par la présence des inclusions. Si on prend en compte ces paramètres, la vitesse de sédimentation calculée est plus faible que la vitesse de Stokes.

Tableau 2. Vitesses de Stokes en fonction de la taille, pour des inclusions d'alumine et de CaO.

Diamètre inclusion (µm)	Alumine (3900 kg.m ⁻³)		CaO (2660 kg.m ⁻³)	
	Vitesse de Stokes (m.s ⁻¹)	Distance parcourue en 60 min (m)	Vitesse de Stokes (m.s ⁻¹)	Distance parcourue en 60 min (m)
10	6,5.10 ⁻⁵	2,4.10 ⁻¹	1,3.10 ⁻⁵	4,6.10 ⁻²
20	2,6.10 ⁻⁴	9,4.10 ⁻¹	5,1.10 ⁻⁵	1,8.10 ⁻¹
40	1,0.10 ⁻³	3,8	2,1.10 ⁻⁴	7,4.10 ⁻¹
60	2,3.10 ⁻³	8,5	8,2.10 ⁻⁴	1,7
80	4,1.10 ⁻³	1,5.10 ⁺¹	8,2.10 ⁻⁴	3,0
100	6,5.10 ⁻³	2,4.10 ⁺¹	1,3.10 ⁻³	4,6

Selon Eckert [8], la décantation des inclusions dans le four de maintien n'est efficace que pour des inclusions de dimension supérieure à 90 µm.

La filtration en profondeur de l'aluminium

En sortie de la poche de dégazage / flottation, que nous détaillerons dans le paragraphe 1.2 ci-après, le métal liquide est dirigé vers une poche de filtration. Nous nous contentons ici de rappeler les grandes lignes concernant ce procédé. Le lecteur désireux d'approfondir ce sujet pourra se reporter aux travaux réalisés au LGPM, dans le cadre du projet CIPAL, par Carlos Rivière : « Etude de la

INTRODUCTION GENERALE

filtration de l'aluminium liquide : modélisation et expérimentation à l'échelle pilote » [9, 10].

De façon synthétique, il existe trois modes de filtration de l'aluminium.

- La filtration tamis, où les inclusions de dimension supérieure au grade du filtre sont stoppées à la surface de celui-ci.
- La filtration sur support avec formation de gâteau, où les inclusions, de taille supérieure à celle des pores du medium filtrant, s'accroissent à sa surface et forment un dépôt qui joue le rôle de filtre pour les inclusions de plus petite taille.
- La filtration en profondeur, où les pores du medium filtrant sont de taille supérieure aux inclusions. Ces dernières pénètrent ainsi le filtre et sont capturées sur des sites privilégiés.

Ces trois modes de filtration sont représentés de façon schématique sur la Figure 10.

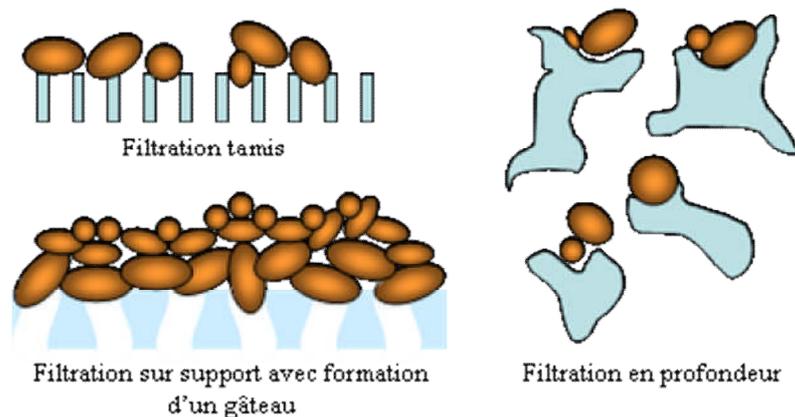


Figure 10. Différents modes de filtration.

1.2 La purification de l'aluminium par flottation

La poche de dégazage / flottation est située sur la ligne de coulée, entre le four de maintien et la poche de filtration. Nous allons nous attacher à la présentation de ce dispositif, qui fait l'objet de cette étude.

Il est intéressant de noter que la poche porte le nom de dégazage / flottation du fait des deux fonctions de cette installation.

INTRODUCTION GENERALE

1.2.1 Une poche multi-fonctions

A l'origine était l'hydrogène ...

Historiquement, cette poche a vu le jour pour éliminer l'hydrogène dissous dans le métal, ainsi que les alcalins. A cette fin, un gaz inerte, généralement de l'argon, est injecté dans le métal liquide sous forme de bulles. L'hydrogène diffuse alors au sein de ces bulles, jusqu'à atteindre une pression partielle en équilibre avec l'hydrogène dissous dans le bain.

Afin d'augmenter la surface d'échange avec le bain, il convient de faire des bulles les plus petites possibles. Pour cela le gaz est injecté par le biais d'un rotor. Le cisaillement en bout de pales permet en effet de former des bulles de petite taille, malgré la forte tension superficielle de l'aluminium liquide.

Afin d'éliminer les alcalins, un gaz réactif est ajouté à l'argon. La plupart du temps le gaz choisi est le chlore. Ce dernier réagit instantanément avec les alcalins (ex : $\text{Na} + \text{Cl} \rightarrow \text{NaCl}$) et permet ainsi leur élimination.

L'injection de chlore a, par ailleurs, l'avantage d'engendrer la formation des bulles de plus petite taille. En effet, selon [3], le chlore réagit violemment avec l'aluminium liquide pour former des chlorures d'aluminium gazeux. L'énergie libérée lors de cette réaction serait, selon l'auteur, suffisante pour disperser ces chlorures gazeux ainsi que le gaz vecteur en fines bulles.

Du dégazage à la flottation

Mais l'utilité de cette poche de dégazage ne s'arrête pas à l'élimination de l'hydrogène dissous et des alcalins. En effet, l'injection de bulles dans une phase liquide contenant des inclusions en suspension donne lieu à un processus bien connu des minéralogistes : la flottation.

1.2.2 Le procédé de flottation

1.2.2.1 Généralités

La flottation est un procédé de séparation de phases largement utilisé dans l'industrie. Le principe consiste à injecter des bulles au sein d'une phase continue, dont on veut extraire une phase dispersée, qui peut être solide ou liquide. Ces bulles captent, lors de leur ascension au sein du liquide, les particules en suspension et les drainent vers la surface du bain où elles s'accumulent pour former une couche superficielle, qui est éliminée mécaniquement.

INTRODUCTION GENERALE

D'autres configurations, pour lesquelles le vecteur de purification n'est pas constitué de bulles, mais de solides (« carrier flottation ») ou de liquides (« oil flottation »), existent également.

Quelle que soit la configuration envisagée, le principe fondamental, à l'origine de la séparation de phase, est le même. Il s'agit de la différence de tension superficielle à l'interface particule / phase continue et particule / collecteur. De façon synthétique, si la tension superficielle particule / collecteur est plus faible que la tension superficielle particule / phase continue, alors les particules sont susceptibles d'adhérer au collecteur, et ainsi d'être éliminées.

La notion de tension superficielle sera développée au chapitre 3.

Ce processus physique a pendant très longtemps été utilisé empiriquement de diverses façons. On trouve ainsi des traces de la technique de flottation durant la dynastie des Han (206 av. J.C. à 220 ap. J.C.) pour la purification de sels. Ce n'est cependant qu'au 19^e siècle, que la flottation en tant que procédé de séparation industriel fait son apparition dans le domaine de la minéralogie.

La flottation est aujourd'hui un procédé de séparation de phase largement exploité. On l'utilise par exemple pour la récupération de bitume à partir de sables huileux, le dé-encreage de la pâte à papier, le traitement d'effluents toxiques dans les industries chimiques et minières, l'extraction de solides dispersés dans le traitement des eaux domestiques ou industrielles, etc. Plus récemment, ce procédé a été appliqué à l'industrie métallurgique, notamment de l'aluminium, afin de purifier le métal à l'état liquide.

1.2.2.2 Application à la purification de l'aluminium

Appliquée au traitement de l'aluminium liquide, la technique de flottation emploie des bulles de gaz pour collecter les inclusions dispersées dans le liquide. Le procédé n'impose que peu de contraintes et peut être mis en œuvre en utilisant différentes technologies.

Suivant la filière industrielle concernée, le fluide peut ainsi être au repos, en écoulement libre dans une goulotte (configuration employée par Alcan avec le Alcan Compact Degaser), ou encore en écoulement turbulent au sein d'une cuve agitée par un rotor (procédé Alpur). Ces deux derniers dispositifs sont représentés schématiquement sur la Figure 11 et la Figure 12.

De même plusieurs média sont possibles pour l'injection du gaz au sein du liquide. La sidérurgie, comme l'industrie chimique, a souvent recours à des bouchons poreux, tandis que l'industrie de l'aluminium préfère l'utilisation de

INTRODUCTION GENERALE

rotors, où le gaz est injecté en bout de pales. Trois types de rotors, fréquemment utilisés dans les fonderies d'aluminium, sont présentés sur la Figure 13.

Dans le cadre de notre étude, nous allons nous intéresser au procédé de flottation en cuve agitée de type Alpur. Ce type de cuve, placé en sortie du four de fusion, présente une entrée et une sortie de métal, et peut fonctionner en batch (système fermé) ou semi-batch (système ouvert). Les rotors employés sont de types Alpur 1 et sont fabriqués en graphite.

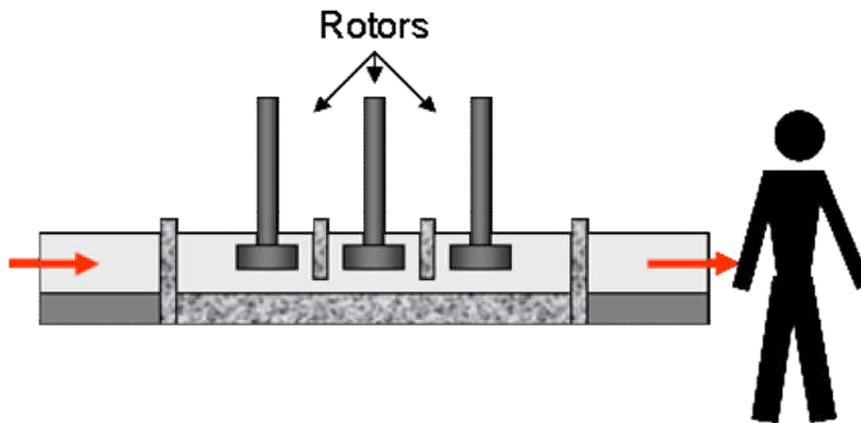


Figure 11. Schéma de principe du dispositif Alcan Compact Degaser, traitant le métal directement en goulotte.

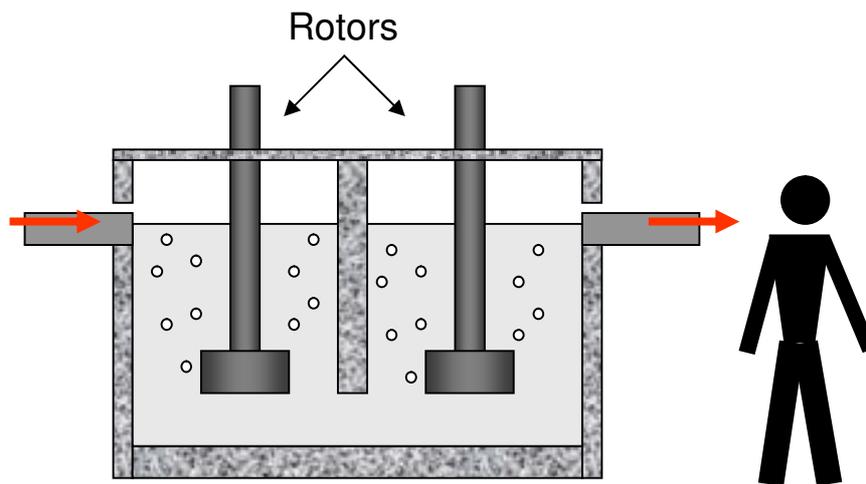


Figure 12. Schéma de principe du dispositif Alpur en cuve agitée.

INTRODUCTION GENERALE

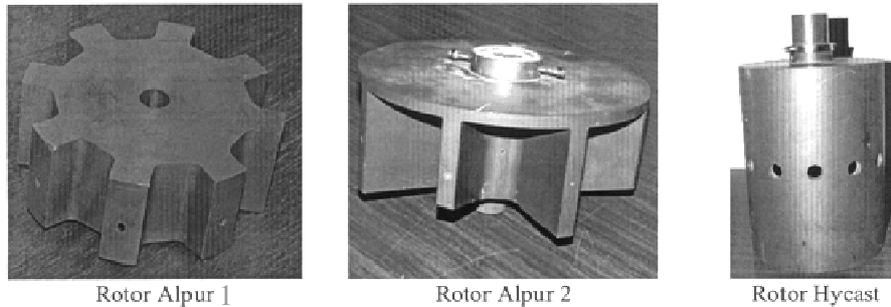


Figure 13. Différents types de rotors utilisés pour l'injection de bulles. Sur les rotors Alpur, les injecteurs se situent en bout de pales.

1.3 Objectifs

Si le procédé de flottation en cuve agitée est relativement simple à comprendre, il dissimule, à différentes échelles une multitude de processus physiques complexes, tels que l'attachement des inclusions aux bulles ou les phénomènes d'agglomération entre inclusions.

La maîtrise et l'optimisation du procédé nécessite la bonne compréhension de tous ces phénomènes sous-jacents.

A cette fin, nous nous proposons, dans cette étude :

- de recenser les différents processus physiques intervenant au cours du procédé de purification de l'aluminium par flottation en cuve agitée et d'identifier les paramètres opératoires importants,
- d'étudier ces processus, en particulier l'agglomération et la flottation des inclusions, et de les décrire mathématiquement,
- d'étudier l'hydrodynamique du réacteur³,
- d'élaborer un modèle mathématique multi-échelles, rendant compte aussi bien des phénomènes à l'échelle des inclusions et des bulles, que des comportements macroscopiques à l'échelle du réacteur,
- d'étudier le rôle du chlore dans le procédé de purification.

³ Comme nous le verrons plus tard, cette partie a été essentiellement réalisée au CRV, par E. WAZ.

INTRODUCTION GENERALE

La suite du manuscrit, se développe le long des chapitres 2 à 5.

Dans le Chapitre 2, nous présentons les différents processus physiques pris en considération, puis nous élaborons une méthodologie pour modéliser mathématiquement, par une approche multi-échelles, le réacteur.

Le détail des méthodes numériques employées pour la résolution des équations du modèle, sont ensuite présentées dans le Chapitre 3.

Le Chapitre 4 est consacré à la description fine des processus d'agglomération et de flottation.

Enfin, les principaux résultats sont présentés dans le Chapitre 5.

La dernière partie du manuscrit est, quant à elle, consacrée aux conclusions et perspectives de l'étude.

INTRODUCTION GENERALE

Tableau 3. Propriétés des principales inclusions rencontrées dans l'aluminium

Inclusions	Formule chimique	Dimension (µm)	Densité (g/cm ³)	T _{fusion} (°C)	Origine
Peaux d'oxydes	γ-Al ₂ O ₃	Longueurs : <250 ; 250-500 ; >500 Epaisseur : < 1 ; 1-3 ; > 3	3,9	2047	Oxydation du métal en surface. Les peaux d'oxydes sont principalement générées lors de la coulée ou des opérations de refusion.
Petits Carbures	Al ₄ C ₃	0,5-3	2,36	2100	Réduction de l'alumine lors des opérations d'électrolyse et de recyclage.
Gros Carbures		3-25	2,36		Détérioration des électrodes ou des rotors en graphite. De part leur très forte dureté ces inclusions sont particulièrement préjudiciables.
Magnésite	MgO	0,1-5 et 10-5000	3,58	2115	Oxydation du magnésium au contact de l'oxygène.
Cuboïdes	MgAl ₂ O ₄				Formation naturelle dans les alliages de Mg sous certaines conditions de température.
Spinnelle	MgAl ₂ O ₄	0,1-100 et 10-5000	3,6	2825	Idem. Inclusions particulièrement préjudiciables de part leur très forte dureté.
Refractaires	Type Spinelles γ-Al ₂ O ₃ , CaO, SiO ₂ C (graphite)	/ 10-5000 0,5-30 ; < 5	/ 3,9 ; 2,66 ; 3,37	/ 2047, 1650, 2630	Réactivité du réfractaire avec les alliages au magnésium. Dégradation des réfractaires. Débris de réfractaires pouvant former des carbures.

INTRODUCTION GENERALE

Traitements du métal	Chlorures Potentiels	Sels de flux	MgCl ₂ , NaCl, CaCl ₂ , ...	0,1-5	1,98-2,17	712-800	Inclusions sphériques se dissociant facilement en présence d'humidité (polissage à sec pour les mettre en évidence). Proviennent directement du flux.
Inclusions peu communes	Aiguilles d'alumine		Al ₂ O ₃	/	3,4	2047	Recyclage.
	Nitrures		AlN	10-50	3,26	2257	Réaction entre l'aluminium et l'azote de l'air ou du gaz d'inertage.
	Oxydes		FeO / MnO	/	/	/	Additifs pour la nuance de l'alliage.
	Silicium		Si	/	2,33	1960	Ajout de silice à l'alliage.
	Fluorures		Na ₃ AlF ₆ , ...	0,1-5	2,9-3	1000	Résidus de cryolite provenant de l'électrolyse.
	Borures d'Al		AlB ₂ , AlB ₁₂	/	/	/	Traitement au bore.
	Carbures de bore		Al ₄ C ₄ B	/	/	/	Excès de borures réagissant avec les carbures.
	Alumine γ dispersée		γ -Al ₂ O ₃	/	3,9	2047	Se forme naturellement dans l'aluminium pur.
	« Bone ash »		Ca ₃ (PO ₄) ₂	/	/	/	
	Borures		(Ti, V)B ₂	1-30 ; 1-20	4,5 ; 5,1	/	Formation quand du bore est ajouté au bain pour accroître sa conductivité en précipitant du vanadium et du titane.
Additifs	Phosphores d'Aluminium		AlP	/	/	/	Addition de phosphore au bain.
	Affinant		TiB ₂ / TiC	1-30	4,5	/	Ajout d'affinant pour réduire la taille de grain.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

2 MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, la maîtrise du procédé de flottation en cuve agitée, et son optimisation, nécessitent la bonne compréhension de tous les processus physiques intervenant au cours de celui-ci. Une fois ces processus identifiés, la modélisation mathématique, associée à la simulation numérique, constitue un outil prédictif puissant, permettant d'établir les conditions optimales de fonctionnement du procédé. Ce chapitre est consacré à la présentation de la démarche que nous avons retenue pour le développement d'un tel outil de simulation.

2.1 Identification des paramètres clefs et des processus physiques fondamentaux

2.1.1 Système d'étude

Nous nous proposons de modéliser une cuve de flottation de type Alpur. En configuration industrielle, ce type de cuve parallélépipédique accueille plusieurs tonnes de métal liquide. Deux rotors en graphite, préalablement chauffés, sont introduits dans le métal et permettent l'agitation du bain et l'injection de gaz par le biais d'orifices se situant en bout de pales. Cette cuve étant très volumineuse et peu encline à servir d'outil expérimental, une cuve pilote de taille réduite à été construite au Centre de Recherches de

Voreppe. Cette cuve, de géométrie ogivale accueille 70 kg de métal en fusion. Comme pour la cuve industrielle, le gaz est dispensé au sein de la cuve par le biais du rotor, qui est une réplique, à petite échelle, des rotors Alpur 1 industriels.

C'est cette cuve pilote qui constituera notre base de travail. Par la suite cette dernière sera qualifiée de « cuve 80 », terminologie employée à la fonderie du CRV.

Soulignons que la cuve industrielle fonctionne en système ouvert en régime permanent, à la différence de la cuve 80, qui est un réacteur fermé opérant en régime permanent pour l'hydrodynamique, et en régime transitoire pour la physicochimie du bain et l'évolution de la population inclusionnaire.

2.1.2 Paramètres opératoires

Que ce soit sur la cuve industrielle ou la cuve pilote, il n'existe qu'un nombre limité de paramètres opératoires : température, position du rotor dans la cuve, vitesse de rotation du rotor, débit de gaz et composition de ce dernier.

La température du métal n'est a priori pas un paramètre jouant un rôle majeur sur l'efficacité du procédé de flottation. Ce dernier peut avoir une légère influence sur la vitesse de décantation des inclusions (variation de la masse volumique avec la température), sur la tension de surface du liquide et sur un certain nombre de réactions chimiques se produisant en présence de gaz réactif dans les bulles. Ces dernières seront explicitées dans le paragraphe consacré au rôle du chlore dans la flottation.

D'un point de vue pratique, pour cette étude, la température du bain sera supposée constante et égale à 1000 K.

La position du rotor dans la cuve a un rôle important au niveau de l'hydrodynamique du métal liquide et du temps de séjour des bulles dans la cuve. Waz a montré dans [11] qu'en position haute, l'écoulement est essentiellement radial avec une légère composante axiale vers le haut. En position basse, on observe au contraire une forte composante axiale vers le bas, comme on peut le voir sur la Figure 14, où sont reportées des mesures de vitesses, réalisées par vélocimétrie laser à effet Doppler. Dans cette dernière configuration, la forte interaction avec le fond de la cuve conduit à des conditions de turbulence plus fortes qu'en position haute.

Dans le cadre de notre étude nous nous intéressons au rotor en position basse.

La vitesse de rotation du rotor est un paramètre opératoire très important. C'est en grande partie ce dernier qui contrôle l'hydrodynamique et les conditions de turbulence de la cuve. La vitesse de rotation constitue donc une variable de notre système.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

Les bulles échangent de la quantité de mouvement avec le métal liquide, si bien que l'injection des bulles modifie l'écoulement de ce dernier ; le **débit de gaz** d'injection est donc aussi un paramètre de première importance. La répartition et la taille des bulles dans la cuve sont par ailleurs liées à la vitesse de rotation du rotor et au débit de gaz.

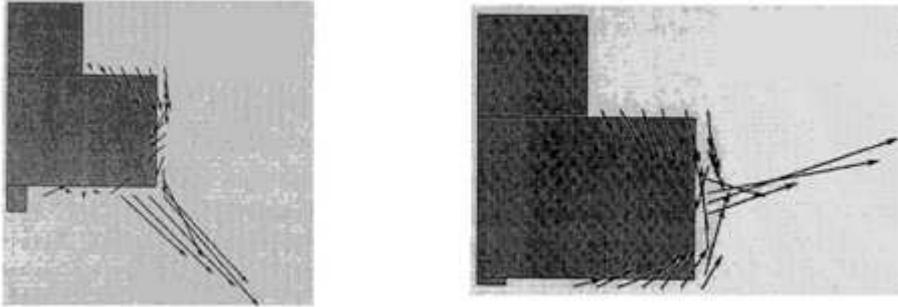


Figure 14. Profil de vitesse autour du rotor Alpur, en position basse (à gauche) et en position haute (à droite), d'après Waz [11].

Processus physiques fondamentaux

Notre système d'étude est composé de métal liquide, de bulles et d'inclusions : il s'agit donc d'un système polyphasique mettant en jeu une phase continue et deux phases dispersées.

L'étude de cet écoulement polyphasique fait intervenir des interactions de nature diverses entre les phases.

Il est possible d'envisager des interactions (Figure 15) :

- phase continue / dispersée :
 - métal liquide / bulles et
 - métal liquide / inclusions,
- phase dispersée / dispersée :
 - bulles / bulles,
 - bulles / inclusions et
 - inclusions / inclusions.

L'échange de quantité de mouvement entre les phases continue et dispersées participe au mouvement du métal liquide et détermine le mouvement des inclusions et des bulles.

Les autres types d'interactions envisagés ne concernent que les phases dispersées et sont relatifs à des processus collisionnels. La collision de deux bulles peut donner lieu à un phénomène de coalescence, tout comme la collision de deux inclusions peut donner lieu à un phénomène d'agglomération. La

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

collision entre une inclusion et une bulle peut conduire à l'attachement de l'inclusion à la bulle – ce qui constitue la base du processus de flottation.

Nous allons maintenant proposer une représentation de ces différents processus afin d'élaborer le modèle le plus complet possible.

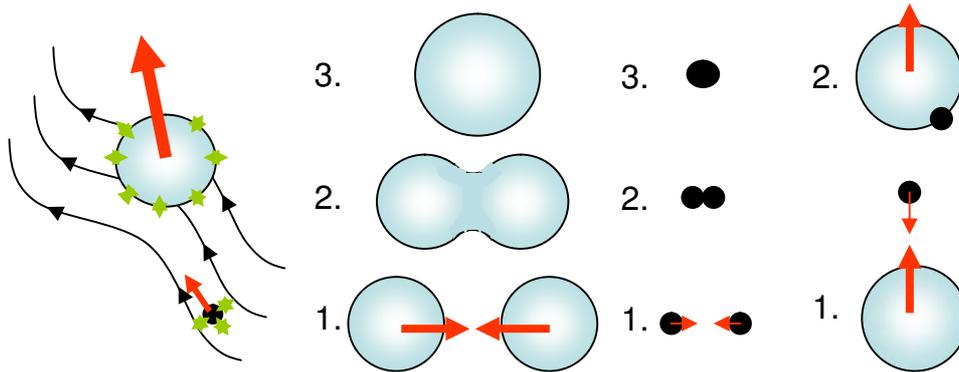


Figure 15. Représentation schématique des différents processus élémentaires. De gauche à droite : échange de quantité de mouvement entre phase continue et phases dispersées, coalescence de bulles, agglomération et flottation.

2.2 Modélisation du réacteur

Nous nous proposons de dégager les principales démarches envisageables pour la modélisation du procédé de flottation en cuve agitée.

Comme nous venons de le voir, le mélange dans la cuve est un système polyphasé, constitué d'une phase continue en écoulement et de deux phases dispersées, que sont les bulles et les inclusions. Ces deux phases dispersées ont des caractéristiques très différentes, tant au niveau de la taille des particules que leur densité. Elles n'ont, à l'évidence, pas le même comportement au sein de l'écoulement de la phase continue et ne perturbent pas cette dernière dans les mêmes proportions.

2.2.1 Critère d'influence des phases dispersées sur l'écoulement du métal liquide

Dans beaucoup de simulation d'écoulements diphasiques, mettant en présence une phase continue et une phase dispersée, l'échange de quantité de mouvement entre les deux phases est considéré significatif pour la phase discrète, mais peut être supposé négligeable pour la phase continue. Un tel type d'approche est qualifié de couplage faible, ou *one way*, entre le fluide et la phase dispersée. L'écoulement de la phase continue est donc en tout point similaire à celui d'un écoulement monophasique. Une telle approche conduit successivement à la résolution de l'équation du mouvement pour la phase continue puis à celle pour la phase dispersée, ce qui permet une réduction significative du temps de calcul. Cette méthodologie est à opposer au couplage fort, ou *two ways*, plus gourmand en temps de calcul, dans lequel la phase dispersée perturbe l'écoulement de la phase continue (Figure 16).

Nous considérons dans cette étude, non pas un système diphasé, mais un système triphasé, ce qui rend le problème encore plus complexe. Il est donc primordial, avant de se lancer dans le calcul hydrodynamique du réacteur, d'établir clairement l'influence de chacune des phases en présence.

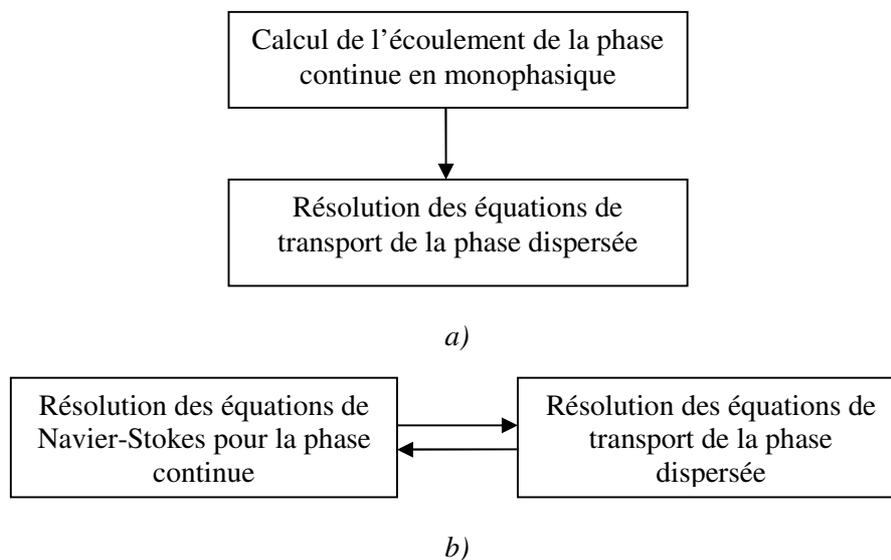


Figure 16. Représentation schématique a) du couplage faible et b) du couplage fort entre phase continue et phase dispersée.

Selon que l'écoulement est laminaire ou turbulent, le critère d'échange de quantité de mouvement, dans le sens phase dispersée – phase continue, n'est pas le même.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

Dans le cas d'un écoulement laminaire, la principale source de non-équilibre entre les phases (se traduisant par l'existence d'une vitesse relative) résulte des effets de gravité.

Dans le cas d'un réacteur agité, l'écoulement est turbulent, et le non-équilibre entre la phase continue et les phases dispersées résulte de variations rapides en temps ou en espace, des propriétés de l'écoulement de la phase continue.

La fraction massique de la phase dispersée α_m influence naturellement l'échange de quantité de mouvement entre la phase dispersée et le fluide.

$$\alpha_m = \alpha \frac{\rho_p}{\rho_f} \quad \text{éq. 2}$$

où α est la fraction volumique de la phase dispersée.

En règle générale, pour un écoulement turbulent, il est possible de considérer que la présence de la phase dispersée ne perturbe pas l'écoulement de la phase continue si [12] :

$$\alpha_m \ll 1$$

pour des particules plus denses, ou de densité équivalente à celle du fluide.

Pour des particules plus légères que le fluide, comme c'est le cas pour les bulles, la force de masse ajoutée des particules n'est plus négligeable et on doit raisonner directement sur la fraction volumique α . La condition de « non perturbation » de la phase continue est alors :

$$\alpha \ll 1$$

Dans le contexte industriel, on enregistre typiquement, pour des conditions opératoires classiques, une rétention gazeuse (fraction volumique de gaz) de l'ordre de quelques pourcents.

En ce qui concerne les inclusions, si on considère une concentration numérale⁴ moyenne de 20 k/kg, en inclusions d'alumine de diamètre équivalent moyen de l'ordre de 20 microns, on obtient une fraction massique de l'ordre de 10^{-7} . Ces résultats sont récapitulés dans le Tableau 4.

Cette étude préliminaire permet de conclure qu'un couplage fort doit être établi entre le calcul de l'écoulement du métal liquide et celui des bulles, tandis qu'un couplage faible est applicable entre les inclusions et le métal liquide.

⁴ Dans le milieu de la fonderie d'aluminium, on caractérise la teneur en inclusions du métal par le nombre d'inclusions par kg de métal. Cette quantité se mesure en milliers d'inclusions par kg de métal (k/kg).

Tableau 4. Critères d'influence des phases dispersées sur l'écoulement de la phase continue, dans le cas de notre étude.

Particules	Diamètre moyen	Fraction
Bulles	1 cm	Volumique α : qqs %
Inclusions (Al_2O_3)	20 μm	Massique α_m : # 10^{-7}

Le détail du protocole de calcul, avec un couplage fort, de l'écoulement diphasique métal liquide - bulles sera détaillé dans le Chapitre 3.

2.2.2 Modélisation du comportement inclusionnaire

Ce paragraphe présente plusieurs approches pour modéliser, suivant un couplage faible, le comportement d'une population d'inclusions (transport au sein de l'écoulement de la phase continue, phénomènes d'agglomération, de rupture et de flottation).

2.2.2.1 Approche Lagrangienne

L'approche la plus naturelle pour traiter l'évolution de la population d'inclusions au sein du métal liquide consiste à suivre ces dernières de façon individuelle au sein de l'écoulement de la phase continue. Une telle démarche est qualifiée d'approche Lagrangienne.

Pour chaque inclusion, il est alors nécessaire de résoudre les équations du mouvement (équations de Newton) en tout point du système.

Une démarche de ce type a par exemple été employée par Ho & Sommerfeld [13] pour modéliser l'agglomération de particules microscopiques au sein d'un écoulement turbulent. Dans leur étude, l'écoulement considéré est un champ de turbulence isotrope et homogène sans terme convectif moyen. Les vitesses fluctuantes du fluide le long des trajectoires des particules sont déterminées au fur et à mesure par la méthode de Langevin (couplage faible). Les processus collisionnels sont traités par une méthode stochastique de Monte Carlo (Simulation Directe de Monte Carlo - SDMC).

On peut noter ici l'analogie avec la méthode SDMC développée en théorie cinétique des gaz pour simuler l'équation de Boltzmann, où les variables indépendantes (constituant l'espace des phases) sont la position et le vecteur vitesse, ce qui signifie que les particules sont supposées toutes identiques.

Une telle démarche étant extrêmement coûteuse en temps de calcul, il n'est pas raisonnable de l'appliquer à un réacteur contenant plusieurs centaines de milliers d'inclusions.

Pour palier cette difficulté, on ne traite souvent qu'un nombre restreint de particules fictives (ou particules « numériques »), qui sont chacune représentatives d'un ensemble d'inclusions réelles.

Récemment, ce type de démarche a été complété par un couplage avec un bilan de population, réalisé au sein de chaque cellule de fluide [14, 15]. Le transport des particules est ainsi simulé directement suivant une méthode lagrangienne, tandis que les interactions entre les particules sont prédites par cette technique, qui permet une représentation discrète de la distribution de la population d'inclusions et limite fortement le nombre de données à stocker au sein de chaque cellule de fluide. Un gain de temps de calcul important est ainsi obtenu.

Cette méthode a par ailleurs récemment évolué pour devenir une méthode dédiée à la résolution de l'équation de bilan de population. Connue sous le nom de *Mass Flow Algorithm* (MFA) [16], cette nouvelle technique se distingue de la précédente par le fait que, dans la SDMC classique, une particule fictive est représentative d'une certaine concentration numérale en inclusions réelles, alors que pour le MFA, une particule fictive est représentative d'une concentration massique d'inclusions réelles.

Les lecteurs désireux d'approfondir ce sujet pourront se référer notamment aux travaux de Goodson & Kraft [17].

Ces méthodes sont réputées puissantes et précises, mais leur mise en œuvre difficile et leur besoin excessif en temps de calcul constituent souvent des arguments jouant en leur défaveur.

Nous venons de citer la technique des Bilans de Population, dédiée au suivi de l'évolution d'une population de particules soumise à différents processus physiques (agglomération, rupture, croissance, ...). Avant d'aller plus loin, il est nécessaire de clarifier les fondements de cette méthode, qui est centrale dans notre modélisation.

2.2.2.2 Méthode des Bilans de Populations

Présentation

Dans son ouvrage consacré aux bilans de populations, Doraiswami Ramkrishna [18] présente cette méthode comme étant dédiée à la caractérisation du

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

comportement d'une population de particules, à partir de l'étude comportementale de particules prises individuellement dans leur environnement local. Cette méthode répond au besoin de mettre en place des modélisations multi-échelles, qui rendent compte à l'échelle macroscopique (réacteur industriel) des processus ayant lieu à l'échelle élémentaire (interactions entre particules).

Dans cette approche, la population est caractérisée par la densité d'une variable extensive appropriée, généralement le nombre de particules.

Les particules, ici les inclusions, sont quant à elles caractérisées à la fois par leurs propriétés intrinsèques, telles que leur dimension et leur masse, et par leur localisation dans l'espace physique (le réacteur). D'un point de vue formel, on parle d'espace des coordonnées internes (dimension, masse, ...) et d'espace des coordonnées externes (localisation); l'union de ces deux espaces formant *l'espace d'état des particules*.

De façon synthétique, l'équation de bilan de population rend compte des différents processus par lesquels des particules d'un état donné peuvent apparaître ou disparaître du système. Le changement d'état d'une particule peut se faire de façon continue, avec conservation du nombre total de particules, comme c'est le cas pour les phénomènes de croissance par exemple. Certains processus peuvent également entraîner une variation du nombre totale de particules, comme c'est le cas pour les phénomènes d'agglomération ou de fragmentation. Il y a alors création de nouvelles particules ou disparition de particules existantes et on parle respectivement de processus de naissance et de mort.

Une hypothèse importante du bilan de population réside dans le fait qu'il n'existe aucune interaction *directe* (par exemple de type électrostatique) entre les particules. Ainsi, la vitesse d'évolution de l'état d'une particule ne peut être fonction que de l'état de cette même particule et de l'état de la phase continue dans laquelle elle se trouve. Ceci n'exclut pas pour autant les interactions *indirectes* entre particules, liées au comportement de ces dernières au sein de la phase continue (collisions induites par la turbulence par exemple).

Vecteurs d'état

Le vecteur d'état d'une particule est l'objet mathématique permettant de caractériser cette dernière dans l'espace d'état des particules : il est donc naturellement composé des coordonnées externes $\mathbf{r} \equiv (r_1, r_2, r_3)$ et internes $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_m)$ de la particule, où (x_1, x_2, \dots, x_m) représentent les m propriétés d'intérêt associées à la particule (volume, masse, âge, composition, ...). \mathbf{r} et \mathbf{x} appartiennent respectivement à l'espace des coordonnées externes Ω_r et à l'espace des coordonnées internes Ω_x , encore appelé espace des propriétés.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

On définit de même un vecteur d'état pour la phase continue, qui affecte le comportement de la phase dispersée. Ce vecteur, noté $Y(\mathbf{r},t) \equiv [Y_1(\mathbf{r},t), Y_2(\mathbf{r},t), \dots, Y_p(\mathbf{r},t)]$ (vitesse, température, ...), n'est fonction que des coordonnées externes \mathbf{r} et du temps t . L'évolution de ce champ de vecteurs est soumise aux lois des phénomènes de transport et aux interactions avec la phase dispersée.

Densité numérale de particules

Comme nous l'avons abordé en introduction, la population de particules est caractérisée par la densité d'une variable extensive appropriée, qui sera ici le nombre de particules. Notre variable d'intérêt sera donc la densité numérale de particules $n(\mathbf{x},\mathbf{r},t)$, qui représente le nombre moyen, à l'instant t , de particules en un lieu \mathbf{x} de l'espace des propriétés et \mathbf{r} de l'espace physique.

Avec une telle définition, le nombre moyen d'inclusions d'état (\mathbf{x},\mathbf{r}) contenu dans le volume élémentaire $dV_x dV_r$ de l'espace d'état est donné par l'expression :

$$n(\mathbf{x},\mathbf{r},t)dV_x dV_r$$

Cette dernière expression peut être intégrée sur l'ensemble de l'espace d'état pour calculer le nombre moyen total de particules dans le système, défini comme il suit :

$$\int_{\Omega_x} \int_{\Omega_r} n(\mathbf{x},\mathbf{r},t)dV_x dV_r$$

On peut de même déterminer le nombre moyen total de particules par unité de volume de l'espace physique (m^{-3}), noté $N(\mathbf{r},t)$, de la façon suivante :

$$N(\mathbf{r},t) = \int_{\Omega_x} n(\mathbf{x},\mathbf{r},t)dV_x \quad \text{éq. 3}$$

Il est également possible de calculer, de la même façon, le nombre moyen de particules appartenant à un sous ensemble A_x de l'espace des propriétés Ω_x . Il suffit pour cela de procéder à la même intégration que précédemment sur ce sous ensemble A_x .

Vitesse d'évolution du vecteur d'état d'une particule

L'état d'une particule est susceptible d'évoluer au cours du temps. Ce changement d'état peut provenir d'une évolution des coordonnées externes et/ou internes de la particule. Une évolution des coordonnées externes traduit un déplacement de la particule dans l'espace physique, tandis qu'une évolution des

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

coordonnées internes traduit un déplacement dans l'espace des propriétés – comme par exemple un changement de volume par croissance.

Pour caractériser au mieux ces évolutions, on définit alors les vitesses d'évolution des coordonnées internes et externes, notées respectivement $\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ et $\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$.

A partir de ces vitesses d'évolution, il est possible de définir le flux numéral de particules à travers l'espace physique ainsi que le flux numéral de particules à travers l'espace des propriétés. Ces flux, qui représentent le nombre de particules traversant une surface unitaire, normale au vecteur vitesse considéré, par unité de temps, sont définis de la façon suivante :

- $n(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ représente le flux de particules dans l'espace physique
- $n(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ représente le flux de particules dans l'espace des propriétés

Ces flux sont évalués à l'instant t et au lieu (\mathbf{x}, \mathbf{r}) de l'espace d'état des particules.

Equation de transport de Reynolds

Dans l'espace physique à trois dimensions, le théorème de transport de Reynolds permet d'obtenir facilement les équations de conservation de la mécanique des milieux continus. L'application de ce théorème au continuum formé par l'espace d'état des particules, permet d'obtenir l'équation générale du bilan de population.

Si on considère une région arbitraire $\Lambda(t)$ de ce continuum de l'espace d'état des particules à l'instant t , elle est composée à la fois d'une partie $A_x(t)$ de l'espace des propriétés Ω_x et d'une partie $A_r(t)$ de l'espace physique Ω_r .

L'application du théorème de transport de Reynolds à cet espace de dimension $m+3$ conduit à l'équation générale suivante [18] :

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Lambda(t)} n(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) dV_x dV_r = \int_{\Lambda(t)} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}_v(\dot{\mathbf{X}}n) + \text{div}_{xyz}(\dot{\mathbf{R}}n) \right) dV_x dV_r \quad \text{éq. 4}$$

Equation de bilan de population

Notons maintenant $H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ la vitesse nette de production des particules d'état (\mathbf{x}, \mathbf{r}) par unité de volume de l'espace d'état. La conservation du nombre de particules se traduit alors par le bilan suivant :

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Lambda(t)} n(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) dV_x dV_r = \int_{\Lambda(t)} H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) dV_x dV_r \quad \text{éq. 5}$$

Remplaçons maintenant le membre de gauche de cette équation par le membre de droite de l'équation de transport de Reynolds obtenue au paragraphe précédent :

$$\int_{\Lambda(t)} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}_x(\dot{\mathbf{X}}n) + \text{div}_r(\dot{\mathbf{R}}n) \right) dV_x dV_r = \int_{\Lambda(t)} H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) dV_x dV_r \quad \text{éq. 6}$$

Soit :

$$\int_{\Lambda(t)} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}_x(\dot{\mathbf{X}}n) + \text{div}_r(\dot{\mathbf{R}}n) - H \right) dV_x dV_r = 0 \quad \text{éq. 7}$$

Le volume d'intégration utilisé dans l'équation précédente étant arbitraire, il est possible de la simplifier de la façon suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}_x(\dot{\mathbf{X}}n) + \text{div}_r(\dot{\mathbf{R}}n) = H \quad \text{éq. 8}$$

Cette équation n'est autre que la forme générale de l'équation de bilan de population. On constate une parfaite similitude avec les équations classiques de conservation de la mécanique des milieux continus, à l'exception près du terme additionnel de divergence, portant sur l'espace des propriétés.

Le terme de production nette de particules dans l'état (\mathbf{x}, \mathbf{r}) , $H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$, est fréquemment décomposé en un terme de naissance (B pour *Birth*) et en un terme de mort (D pour *Death*) :

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) = B(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) - D(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) \quad \text{éq. 9}$$

L'équation de bilan de population, dans sa forme la plus courante, s'écrit donc ainsi :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}_x(\dot{\mathbf{X}}n) + \text{div}_r(\dot{\mathbf{R}}n) = B - D \quad \text{éq. 10}$$

L'équation de bilan de population, présentée sous cette forme, a été proposée pour la première fois en 1971, par Randolph et Larson [19].

Le membre de gauche est composé d'un terme d'évolution temporelle, d'un terme de transport dans l'espace des propriétés internes, qui est le plus souvent

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

un terme caractérisant une évolution morphologique (phénomène de croissance par exemple), et un terme de transport convectif dans l'espace physique. Les termes de naissance et de mort du membre de droite font l'objet du paragraphe suivant.

Termes de naissance et de mort

➤ Identification

La caractérisation des termes de naissance et de mort, introduits précédemment, nécessite une identification claire des processus physiques fondamentaux à prendre en compte.

Dans le cadre de notre étude, la phase dispersée que nous considérons, constituée par les inclusions, est soumise d'une part à des phénomènes de flottation et d'autre part à des phénomènes d'agglomération et de fragmentation (Figure 17).

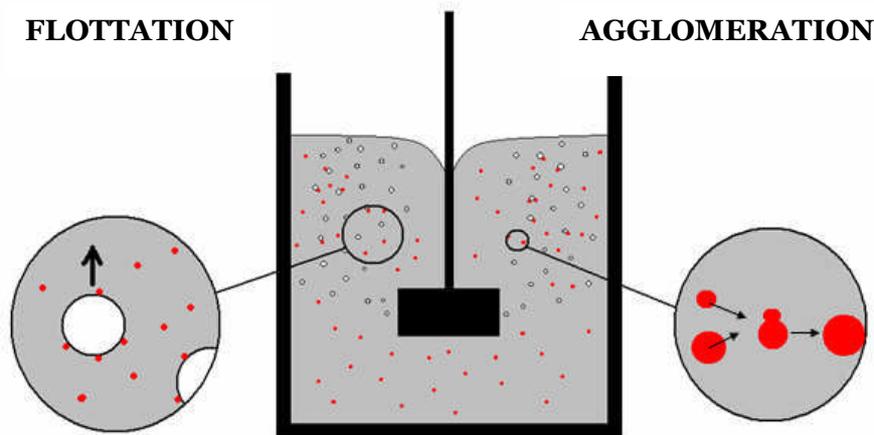


Figure 17. Représentation schématique des processus physiques pris en compte.

Les phénomènes de flottation s'intègrent naturellement dans l'équation de bilan de population, sous la forme d'un terme de mort. Lorsqu'une inclusion est captée par une bulle, celle-ci est tout simplement éliminée du système. La difficulté réside dans l'identification des processus aboutissant à l'attachement de l'inclusion à la bulle et à leur formulation mathématique. Cette étape sera détaillée au chapitre 3.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

La prise en compte des phénomènes d'agglomération et de fragmentation est en revanche plus délicate, puisqu'elle fait intervenir plusieurs inclusions : au moins deux inclusions mères et une inclusion fille dans le cas de l'agglomération, et une inclusion mère et au moins deux inclusions filles dans le cas d'une fragmentation.

Dans le cadre de notre étude on supposera que les agglomérats formés sont stables et que les phénomènes de fragmentation sont marginaux – ils ne sont donc pas pris en compte dans notre modèle. Les justifications de ces hypothèses sont détaillées au chapitre 4.

➤ Prise en considération des processus d'agglomération

Le bilan de population ayant pour objet l'étude de l'évolution de la population d'inclusions dans le temps, c'est à travers la fréquence de leur occurrence que nous allons caractériser les phénomènes d'agglomération.

La concentration en inclusions du métal étant peu élevée, la probabilité d'observer des collisions multiples est très faible.

Par analogie à la théorie cinétique des gaz, il est en effet possible de calculer l'espacement inter-particules l :

$$l = N^{-1/3} \quad \text{éq. 11}$$

Pour une concentration de 20 k/kg, cette valeur est de l'ordre de 3 mm, ce qui est très largement supérieur à la dimension des inclusions rencontrées dans l'aluminium liquide.

Selon [20], il est donc possible de considérer la probabilité de collisions multiples comme étant négligeable. Nous ne considérons donc, dans notre modèle, que les agglomérations résultant de collisions binaires.

Notons $\beta(\mathbf{x}, \mathbf{r}; \mathbf{x}', \mathbf{r}'; \mathbf{Y})$ la fraction de paires d'inclusions d'état (\mathbf{x}, \mathbf{r}) et $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$ s'agglomérant par unité de temps, encore appelée fréquence d'agglomération. La probabilité d'agglomération de deux inclusions dans les états (\mathbf{x}, \mathbf{r}) et $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$ s'écrit alors indifféremment :

$$\beta(\mathbf{x}, \mathbf{r}; \mathbf{x}', \mathbf{r}'; \mathbf{Y}) dt \quad \text{ou} \quad \beta(\mathbf{x}', \mathbf{r}'; \mathbf{x}, \mathbf{r}; \mathbf{Y}) dt$$

L'agglomération de deux inclusions d'états respectifs (\mathbf{x}, \mathbf{r}) et $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$ engendre la formation d'une nouvelle inclusion qu'il est nécessaire d'identifier. Notons ainsi x_1 et r_1 les coordonnées internes et externes de cette nouvelle inclusion. Notons également x_2 et r_2 les coordonnées internes et externes d'une inclusion qui, par agglomération avec une inclusion d'état $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$, engendre la formation d'une inclusion d'état (\mathbf{x}, \mathbf{r}) .

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

Pour plus de clarté, les différents processus que nous venons d'évoquer sont représentés de façon symbolique sur le schéma ci-dessous :

$$(x, r) + (x', r') \Rightarrow (x_1, r_1)$$

$$(x_2, r_2) + (x', r') \Rightarrow (x, r)$$

Pour terminer, notons $n_2(x, r; x', r'; t)$ le nombre de paires distinctes d'inclusions localisées respectivement en (x, r) et (x', r') , par unité de volume d'espace d'état, à l'instant t .

Suivant ces notations, l'expression de la vitesse de production d'inclusions dans l'état (x, r) , par unité de volume d'espace d'état, prend la forme suivante :

$$B(x, r, Y, t) =$$

$$\int_{\Lambda_x \Lambda_r} \frac{1}{\delta} \beta(x_2, r_2; x', r'; Y) n_2(x_2, r_2; x', r'; Y, t) dV_{x'} dV_r, \quad \text{éq. 12}$$

Dans cette équation, δ représente le nombre de fois où des paires d'inclusions identiques sont comptabilisées lors de l'intégration – le terme $1/\delta$ permet ainsi de corriger les redondances.

L'expression de la vitesse de disparition d'inclusions d'état (x, r) , par unité de volume d'espace d'état, prend quant à elle la forme suivante :

$$D(x, r, Y, t) =$$

$$\int_{\Lambda_x \Lambda_r} \beta(x', r'; x, r; Y) n_2(x', r'; x, r; Y, t) dV_{x'} dV_r, \quad \text{éq. 13}$$

Il subsiste cependant une inconnue dans les équations précédentes : la densité de paires distinctes d'inclusions localisées respectivement en (x, r) et (x', r') , que nous avons noté $n_2(x, r; x', r'; t)$. Afin de pouvoir résoudre l'équation de bilan de populations, Ramkrishna [18] propose d'employer la relation de fermeture suivante :

$$n_2(x', r'; x, r) = n(x', r') \cdot n(x, r) \quad \text{éq. 14}$$

Cette hypothèse revient à supposer que les inclusions d'état (x, r) et (x', r') sont parfaitement indépendantes (aucune corrélation statistique) et cela, quel que soit l'instant t considéré.

- Application à une population d'inclusions, caractérisées par leur volume, homogène dans l'espace physique

Les expressions des termes de naissance et de mort que nous venons d'établir sont d'ordre tout à fait général. Considérons maintenant que les inclusions sont

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

réparties uniformément dans l'espace et que ces dernières sont entièrement caractérisées par leur volume v . Cette propriété est une grandeur additive, indépendante de la forme des inclusions.

On ne considère donc ici qu'une seule coordonnée interne, le volume, et aucune coordonnée externe. On supposera de plus, comme c'est le cas pour notre système, que les inclusions considérées ne sont pas soumises au phénomène de croissance.

Sous ces hypothèses, le noyau d'agglomération β pour un volume V de l'espace physique entre des inclusions de volume respectif v et v' , prend la forme suivante :

$$\beta(v, v') = \frac{1}{V} \int_V \int_V \beta(v, \mathbf{r}; v', \mathbf{r}') dV_{r'} dV_r \quad \text{éq. 15}$$

Avec cette définition, on constate que le noyau d'agglomération a la dimension d'un volume (d'espace physique) par unité de temps, alors que dans le cas général présenté précédemment, elle était homogène à l'inverse d'un temps.

La naissance d'une inclusion de volume v peut être schématisée de la façon suivante :

$$(v') + (v - v') \Rightarrow (v)$$

De même on peut schématiser la mort d'une inclusion de volume v de la façon suivante :

$$(v) + (v') \Rightarrow (v'')$$

A partir de ces remarques, il est alors possible d'établir les expressions des termes de naissance et de mort, qui prennent la forme suivante :

$$B(v, t) = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv' \quad \text{éq. 16}$$

Le coefficient $\frac{1}{2}$ permet de ne pas compter deux fois l'appariement des inclusions de volume v' et $(v - v')$.

$$D(v, t) = \int_0^\infty \beta(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' \quad \text{éq. 17}$$

Pour un système homogène soumis uniquement à des phénomènes d'agglomération, l'équation de bilan de population a ainsi pour expression :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv \\ & - \int_0^\infty \beta(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' \end{aligned} \quad \text{éq. 18}$$

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

Cette équation, établie pour la première fois en 1917, par Smoluchowski dans son étude de l'évolution temporelle d'une population de particules soumise à des processus de coagulation, est connue dans la littérature sous le nom d'équation de Smoluchovski⁵.



*Marian Ritter von Smolan
Smoluchowski*

➤ Prise en considération de la flottation

La prise en considération de la flottation dans l'EBP est plus directe que pour les processus d'agglomération, dans le sens où la flottation ne fait intervenir qu'une inclusion à la fois. Considérant un nombre de bulles N_b par unité de volume de fluide, et notant $Z[n(v, t), v, t, N_b]$ la fréquence de flottation par unité de volume de fluide, la vitesse de disparition des inclusions, prenant en considération agglomération et flottation, s'écrit de la façon suivante :

$$D(v, t) = \int_0^{\infty} \beta(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' + Z[n(v, t), N_b] \quad \text{éq. 19}$$

Pour un système homogène, soumis à des phénomènes d'agglomération et de flottation, l'équation de bilan de population prend ainsi la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv \\ & - \int_0^{\infty} \beta(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' \\ & - Z[n(v, t), N_b] \end{aligned} \quad \text{éq. 20}$$

⁵ Elève de Boltzmann et de Stefan, Smoluchovski fut un pionnier dans le domaine de la physique statistique. Il travailla notamment sur la théorie cinétique et sur les phénomènes de coagulation.

Pour un système (inhomogène) dans lequel on prend en considération le transport convectif des inclusions, l'équation locale de bilan de population devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \text{div}_{r\theta} (n(v,t)\mathbf{u}_p) = & \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-v',v') n(v-v',t) n(v',t) dv \\ & - \int_0^\infty \beta(v,v') n(v,t) n(v',t) dv' \\ & - Z[n(v,t), N_b] \end{aligned} \quad \text{éq. 21}$$

où \mathbf{u}_p désigne la vitesse locale des inclusions.

2.2.2.3 Approche de type cuve homogène

De façon caricaturale, l'approche de type cuve homogène, ou réacteur parfaitement agité, est aux antipodes de la simulation directe. Dans cette approche, on occulte en effet complètement le transport des inclusions et on se concentre uniquement sur la résolution de l'équation de bilan de population, appliquée à l'ensemble du réacteur, qui se réduit ici à l'équation 20, présentée au paragraphe précédent.

La résolution de cette équation de bilan de population ne requiert que la connaissance des valeurs moyennes de l'écoulement turbulent diphasique métal liquide / bulles, c'est-à-dire des vitesses des bulles, de la rétention gazeuse, de la vitesse du métal et de l'énergie cinétique turbulente ainsi que son taux de dissipation. Ces valeurs sont utiles pour expliciter les fréquences d'agglomération et de flottation.

Cette approche est utilisée par de très nombreux auteurs, dans le cas de systèmes hétérogènes. Toutes les grandeurs sont ainsi moyennées, comme cela est schématiquement représenté sur la Figure 18.

Cela a par exemple été effectué par l'équipe du *Material Processing Institut* au *WPI* dans leur modélisation de la purification de l'aluminium par flottation [21, 5, 22]. Un calcul préliminaire de l'écoulement diphasique métal liquide / bulles est réalisé à l'aide du code commercial FLUENT, puis les grandeurs caractéristiques sont moyennées sur l'ensemble de la cuve pour pouvoir résoudre l'équation de bilan de population en cuve homogène.

Une approche similaire a été adoptée par Johansen & Taniguchi dans leur étude de l'agglomération de particules dans l'aluminium liquide [23]. L'auteur tente cependant de tenir compte de l'hétérogénéité du système en calculant la

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

moyenne du noyau d'agglomération sur la cuve, et non pas la valeur du noyau d'agglomération obtenue avec les valeurs moyennes des grandeurs caractéristiques de l'écoulement.

D'autres auteurs, comme Duan et al. [24] et Bloom & Heindel [25, 26] procèdent à des mesures expérimentales, plutôt qu'à la simulation numérique, pour obtenir les valeurs moyennes des grandeurs caractéristiques de l'écoulement.

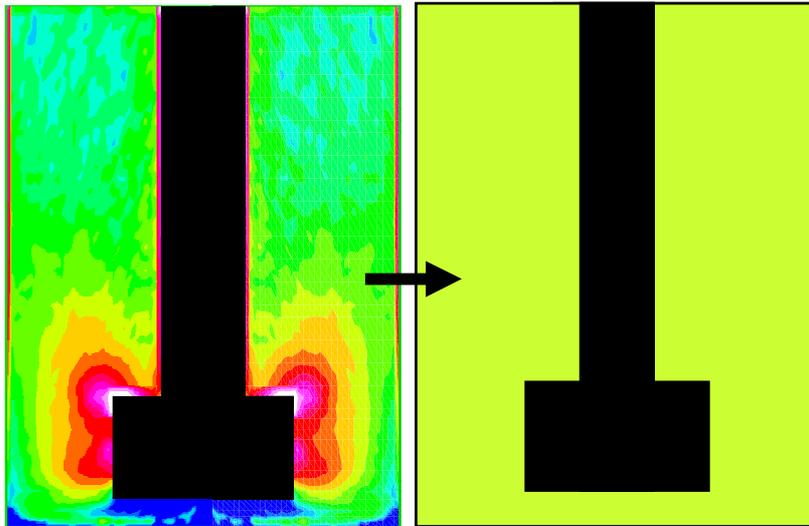


Figure 18. Représentation schématique de l'approche en cuve homogène (à gauche, carte des isovaleurs de la rétention gazeuse, à droite, valeur moyenne imposée sur l'ensemble du bain).

2.2.2.4 Division du système d'étude en zones

Afin d'améliorer l'approche en cuve homogène et de rendre compte des hétérogénéités des conditions d'écoulement (taux de rétention gazeuse, turbulence, ...) qui peuvent être importante dans un réacteur industriel, Wouters & Haut [27] ont développé une méthode par zones pour simuler un procédé de floculation en cuve agitée.

Cette approche consiste à séparer le volume de fluide du réacteur en plusieurs zones au sein desquelles toutes les grandeurs sont supposées homogènes. Dans ce but, une prise de moyenne est appliquée à toutes les grandeurs calculées préalablement par un logiciel de mécanique des fluides. La Figure 19 illustre sur un exemple la séparation en zones et la prise de moyenne.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

L'équation de bilan de population en cuve homogène est résolue dans chaque zone et les échanges de matière de la phase dispersée entre zones sont pris en considération.

Même si le transport des inclusions n'est que partiellement représenté, cette démarche constitue un progrès par rapport au modèle en cuve homogène et apporte les bases de réflexion qui conduisent à l'approche eulérienne finalement retenue.

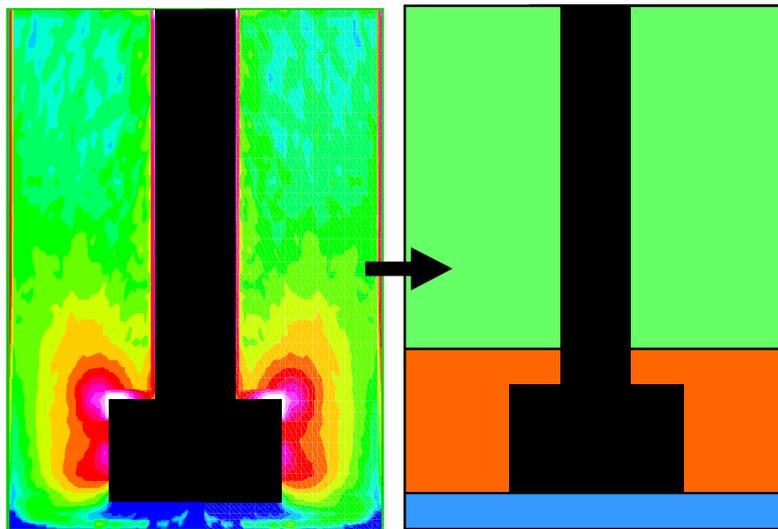


Figure 19. Représentation schématique de la division du système en zones (à gauche, carte des isovaleurs de la rétention gazeuse, à droite, valeurs moyennes imposées dans chaque zone).

2.2.2.5 Approche Eulérienne

Les phases dispersées dans les écoulements multiphasiques peuvent être décrits soit suivant une approche Lagrangienne (et les inclusions sont suivies de façon individuelles), soit suivant une approche eulérienne (et les inclusions sont considérées en tant que phase continue).

Dans le cas d'un couplage faible et si l'on considère que les inclusions suivent parfaitement les lignes de courant du fluide, le transport des inclusions au sein de la phase continue par cette dernière méthode, s'apparente en tout point à du transport solutale, où la phase dispersée est caractérisée par une concentration

d'extensité appropriée (masse, volume, nombre, moments d'une distribution ou toute autre grandeur).

D'un point de vue numérique, les équations convecto-diffusives aux dérivées partielles, obtenues suivant l'approche eulérienne, peuvent être résolues par la méthode des volumes finis⁶, dans laquelle l'espace physique est divisé en cellules, au sein desquelles les grandeurs physiques sont supposées homogènes.

On constate qu'une telle démarche semble tout à fait appropriée à un couplage avec l'équation de bilan de population : la phase dispersée est transportée de cellule en cellule, et au sein de chacune d'elles, on peut appliquer un bilan de population.

2.3 Bilan : démarche adoptée

2.3.1 Récapitulatif

Au terme de cette étude à caractère bibliographique, nous pouvons dégager la méthodologie à adopter pour modéliser la purification de l'aluminium en cuve agitée.

Tout d'abord, vus les critères définis au paragraphe 2.2.1., l'étude du système triphasé métal liquide – bulles – inclusions peut se décomposer en deux parties bien distinctes.

Nous avons montré que la phase gazeuse injectée au sein de l'écoulement de métal liquide sous forme de bulles, dont le diamètre est voisin du centimètre, ne peut pas être traitée indépendamment de la phase continue (métal liquide). De part leur dimension, leur inertie et leur nombre, les bulles échangent une quantité de mouvement importante avec le métal liquide et modifient l'écoulement de ce dernier.

Pour cette raison, il est nécessaire de réaliser **un couplage fort entre le métal liquide et les bulles**, qui est détaillé dans le chapitre suivant.

En ce qui concerne la description du comportement de la phase inclusionnaire, on retiendra que les approches Lagrangiennes couplées aux méthodes stochastiques, de type Monte Carlo, constituent des outils puissants pour traiter les phénomènes de transport et d'agglomération. Ces méthodes sont cependant

⁶ Le principe des schémas aux volumes finis sera développé au Chapitre 3

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

lourdes à mettre en place et gourmandes en temps de calcul, et sont, en définitive, peu appropriées aux applications industrielles.

Notre objectif n'est pas ici de connaître individuellement l'histoire des inclusions, mais de prédire le comportement macroscopique du réacteur. Le modèle à développer doit rendre compte à la fois des hétérogénéités du système, de transport convectif macroscopique des inclusions ainsi que des phénomènes, à l'échelle particulière, d'agglomération et de flottation.

On s'oriente donc vers l'utilisation de **la technique des bilans de population appliquée à un système hétérogène**. Le transport inclusionnaire dans le bain peut être décrit par une approche Eulérienne, où les inclusions ne sont pas considérées comme des entités individuelles, mais comme un continuum de matière.

Le système sera donc divisé en cellules, ou volumes de contrôle, au sein desquels les propriétés physiques sont supposées homogènes. L'équation de transport convectif des inclusions entre ces différentes cellules sera ainsi résolue par un **schéma aux volumes finis**, et au sein de chaque cellule, sera appliqué un Bilan de Population. Une telle approche peut être qualifiée de « **modélisation de type micro-cuves homogènes** ».

Nous considérons ici des inclusions de très petite taille, et dont la densité est peu différente de celle du fluide (au plus un rapport de deux), ce qui induit un constant de temps dynamique (ou temps de relaxation) suffisamment faible, pour qu'en première approximation on puisse considérer que les inclusions suivent macroscopiquement l'écoulement du fluide, et ont localement la même vitesse que le fluide. Cette approximation porte le nom de *locally homogeneous flow* (LHF) [12].

Dans les zones de forte turbulence, où les variations temporelles et spatiales de la vitesse du fluide sont grandes, une telle hypothèse peut certainement prêter à discussion. Mais gardons à l'esprit que l'objet de notre étude n'est pas de réaliser un suivi précis des inclusions, mais simplement de décrire macroscopiquement les mouvements de ces dernières au sein de la cuve. En ce sens, **un modèle de type LHF** répond entièrement à nos attentes.

En revanche, comme on le verra au chapitre 4, ce type d'approche est trop réducteur pour décrire localement, à l'échelle des inclusions et des bulles, les phénomènes d'agglomération et de flottation. Il est donc nécessaire, pour chaque cellule de contrôle, d'étudier de façon précise le comportement des inclusions et des bulles au sein de l'écoulement de métal liquide.

2.3.2 Mise en œuvre

D'un point de vue pratique, l'outil de calcul numérique développé au CRV se présente sous la forme d'une plateforme modulaire dans laquelle doit s'intégrer notre travail.

La plateforme du CRV dispose d'un module qui calcule l'hydrodynamique de l'écoulement diphasique métal liquide – bulles au sein d'une cuve de flottation. Ce module MFN (Mécanique des Fluides Numériques) développé au CRV par Emmanuel Waz, est explicité dans le chapitre 3.

Les fichiers résultats du module MFN sont ensuite utilisés dans le module Agglomération – Flottation développé au LSG2M.

Le principe de la démarche est récapitulé sur le schéma synthétique de la Figure 20.

MODELISATION DU PROCEDE DE FLOTTATION EN CUVE AGITEE

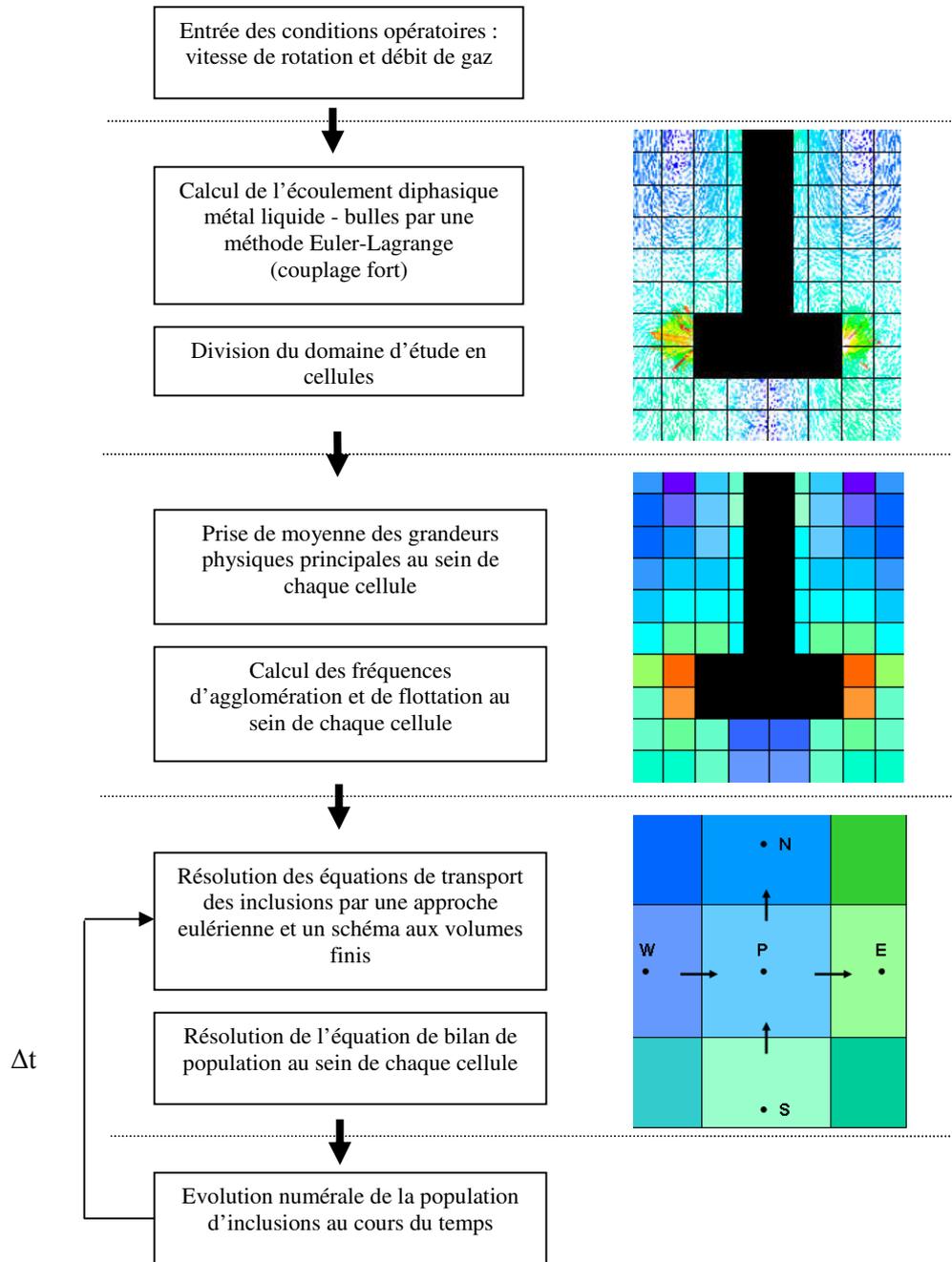


Figure 20. Représentation schématique de la démarche adoptée.

3 METHODES NUMERIQUES

Nous nous proposons ici de détailler les méthodes numériques à appliquer à la modélisation proposée au chapitre précédent.

Comme nous l'avons déjà évoqué, la simulation de l'écoulement diphasique métal liquide – bulles a été développée par Emmanuel Waz lors de son travail de thèse. Dans le cadre du projet CIPAL, ce modèle numérique a été légèrement modifié au CRV, en collaboration avec le LSG2M. Nous présentons les grandes lignes de cette simulation et le lecteur désireux d'approfondir cette partie pourra se référer au manuscrit de thèse d'E. Waz [11].

Nous nous attachons dans un second temps aux méthodes numériques adoptées pour la résolution de l'équation de bilan de population, avant de présenter le couplage de cette dernière avec le transport convectif des inclusions au sein de l'écoulement de métal liquide.

3.1 Hydrodynamique de l'écoulement diphasique métal liquide – bulles

3.1.1 Généralités

Afin de calculer l'hydrodynamique de l'écoulement métal liquide – bulles, une approche de type Euler – Lagrange a été retenue. Dans ce type d'approche, l'équation moyennée de Navier – Stokes (méthode RANS) est résolue pour la phase continue, et la trajectoire des bulles est calculée de façon individuelle par résolution des équations fondamentales de la dynamique, en tenant compte des forces:

- de trainée,
- de gravité,
- de masse ajoutée,

- de portance,
- de Basset.

La turbulence de la phase continue est décrite par le modèle classique à deux équations $k_t - \varepsilon$, prenant en considération le transport de l'énergie cinétique k_t et de son taux de dissipation ε .

Les bulles sont ici considérées comme des sphères rigides de diamètre constant. Ce diamètre est calculé à l'aide de corrélations⁷, faisant intervenir la vitesse de rotation de l'agitateur et le débit de gaz.

Pour chaque couple vitesse de rotation / débit, les bulles ont ainsi un diamètre différent. Aucune interaction entre les bulles n'étant prise en considération, les phénomènes de coalescence sont ignorés, et le diamètre des bulles est considéré comme constant au sein de la cuve.

Les calculs sont menés en 3D, avec le code commercial aux éléments finis FIDAPTM.

3.1.2 Mise en œuvre

L'hydrodynamique de l'écoulement monophasique brassé par l'agitateur est calculée dans un premier temps. Une fois ce calcul préliminaire convergé, le comportement de l'écoulement diphasique liquide / bulles est simulé en régime transitoire jusqu'à l'établissement d'un régime permanent. A cette fin, les trajectoires des bulles introduites dans le bain sont calculées ainsi que l'écoulement de la phase continue et, à chaque pas de temps, les échanges de quantité de mouvement entre les deux phases sont actualisés.

Ces différentes étapes sont récapitulées sur le schéma synthétique de la Figure 21.

⁷ Pour des raisons de confidentialité, ces corrélations ne sont pas explicitées ici.

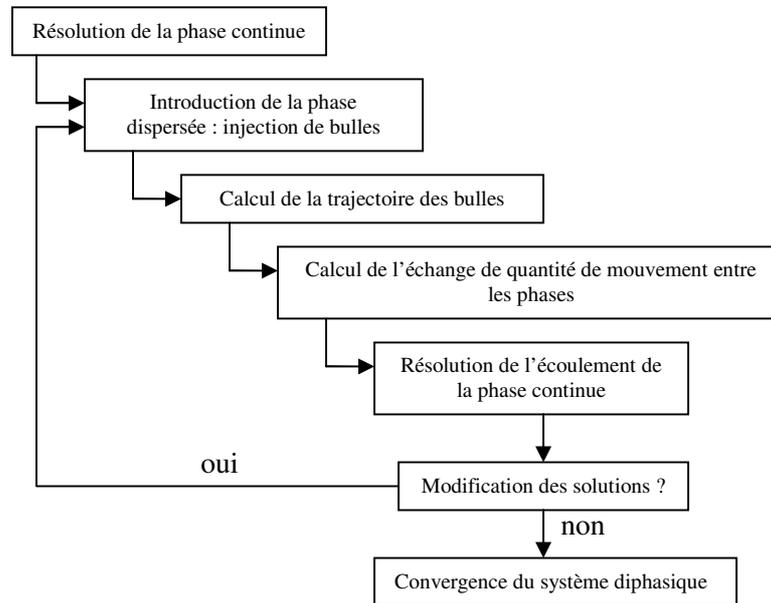


Figure 21. Schéma synthétique de la démarche adoptée pour le calcul de l'écoulement diphasique, d'après Waz [11].

3.1.3 Conditions aux limites

3.1.3.1 Parois de l'agitateur (phase continue)

La géométrie de l'agitateur n'est pas décrite dans le modèle ; une approche de type « boîte noire », dont le contour est extérieur à l'enveloppe de l'agitateur, a en effet été retenue dans le travail de Waz.

L'agitateur n'est donc pas représenté physiquement, mais un certain nombre de grandeurs physiques (composantes de la vitesse moyenne, énergie cinétique turbulente k_t , taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ) caractérisent l'écoulement qu'il induit. L'acquisition de ces grandeurs physiques s'appuie sur une approche expérimentale préliminaire. Dans le cadre de son travail de thèse, Waz a réalisé une maquette à eau de laboratoire sur laquelle il a pu effectuer des mesures de vitesse par vélocimétrie laser à effet Doppler, et des mesures locales de rétention gazeuse à l'aide d'une double sonde à fibre optique⁸. Les mesures de vitesses effectuées sur maquette à eau sont ensuite transposées au cas de l'aluminium.

⁸ Ces dispositifs sont détaillés dans le mémoire de Waz.

Les vitesses et les conditions de turbulence obtenues, au voisinage du rotor, servent alors de conditions aux limites pour la phase continue sur les parois virtuelles de la boîte noire (Figure 22).

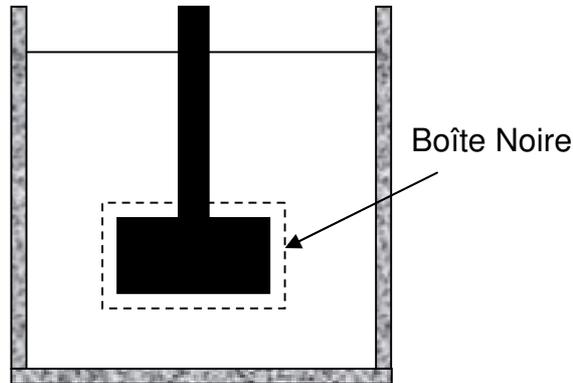


Figure 22. Représentation schématique de l'approche de type boîte noire : les vitesses mesurées expérimentalement sont implémentées comme conditions aux limites pour le fluide, au niveau des surface en pointillés.

3.1.3.2 Parois de la cuve et surface du bain (phase continue)

Sur toutes les parois, autres que celles du rotor, une condition de non-glissement est imposée.

Une étude menée sur la géométrie de la surface libre du métal a montré que la formation de vortex en surface du bain ne modifie pas de façon significative les mouvements d'ensemble du fluide à l'intérieur du bain liquide.

De plus, la modélisation de la déformation de la surface libre augmente de façon très significative le temps de calcul ; c'est pourquoi il a été décidé de faire l'hypothèse d'une surface plane avec une condition de glissement.

3.1.3.3 Parois de l'agitateur (bulles)

Au niveau de la paroi de l'arbre du rotor et des parois latérale et inférieure de la boîte noire, une condition de réflexion spéculaire est imposée pour les bulles.

Par contre, si une condition du même type est imposée sur la surface supérieure du rotor, on constate des rétentions gazeuses locales extrêmement élevées au voisinage de la surface supérieure de la boîte noire. Ce résultat est dû à la présence d'une boucle de recirculation au voisinage de cette surface : les bulles rebondissent sur le rotor et sont réintroduites dans cette recirculation (Figure 23).

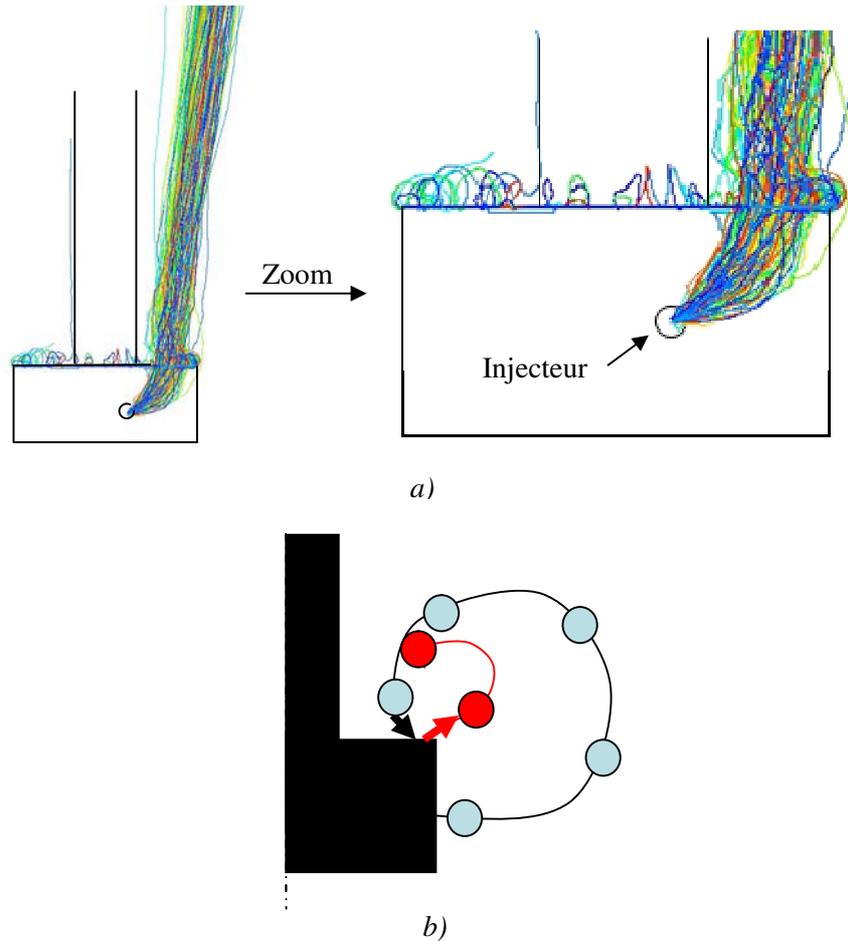


Figure 23. Simulation du comportement des bulles au voisinage du rotor : a) visualisation des trajectoires simulées (250 tr.min^{-1} et $0,5 \text{ Nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$) et b) représentation schématique (en bleu jusqu'à l'impact sur le rotor et en rouge après réflexion spéculaire).

Un certain nombre de bulles restent ainsi prisonnières de cette recirculation et ne remontent jamais à la surface du bain. Les bulles étant traitées comme des particules indépendantes sans interaction entre elles, l'accumulation des bulles

dans cette zone peut conduire à des taux de rétention calculés bien supérieurs à l'unité.

Ce résultat aberrant est lié à l'approche Lagrangienne et à la condition à la limite inadaptée sur la paroi supérieure de l'agitateur.

Par ailleurs, des expériences réalisées sur maquette à eau ont montré que si le rotor n'est pas mouillé par le liquide – ce qui est précisément le cas pour un rotor en graphite plongé dans de l'aluminium liquide – les bulles ont tendance à adhérer à sa surface ; les bulles sont alors susceptibles de coalescer et de former un film gazeux nappant le rotor et remontant à la surface le long de l'arbre (Figure 24).

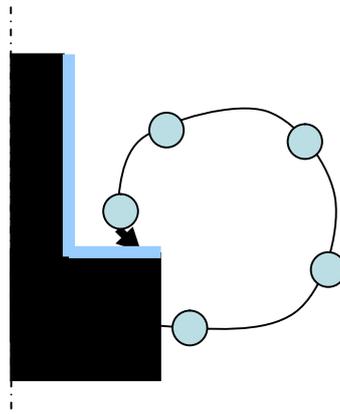


Figure 24. Représentation schématique de la formation d'un film de gaz au voisinage du rotor.

Puisque les bulles captées à la surface du rotor ne participent pas à la flottation, une solution simple, consiste donc à les éliminer du système.

La condition de réflexion spéculaire, sur les surfaces latérale et supérieure du rotor, a donc été remplacée par une condition de sortie (*escape*) dans le modèle pour permettre sa résolution de façon satisfaisante avec le logiciel FIDAPTM.

Dans la réalité, une fraction des bulles captées par le rotor est très certainement réinjectée en bout de pale, en raison du fort cisaillement dans cette zone. Il est cependant, dans l'état actuel, impossible de quantifier ce phénomène.

En appliquant cette condition de sortie, on prédit donc certainement plus de bulles éliminées que dans la réalité, et l'efficacité du procédé calculée sera de ce fait un minorant de l'efficacité réelle.

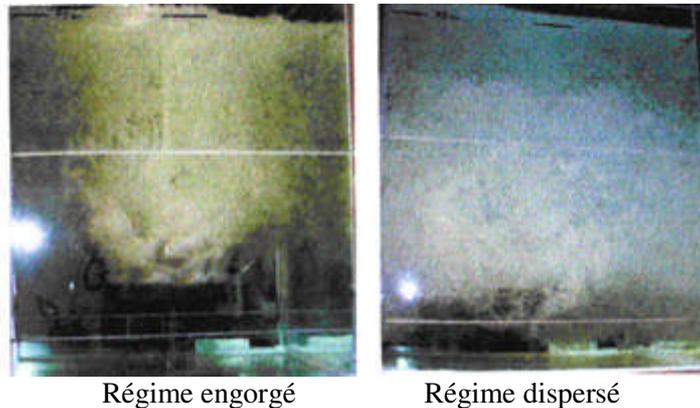
3.1.4 Limitation de la modélisation au régime dispersé

La modélisation hydrodynamique de l'écoulement diphasique métal liquide – bulles a été développée initialement pour étudier la cuve en régime de dispersion complète. Dans un tel régime, l'écoulement du liquide est relativement peu influencé par la présence de la phase gazeuse et cette dernière étant très dispersée, la rétention gazeuse locale doit rester inférieure à 10%, ce qui permet de négliger les interactions entre bulles.

Dès lors que le régime d'écoulement n'est plus dispersé, le panache de bulles devient plus dense, les rétentions gazeuses locales deviennent plus importantes (Figure 25), et il devient difficile de négliger les interactions hydrodynamiques entre bulles ainsi que les phénomènes de coalescence.

Pour ce type de régimes de fonctionnement (engorgement), la démarche employée peut donc être contestable, et gagnerait à être complétée par la prise en considération des phénomènes de coalescence notamment.

Les interactions hydrodynamiques entre les bulles et les mécanismes de coalescence demeurent très complexes à simuler, et pour des raisons de simplification, il n'a pas été envisagé d'intégrer ces phénomènes dans le modèle. Il convient cependant de garder à l'esprit, qu'en régime engorgé, les hypothèses de notre modèle sont à la limite de leurs conditions de validité ; de ce fait les résultats seront à considérer avec précaution.



a)

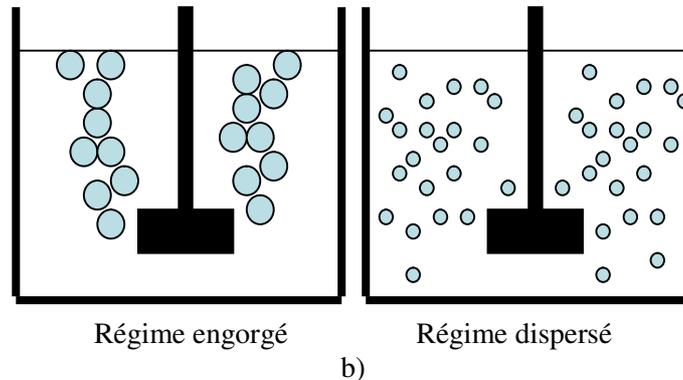


Figure 25. Observation (a) et représentation schématique (b) des régimes engorgés et dispersés sur maquette à eau, pour un débit gazeux de $18 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ et des vitesses de rotation égales à 150 et $250 \text{ tr} \cdot \text{min}^{-1}$, respectivement [11].

3.1.5 Résultats du modèle hydrodynamique et récupération du champ de vitesses

Le calcul de l'écoulement diphasique, mené sous FIDAPTM, est réalisé en 3D sur un maillage construit avec le mailleur commercial GAMBITTM. La simulation apporte en tout point du maillage 3D et en régime stationnaire :

- La vitesse du métal liquide \vec{U} et les conditions de turbulence (k_t , ϵ),
- Les valeurs moyennes du taux de rétention gazeuse et du vecteur vitesse des bulles.

Les résultats doivent ensuite être exportés sur le maillage 2D du programme numérique de flottation, décrit plus loin (paragraphe 3.3).

Cette opération est réalisée par extrapolation du maillage 2D à 3 dimensions (rotation autour de l'axe de symétrie), puis par interpolation des résultats sur ce maillage.

Les conditions aux limites appliquées pour ce mémoire étant toutes symétriques, l'écoulement 3D simulé vérifie une bonne axisymétrie (excepté au voisinage immédiat de l'arbre du rotor, comme on le verra au chapitre 5), si bien qu'un plan (r, z) est ensuite choisi pour servir de base à l'écoulement bidimensionnel intervenant dans le modèle de flottation.

Lors de ces opérations, deux sources d'erreurs sont introduites :

- le passage de 3 dimensions à 2 dimensions introduit des erreurs en raison de l'écart, même faible, à l'axisymétrie de l'écoulement,
- l'interpolation d'un maillage à un autre modifie sensiblement le champ de vitesses.

Il en résulte une perte du caractère conservatif du champ de vitesses, qui est nécessaire à la simulation du transport d'un scalaire passif par la méthode des volumes finis.

Pour rendre ce champ de vitesses 2D conservatif nous exploitons la fonction courant Ψ de l'écoulement, qui s'exprime à partir des coordonnées U_r et U_z du champ de vitesses moyen :

$$\begin{cases} U_z = \frac{1}{\rho r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \\ U_r = -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \end{cases} \quad \text{éq. 22}$$

où ρ désigne la masse volumique du fluide, prenant ici en considération la rétention gazeuse locale α :

$$\rho = \alpha \rho_g + (1 - \alpha) \rho_l \quad \text{éq. 23}$$

En inversant ces formules, il est donc possible de calculer, de proche en proche, la fonction courant de l'écoulement, à partir du champ de vitesses 2D non conservatif.

En dérivant la fonction courant obtenue, on peut ensuite recalculer un champ de vitesses, qui est, par construction mathématique, conservatif.

3.2 Discrétisation de l'Equation de Bilan de Population (EBP)

Comme nous l'avons vu au chapitre 2, nous avons retenu la méthode des bilans de population pour décrire l'évolution de la population d'inclusions au sein du réacteur. L'Equation de Bilan de Population, rappelée ci-dessous, n'admet pas, dans le cas général, de solution analytique.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \operatorname{div}_{r,z,\theta} (n(v,t) \mathbf{u}_p) &= \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-v',v') n(v-v',t) n(v',t) dv \\
&\quad - \int_0^\infty \beta(v,v') n(v,t) n(v',t) dv' \\
&\quad - Z[n(v,t), N_b]
\end{aligned} \tag{24}$$

Il est ainsi nécessaire d'avoir recours à la simulation numérique pour la résolution de l'EBP. Pour cela, deux approches principales se distinguent, la méthode discrète des classes (ordre zéro ou plus élevé) et la méthode des moments.

3.2.1 Méthodes d'ordre zéro

Les méthodes dites d'ordre zéro consistent à discrétiser la distribution de particules, par rapport à l'espace des coordonnées internes (limité ici à une seule dimension), et à supposer que la distribution des inclusions, relativement à cette coordonnée interne, est constante au sein de chacune des classes ainsi formées.

Dans le cas d'une discrétisation par rapport au volume v des particules⁹, la distribution en taille (volume) des particules est divisée en M sections $[v_i, v_{i+1}]$. Les particules contenues dans une section (ou classe) donnée, sont ainsi caractérisées par un même volume, représentatif de la section et noté x_i (Figure 26).

En appliquant cette discrétisation, l'EBP, pour chacune des M classes considérées, s'écrit :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} + \operatorname{div}(N_i \mathbf{u}_p) &= \frac{1}{2} \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^v \beta(v', v-v') n(v',t) n(v-v',t) dv' \\
&\quad - \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v,t) dv \int_0^\infty \beta(v', v) n(v',t) dv' \\
&\quad - Z_i[N_i, N_b, t]
\end{aligned} \tag{25}$$

⁹ On préfère travailler sur le volume des inclusions que sur leur diamètre lors de la résolution de l'EBP. Lors de l'agglomération de deux inclusions il y a en effet conservation du volume, contrairement au diamètre.

où $N_i(t)$ est le nombre de particules appartenant à la classe i par m^3 de fluide, soit par définition :

$$N_i(t) = \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv \quad \text{éq. 26}$$

La résolution du système de M équations ainsi obtenu est cependant rendu impossible, à ce stade, par la méconnaissance de la densité numérale $n(v, t)$, du membre de droite. Le système d'équations n'est donc pas fermé, sous cette forme, et la réécriture du membre de droite en fonction des N_i est nécessaire.

Deux approches classiques sont possibles :

- la méthode M-I, qui consiste à appliquer le théorème de la moyenne au noyau d'agglomération β ,
- la méthode M-II, qui consiste à appliquer ce même théorème à la densité numérale.

La méthode M-I se traduit ainsi par :

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_{v_k}^{v_{k+1}} \beta(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' = N_i(t) N_k(t) \beta_{i,k} \quad \text{éq. 27}$$

avec $\beta_{i,k} = \beta(x_i, x_k)$, $v_i \leq x_i \leq v_{i+1}$ et $v_k \leq x_k \leq v_{k+1}$.

Tandis que la méthode M-II donne :

$$\begin{aligned} \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_{v_k}^{v_{k+1}} \beta(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' \\ = \bar{n}_i(t) \bar{n}_k(t) \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_{v_k}^{v_{k+1}} \beta(v, v') dv' \end{aligned} \quad \text{éq. 28}$$

avec

$$\bar{n}_i(t) = \frac{1}{v_{i+1} - v_i} \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv \quad \text{éq. 29}$$

La méthode M-II est en règle générale très gourmande en temps de calcul, en raison des intégrales doubles à évaluer dans l'équation 28, et elle est, de ce fait, moins utilisée.

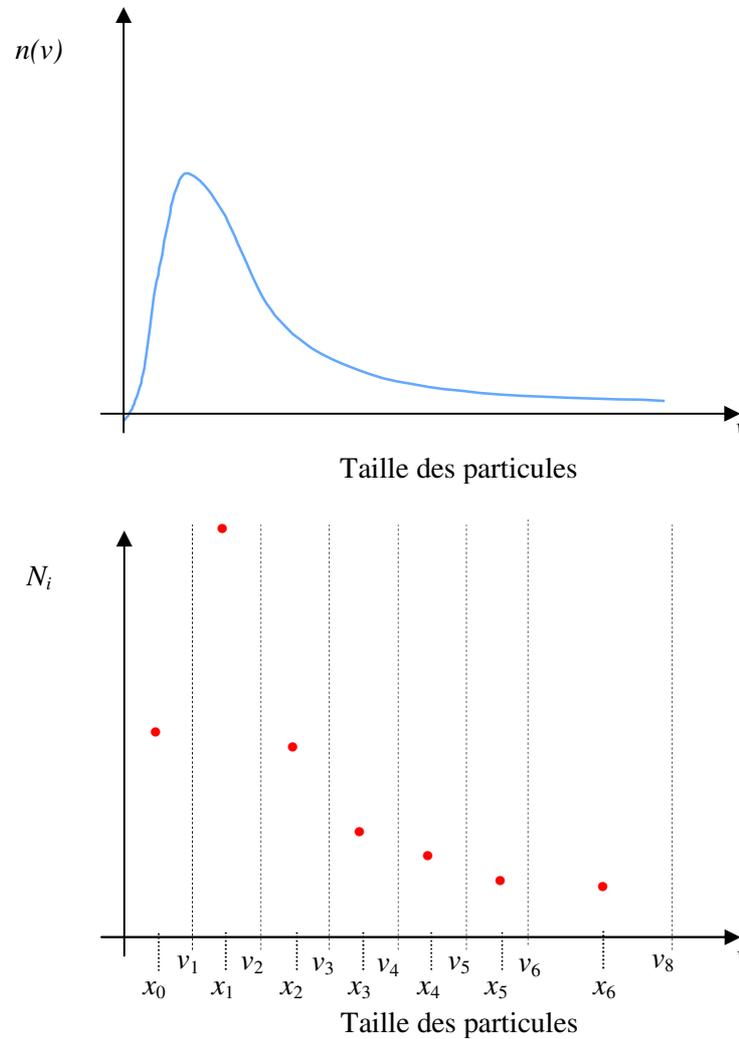


Figure 26. Discretisation de la distribution en taille des inclusions en classes.

De nombreuses formulations de l'EBP ont ainsi été développées en employant les méthodes M-I et M-II.

Notre propos n'est pas ici de toutes les détailler, et nous nous limitons à la présentation de la méthode de Hounslow (M-I), employée par l'équipe du *Material Processing Institut* [21, 22], qui a déjà été évoquée au paragraphe 2.2.2.3.

3.2.1.1 Méthode de Hounslow

La méthode de Hounslow [28] est une méthode M-I reposant sur une discrétisation de l'espace des coordonnées internes suivant une suite géométrique de raison 2, telle que $v_{i+1} = 2v_i$.

L'évolution du nombre d'inclusions au sein d'une classe peut alors, avec cette discrétisation, se décrire par quatre mécanismes, présentés dans le tableau suivant (Tableau 5).

Tableau 5. Interactions binaires permettant de décrire complètement l'évolution de la population due à l'agglomération au sein d'une classe i donnée.

Mécanisme	Naissance ou mort dans la classe i	Collision entre 2 inclusions provenant des classes	
1	naissance	i-1	[1 ; i-2]
2	naissance	i-1	i-1
3	mort	i	[1 ; i-1]
4	mort	i	[i ; M]

Sous ces hypothèses, l'équation de bilan de population prend la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial N_i(t)}{\partial t} + \text{div}(N_i \mathbf{u}_p) = & \sum_{k=1}^{i-2} 2^{k-i+1} N_{i-1}(t) N_k(t) \beta(v_{i-1}, v_k) \\
 & + \frac{1}{2} N_{i-1}^2(t) \beta(v_{i-1}, v_{i-1}) \\
 & - \sum_{k=1}^{i-1} 2^{k-i} N_k(t) N_i(t) \beta(v_i, v_k) \\
 & - \sum_{k=i}^M N_i(t) N_k(t) \beta(v_i, v_k) \\
 & - Z_i[N_i, N_b, t]
 \end{aligned} \tag{30}$$

où chacun des quatre termes du membre de droite correspond à un mécanisme présenté dans le tableau 1.

Ce jeu d'équations est obtenu à partir d'un raisonnement effectué sur le moment d'ordre zéro de la distribution, c'est-à-dire le nombre total d'inclusions, ce qui ne permet pas de conserver la masse.

Ce défaut majeur est qualifié d'inconsistance (ou inhomogénéité) interne¹⁰ par Ramkrishna. Cette lacune a été comblée par l'ajout d'un terme correctif (intégré dans l'équation 30), qui permet de restaurer l'homogénéité interne de la méthode [28].

Pour finir, notons que cette méthode souffre d'un manque de souplesse, du fait de la rigidité de la discrétisation de l'espace des coordonnées internes (raison géométrique d'ordre 2).

Afin de palier aux insuffisances de la méthode M-I et aux difficultés de résolution de la méthode M-II, Kumar & Ramkrishna [29] ont élaboré une méthode très générale, permettant la préservation de deux propriétés et n'imposant aucune contrainte sur le maillage de la discrétisation des classes.

3.2.1.2 Méthode du pivot fixe de Kumar & Ramkrishna

La méthode du pivot fixe¹¹ développée par Kumar & Ramkrishna [29] est basée sur la préservation de deux propriétés intégrales (généralement volume et nombre total d'inclusions), contrairement à la méthode de Hounslow qui ne préserve que le nombre total.

Si on considère une propriété intégrale $P(t)$ représentative de l'ensemble de la population de particules (nombre total, masse totale, volume total, ...), alors $P(t)$ peut s'exprimer en fonction de sa valeur $p(v)$ pour chacune des inclusions de volume v :

$$P(t) = \int_0^{\infty} p(v)n(v,t)dv \quad \text{éq. 31}$$

Pour connaître l'évolution de $P(t)$, il suffit donc de suivre l'évolution de $n(v,t)$, puis de calculer les valeurs intégrales. Les auteurs suggèrent de se focaliser sur la préservation de $p(v)$ au cours de son évolution, la consistance de l'évolution de $P(t)$ étant garantie par la discrétisation du bilan de population.

¹⁰ La consistance interne est un terme statistique qui est ici détourné : lorsque l'on élabore une méthode mathématique, on peut avoir recours à différentes propriétés (masse, nombre, ...) permettant de caractériser une même "entité sous-jacente" (ici la population d'inclusions).

La cohérence de la méthode vis-à-vis de ces différentes propriétés est précisément désignée par le terme d'homogénéité ou de consistance interne (on utilise aussi le terme, parfois ambigu, d'unidimensionnalité). Elle exige que les corrélations entre couples de propriétés (ou les corrélations entre chaque propriété et la méthode dans son ensemble) soient suffisamment élevées.

¹¹ Les auteurs ont également développé une méthode à pivot mobile, destinée aux problèmes traitant de phénomènes de croissance, qui ne sera pas développée ici.

Deux propriétés $p_1(v)$ et $p_2(v)$ vont donc être considérées. De plus, pour traduire au mieux le phénomène d'agglomération, les auteurs considèrent que deux particules s'agglomérant n'ont qu'une très faible probabilité de former un agglomérat dont le volume correspondra exactement au volume représentatif x_i de la section à laquelle il appartient. Ainsi, une inclusion de volume v inclus dans l'intervalle $[x_i ; x_{i+1}]$ sera représentée en attribuant respectivement une fraction $a(v, x_i)$ et $b(v, x_{i+1})$ aux classes i et $i+1$.

On a ainsi :

$$\begin{aligned} a(v, x_i)p_1(x_i) + b(v, x_{i+1})p_1(x_{i+1}) &= p_1(v) \\ a(v, x_i)p_2(x_i) + b(v, x_{i+1})p_2(x_{i+1}) &= p_2(v) \end{aligned} \quad \text{éq. 32}$$

Dans le contexte de notre étude, on s'intéresse au nombre et au volume des particules, que l'on souhaite préserver, ce qui se traduit par $p_1(v)=1$ et $p_2(v)=v$. On a donc :

$$\begin{aligned} a(v, x_i) &= \frac{x_{i+1} - v}{x_{i+1} - x_i} \\ b(v, x_{i+1}) &= \frac{v - x_i}{x_{i+1} - x_i} \end{aligned} \quad \text{éq. 33}$$

Il faut ensuite exprimer les différents termes de l'équation de Smoluchovsky en introduisant ces paramètres. Ainsi,

$$B = \frac{1}{2} \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^v \beta(v', v - v')n(v', t)n(v - v', t)dv' \quad \text{éq. 34}$$

devient :

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} a(v, x_i)dv \int_0^v \beta(v', v - v')n(v', t)n(v - v', t)dv' \\ &+ \frac{1}{2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} b(v, x_i)dv \int_0^v \beta(v', v - v')n(v', t)n(v - v', t)dv' \end{aligned} \quad \text{éq. 35}$$

Sachant que la population de particules est répartie sur les volumes représentatifs x_i , la densité numérale de particules peut se mettre sous la forme discrète suivante :

$$n(v, t) = \sum_{k=1}^M N_k \delta(v - x_k) \quad \text{éq. 36}$$

où δ est la fonction de Dirac et M est le nombre total de classes.

Au final, l'équation de bilan de population discrétisée par la méthode du pivot fixe de Kumar & Ramkrishna est la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i}{\partial t} + \text{div}(N_i \mathbf{u}_p) = & \\ & \sum_{\substack{j,k \\ x_{i-1} \leq (x_j + x_k) \leq x_{i+1}}}^{j \geq k} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}\right) \eta \beta_{j,k} N_j(t) N_k(t) \\ & - N_i(t) \sum_{k=1}^M \beta_{i,k} N_k(t) - Z_i \end{aligned} \quad \text{éq. 37}$$

où $\delta_{j,k}$ est le symbole de Kronecker, $\beta_{j,k} = \beta(x_j, x_k)$ et :

$$\eta = \begin{cases} \frac{x_{i+1} - v}{x_{i+1} - x_i}, \text{ si } & x_i \leq v \leq x_{i+1} \\ \frac{v - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \text{ si } & x_{i-1} \leq v \leq x_i \end{cases} \quad \text{éq. 38}$$

avec $v = x_j + x_k$.

3.2.2 Méthode « Parallel Parent and Daughter Classes »

Afin de réduire les temps de calculs, Bove [30] a proposé récemment une nouvelle technique de discrétisation, connue sous le nom de « *Parallel Parent and Daughter Classes* » (PPDC). Cette technique très empirique consiste à différencier, entre deux instants séparant les interactions entre particules, les particules dites « mères » des particules « filles » ; parmi ces dernières, on distingue :

- les particules « filles » issues de processus d'agglomération binaire entre particules « mères »,
- les particules « filles » issues de la rupture binaire de particules « mères ».

Pour mener à bien cette démarche, une discrétisation multi-grilles de la population d'inclusions doit être adoptée :

- une grille pour les classes parentes (au nombre de M),
- M grilles pour les classes « filles » issues de ruptures et
- $M(M-1)/2$ grilles pour les classes « filles » issues de processus d'agglomération.

Le schéma de principe d'évolution des classes, de cette méthode, est présenté sur la Figure 27, dans le cas où $M=2$.

L'efficacité de cette méthode réside dans le très petit nombre de classes requis pour suivre avec précision l'évolution de la population : 3 ou 4 classes peuvent en effet suffire. Il découle de ce constat un gain de temps en calcul important, qui peut s'avérer très intéressant si un couplage avec la MFN est appliqué.

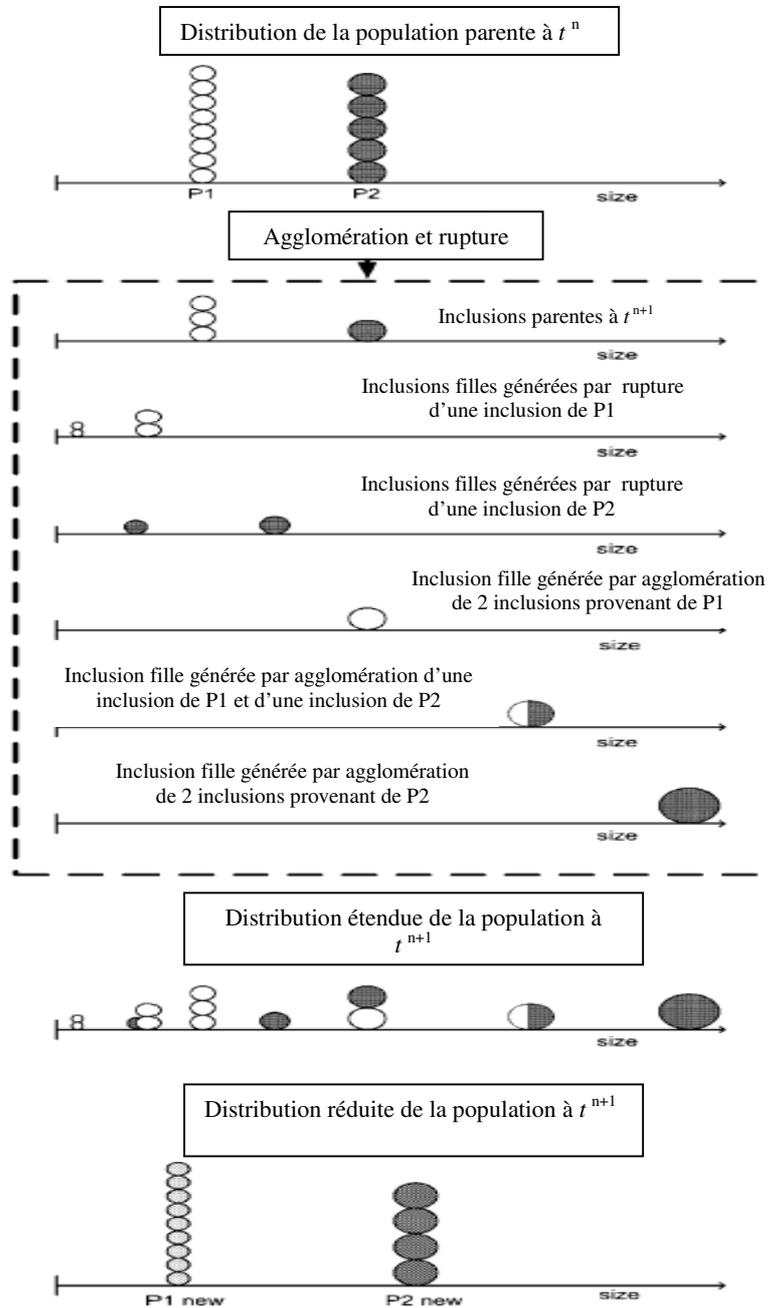


Figure 27 : Schéma de principe de la méthode PPDC (exemple pour $M=2$).

3.2.3 Méthodes d'ordre élevé

Les méthodes, dites d'ordre élevé, appartiennent aux méthodes des classes évoquées précédemment. A la différence des méthodes d'ordre zéro, où la distribution d'inclusions est considérée constante au sein de chaque classe, les méthodes d'ordre élevé adoptent, pour chaque classe, une fonction d'ordre supérieur à zéro, pour représenter la distribution d'inclusions. Ce type de technique a été initié par Gelbard & Seinfeld en 1978 [31], et a été depuis utilisée à de nombreuses reprises par différents auteurs, avec différents jeux de fonctions. On peut par exemple citer, à titre d'exemple, la méthode de Hamilton [32] employant une méthode de collocation orthogonale associée à une base de fonctions de Hermite pondérées.

Ces méthodes sont généralement plus précises que les méthodes d'ordre zéro, mais suivant le type de fonctions adoptées, le temps de calcul peut rapidement devenir prohibitif, en raison des nombreuses intégrales doubles à évaluer.

3.2.4 Méthodes des moments

Une solution couramment utilisée pour gagner en temps de calcul consiste à travailler non pas sur la densité numérale de particules, mais sur les moments de la distribution. Cette méthode est connue dans la littérature sous le nom de Méthode des Moments (MOM).

Considérant la population d'inclusions répartie de façon homogène et caractérisée par sa densité numérale $n(v)$, on définit le moment d'ordre j de la distribution par :

$$M_j = \int_0^{\infty} v^j n(v) dv \quad \text{éq. 39}$$

Selon cette définition, le moment d'ordre zéro, M_0 , de la distribution représente la concentration numérale et le moment d'ordre un, M_1 , représente la fraction volumique de particules dans la phase continue. L'interprétation physique des moments d'ordres supérieurs est plus délicate.

En appliquant cet opérateur mathématique à l'équation de bilan de population, on obtient un système d'équations différentielles, dont les variables sont les différents moments de la distribution :

$$\frac{dM_j}{dt} = \Theta_j(\vec{M}, v) \text{ pour } j = 0, 1, \dots, 4 \text{ à } 6 \text{ en général} \quad \text{éq. 40}$$

Le nombre limité d'équations à résoudre (par comparaison à la méthode des classes) est un avantage évident de cette méthode.

Cependant, la résolution du système d'équations 40 présente deux difficultés majeures, que sont la fermeture du jeu d'équations et la reconstruction de la fonction de distribution.

Le problème de fermeture, intervient lorsque la résolution du système d'équations précédent nécessite la connaissance de moments extérieurs à ce système. Cette situation arrive notamment lorsque l'équation régissant l'évolution d'un moment fait intervenir un moment d'ordre plus élevé [33].

L'objet n'est pas ici de présenter toutes les techniques de fermetures existantes ; nous nous limitons donc à celles les plus rencontrées dans la littérature.

La méthode la plus simple consiste à supposer que la population d'inclusions est monodispersée (ici en volume) [34]. Avec cette hypothèse, le volume moyen des inclusions v_n suffit à caractériser la population et la relation de fermeture du problème s'obtient de la façon suivante :

$$n(v) = M_0 \delta(v - v_n), \quad v_n = \frac{M_1}{M_0} \quad \text{éq. 41}$$

$$M_j = M_0 v_n^j = M_0^{1-j} M_1^j$$

Cette approximation facilite ainsi grandement le problème, mais est par la même extrêmement réductrice.

En suivant la même idée, la fonction de distribution de la population d'inclusions peut être modélisée par une distribution connue, le plus souvent une distribution log-normale. A partir des moments M_0 , M_1 et M_2 il est alors possible de calculer la moyenne géométrique \bar{v} et l'écart type σ de la distribution, qui permettent d'accéder aux autres moments nécessaires :

$$\bar{v} = \frac{M_1^2}{M_0^{3/2} M_2^{1/2}},$$

$$\ln^2 \sigma = \ln \frac{M_2 M_0}{M_1^2}, \quad \text{éq. 42}$$

$$M_j = M_0 \bar{v}^j \exp(j^2 / 2) \ln^2(\sigma)$$

Bien que moins réductrice que la précédente, cette technique de fermeture nécessite de connaître, a priori, la forme de la fonction de distribution, qui doit répondre à une fonction mathématique simple – ce qui reste une hypothèse forte.

Plus récemment des méthodes plus performantes, ne nécessitant aucune hypothèse quant à la distribution d'inclusions, ont été développées. Ces méthodes, basées sur une interpolation entre les différents moments de la distribution, fournissent des résultats beaucoup plus satisfaisants que les méthodes citées précédemment. De telles techniques ont notamment été utilisées par Frenklach & Harris [35] et Diemer & Olson [34].

Mc Graw [36] a également proposé une technique de fermeture générale, basée sur une méthode de quadrature gaussienne, fournissant de très bons résultats. Cette méthode, aujourd'hui largement répandue, est appelée Méthode de Quadrature des Moments (QMOM).

La QMOM a récemment été étendue aux systèmes multivariants d'une part avec la méthode statistique d'Analyse de Composantes Principales (PCA) qui a donné naissance à la méthode PCA-QMOM [37] et d'autre part avec la Méthode de Quadrature Directe des Moments (DQMOM), développée par Fan, Marchisio & Fox [38] avec l'objectif de faciliter le couplage avec la MFN.

Le lecteur désireux d'approfondir ces méthodes récentes pourra se référer à la littérature citée.

Le problème de fermeture ne constitue cependant que l'une des deux difficultés majeures de la méthode des moments. En effet, une fois les équations résolues et les nouveaux moments calculés, reste le problème de la reconstruction de la fonction de distribution (à moins bien sûr qu'on ne s'intéresse qu'aux moments de la distribution). Plusieurs méthodes ont pour cela été envisagées, notamment à partir des polynômes de Laguerre (par exemple [39]). D'autres méthodes plus récentes existent, et sont présentées par Diemer & Olson dans [34].

En conclusion, les méthodes des moments sont des méthodes puissantes permettant un gain de calcul certain par rapport aux méthodes d'ordre zéro. Leur inconvénient majeur réside dans leur lourdeur mathématique.

3.2.5 Choix de la méthode de résolution de l'EBP

Les principes des méthodes dédiées à la résolution de l'équation de bilan de population ont été présentés succinctement. De cette étude bibliographique, il ressort que :

- Les méthodes d'ordre zéro sont les plus faciles d'accès car elles restent très proches du problème physique de départ. Restées longtemps rigides en raison de contraintes imposées par le type de grille adopté (linéaire et géométrique de raison 2, principalement), elles sont aujourd'hui souples et robustes, notamment avec la méthode du pivot (fixe ou mobile) développée par Kumar & Ramkrishna. On peut cependant leur reprocher d'être relativement lourdes en temps de calcul, en raison du grand nombre de classes à considérer.
- Les méthodes d'ordre élevées sont précises, mais très coûteuses en temps de calcul, en raison des nombreuses intégrales doubles à évaluer.
- Les méthodes des moments constituent un outil puissant et en continuelle évolution. Elles permettent d'alléger le temps de calcul par rapport aux méthodes des classes, mais ont l'inconvénient d'être très mathématiques.
- La méthode PPDC s'avère être une méthode prometteuse, mais de par sa nouveauté, nous n'avons que peu de recul la concernant.

Afin de trouver un juste compromis entre temps de calcul et simplicité de mise en œuvre, nous avons fait le choix d'adopter la méthode du pivot fixe de Kumar & Ramkrishna pour discrétiser l'équation de bilan de population dans notre modèle.

3.2.6 Validation du programme de résolution de l'EBP

Afin de valider notre programme numérique de résolution de l'EBP par la méthode du pivot fixe de Kumar & Ramkrishna, nous avons testé ce dernier sur un système homogène présentant une distribution initiale en particules répondant à une fonction analytique connue. La fonction de distribution choisie, de type Gaussienne, est extraite du travail de Scott [40] sur la coalescence de gouttelettes d'eau dans les nuages.

La fonction mathématique de Scott, décrivant la densité numérale d'inclusions $n(v,t)$ à l'instant initial s'exprime selon une exponentielle décroissante :

$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0} e^{-v/v_0} \quad \text{éq. 43}$$

Sous l'hypothèse d'un noyau d'agglomération constant β_o , l'équation de bilan de population admet une solution analytique, permettant de déterminer l'évolution de la distribution dans le temps.

En posant $t^* = \beta_0 N_0 t$ puis $m_0 = \frac{2}{2+t^*}$, la distribution de densité numérale de particules à l'instant t est donnée par :

$$n(v, t) = m_0^2 \frac{N_0}{v_0} e^{-m_0 \frac{v}{v_0}} \quad \text{éq. 44}$$

Cette solution analytique de l'EBP va nous servir de base de comparaison, pour valider le programme de résolution numérique.

Comme dans les travaux originaux de Scott, les calculs sont menés avec les données consignées dans le Tableau 6:

Tableau 6. Valeurs numériques employées pour la validation du programme numérique de résolution.

v_0 (m ³)	$N_0 v_0$	β_0 (m ³ .s ⁻¹)	$t^* = \beta_0 N_0 t$
$4.189 \cdot 10^{-15}$	10^{-6}	$1,8 \cdot 10^{-10}$	$0,0429 t$

Le volume des inclusions considérées s'étend de $10^{-3} v_0$ à $10^7 v_0$. La discrétisation de l'espace des coordonnées internes est réalisée suivant une série géométrique de raison s , telle que $x_{i+1} = s x_i$.

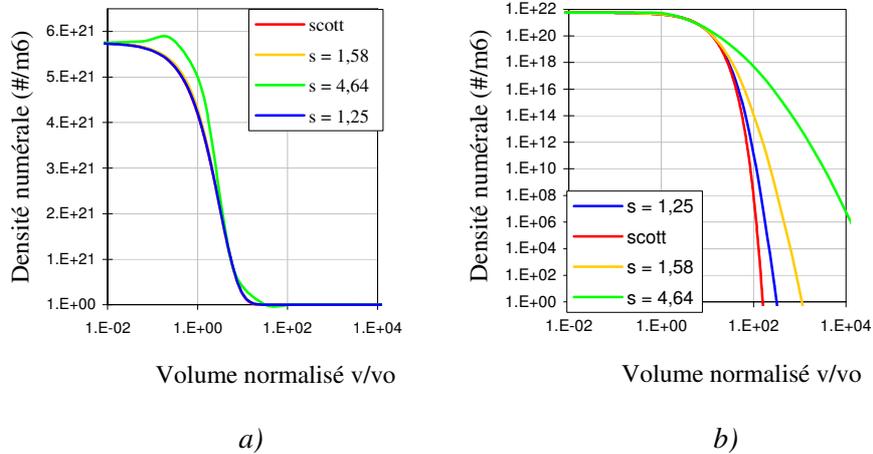
Avec cette discrétisation, si $s = 2$, la méthode du pivot fixe est réduite à la méthode de Hounslow.

Des tests ont été réalisés pour différentes valeurs de s qui, étant donnée l'étendue de l'espace interne considérée, correspondent au nombre de classes données dans le Tableau 7.

Tableau 7. Correspondance entre la valeur de la raison s et le nombre de classes.

s	1,25	1,58	4,64
Nombre de classes	100	50	15

Comme le montre la Figure 28, les résultats obtenus pour différentes valeurs de $s < 2$, révèlent une très bonne corrélation entre les valeurs obtenues avec la fonction analytique de Scott, et les valeurs approchées obtenues par résolution de l'équation de bilan de population avec la méthode du pivot fixe. Ces résultats montrent également que si le nombre de classes est insuffisant (grandes valeurs de s), les résultats calculés peuvent s'écarter grandement des valeurs analytiques. L'échelle log/log met clairement en exergue que la précision de la solution numérique est d'autant meilleure que le nombre de classes employé est important.



a) b)
 Figure 28. Evolution de la densité numérale de particules pour $t=100$ secondes et différentes valeurs de s .
 a) échelle log/décimale b) échelle log/log.

La Figure 29, réalisée avec 50 classes de particules, met en évidence la diminution du nombre d'inclusions de petite taille et l'augmentation du nombre d'inclusions de grosse taille au cours du temps – conséquence de l'agglomération.

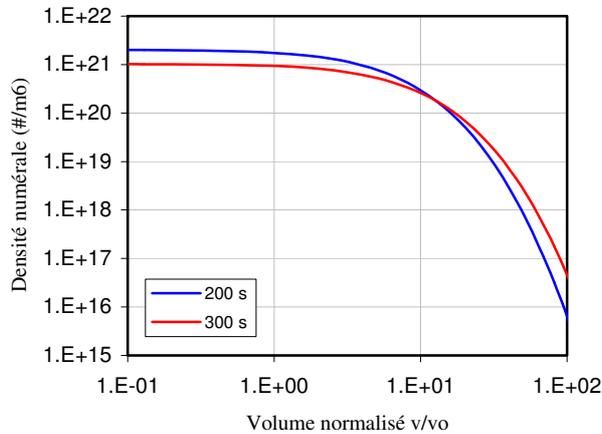


Figure 29. Evolution de la densité numérale de particules pour 200 et 300 secondes (50 classes de particules, $s = 1,58$).

L'étendue de l'espace interne considérée ici est très importante : il existe un rapport de 10^{10} entre le volume des plus petites et celui des plus grosses inclusions. Ceci justifie la nécessité d'utiliser un grand nombre de classes pour

suivre au mieux l'évolution de la population d'inclusions. Dans le cas de la purification de l'aluminium, nous ne considérerons qu'un rapport de l'ordre de 10^6 entre les volumes des plus petites et des plus grosses inclusions, ce qui limitera le nombre de classes à considérer.

3.3 Couplage MFN – EBP

3.3.1 Les équations à résoudre

L'équation fondamentale, rendant compte du transport des inclusions au sein de l'écoulement de métal liquide et de l'évolution numérique par phénomènes d'agglomération et de flottation, n'est autre que l'équation de bilan de population.

En adoptant une méthode des classes pour la résolution numérique de cette dernière, l'EBP s'écrit, pour chacune des M classes considérées, de la façon suivante :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \text{div}(N_i \mathbf{u}_p) = B_i - D_i \quad i \in [1; M] \quad \text{éq. 45}$$

On obtient donc un système de M équations aux dérivées partielles hyperboliques non-homogènes et couplées¹².

Ce système d'équations est relié à l'écoulement dans le réacteur à travers la vitesse des inclusions \mathbf{u}_p . Comme nous avons fait le choix d'adopter une méthode de type LHF, cette vitesse locale des inclusions est supposée égale à la vitesse locale \mathbf{U} du fluide, et nous rappelons que cette vitesse moyenne du métal liquide est obtenue dans un système de coordonnées (r, z) .

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \text{div}(N_i \mathbf{U}) = B_i - D_i \quad i \in [1; M] \quad \text{éq. 46}$$

Dans l'équation ainsi obtenue, le phénomène de décantation des inclusions n'est pas pris en considération. Comme on l'a vu au chapitre 1, la vitesse de décantation est très faible pour les plus petites inclusions, mais prend des valeurs non-négligeables pour les inclusions de taille importante.

Afin de prendre en considération ce phénomène dans notre modèle, nous pouvons réécrire l'équation 46 en intégrant la vitesse de décantation des inclusions \mathbf{u}_{dec} de la façon suivante :

¹² le couplage intervient à travers le terme d'agglomération

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \text{div}(N_i(\mathbf{U} + \mathbf{u}_{dec})) = B_i - D_i \quad \text{éq. 47}$$

Soit :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \text{div}(N_i \mathbf{U}) + \text{div}(N_i \mathbf{u}_{dec}) = B_i - D_i \quad \text{éq. 48}$$

où \mathbf{u}_{dec} est la vitesse de Stokes, définie comme il suit :

$$\mathbf{u}_{dec} = -\frac{2r_i^2(\rho_p - \rho_f)g}{9\mu} \mathbf{e}_z \quad \text{éq. 49}$$

Pour une classe d'inclusions donnée, la vitesse de décantation \mathbf{u}_{dec} est constante dans la cuve, ce qui nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \text{div}(N_i \mathbf{u}_{dec}) &= N_i \text{div}(\mathbf{u}_{dec}) + \mathbf{u}_{dec} \cdot \mathbf{grad}(N_i) \\ &= \mathbf{u}_{dec} \cdot \mathbf{grad}(N_i) \\ &= u_{dec} \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{aligned} \quad \text{éq. 50}$$

Dans l'approche aux volumes finis retenues, ce terme peut alors être décomposé pour chaque cellule, en un terme d'entrée, correspondant au flux d'inclusions provenant de la cellule nord se situant au dessus, et un terme de sortie, correspondant au flux d'inclusions rejoignant la cellule sud du dessous. Ces deux flux peuvent ainsi être naturellement intégrés aux termes de naissance et de mort, B_i et D_i .

La résolution du système d'équations 46 est extrêmement lourde, et une technique de séparation des opérateurs a été employée. De plus, pour pouvoir plus facilement appliquer par la suite des schémas de discrétisation d'ordre élevé au terme de transport convectif, une séparation de l'équation suivant les deux directions spatiales (r , z) est adoptée.

3.3.1.1 Séparation des opérateurs

Nous employons la technique de séparation des opérateurs proposée par Toro [41]. Cette technique permet de décomposer le système d'équations précédent en deux systèmes d'équations, séparant distinctement les phénomènes de transport des phénomènes d'agglomération et de flottation :

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial N_i^*}{\partial t} + N_i^* \operatorname{div}(\mathbf{U}) + \mathbf{U} \cdot \mathbf{grad}(N_i^*) = 0 \\ t = t^n, \quad N_i^* = N_i(t^n, r, z) \end{array} \right\} \Rightarrow N_i^*(t^{n+1}, r, z) \quad i = 1, 2, \dots, M \quad \text{éq. 51}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial N_i}{\partial t} = B_i - D_i \\ t = t^n, \quad N_i = N_i^*(t^{n+1}, r, z) \end{array} \right\} \Rightarrow N_i(t^{n+1}, r, z) \quad i = 1, 2, \dots, M \quad \text{éq. 52}$$

où on note N_i^* la concentration numérale d'inclusions dans la classe i répondant à l'équation 51 sans second membre, c'est-à-dire sans les termes d'agglomération et de flottation¹³.

On obtient ainsi un système de M équations de convection pure non couplées pour la partie transport, et un système de M équations aux dérivées partielles ordinaires couplées pour la partie agglomération – flottation – décantation.

Le système d'équations relatif à l'agglomération-flottation-décantation (éq. 52) est résolu par la méthode du pivot fixe de Kumar et Ramkrishna [40], explicitée précédemment. La résolution du système d'équations de transport (éq. 51) fait quant elle l'objet des paragraphes suivants.

3.3.1.2 Séparation dimensionnelle

Pour rendre compte du transport des inclusions dans l'espace à 2 dimensions (système de coordonnées axisymétrique (r, z)), il convient de résoudre, pour chaque classe de particules, l'équation suivante :

$$\frac{\partial N_i^*}{\partial t} + N_i^* \operatorname{div}(\mathbf{U}) + \mathbf{U} \cdot \mathbf{grad}(N_i^*) = 0 \quad \text{éq. 53}$$

L'écoulement du métal liquide étant conservatif¹⁴, la divergence de la vitesse est nulle et l'équation précédente est réduite à :

$$\frac{\partial N_i^*}{\partial t} + U_r \frac{\partial N_i^*}{\partial r} + U_z \frac{\partial N_i^*}{\partial z} = 0 \quad \text{éq. 54}$$

¹³ Il s'agit donc d'une équation de convection pure

¹⁴ Cette propriété est assurée par le passage par la fonction de courant vu au paragraphe 3.1.5.

Pour résoudre cette équation, il est possible de réaliser, comme le suggère Toro [41], une séparation dimensionnelle. Cette dernière permet de décomposer cette équation de transport bidimensionnelle en deux équations de transport monodimensionnelles :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial N_i^*}{\partial t} + U_r \frac{\partial N_i^*}{\partial r} = 0 \\ t = t^n, \quad N_i^* = N_i(t^n, r, z) \end{aligned} \right\} \xRightarrow{\Delta t} N_i^*(t^{n+1/2}, r, z)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial N_i^*}{\partial t} + U_z \frac{\partial N_i^*}{\partial z} = 0 \\ t = t^{n+1/2}, \quad N_i^* = N_i^*(t^{n+1/2}, r, z) \end{aligned} \right\} \xRightarrow{\Delta t} N_i^*(t^{n+1}, r, z)$$

éq. 55

La première équation permet ainsi de réaliser le transport selon la direction r , et la seconde selon la direction z .

3.3.1.3 Conditions initiales et aux limites

Pour les simulations qui seront menées dans un réacteur fermé (le four du CRV 80), on suppose que la distribution inclusionnaire initiale est homogène dans tout le réacteur.

La condition aux limites employée sur toutes les frontières du système, à l'exception du fond de la cuve et de la paroi supérieure du rotor, est une condition de Neumann de flux nul, indiquant qu'aucune inclusion n'est capturée ou relarguée au niveau de ces interfaces.

La prise en considération de la décantation des inclusions conduit à considérer le fond de la cuve et la paroi supérieure du rotor comme des sorties de matière : les inclusions atteignant ces surfaces par décantation sont considérées comme capturées au niveau de la paroi. Sur ces surfaces, le flux de sortie est fixé, pour chaque classe d'inclusions, par la vitesse de décantation.

Un travail conséquent devrait être mis en place pour mieux décrire le comportement des inclusions au niveau de la paroi latérale de la cuve et de la surface du bain, et modifier la condition de flux nul prise par défaut.

3.3.2 Volumes finis et schéma de discrétisation

3.3.2.1 Préambule

Les équations à résoudre n'admettant pas de solution analytique, nous avons recours à la simulation numérique pour calculer une solution approchée.

L'étape préliminaire à la discrétisation des équations régissant l'évolution du système est la discrétisation du domaine d'étude, réalisée à l'aide d'un maillage de l'espace physique.

Nous adoptons ici un maillage irrégulier afin de suivre la géométrie de notre système.

Les équations de transport sont ensuite discrétisées suivant ce maillage. On obtient alors un ensemble de valeurs discrètes, qui peuvent être définies de différentes façons, selon que l'on adopte une approche de type *éléments finis* ou de type *volumes finis*.

Dans l'approche volumes finis, retenue ici, le domaine d'étude est subdivisé en volumes de contrôle (Figure 30), ou cellules, et l'équation de transport aux dérivées partielles est intégrée sur chacune de ces cellules.

Le système d'équations hyperboliques à résoudre (éq. 55) comprend un terme d'accumulation (dérivée temporelle) et un terme convectif (dérivée par rapport à une direction de l'espace géométrique). Le premier terme est discrétisé par un schéma temporelle au premier ordre, et un schéma explicite en temps a été choisi. Il permet un calcul direct de N_p^{n+1} , en chaque point P du maillage, à partir des valeurs de N_p^n à l'instant précédent.

Le deuxième terme, relatif à la convection, fait l'objet d'un développement approfondi dans les paragraphes suivants. Par mesure de clarté, et en accord avec la séparation dimensionnelle, nous ne présentons le schéma de discrétisation que pour un système à une dimension (selon Oz), noté :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + U_z \frac{\partial N_i}{\partial z} = 0 \quad \text{éq. 56}$$

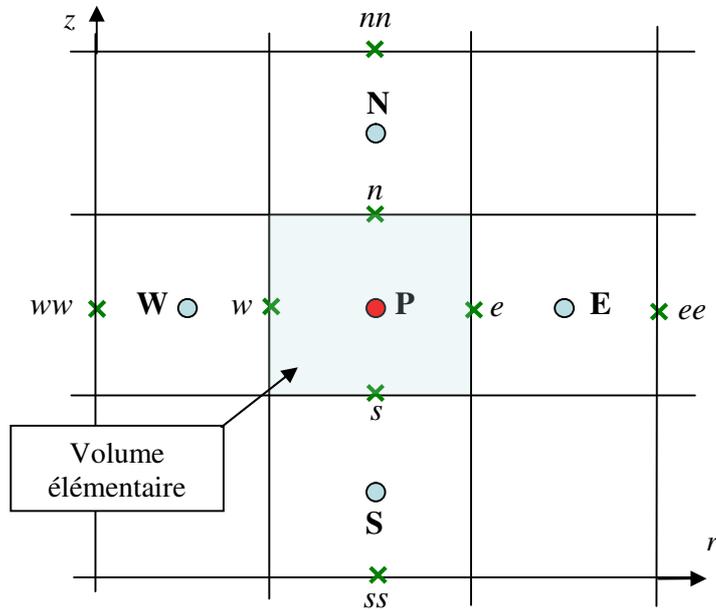


Figure 30. Principe des schémas aux volumes finis à 2 D avec la notation « rose des vents » : autour de chaque nœud du maillage, on considère un volume élémentaire dans lequel on considère les grandeurs moyennes.

3.3.2.2 Schémas de discrétisation classiques

➤ Schéma upwind du premier ordre

La méthode la plus simple pour discrétiser le terme convectif de l'équation 56 consiste à réaliser une approximation amont ou aval au premier ordre des dérivées spatiales.

A une dimension, la dérivée partielle par rapport à la coordonnée spatiale z peut ainsi prendre les formes suivantes¹⁵ :

$$\frac{\partial N}{\partial z} = \frac{N_P^n - N_S^n}{\Delta z} \tag{eq. 57}$$

$$\frac{\partial N}{\partial z} = \frac{N_N^n - N_P^n}{\Delta z}$$

¹⁵ Par mesure de clarté d'écriture, nous ne ferons pas apparaître l'indice i relatif à la classe.

Le choix de l'une ou l'autre de ces expressions est conditionné par le sens de déplacement du fluide ; pour une vitesse positive on adoptera ainsi la première formulation alors que dans le cas d'une vitesse négative c'est la seconde que l'on retiendra.

En introduisant le nombre de Courant Co défini par :

$$Co = \frac{U_z \Delta t}{\Delta z} \quad \text{éq. 58}$$

il est possible d'unifier le schéma de discrétisation quel que soit le sens de déplacement du fluide.

L'équation 52 s'écrit ainsi, sous forme discrétisée, de la façon suivante :

$$N_p^{n+1} = N_p^n - Co^+ (N_p^n - N_s^n) - Co^- (N_N^n - N_p^n) \quad \text{éq. 59}$$

Où Co^+ et Co^- désigne respectivement les nombres de Courant pour des valeurs positives et négatives de la vitesse du fluide.

Le schéma ainsi obtenu est connu dans la littérature sous le nom de *schéma upwind du premier ordre*.

Un tel schéma est stable en formulation explicite (ie ne diverge pas) si la condition :

$$0 \leq |Co| \leq 1 \quad \text{éq. 60}$$

est satisfaite. Cette condition impose ainsi une restriction quant au choix du pas de temps Δt .

Une approche adaptée à la philosophie de la méthode des volumes finis consiste à faire intervenir les densités de flux φ_j aux interfaces des volumes élémentaires, conduisant à l'écriture suivante :

$$N_p^{n+1} = N_p^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\varphi_n + \varphi_s) \quad \text{éq. 61}$$

➤ Schéma de Lax et Friedrich du premier ordre

Le schéma de *Lax et Friedrich* consiste à remplacer, dans la dérivée temporelle, le terme N_j^n par la moyenne, à l'instant n , des cellules adjacentes, soit :

$$N_p^n \rightarrow \frac{1}{2} (N_s^n + N_N^n)$$

Ceci aboutit au schéma suivant :

$$N_P^{n+1} = \frac{1}{2}(1 + Co)N_S^n + \frac{1}{2}(1 - Co)N_N^n \quad \text{éq. 62}$$

Les conditions de stabilité de ce schéma sont identiques à celles du schéma *upwind*.

3.3.2.3 Diffusion numérique

➤ Définition

Les schémas classiques de discrétisation du terme de convection pure, évoqués précédemment, introduisent implicitement un terme de diffusion artificielle, qualifié de diffusion numérique.

Nous avons vu que l'équation de transport, associée à un *schéma upwind du premier ordre* et un schéma temporel explicite, prend la forme classique suivante (pour $U_z > 0$) :

$$N_P^{n+1} = N_P^n - \frac{U_z \Delta t}{\Delta x} (N_P^n - N_S^n) \quad \text{éq. 63}$$

Afin de mettre en évidence le phénomène de diffusion numérique, Warming & Hyett [42] proposent de remplacer, dans l'équation précédente, la concentration numérale N par sa forme développée en série de Taylor à l'ordre deux :

$$N_P^{n+1} = N_P^n + \Delta t \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + o(t^3) \quad \text{éq. 64}$$

$$N_S^n = N_P^n - \Delta z \frac{\partial N}{\partial z} + \frac{\Delta z^2}{2} \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} + o(z^3) \quad \text{éq. 65}$$

ce qui conduit à :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + U_z \frac{\partial N}{\partial z} = U_z \frac{\Delta z}{2} \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + o(t^2, z^2) \quad \text{éq. 66}$$

L'élimination de la dérivée temporelle d'ordre supérieur à 1 se fait en soustrayant à l'équation 62 sa dérivée temporelle multipliée par le facteur $\frac{\Delta t}{2}$.

On obtient alors :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + U_z \frac{\partial N}{\partial z} = U_z \frac{\Delta z}{2} \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 N}{\partial t \partial z} + o(t^2, z^2) \quad \text{éq. 67}$$

De même, l'élimination de la dérivée mixte par rapport au temps et à l'espace, se fait alors en soustrayant à l'équation 63 sa dérivée par rapport à l'espace multipliée par $U_z \Delta t / 2$.

En introduisant le nombre de Courant, l'équation finale devient :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + U_z \frac{\partial N}{\partial z} = U_z \frac{\Delta z}{2} (1 - Co) \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} + o(t^2, z^2) \quad \text{éq. 68}$$

Cette équation est à comparer à l'équation initiale de convection pure, qui ne possède pas de second membre. Le terme additionnel qui apparaît ici prend la forme mathématique d'un phénomène de diffusion, et a pour effet une diffusion dite numérique. Le fait que ce terme d'erreur dépende du pas d'espace Δz montre que le schéma considéré n'est précis qu'au premier ordre (schéma dit du premier ordre).

Dans cette dernière équation, on peut identifier le coefficient de diffusion numérique :

$$D_{num} = U_z \frac{\Delta z}{2} (1 - Co) \quad \text{éq. 69}$$

Cette diffusion numérique, introduite par le schéma de discrétisation, modifie la nature purement convective de l'équation initiale. En conséquence, alors que la solution exacte de l'équation suggère qu'une onde se propage sans perte d'amplitude, la solution numérique, calculée à l'aide du schéma *upwind*, présentera un terme d'atténuation attribué à la diffusion numérique.

Le même raisonnement aurait pu être conduit avec le schéma de Lax & Friedrich, et aurait conduit à un coefficient de diffusion numérique encore plus défavorable ;

$$D_{num} = U \frac{\Delta z}{2Co} (1 - Co^2) \quad \text{éq. 70}$$

➤ Mise en évidence pratique de la diffusion numérique

Considérons le cas classique d'un écoulement piston : un fluide incompressible s'écoule dans une conduite à la vitesse uniforme U . A l'instant initial, on effectue une injection de particules en un lieu donné de la conduite et on observe le transport de cet amas de particules (Figure 31). On considère que toutes les particules ont la vitesse du fluide U .

Le transport étant purement advectif, l'amas de particules devrait normalement se déplacer « en bloc », sans étalement, si bien que le temps de séjour de toutes les particules dans la conduite doit être identique.

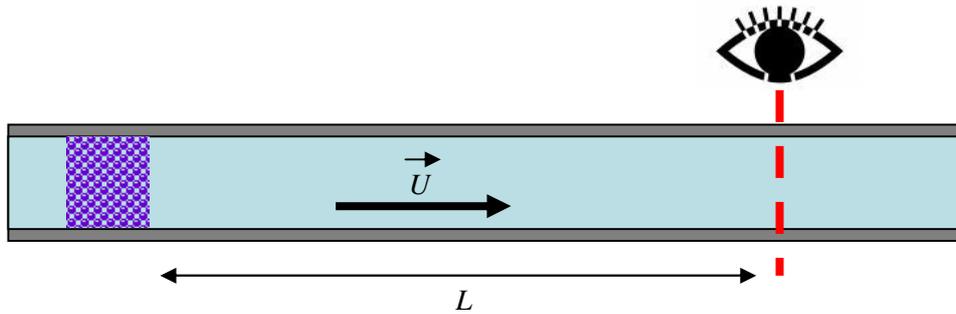


Figure 31. Représentation schématique du cas d'étude.

Dans cet exemple la conduite est maillée de façon régulière avec une taille de cellule de 1 mm et la vitesse du fluide est prise égale à 2 cm/s. La concentration initiale en particules est prise égale à zéro partout dans la conduite, sauf sur une zone constituée de 26 cellules adjacentes, dans lesquelles on fixe le nombre de particules égal à 50 000 à l'instant initial.

On se place alors à un endroit quelconque de la conduite en aval de l'injection de particules, et on relève, en fonction du temps, le nombre de particules dans la cellule choisie. Les calculs sont effectués pour une conduite de longueur L égale à 197 cm et pour différentes valeurs du nombre de Courant.

Les résultats de ce test, reportés sur la Figure 32, mettent clairement en évidence le phénomène de diffusion numérique. On constate en effet un étalement de la distribution caractéristique de ce phénomène. Conformément à la théorie développée dans le paragraphe précédent, plus le nombre de Courant est petit, soit plus le pas de temps est petit (à maillage fixe), plus ce phénomène est important.

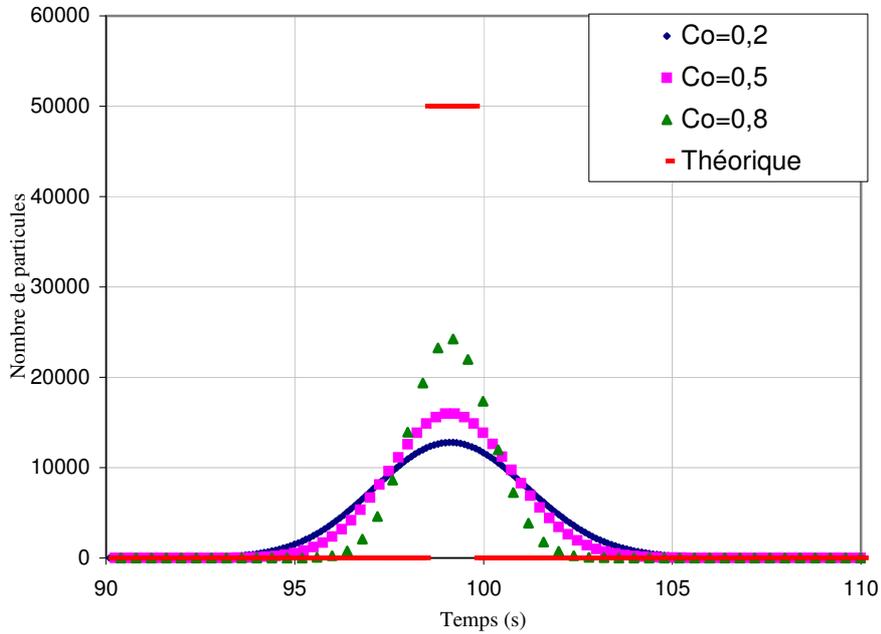


Figure 32. Evolution temporelle du nombre de particules dans la cellule de contrôle pour différentes valeurs de Co .

A partir des courbes précédentes, il est possible de déterminer les coefficients de diffusion numérique équivalents. En effet, le calcul de la variance σ^2 et du temps de séjour moyen \bar{t} de la distribution (notions introduites sur la Figure 33) permettent de remonter au coefficient de diffusion D_{mes} par la formule suivante [43] :

$$\frac{\sigma^2}{\bar{t}^2} = 2 \left(\frac{D_{mes}}{UL} \right) + 8 \left(\frac{D_{mes}}{UL} \right)^2 \quad \text{éq. 71}$$

Dans cette formule, valable pour $Pe \gg 1$, le terme d'ordre deux peut généralement être négligé¹⁶.

¹⁶ Le nombre de Péclet Pe est défini par $Pe = LU/D$.

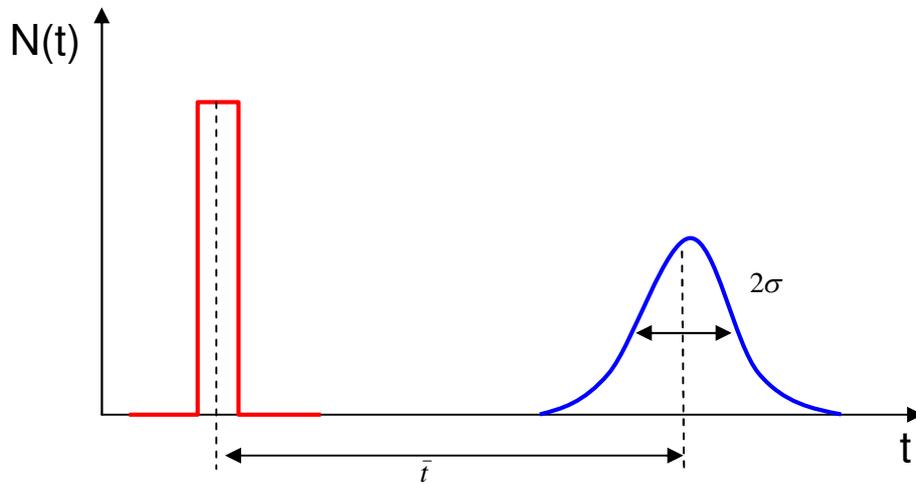


Figure 33. Notion de d'écart type et de temps de séjour moyen.

Cette valeur numérique, D_{mes} , du coefficient de diffusion peut alors être comparée à sa valeur théorique, D_{num} , déterminée à l'aide de l'équation 66. Les résultats sont reportés dans le Tableau 8.

Les résultats montrent une bonne correspondance entre D_{num} et D_{mes} en particulier pour les petites valeurs de Co . Pour les valeurs de Co proches de l'unité, l'expression théorique 70 prévoit en effet un coefficient de diffusion tendant vers zéro, ce qui montre la limite du modèle.

Tableau 8. Comparaison entre D_{mes} et D_{num}

Co	Pe	D_{num}	D_{mes}
0,2	2,5	8,00E-04	8,35E-04
0,5	4	5,00E-04	5,33E-04
0,8	10	2,00E-04	2,31E-04
0,95	40	5,00E-05	7,92E-05
0,98	100	2,00E-05	4,89E-05

➤ Conséquences

Sur cet exemple simple à géométrie mono dimensionnelle nous avons pu mettre en évidence l'existence du phénomène de diffusion numérique. Ce phénomène modifie la nature purement convective de la solution de l'équation de transport (éq. 56) et entraîne ainsi une perte d'informations. Ce phénomène est par ailleurs amplifié en géométrie bidimensionnelle.

Par ailleurs, lorsque des phénomènes de diffusion réels sont simulés, comme ceux produits par la turbulence, ils peuvent être masqués par la diffusion numérique.

Il est donc important de s'attacher à limiter au maximum le phénomène de diffusion numérique.

3.3.2.4 Limitation de la diffusion numérique

- Les schémas d'ordre plus élevé

Les schémas étudiés au paragraphe précédent étaient des schémas du premier ordre, qui conduisaient à une diffusion numérique importante, comme nous avons pu le constater avec la simulation test (transport d'un pic de concentration).

Des schémas d'une précision d'ordre supérieur, faisant intervenir des termes provenant de cellules plus éloignées que les seules cellules voisines, existent. Une étude approfondie de ces schémas est menée par Hirsch dans [44].

Deux alternatives sont possibles pour obtenir un schéma d'ordre plus élevé à partir d'un schéma d'ordre un.

La première consiste en une extrapolation des variables d'état du système considéré – cette méthode est aussi connue dans la littérature sous le nom de méthode de Godunov. En effet dans le schéma Upwind du premier ordre, les grandeurs transportées sont considérées comme constantes dans chaque cellule, ce qui correspond à les définir comme des fonctions constantes par morceaux. Afin de passer à un schéma d'ordre deux, il suffit de garder un terme de plus dans le développement de Taylor, ce qui revient à définir ces grandeurs comme des fonctions linéaires par morceaux, comme on peut le voir sur la Figure 34. On comprend alors aisément que passer à une description quadratique des fonctions d'état confère une précision d'ordre trois au schéma.

La forme du schéma upwind du second ordre obtenue par extrapolation des variables d'état, encore appelée schéma de Beam & Warming, prend ainsi la forme suivante pour une vitesse $U_z > 0$:

$$N_p^{n+1} - N_p^n = -\frac{Co}{2}(3N_p^n - 4N_s^n + N_{ss}^n) + \frac{Co^2}{2}(N_p^n - 2N_s^n + N_{ss}^n) \quad \text{éq. 72}$$

La condition de stabilité, pour un schéma temporelle explicite, étant cette fois :

$$0 \leq |Co| \leq 2$$

éq. 73

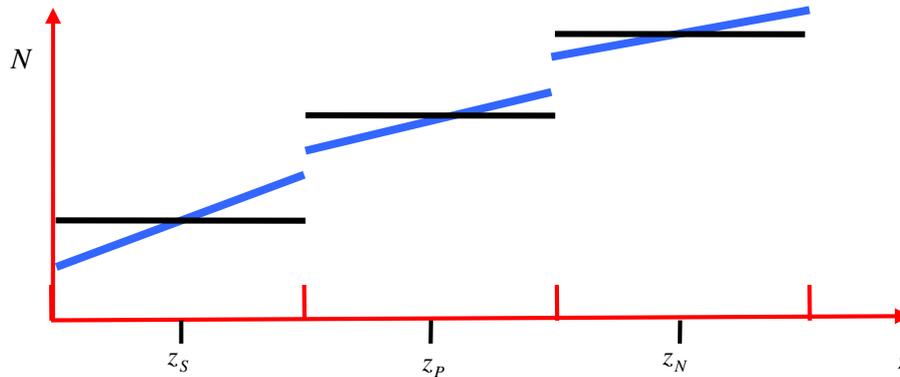


Figure 34. Approximation de la grandeur transportée par une fonction constante par morceaux (noir) et par une fonction linéaire par morceaux (bleu).

Une alternative consiste à conserver le schéma upwind du premier ordre et à extrapoler cette fois l'expression des flux aux interfaces à un ordre plus élevé. Cette approche nous conduit à une forme différente du schéma upwind du second ordre ($U_z > 0$) :

$$N_P^{n+1} - N_P^n = -Co \left((N_P^n - N_S^n) + \frac{1}{2}(N_P^n - N_S^n) - \frac{1}{2}(N_S^n - N_{SS}^n) \right) \quad \text{éq. 74}$$

Dans cette expression, le terme

$$-Co(N_P^n - N_S^n)$$

correspond au flux au premier ordre, et le terme

$$-\frac{1}{2}Co \left((N_P^n - N_S^n) - (N_S^n - N_{SS}^n) \right)$$

correspond à la contribution du second ordre.

En augmentant le nombre de termes dans le schéma de discrétisation, soit par extrapolation des variables, soit par extrapolation des flux, on augmente la quantité d'informations et on aboutit donc à une précision plus grande. Le transport d'une grandeur présentant une discontinuité ou un gradient fort

(créneau par exemple) sera donc, en toute logique mieux transcrit par un schéma d'ordre deux que par un schéma d'ordre un.

L'introduction de termes d'ordres supérieurs à un, dans les schémas de discrétisation, entraîne cependant l'apparition d'oscillations sporadiques qui n'étaient pas observées avec les schémas du premier ordre.

Ce phénomène est illustré sur la Figure 35, où sont comparés, en transport convectif pur, la transformée de signaux gaussien et créneau par des schémas du premier ordre et du second ordre.

L'apparition de ces oscillations est bien évidemment handicapante et peut avoir des conséquences néfastes lors de l'intégration d'un tel schéma dans un code de calcul.

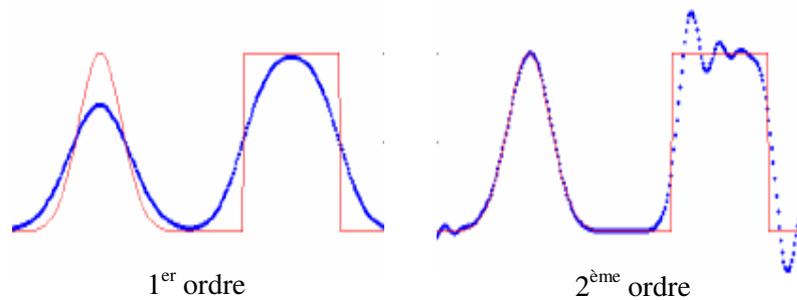


Figure 35. Comparaison schématique des schémas upwind du premier ordre et second ordre (Beam-Warming) dans les mêmes conditions opératoires, d'après [45]. En rouge le signal d'entrée et en bleu le signal calculé après transport convectif.

3.3.2.5 Schéma adopté

Afin de limiter la diffusion numérique lors de la résolution de l'équation de transport, nous avons adopté un schéma TVD (*Total Variation Diminishing*) pour la discrétisation de cette dernière. Ces schémas sont présentés en détail dans l'annexe 1.

Notre choix s'est porté sur le schéma explicite du 3^{ème} ordre proposé par Osher & Chakravarthy [46, 47], comme le suggèrent Campos & Lage dans [48].

L'équation de convection pure, selon la direction axiale, pour une classe d'inclusions quelconque a pour forme :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + U_z \frac{\partial N}{\partial z} = 0$$

Cette équation prend alors la forme discrétisée suivante :

$$N_P^{n+1} = N_P^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} (\varphi_n^n - \varphi_s^n) \quad \text{éq. 75}$$

L'expression des densités de flux proposée par Osher & Chakravarthy [47] est la suivante :

$$\begin{aligned} \Phi_n^n = & h(N_N^n, N_P^n) \\ & - \alpha (\min \text{mod}[df_{mn}^-, b df_n^-]) \\ & - \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) (\min \text{mod}[df_n^-, b df_{mn}^-]) \\ & + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) (\min \text{mod}[df_n^+, b df_s^+]) \\ & + \alpha (\min \text{mod}[df_s^+, b df_n^+]) \end{aligned} \quad \text{éq. 76}$$

où $h(N_N^n, N_P^n)$ désigne la densité de flux du premier ordre à l'interface n entre les cellules P et N, et s'exprime comme suit :

$$h(N_N^n, N_P^n) = \min(U_{zn}; 0) N_N^n + \max(U_{zn}; 0) N_P^n \quad \text{éq. 77}$$

La fonction *minmod*, dont le rôle est détaillé en annexe 1, a pour expression :

$$\text{minmod}(r, 1) = \begin{cases} \min(r, 1) & \text{if } r > 0 \\ 0 & \text{if } r \leq 0 \end{cases} \quad \text{éq. 78}$$

Les quantités df sont définies de la façon suivante :

$$df_n^+ = \max(U_{zn}; 0) (N_N^n - N_P^n) \quad \text{éq. 79}$$

$$df_n^- = \min(U_{zn}; 0) (N_N^n - N_P^n) \quad \text{éq. 80}$$

Suivant la valeur de α choisie, le schéma obtenu sera de nature différente¹⁷. Pour une valeur de 1/6, le schéma formé est un schéma TVD du troisième ordre.

¹⁷ Schéma upwind pour $\alpha=1/2$; schéma de Fromm pour $\alpha=1/4$; schéma central pour $\alpha=0$.

Le paramètre b , dit de compression, doit alors être choisi en respectant la condition suivante :

$$1 < b \leq 1 + \frac{1}{2\alpha} = b_{\max} \quad \text{éq. 81}$$

ce qui impose une valeur de b_{\max} égale à 4 pour le schéma du troisième ordre.

3.3.2.6 Choix du pas de temps

La condition de stabilité relative au nombre de Courant se traduit par la relation suivante :

$$\Delta t = \min_P (Co \Delta z / U_{z,n}) \quad \text{éq. 82}$$

Pour une géométrie 1D, et dans le cas d'une géométrie 2D (r, z) :

$$\Delta t = \min(\min_P (Co \Delta z / U_{z,n}), \min_P (Co \Delta r / U_{r,e})) \quad \text{éq. 83}$$

Pour le schéma choisi, Osher & Chakravarthy [47] ont montré qu'il convient de vérifier :

$$Co \leq \frac{4\alpha}{1 + 4\alpha} \quad \text{éq. 84}$$

Soit pour $b = b_{\max}$, $Co \leq 0,4$.

3.3.2.7 Efficacité du schéma TVD d'ordre 3

Considérons à nouveau le cas test décrit au paragraphe 3.3.2.3, où un amas de particules est transporté convectivement par un écoulement piston.

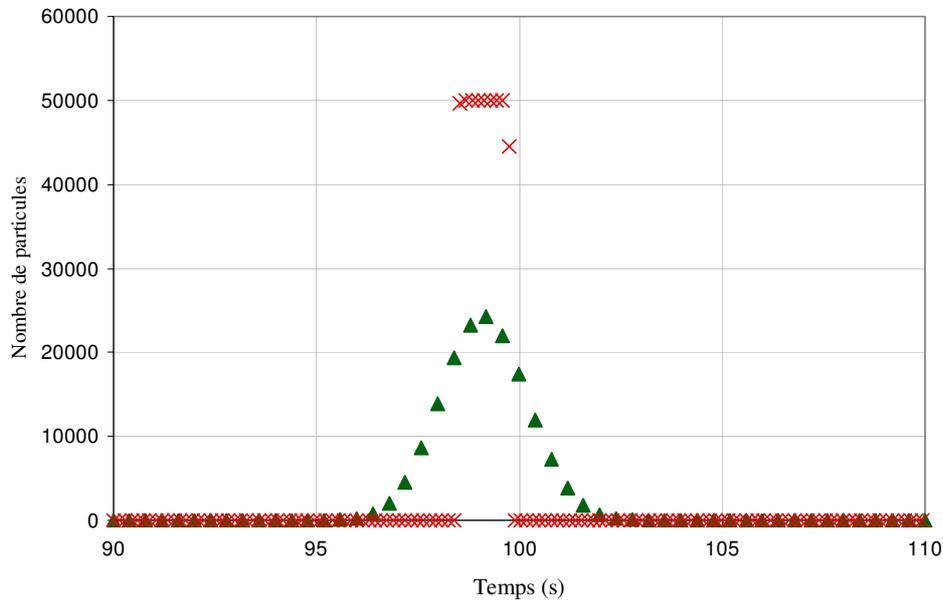


Figure 36. Evolution temporelle du nombre de particules dans la cellule de contrôle. Upwind premier ordre (▲) pour $Co = 0,8$ et TVD du 3ème ordre (×) pour $Co = 0,3$.

Si on résout l'équation de transport à l'aide du schéma TVD proposé par Osher & Chakravarthy, on constate que la dispersion des inclusions est quasi nulle : le schéma TVD permet donc de limiter très fortement le phénomène de diffusion numérique, sans pour autant introduire d'oscillation, comme c'est le cas avec les schémas d'ordre élevé classiques.

A deux dimensions, la technique de séparation dimensionnelle employée, induit malheureusement une diffusion numérique additionnelle, qui ne peut être contenue par le schéma TVD monodimensionnel présenté.

Pour la géométrie bidimensionnelle qui nous occupe, le schéma TVD permet ainsi de limiter la diffusion numérique, mais pas de l'éliminer complètement.

3.4 Récapitulatif

Le calcul de l'hydrodynamique de l'écoulement diphasique métal liquide – bulles est réalisé par une approche Euler-Lagrange faisant intervenir un

METHODES NUMERIQUES

couplage fort entre les bulles et le fluide. Les bulles sont ici considérées comme des sphères rigides ayant une taille constante dans la cuve (la coalescence des bulles n'est pas prise en considération).

Au niveau des parois de la cuve, de l'arbre du rotor, ainsi que des parois latérales et inférieures du rotor une condition de réflexion spéculaire est adoptée pour décrire le comportement des bulles. Au niveau de la paroi supérieure du rotor, une condition de sortie est imposée pour les bulles. Cette condition traduit la formation d'un film gazeux au niveau du rotor.

L'écoulement diphasique 3D, ainsi calculé à l'aide du code commercial FIDAPTM, est ensuite exporté vers un maillage 2D axisymétrique. Le calcul de la fonction courant de cet écoulement, rendu non-conservatif par le changement de maillage, permet alors de restaurer la conservation de la matière, au niveau de chaque cellule du maillage.

Afin de résoudre numériquement l'Equation de Bilan de Population, une méthode des classes est adoptée. La technique du pivot fixe de Kumar & Ramkrishna a été retenue.

Le couplage du transport convectif des inclusions et des phénomènes d'agglomération, de flottation et de décantation est réalisé au moyen d'une approche de type volumes finis. Afin de pouvoir résoudre le système d'équations obtenu, une séparation des opérateurs et une séparation dimensionnelle ont été adoptées.

Un schéma de discrétisation TVD a par ailleurs été employé, afin de limiter la diffusion numérique.

METHODES NUMERIQUES

4 AGGLOMERATION ET FLOTTATION

Nous avons introduit dans le chapitre deux la technique des Bilans de Population, permettant de décrire l'évolution temporelle d'une population d'inclusions soumises à des phénomènes d'agglomération et de flottation ; puis nous avons présenté, dans le chapitre trois, la méthode numérique employée pour la résolution de l'Equation de Bilan de Population.

Nous avons pu voir que l'évolution de la population d'inclusions est conditionnée par les fréquences d'agglomération et de flottation, mais nous n'avons pas, pour l'instant, explicité celles-ci.

L'objet de ce chapitre est précisément de présenter en détails les phénomènes d'agglomération et de flottation, et de décrire les modèles mathématiques qui permettent de calculer la fréquence de leur occurrence.

4.1 Phénomènes d'agglomération

L'agglomération est le processus par lequel deux inclusions entrent en collision et adhèrent l'une à l'autre pour former une nouvelle inclusion. L'agglomération est gouvernée majoritairement par les forces extérieures et résulte du mouvement des inclusions dans des directions différentes et/ou à des vitesses différentes. Le mouvement peut avoir comme origine la diffusion brownienne, la sédimentation, la turbulence ...

La taille des inclusions considérées (supérieure au micromètre) et l'intensité de la turbulence générée à la fois par le rotor et le panache de bulles conduisent à nous limiter ici à l'agglomération turbulente.

La formation d'amas d'inclusions par agglomération a donc principalement lieu dans les zones de forte intensité turbulente, où les inclusions sont soumises aux fluctuations de la vitesse du fluide, et sont projetées les unes contre les autres.

A l'échelle du réacteur, nous avons supposé que les inclusions suivent macroscopiquement l'écoulement du métal liquide, en tenant compte d'une vitesse de dérive liée à la sédimentation. Cette approche nous permet de représenter le transport convectif des inclusions au sein du réacteur mais ne nous permet pas, à l'échelle locale, de décrire les phénomènes collisionnels entre inclusions.

La modélisation du transport convectif macroscopique des inclusions doit donc être complétée, à l'échelle de la taille des inclusions et aux échelles spatiales de la turbulence, par une description fine du comportement des inclusions au sein de l'écoulement turbulent.

Nous employons pour cela une approche statistique.

4.1.1 Comportement des inclusions au sein d'un écoulement turbulent

Deux paramètres importants permettent de prédire qualitativement le comportement des inclusions dans un écoulement turbulent.

Le premier est **la taille des inclusions**. Concernant ce paramètre, il convient de différencier deux cas :

- si les inclusions sont de dimensions inférieures à l'échelle de Kolmogorov η_k (dimension des plus petites structures turbulentes), elles sont susceptibles de suivre parfaitement toutes les fluctuations du fluide (Figure 37).

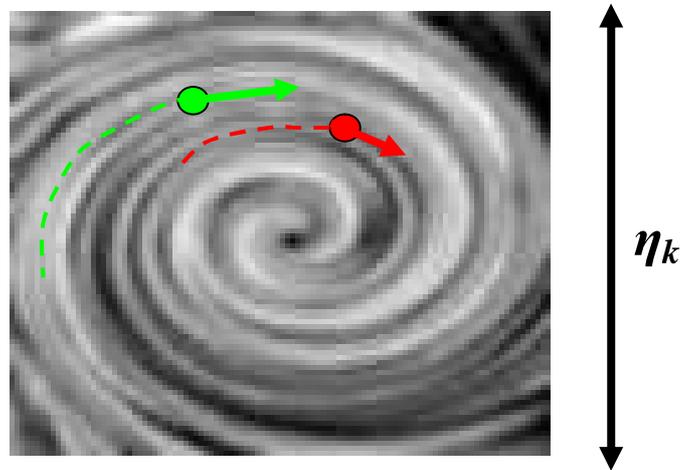


Figure 37. Représentation schématique du comportement possible d'inclusions de dimension inférieure à l'échelle de Kolmogorov.

- si leur dimension est plus grande que l'échelle de Kolmogorov, les inclusions ne peuvent être contenues dans les plus petites structures turbulentes, et seront donc « ballotées » de tourbillons en tourbillons, suivant le schéma de la Figure 38.

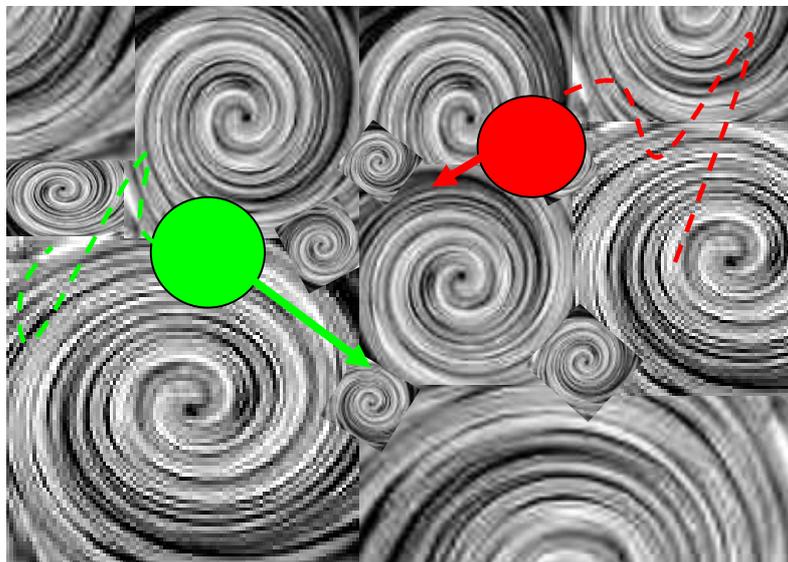


Figure 38. Représentation schématique du comportement possible d'inclusions de dimensions supérieures à l'échelle de Kolmogorov.

L'échelle de Kolmogorov est reliée à la viscosité cinématique du fluide et au taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε par la relation suivante :

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad \text{éq. 85}$$

Le second paramètre est le **temps de relaxation des particules** τ_p , caractérisant leur inertie.

Le temps de relaxation des inclusions est défini de la façon suivante [12]:

$$\tau_p = \frac{2 \left(\rho_p + \frac{1}{2} \rho_f \right) r_p^2}{9 \mu f} \quad \text{éq. 86}$$

où f désigne le facteur de correction de Stokes définit comme le rapport entre le coefficient de trainée de la particule et le coefficient de trainée de Stokes. Lorsque l'écoulement de Stokes autour de l'inclusion est vérifiée, f vaut 1.

Si ce n'est pas le cas, la valeur de ce coefficient correctif est fonction du nombre de Reynolds des inclusions concernées Re_p et pour évaluer ce dernier, il est nécessaire de connaître la vitesse fluctuante relative des inclusions par rapport au fluide. La masse volumique des inclusions étant voisine de celle du fluide et leur dimension étant réduite, cette vitesse relative doit être, a priori, très faible, en particulier dans les zones de faible intensité turbulente.

Dans les zones de forte intensité turbulente nous pouvons évaluer l'écart type de cette dernière¹⁸, en employant l'expression proposée par Nguyen & Schulze [49] :

$$\sqrt{\overline{(u_{pf}^2)}} = \frac{2 \varepsilon r_p^3}{135 \nu^2} \left(\frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_f} \right) \quad \text{éq. 87}$$

Pour de fortes conditions de turbulence au sein de la cuve, le nombre de Reynolds pour une particule d'alumine de 20 microns de diamètre n'atteint au plus que 0,14 (Tableau 9). Dans la plupart des cas cette valeur sera beaucoup plus faible et on peut donc admettre qu'on aura $Re_p < 1$ dans la quasi-totalité de la cuve.

¹⁸ La vitesse instantanée des inclusions se décompose en une composante moyenne et une composante fluctuante u' . On suppose ici que les inclusions ont en moyenne la même vitesse que le fluide : la vitesse relative des inclusions par rapport au fluide est alors directement donnée par la composante fluctuante u' , dont l'écart-type est fréquemment appelée vitesse quadratique moyenne (*Root Mean Squared (rms) Velocity*).

On se situe ainsi dans une situation proche de l'écoulement de Stokes et le terme correctif est donc voisin de l'unité [12]. Par commodité, on considèrera donc que f est égal à l'unité dans notre étude.

Tableau 9. Exemple de calcul de vitesse rms et de Reynolds particulière pour des fortes conditions de turbulence.

r_p (μm)	ρ_p (kg/m^3)	ε (m^2/s^3)	$\sqrt{\overline{u_{pf}^2}}$ (m/s)	Re_p
10	3900	100	$3,7 \cdot 10^{-3}$	0,14

Le temps de relaxation des inclusions τ_p est à comparer au temps caractéristique des structures turbulentes pour connaître l'impact des effets inertiels sur le mouvement des particules.

On définit ainsi le nombre de Stokes :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_{\text{caractéristique}}} \quad \text{éq. 88}$$

Si ce nombre est petit devant 1, alors les effets de l'inertie des particules peuvent être négligés, à l'échelle des tourbillons considérés. Les particules suivent alors exactement les fluctuations de l'écoulement. Dans le cas contraire, l'inertie des particules aura un impact non négligeable sur leur trajectoire comme on peut le voir schématiquement sur la Figure 39.

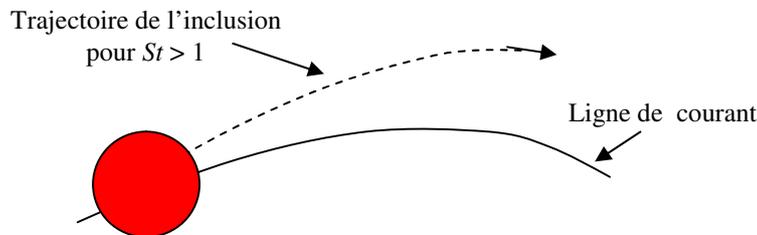


Figure 39. Effet de l'inertie sur la trajectoire d'une particule : pour un nombre de Stokes supérieur à un, la force centrifuge écarte l'inclusion de la ligne de courant du fluide.

Deux modèles statistiques antagonistes, basés sur ces considérations, font référence dans la littérature pour décrire les fréquences de collisions entre inclusions : le modèle de Saffman & Turner et le modèle de Abrahamson.

4.1.2 Modèle de Saffman & Turner

Développé initialement pour décrire l'agglomération de fines gouttelettes dans l'atmosphère, le modèle de Saffman & Turner [50] s'intéresse au cas où les inclusions considérées suivent parfaitement les fluctuations du fluide.

Selon les remarques effectuées au paragraphe précédent, cette hypothèse a deux implications majeures :

- les particules doivent être de taille inférieure aux plus petites structures de turbulence, c'est-à-dire à l'échelle de Kolmogorov,
- l'inertie des particules doit être suffisamment faible pour ne pas influencer leur trajectoire.

En d'autres termes, les conditions de validité du modèle sont les suivantes :

$$\begin{cases} d_p < \eta_k \\ St_k = \frac{\tau_p}{\tau_k} < 1 \end{cases} \quad \text{éq. 89}$$

où τ_k est l'échelle temporelle caractéristique de Kolmogorov, définie comme il suit :

$$\tau_k = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad \text{éq. 90}$$

En pratique, le modèle développé par Saffman & Turner considère le cas limite, correspondant à l'inertie nulle : $St_k \rightarrow 0$.

Considérons deux classes d'inclusions, de rayons représentatifs respectifs r_1 et r_2 , et notons d_{12} la longueur r_1+r_2 , aussi appelée diamètre collisionnel (Figure 40). Toute inclusion de type 1 passant à une distance inférieure ou égale à d_{12} d'une inclusion de type 2, entre en collision avec cette dernière, et réciproquement.

Selon des considérations purement géométriques, le nombre de collisions subies par une inclusion donnée, par unité de temps, est alors égal au flux de particules traversant la sphère de diamètre d_{12} qui l'entoure (Figure 40). Puisque les inclusions suivent exactement les fluctuations du fluide, et que la turbulence est isotrope à l'échelle des structures tourbillonnaires concernées, le flux de

particules est égal au flux volumique de liquide, multiplié par la concentration numérale en inclusions.

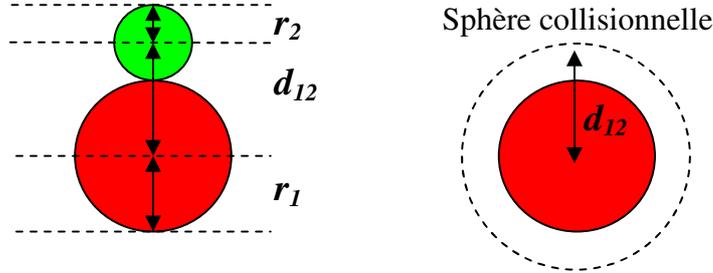


Figure 40. Notion de diamètre collisionnel et de sphère collisionnelle.

Si on note w'_r la composante radiale de la vitesse fluctuante relative entre deux inclusions de type 1 et 2, alors le flux volumique Φ_V de liquide à travers la « sphère collisionnelle », entourant l'une des inclusions, est donné par :

$$\Phi_V = - \overline{\int_{w'_r < 0} w'_r dS} \quad \text{éq. 91}$$

Le flux numéral d'inclusions de type 2, traversant la sphère collisionnelle qui entoure une inclusion de type 1, vaut alors :

$$Z_2 = -N_2 \overline{\int_{w'_r < 0} w'_r dS} \quad \text{éq. 92}$$

On obtient alors aisément la fréquence¹⁹ de collision entre inclusions de type 1 et 2 :

$$Z_{12} = -N_1 N_2 \overline{\int_{w'_r < 0} w'_r dS} \quad \text{éq. 93}$$

L'équation de continuité pour le fluide impose :

$$\int_{w'_r < 0} w'_r dS + \int_{w'_r > 0} w'_r dS = 0 \quad \text{éq. 94}$$

Soit :

$$- \int_{w'_r < 0} w'_r dS = \frac{1}{2} \overline{\int |w'_r| dS} = \frac{1}{2} \int |w'_r| dS \quad \text{éq. 95}$$

¹⁹ Le terme « fréquence » est un abus de langage : il s'agit en fait de la fréquence de collision par unité de volume de fluide ($\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

La turbulence étant supposée isotrope, l'expression de la fréquence de collision se réduit alors à :

$$Z_{12} = 2\pi d_{12}^2 N_1 N_2 \overline{|w'_x|} \quad \text{éq. 96}$$

où $\overline{|w'_x|}$ est la composante radiale de la vitesse relative des inclusions, projetée selon la direction d'approche des inclusions, notée x . L'inertie des inclusions étant supposée nulle, ce terme est directement lié au gradient de vitesse du fluide au sein de la structure turbulente dans laquelle sont confinées les inclusions considérées (Figure 41) :

$$\overline{|w'_x|} = d_{12} \left| \frac{\partial U_x}{\partial x} \right| \quad \text{éq. 97}$$

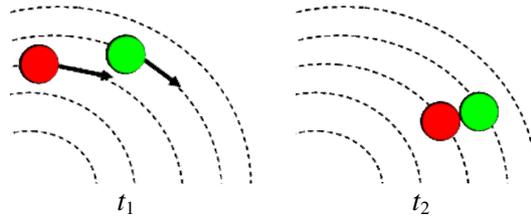


Figure 41. Représentation schématique d'une collision induite par le gradient de vitesse au sein de la structure turbulente.

A partir de l'expression de Taylor [51] de la variance du gradient de vitesse selon la direction x , donnée par :

$$\overline{\left(\frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2} = \frac{\varepsilon}{15\nu} \quad \text{éq. 98}$$

et en supposant une distribution normale du gradient de vitesse selon x [52], on peut alors écrire l'expression de la fréquence de collision établie par Saffman & Turner :

$$\begin{aligned} Z_{12} &= \sqrt{\frac{8\pi}{15}} d_{12}^3 N_1 N_2 \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \\ &\approx 1,3 d_{12}^3 N_1 N_2 \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad \text{éq. 99}$$

Cette équation peut également s'écrire sous la forme suivante :

$$Z_{12} = N_1 N_2 \sqrt{\frac{8\pi}{3}} d_{12}^2 \sqrt{w_{shear}'^2} \quad \text{éq. 100}$$

avec :

$$\sqrt{w_{shear}'^2} = d_{12} \sqrt{\frac{\varepsilon}{5\nu}} \quad \text{éq. 101}$$

Cette dernière forme de la fréquence de collision permet de mettre en évidence l'écart-type de la vitesse fluctuante relative des inclusions liée au gradient de vitesse au sein de la structure turbulente, notée $\sqrt{w_{shear}'^2}$.

Malgré des conditions d'application très restrictives, cette expression est très utilisée dans la littérature, notamment dans le domaine de la science des aérosols.

Dans leurs travaux originaux, Saffman & Turner ont également proposé une variante de ce modèle, prenant en considération l'inertie des inclusions (Figure 42). Cette variante, que nous ne développerons pas ici, est relativement peu employée dans la littérature, et c'est le modèle de Saffman & Turner à inertie nulle qui est pris en référence la plupart du temps.

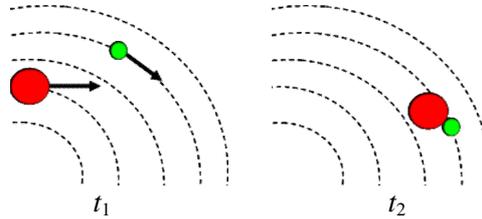


Figure 42. Représentation schématique d'un processus collisionnel prenant en considération l'inertie des inclusions.

En conclusion, le modèle de Saffman & Turner est un modèle très utile pour décrire des phénomènes collisionnels entre particules de très faible inertie et de très petite taille, soumise à des conditions de faible turbulence ; il est cependant inadapté à la description des phénomènes collisionnels entre inclusions d'inertie importante dans des conditions de forte turbulence.

4.1.3 Modèle de Abrahamson

Le modèle développé par Abrahamson [53] est en quelque sorte le modèle antagoniste de celui de Saffman & Turner, puisqu'il s'intéresse à des particules d'inertie importante soumises à de forte conditions de turbulence (zone inertielle).

En pratique, le modèle développé par Abrahamson²⁰ adopte l'hypothèse de l'inertie infinie, traduisant un mouvement des inclusions totalement stochastique, analogue au mouvement désordonné des atomes dans un gaz décrit par la théorie cinétique des gaz.

Cette hypothèse est vérifiée si la dimension des inclusions vérifie la condition suivante :

$$d_i^2 > \frac{15\mu\overline{U'^2}}{\rho_p \varepsilon} \quad \text{éq. 102}$$

En supposant une distribution normale des vitesses²¹ des inclusions selon les trois directions de l'espace, la densité de probabilité de trouver une inclusion, dont la vitesse fluctuante²² est comprise dans l'intervalle $[u_x' + du_x'; u_y' + du_y'; u_z' + du_z']$, est donnée par l'équation suivante :

$$dN = \frac{N}{(2\pi \overline{u_p'^2})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(u_{px}'^2 + u_{py}'^2 + u_{pz}'^2)}{2 \overline{u_p'^2}}\right) du_{px}' du_{py}' du_{pz}' \quad \text{éq. 103}$$

où la variance de la vitesse fluctuante des inclusions $\overline{u_p'^2}$ est identique dans les trois directions, et s'exprime en fonction de la variance de la vitesse fluctuante du fluide $\overline{U'^2}$ de la façon suivante :

$$\overline{u_p'^2} = \frac{\overline{U'^2}}{1 + 1,5 \frac{\tau_p \varepsilon}{\overline{U'^2}}} \quad \text{éq. 104}$$

En supposant l'indépendance des vitesses entre les inclusions, la densité de probabilité de collision entre deux inclusions, de type 1 et 2, prend la forme suivante :

²⁰ Les travaux de Abrahamson portent sur l'agglomération des particules dans un cyclone à poussières.

²¹ On considère ici les vitesses absolues des inclusions.

²² Le mouvement étant purement stochastique, on considère que la vitesse moyenne des inclusions est nulle ; la vitesse instantanée est donc réduite à la vitesse fluctuante.

$$dZ_{12} = dN_1 dN_2 d_{12}^2 C_{12} \quad \text{éq. 105}$$

où C_{12} désigne la vitesse relative entre les inclusions, définie comme suit :

$$C_{12}^2 = (u'_{px,1} - u'_{px,2})^2 + (u'_{py,1} - u'_{py,2})^2 + (u'_{pz,1} - u'_{pz,2})^2 \quad \text{éq. 106}$$

Le nombre de collisions entre inclusions de type 1 et 2, par unité de temps et de volume, est alors donné par l'expression suivante :

$$Z_{12} = \frac{N_1 N_2 d_{12}^2}{8\pi^3 (u_{p1}^2 u_{p2}^2)^{3/2}} \int \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} C_{12} \exp\left(\frac{-\left(u_{px,i}^2 + u_{py,i}^2 + u_{pz,i}^2\right)}{2u_{p1}^2}\right) \exp\left(\frac{-\left(u_{px,i}^2 + u_{py,i}^2 + u_{pz,i}^2\right)}{2u_{p2}^2}\right) du'_{px,1} du'_{py,1} du'_{pz,1} du'_{px,2} du'_{py,2} du'_{pz,2} \quad \text{éq. 107}$$

Cette intégrale admet une solution analytique, qui permet d'écrire la fréquence d'agglomération sous une forme plus compacte :

$$Z_{12} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} N_1 N_2 d_{12}^2 \sqrt{3(u_{p1}^2 + u_{p2}^2)} \approx 5 N_1 N_2 d_{12}^2 \sqrt{(u_{p1}^2 + u_{p2}^2)} \quad \text{éq. 108}$$

Cette expression de la fréquence de collision est, tout comme celle de Saffman & Turner, très employée dans la littérature.

Force est de constater que ces deux modèles présentés sont excessivement restrictifs quant à leurs conditions d'application : inertie nulle pour l'un et inertie infinie pour l'autre.

Si dans quelques cas limites, il est possible d'employer l'un ou l'autre de ces modèles, dans la majorité des cas, la distribution étendue en taille des inclusions ne permet pas de faire ce choix avec rigueur.

4.1.4 Modèle de Kruis & Kusters

Récemment, les travaux de Kruis & Kuster [54] ont conduit à l'élaboration d'un modèle complet, prenant en considération à la fois les collisions dues au

cisaillement et les collisions dues aux effets inertiels. Ce modèle se veut être un modèle universel, applicable à la grande variété des inclusions (en taille et en masse volumique) et à tout le spectre de turbulence.

L'attention des auteurs s'est portée sur l'établissement d'une expression de la vitesse relative des inclusions, valide quelles que soient les conditions de turbulence et la taille des inclusions.

Les hypothèses principales du modèle sont les suivantes :

- Les conditions de turbulence ne sont pas affectées par la présence des inclusions, ce qui est justifié par la très faible concentration massique en inclusions.
- La turbulence est supposée isotrope.
- Pour les inclusions les plus petites et de faible inertie, dont la dimension est inférieure à l'échelle de Kolmogorov et dont la trajectoire suit les lignes de courant du fluide, le gradient de vitesse est supposé constant.
- La traînée des inclusions est décrite par la loi de Stokes, qui a été justifiée au paragraphe 4.1.1.
- La sédimentation différentielle est négligée.
- Le terme historique de Basset, lié à l'histoire de la trajectoire de l'inclusion en mouvement instationnaire et traduisant le phénomène de relaxation du fluide vers l'état stationnaire, n'est pas pris en considération.

S'appuyant sur les travaux antérieurs de Williams & Crane [55], les auteurs sont parvenus aux expressions suivantes²³ pour les variance des vitesses relatives de deux inclusions de type 1 et 2, induites par cisaillement $\overline{w_{shear}^2}$ et par effet inertiel $\overline{w_{accel}^2}$:

$$\overline{w_{shear}^2} = 0,238 b U'^2 \left(\frac{\overline{u_{p1}^2}}{U'^2} \frac{St_{L,1}}{C_{c,1}} + \frac{\overline{u_{p2}^2}}{U'^2} \frac{St_{L,2}}{C_{c,2}} + 2 \sqrt{\frac{St_{L,1} St_{L,2}}{C_{c,1} C_{c,2}}} \frac{\overline{u_{p1} u_{p2}}}{U'^2} \right) \quad \text{éq. 109}$$

et :

$$\overline{w_{accel}^2} = \overline{w_{accel,x}^2} + \overline{w_{accel,y}^2} + \overline{w_{accel,z}^2} \quad \text{éq. 110}$$

La turbulence étant isotrope :

²³ Afin de ne pas surcharger le manuscrit, le développement des calculs effectués par Kruis & Kusters n'est pas présenté ici. Nous invitons le lecteur à se référer à leurs travaux pour de plus amples détails.

$$\begin{aligned}
 \overline{w_{accel}^2} &= 3 \times \overline{w_{accel,x}^2} \\
 &= 3 \times (1-b)^2 \overline{U^2} \frac{\gamma}{\gamma-1} \times \\
 &\quad \frac{(St_{L,1} + St_{L,2})^2 - 4 St_{L,1} St_{L,2} \sqrt{\frac{1 + St_{L,1} + St_{L,2}}{(1 + St_{L,1})(1 + St_{L,2})}}}{(St_{L,1} + St_{L,2})} \times \\
 &\quad \left\{ \frac{1}{(1 + St_{L,1})(1 + St_{L,2})} - \frac{1}{(1 + \gamma St_{L,1})(1 + \gamma St_{L,2})} \right\}
 \end{aligned} \tag{éq. 111}$$

Dans ces expressions, b désigne le coefficient de masse ajoutée, défini par :

$$b = \frac{3\rho_f}{2\rho_p + \rho_f} \tag{éq. 112}$$

Le nombre de Stokes considéré ici, pour l'inclusion de type i , est le suivant :

$$St_{L,i} = \frac{\tau_{p,i}}{T_L} \tag{éq. 113}$$

où τ_{pi} est le temps de relaxation de la particule, défini au paragraphe 4.1.1., et où l'échelle temporelle Lagrangienne T_L est définie de la façon suivante :

$$T_L = 0,4 \frac{\overline{U^2}}{\varepsilon} \tag{éq. 114}$$

γ est la constante spectrale définie comme suit :

$$\gamma = 0,183 \frac{\overline{U^2}}{\sqrt{\varepsilon v}} \tag{éq. 115}$$

La vitesse quadratique moyenne des inclusions est reliée à la vitesse quadratique moyenne du fluide par la relation suivante :

$$\frac{\overline{u_p^2}}{\overline{U^2}} = \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{1+b^2 St_{L,i}}{1+St_{L,i}} - \frac{1+b^2 \gamma St_{L,i}}{\gamma(1+\gamma St_{L,i})} \right) \tag{éq. 116}$$

La covariance des vitesses fluctuantes des inclusions est elle aussi liée à la vitesse quadratique moyenne du fluide, comme suit :

$$\frac{\overline{u_{p1}u_{p2}}}{U^2} = \frac{\gamma}{\gamma-1} \times \{A_1[B_1 + C_1 + D_1] \times A_2[B_2 + C_2 + D_2]\} \quad \text{éq. 117}$$

avec :

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{(St_{L,1} + St_{L,2})(1 + St_{L,1})(1 + St_{L,2})} \\ B_1 &= (St_{L,1} + St_{L,2} + 2 St_{L,1} St_{L,2}) \\ C_1 &= b(St_{L,1}^2 + St_{L,2}^2 + 2 St_{L,1} St_{L,2}) \\ D_1 &= b^2(St_{L,1}^2 St_{L,2} + St_{L,1} St_{L,2}^2 + 2 St_{L,1} St_{L,2}) \\ A_2 &= \frac{1}{\gamma(St_{L,1} + St_{L,2})(1 + \gamma St_{L,1})(1 + \gamma St_{L,2})} \\ B_2 &= (St_{L,1} + St_{L,2} + 2 \gamma St_{L,1} St_{L,2}) \\ C_2 &= b\gamma(St_{L,1}^2 + St_{L,2}^2 + 2 St_{L,1} St_{L,2}) \\ D_2 &= b^2\gamma(\gamma St_{L,1}^2 St_{L,2} + \gamma St_{L,1} St_{L,2}^2 + 2 St_{L,1} St_{L,2}) \end{aligned}$$

L'expression de la fréquence de collision s'exprime alors sous la forme synthétique suivante :

$$Z_{12} = N_1 N_2 \sqrt{\frac{8\pi}{3}} d_{12}^2 \sqrt{w_{accel}^2 + w_{shear}^2} \quad \text{éq. 118}$$

4.1.5 Comparaison des modèles

Afin de comparer les différents modèles d'agglomération, nous calculons les noyaux d'agglomérations β_{12} ,²⁴ pour des collisions binaires entre une inclusion de diamètre égale à 10,8 μm et une inclusion de diamètre compris entre 2 et 500 μm .

$$\beta_{12} = \frac{Z_{12}}{N_1 N_2} \quad \text{éq. 119}$$

Le diamètre collisionnel d_{12} varie alors de 6 à 255 micromètres.

²⁴ En $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$.

Les calculs sont réalisés dans l'aluminium liquide, pour des conditions de forte turbulence, correspondant aux zones de cisaillement maximal rencontré dans la cuve ($\epsilon = 100 \text{ m}^2/\text{s}^3$ et $k_t = 30 \text{ m}^2/\text{s}^2$). Différentes valeurs du rapport $Q_{pf} = \rho_p / \rho_f$ sont envisagées. La valeur de 1,9 correspond aux inclusions de borures (les plus denses que l'on rencontre habituellement dans l'aluminium).

Dans de telles conditions, la dimension des plus petites structures de turbulence η_k est de l'ordre de $6 \text{ }\mu\text{m}$.

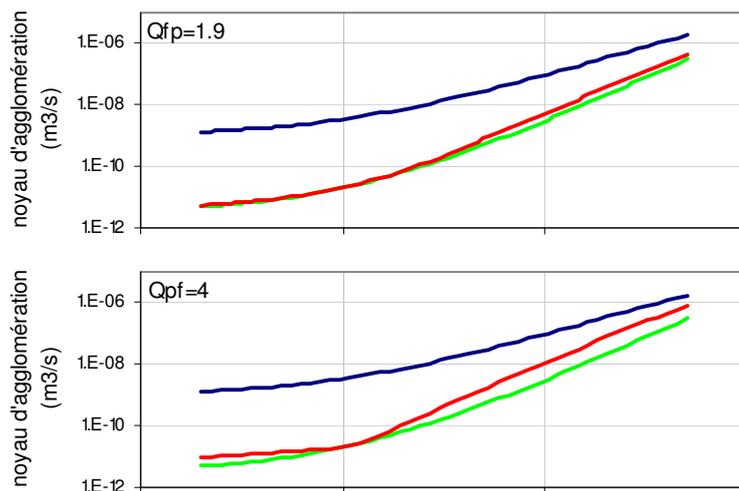
On constate d'ores et déjà que le modèle de Saffman & Turner n'est, en toute rigueur, pas applicable puisque presque toutes les inclusions ont une dimension supérieure à l'échelle de Kolmogorov.

De même, le modèle de Abrahamson n'est, suivant les conditions données au paragraphe 4.1.3., applicable que pour des inclusions dont la dimension est supérieure à $890 \text{ }\mu\text{m}$ (dans le cas des borures), ce qui est au-delà de notre domaine d'étude.

Les deux modèles ne sont donc, en toute rigueur, valides que pour des tailles d'inclusions extérieures au domaine étudié.

Les résultats du calcul de β_{12} sont reportés sur la Figure 43.

On constate immédiatement que les valeurs calculées avec le modèle de Kruis & Kusters sont toujours comprises entre celles calculées avec le modèle de Saffman & Turner (minorant) et celles calculées avec le modèle de Abrahamson (majorant), ce qui est conforme aux remarques précédentes.



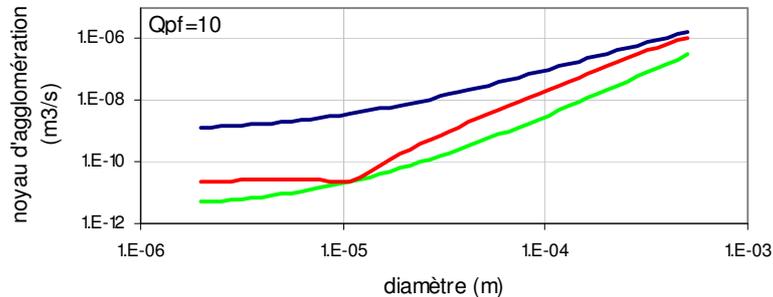


Figure 43. Comparaison des noyau d'agglomération de Abrahamson (bleu), Kruis & Kusters (rouge) et Saffman & Turner (vert), pour des conditions de forte turbulence ($\epsilon=100 \text{ m}^2/\text{s}^3$ et $k_t=30 \text{ m}^2/\text{s}^2$) et pour 3 valeurs de Q_{pf} .

Les valeurs calculées avec le modèle de Saffman & Turner sont bien entendu indépendantes de Q_{pf} , puisque ce modèle ne prend pas en considération l'inertie des inclusions. Concernant les valeurs calculées avec le modèle de Abrahamson, on ne constate pas de différence significative sur la gamme de Q_{pf} étudiée. Pour observer des différences plus importantes, il faut considérer des rapports de masses volumiques beaucoup plus élevés (particules dans un gaz par exemple), ce qui est hors du cadre de cette étude.

Pour des inclusions de faible inertie, le modèle de Kruis & Kusters est très proche du modèle de Saffman & Turner, qui correspond au cas de limite de l'inertie nulle.

Lorsque l'inertie des inclusions est plus grande, le modèle de Kruis & Kusters s'écarte du modèle de Saffman & Turner, et se rapproche du modèle de Abrahamson, tout particulièrement pour les inclusions les plus grosses.

On constate par ailleurs que le modèle de Kruis & Kusters passe par un minimum lorsque les inclusions ont la même taille, minimum correspondant au modèle de Saffman & Turner. En effet des inclusions de même taille subissent des accélérations identiques. Dans ce cas, seuls les effets de cisaillement sont à l'origine des processus collisionnels ; on retrouve alors le modèle de Saffman & Turner.

Cette explication est clairement illustrée par la Figure 44 où les composantes inertielles et de cisaillement du noyau d'agglomération de Kruis & Kusters ont été séparées ($Q_{pf}=10$).

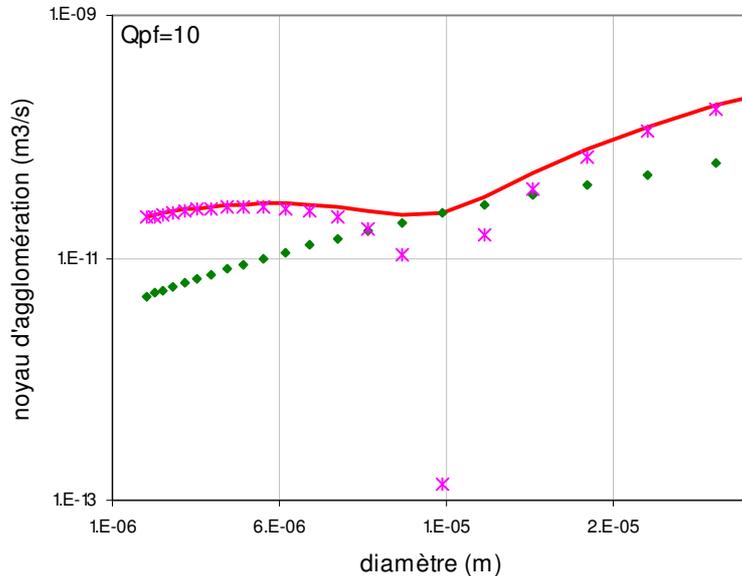


Figure 44. Composante inertielle (×) et composante de cisaillement (♦) du noyau d'agglomération de Kruis & Kusters (—)(mêmes conditions que précédemment).

La fréquence de collision binaire, résultant du seul mouvement inertiel, s'effondre lorsque les inclusions ont des tailles voisines. Par contre, pour des tailles d'inclusions différentes, c'est cette composante inertielle qui est prépondérante, pour ces conditions de turbulence élevées et un rapport Q_{pf} égal à 10.

Cependant, les borures sont les inclusions les plus denses rencontrées dans l'aluminium liquide et, même pour ces conditions de forte turbulence et des tailles de particules très différentes, c'est en fait la composante de cisaillement qui détermine principalement la fréquence de collision. Dans ces conditions, les résultats obtenus avec le modèle de Kruis & Kusters diffèrent peu de ceux obtenus avec le modèle de Saffman & Turner. Pour des particules de plus faible masse volumique et/ou des conditions de turbulence plus faibles, ceci sera encore plus prononcé.

Cette comparaison confirme la vaste étendue du domaine d'application du modèle de Kruis & Kusters, et c'est ce modèle qui sera utilisé par la suite.

4.1.6 Efficacité d'attachement et stabilité de l'agglomérat

En toute rigueur, la fréquence d'agglomération n'est pas égale à la fréquence de collision. En effet il convient de pondérer cette dernière par une efficacité d'attachement E_a .

Cette efficacité est liée aux différentes forces agissant sur l'agglomérat formé. Certaines sont attractives et tendent à faciliter l'attachement des inclusions lors d'une collision ; c'est le cas des forces de Van der Waals et des forces de capillarité, liées aux propriétés de mouillabilité des inclusions. D'autres tendent à déstabiliser l'agglomérat : ce sont les forces hydrodynamiques.

De nombreuses études, décrivant les interactions physico-chimiques entre des inclusions fortement mouillées par le fluide existent dans la littérature (voir notamment [56, 57]). En absence de pont gazeux entre les inclusions, les forces attractives en présence sont relativement faibles, et conduisent à des efficacités de collision très faibles, comme on peut le voir dans le Tableau 10.

Tableau 10. Efficacités d'attachement calculées avec le modèle de Higashitani pour $\varepsilon=10 \text{ m}^2.\text{s}^{-3}$ et une constante de Hamaker de $2,1.10^{-18}$.

d_{12} (μm)	1	10	50	100
E_a	0,57	0,11	0,033	0,02

En revanche lorsque les inclusions sont faiblement mouillées par le liquide, des poches de gaz de taille nanométrique se forment au niveau des rugosités et irrégularités, à la surface des inclusions. Ces poches gazeuses sont susceptibles de former des ponts gazeux, favorisant grandement l'attachement des inclusions. Cournil [58] a récemment montré que l'efficacité de collision est ainsi fortement améliorée lorsque les inclusions ne sont pas ou peu mouillées par le liquide.

L'angle de contact de l'aluminium liquide sur l'alumine étant voisin de 90° à 1100 K (à faible pression partielle en hydrogène), l'alumine est faiblement mouillée par l'aluminium liquide [59].

De plus, en présence de chlorures liquides au sein du bain, il est fort probable, que cette mouillabilité des inclusions soit encore réduite.

En raison de la faible mouillabilité des inclusions, cette efficacité d'attachement est vraisemblablement élevée, et nous faisons le choix de la prendre égale à l'unité.

Nous gardons évidemment à l'esprit que cette valeur est un majorant, qui donnera lieu à des fréquences d'agglomération plus élevées que dans la réalité.

Pour les mêmes raisons, nous faisons l'hypothèse que les forces d'adhésion sont suffisamment fortes pour que les phénomènes de fragmentation des agglomérats soient marginaux ; ceux-ci ne sont donc pas pris en compte dans le modèle.

4.2 Phénomène de flottation.

De la même façon que pour les phénomènes d'agglomération entre inclusions, l'attachement d'inclusions aux bulles résulte de collisions efficaces entre celles-ci.

La fréquence de flottation sera donc tout naturellement le produit de la fréquence de collision inclusions – bulles, pondérée par un terme d'efficacité ; ce dernier pouvant être scindé en un terme d'efficacité collisionnelle E_c et un terme d'efficacité d'attachement E_a .

Les inclusions et les bulles ayant des tailles (centimétrique pour les bulles et micronique pour les inclusions) et des masses volumiques (rapport de l'ordre de 4.10^3) très différentes, leurs comportements au sein de l'écoulement sont très éloignés. On ne peut donc pas, en toute rigueur, utiliser les modèles d'agglomération pour calculer la fréquence de flottation.

Avant de présenter les modèles dédiés à la flottation, intéressons-nous aux caractéristiques des bulles dans le réacteur.

4.2.1 Caractéristiques des bulles

➤ Morphologie

Selon les conditions de fonctionnement de la cuve 80, la taille des bulles peut varier entre 7 et 11 mm.

De façon synthétique, les bulles peuvent présenter trois types de morphologie différents :

- forme sphérique pour les petits diamètres,
- forme ellipsoïdale pour les diamètres intermédiaires,
- forme de « chapeau de Taylor » pour les plus grands diamètres.

Selon la nature du liquide (masse volumique, viscosité et tension de surface) et le régime d'écoulement, le passage d'une morphologie à une autre s'effectue pour des diamètres différents.

Ainsi, dans le cas général, on a recours au calcul du nombre adimensionnel de Tadaki, Ta pour déterminer la forme des bulles [60]:

$$Ta = Re_b Mo^{0,23} \quad \text{éq. 120}$$

où Mo désigne le nombre de Morton, défini par :

$$Mo = \frac{g\mu^4}{\rho\sigma^3} \quad \text{éq. 121}$$

La classification proposée par Tadaki est reportée dans le Tableau 11.

Tableau 11. Morphologie des bulles suivant le nombre de Tadaki.

Ta	Forme de la bulle
$Ta \leq 2$	Sphérique
$2 \leq Ta \leq 6$	Sphéroïde
$6 \leq Ta \leq 16,5$	Ellipsoïde
$16,5 \leq Ta$	Chapeau de Taylor

Pour les conditions opératoires étudiées, et pour les tailles de bulles considérées, la gamme de Re_b rencontrés au sein de la cuve s'étend typiquement de 10^3 à 10^4 . On se situe ainsi dans la gamme de nombre de Tadaki suivante :

$$Ta \in [0,6; 6]$$

Les bulles considérées sont donc de forme sphéroïde. Par la suite, nous les considérerons comme des sphères, afin de simplifier la démarche.

➤ Interface avec le liquide

L'interface liquide-gaz peut, suivant la situation, être mobile ou immobile, par rapport à un référentiel lié à la bulle.

Dans le cas où le liquide est parfaitement propre et ne contient aucune impureté, la surface de la bulle est mobile. En conséquence, il existe une vitesse de glissement du fluide à l'interface avec le gaz ; la vitesse du fluide a ainsi une composante tangentielle non-nulle à la paroi. Ceci peut avoir des effets importants sur la structure du sillage, mais aussi sur le mécanisme d'attachement des inclusions aux bulles.

Lorsque le liquide contient des impuretés susceptibles de s'adsorber en surface de la bulle, celle-ci peut être assimilée à une sphère rigide, et on parle de surface retardée.

Le cas intermédiaire, pour lequel la surface est partiellement immobile, est également fréquent. Dans certaines situations, on peut ainsi observer un amoncellement d'impuretés au niveau de la calotte avale de la bulle. Cette zone est alors totalement rigide, alors que le reste de la bulle est mobile (Figure 45).

Dans le cas de l'aluminium liquide, de nombreuses impuretés sont présentes au sein du liquide. De plus l'utilisation de chlore entraîne la formation de chlorures liquides susceptibles de s'adsorber à la surface des bulles. Pour ces raisons, nous supposons donc que la surface des bulles est totalement retardée dans la cuve de flottation.

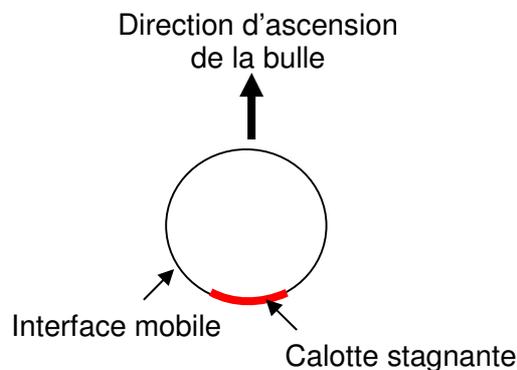


Figure 45. Bulle en ascension avec surface partiellement mobile

4.2.2 Zone d'écoulement laminaire

4.2.2.1 Mise en évidence expérimentale

Afin de bien appréhender les phénomènes collisionnels en régime d'écoulement laminaire, une maquette transparente à eau a été réalisée au laboratoire.

Cette maquette permet de maintenir une bulle en équilibre au sein d'un liquide ensemené en particules. A l'aide d'une caméra rapide, il est alors possible d'observer avec précision l'impact de particules sur la bulle.

- Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental (Figure 46) est composé d'une cuve parallélépipédique en plexiglas dont les dimensions internes sont $0,102 \times 0,021 \times 0,5$ m. Cette cuve, placée en position verticale, est complétée à chacune de ses extrémités, par un convergent rempli d'un filtre en mousse ayant pour objectif d'homogénéiser et de laminariser l'écoulement dans la cuve. Un circuit hydraulique relié à une pompe EHEIM 1262 permet de faire circuler le liquide au sein du dispositif.

Le liquide est ensemencé avec des particules de co-polyamide Schaetti Fix 5000 dont le diamètre est compris entre 60 et 200 microns. La densité du co-polyamide (1,15) étant très proche celle de l'eau, les effets inertiels n'ont que très peu d'influence sur le processus collisionnel.

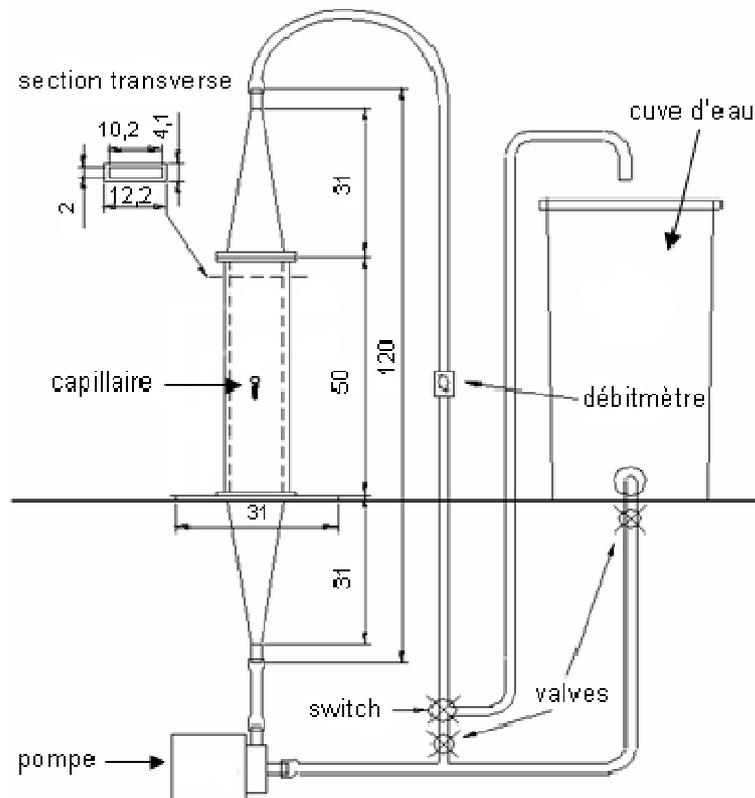


Figure 46. Schéma du dispositif expérimental (distances en cm).

Le débit de liquide est mesuré à l'aide d'un débitmètre Burket SE35 dont la gamme de mesure s'étend de 0,03 l/s à 3 l/s. Les caractéristiques de la pompe nous empêchent cependant de dépasser 0,75 l/s.

Les observations sont réalisées à l'aide d'une caméra rapide Vision Research PHANTOM v.5.1 monochrome équipée d'un capteur CMOS 1 méga-pixels

(Figure 47). En pleine résolution, la cadence maximale de prise de vue est de 1200 images/s, et elle peut monter à 95000 images/s en basse résolution. Un appareil photo Sony DSLR-A équipé d'un capteur 10 méga-pixels est également utilisé.

Au centre de la cuve, est positionné un capillaire en verre évasé, relié au réseau d'air comprimé du laboratoire. C'est au niveau de la partie évasée de ce capillaire qu'est formée la bulle que nous étudions (Figure 48). La forme évasée du capillaire permet de limiter au mieux la perturbation de l'écoulement induite par sa présence.



Figure 47. Caméra rapide PHANTOM v.5.1.

La taille de la bulle est directement conditionnée par la dimension de la partie évasée du capillaire, à laquelle la bulle est accrochée. Différentes tailles de capillaire ont ainsi été étudiées, comme on peut le voir sur la Figure 49. On constate que plus le diamètre du capillaire est grand, plus la bulle a tendance à se former à l'intérieur même du capillaire ; seule une petite calotte sphérique se présente alors à la surface du capillaire. Dans une telle configuration, le bord du capillaire est susceptible de perturber fortement l'écoulement. Lorsque le diamètre du capillaire est suffisamment petit, la bulle se forme beaucoup plus à l'extérieur du capillaire et celui-ci est entièrement positionné à l'arrière de la bulle ; il perturbe de ce fait moins l'écoulement. Il est en revanche plus difficile de stabiliser la bulle dans cette configuration.

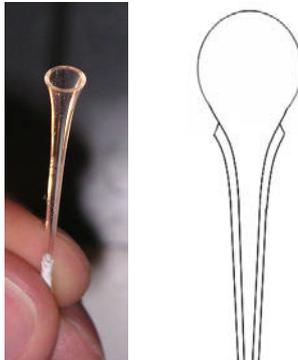


Figure 48. *Forme des capillaires utilisés et représentation schématique de la morphologie des bulles.*

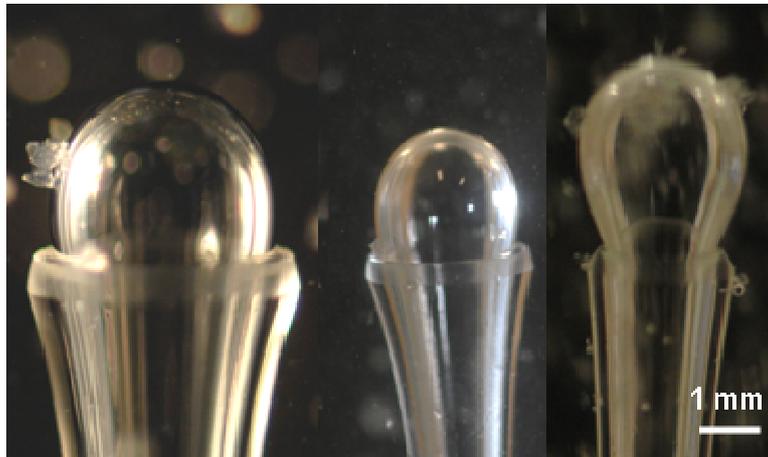


Figure 49. *Evolution de la taille et de la morphologie de la bulle pour différentes tailles de capillaire. De gauche à droite 4 mm, 2,5 mm et 2,1 mm (diamètres).*

➤ Collisions efficaces / inefficaces

Les caractéristiques des capillaires limitent la taille des bulles à 4 mm, ce qui, pour un fonctionnement de la pompe à plein régime, correspond à un nombre de Reynolds des bulles, Re_b , de l'ordre de 1400.

La bulle étant cependant fort peu stable pour un tel Re_b (difficultés à la maintenir au bout du capillaire), nous sommes contraints de travailler à des nombres de Reynolds plus faibles. Ces conditions sont relativement éloignées de celles rencontrées dans la cuve de flottation industrielle, où les bulles sont centimétriques et les nombres de Reynolds des bulles sont de l'ordre de quelques

milliers [11]. Toutefois, en amont de la bulle, la structure de l'écoulement est peu différente, pour un Reynolds de 1400 ou de 7500 (en revanche le sillage de la bulle est fortement différent dans ces deux situations). Les phénomènes de collision observés sur la maquette à eau sont donc qualitativement représentatifs de ce que l'on peut observer dans la cuve de flottation.

A l'aide de la caméra rapide, plusieurs situations sont mises en évidence :

- la trajectoire des inclusions est simplement déviée au voisinage de la bulle, et les inclusions la contournent,
- les inclusions touchent la surface de la bulle, glissent à sa surface et sont relarguées au voisinage de l'équateur (Figure 50),
- les inclusions touchent la surface de la bulle, glissent à sa surface et y adhèrent (Figure 51).

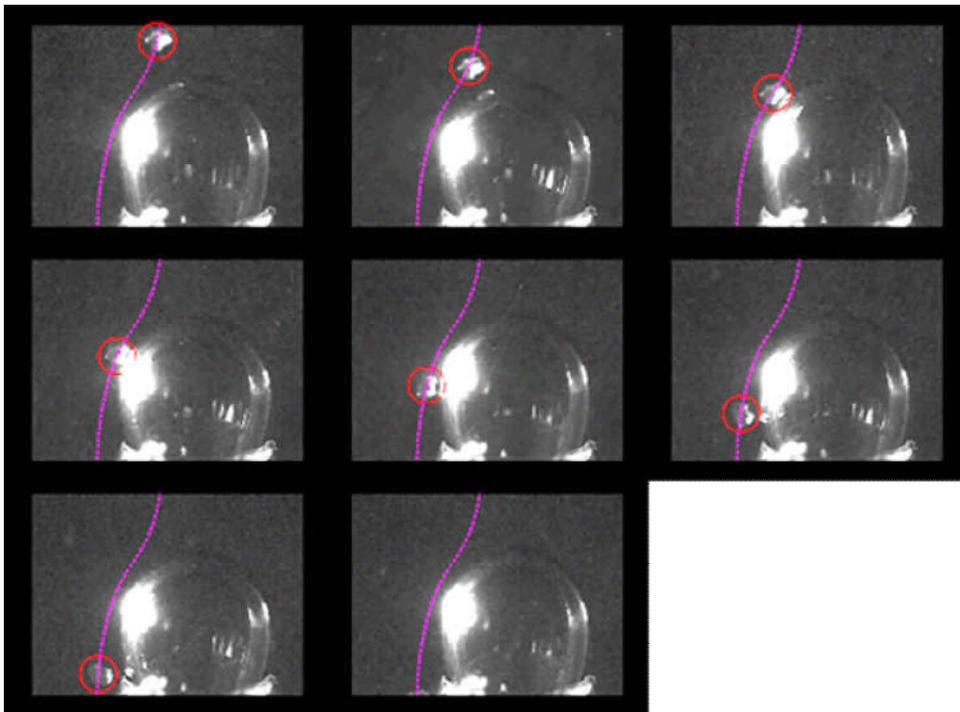


Figure 50. Séquence d'images d'une collision inefficace à l'aide de la caméra rapide ($Re_b \approx 200$). L'inclusion glisse à la surface de la bulle sans parvenir à y adhérer. En pointillés, la ligne de courant suivie par l'inclusion.

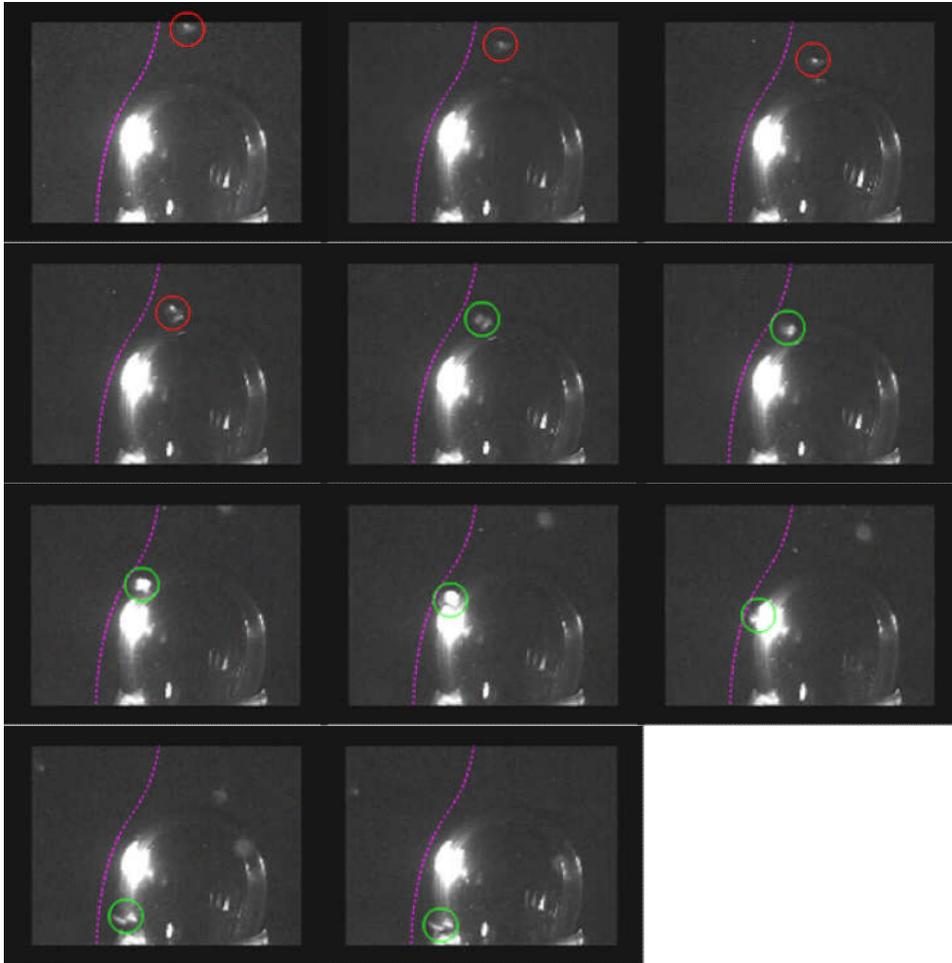


Figure 51. Séquence d'images d'une collision efficace à l'aide de la caméra rapide ($Re_b \approx 200$). La trajectoire de l'inclusion de la figure précédente est représentée pour servir de repère.

Ces observations sont très reproductibles et ont été effectuées pour l'ensemble de la gamme de Reynolds [200 ; 1450] accessible sur notre dispositif expérimental.

Deux aspects fondamentaux de la flottation sont ici mis en évidence. Tout d'abord, une inclusion ne peut être capturée par une bulle que si elle touche sa surface au cours de sa trajectoire. Ceci constitue l'aspect collisionnel, ou d'interception, de la flottation.

Cette condition n'est cependant pas suffisante pour que l'inclusion soit capturée par la bulle, puisque l'inclusion peut glisser à sa surface et être relarguée. Pour que l'inclusion puisse adhérer à la bulle, il faut qu'elle soit en contact

suffisamment longtemps avec la surface de la bulle, pour pouvoir drainer le film liquide qui la sépare du gaz et former un contact triphasé liquide-solide-gaz.

Pour qualifier ces deux aspects, on introduit les notions d'efficacité collisionnelle E_c et d'efficacité d'attachement E_A . Ces notions sont développées dans les paragraphes 4.2.2.2. et 4.2.2.3. suivants.

➤ Comportement des inclusions dans le sillage de la bulle

Si on inverse le sens d'écoulement du liquide (écoulement ascendant), il est alors possible d'étudier le comportement des inclusions dans le sillage de la bulle. Pour la gamme de Re_b étudié, le décollement de la couche limite est situé à l'avant de la bulle, comme cela est représenté sur la Figure 52. En aval de la bulle, se situe une région dépressionnaire turbulente.

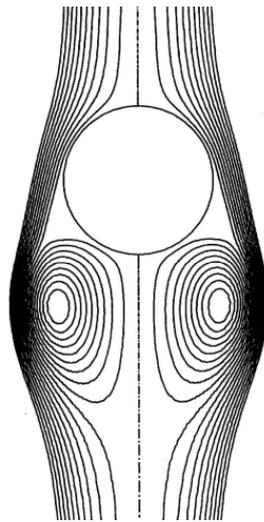


Figure 52. Structure de l'écoulement dans le sillage d'une bulle rigide pour $Re_b=4320$ [61].

Les observations réalisées avec la caméra rapide ont montré que certaines particules piégées dans le sillage effectuent plusieurs mouvements aléatoires avant de quitter cette région. Nous avons réalisés des calculs²⁵ avec le code de

²⁵ Calcul 2D de l'écoulement autour d'une sphère rigide (vitesse nulle à la paroi) réalisé pour un Re_b de 10^4 par une approche RANS avec un modèle de turbulence k- ω . La trajectoire des inclusions est calculée par une approche Lagrangienne *one way* de type « marche aléatoire ». $Q_{fp} = 1,58$ et $d_p/d_b = 0,0025$.

mécanique des fluides numérique FluentTM qui corroborent ces observations (Figure 53).

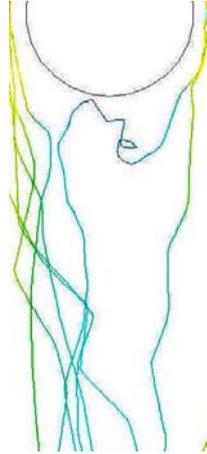


Figure 53. Trajectoires de particules dans le sillage d'une bulle. Simulation réalisée avec FluentTM pour $Re_b=10^4$.

Certaines particules peuvent également entrer en collision avec la calotte arrière de la bulle au cours de leur mouvement chaotique dans le sillage de la bulle, et restent attachée à cette dernière (observation caméra rapide).

Ces deux phénomènes contribuent à améliorer l'efficacité du procédé de flottation :

- lorsque les inclusions sont capturées dans le sillage de la bulle, elles sont drainées vers la surface du bain,
- l'attachement d'inclusions sur la surface avale de la bulle participe aussi au processus d'attachement par collision.

Ces deux phénomènes sont cependant très difficilement quantifiables et dépendent fortement des conditions d'écoulement, de la nature et de la taille des inclusions.

Dans l'état actuel, ces processus ne peuvent donc pas être intégrés à notre modèle.

➤ Comportement des inclusions à la surface de la bulle

Lors de l'étude du comportement des inclusions dans le sillage de la bulle, nous nous sommes également intéressés au lieu privilégié d'attachement des inclusions capturées.

Pour les conditions d'écoulement étudiées, $200 < Re_b < 1450$, les inclusions ne s'accumulent pas au pôle Sud de la bulle comme on pourrait le supposer. Expérimentalement, nous avons en effet observé une accumulation des inclusions sur une couronne, située dans la partie avale de la bulle.

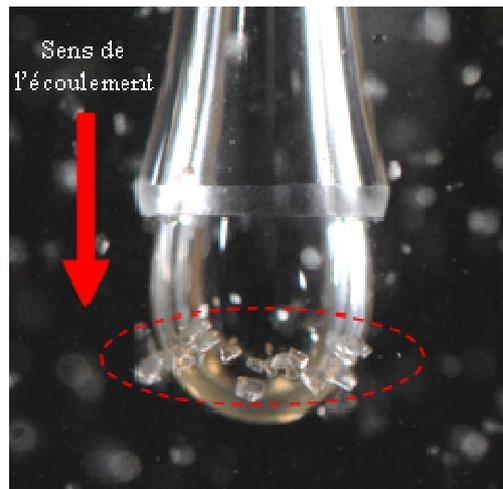


Figure 54. Mise en évidence d'une couronne formée par l'accumulation des inclusions. Bulle de 4 mm de diamètre et Re_b de 1400.

Des photographies ont été réalisées pour différentes situations (taille de bulle et vitesse du fluide) et la position de la couronne a été repérée par l'angle φ_{cour} défini sur la Figure 55.

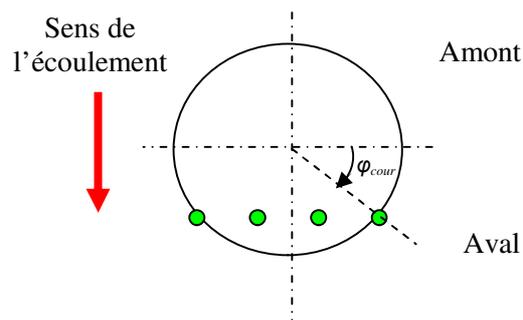


Figure 55. Positionnement de la couronne par l'angle φ_{cour} .

Pour chaque situation, entre 8 et 10 mesures ont été réalisées pour obtenir une valeur moyenne de φ_{cour} . Les bulles étant sujettes à des oscillations liées aux irrégularités de la pompe, les mesures sont relativement dispersées. Notons de

plus que les amas de particules étant parfois assez importants, la détermination de φ_{cour} est souvent délicate.

Les résultats, consignés dans le Tableau 12, ne permettent pas de corréler le nombre de Reynolds et la position de la couronne.

Sur l'ensemble des mesures réalisées, la valeur de φ_{cour} est toujours comprise entre 43° et 54°.

Tableau 12. Position de la couronne en fonction de Re_b (φ_{cour} en degrés).

Re_b	195	233	349	489	600	734	873	932	1398
φ_{cour}	48,7	44	49,7	44,5	49	48,2	48,2	43,2	52,4

Plusieurs hypothèses peuvent être avancées pour justifier la formation et le positionnement de cette couronne.

Pour une particule ponctuelle, le point de décollement correspondrait exactement à la zone de stabilité de la particule, c'est-à-dire sur la face amont de la bulle comme l'indique la Figure 56.

Les particules considérées ayant une dimension non-négligeable (jusqu'à 200 microns), leur zone de stabilité est décalée vers la face aval de la bulle, et correspond au lieu où le bilan des forces exercées sur la particule est nul.

Enfin, le dispositif capillaire modifie très certainement l'écoulement et doit conduire à un point de décollement de la couche limite plus en aval que celui proposé dans la littérature.

La gamme de Re_b étant relativement restreinte, le point de décollement de la couche limite reste sensiblement à la même position pour tous les essais, ce qui expliquerait la valeur approximativement constante de φ_{cour} mesurée.

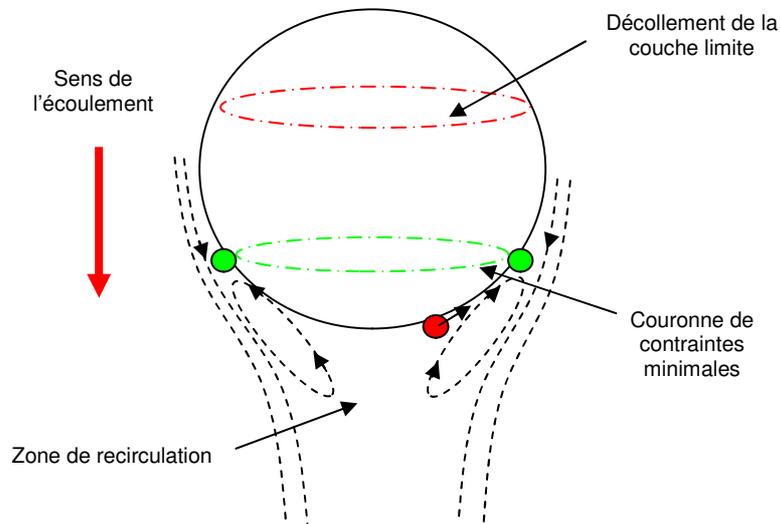


Figure 56. Représentation schématique de la zone de contraintes minimales, correspondant au décollement de la couche limite.

On peut également supposer que l'arrière de la bulle présente une calotte rendue rigide (immobile) par la présence d'une accumulation d'impuretés, comme évoquée au paragraphe 4.2.1. Selon cette hypothèse, les particules s'accumuleraient à la limite de cette calotte.

Cette hypothèse semble cependant moins probable, puisqu'on a pu observer des particules entrer en collision à l'arrière de la bulle, puis se déplacer jusqu'à la couronne, comme on peut le voir schématiquement sur la Figure 57.

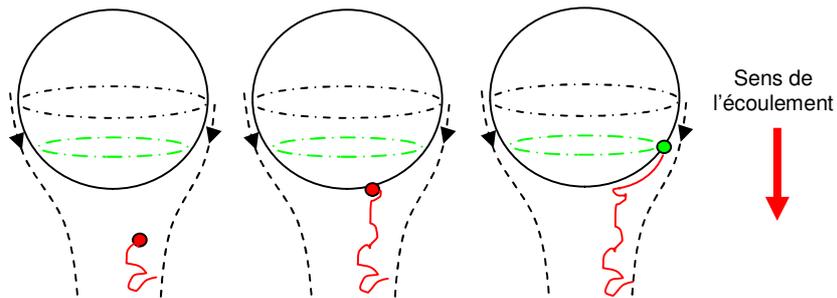


Figure 57. Représentation schématique de la trajectoire d'une particule entrant en collision à l'arrière de la bulle et rejoignant la couronne.

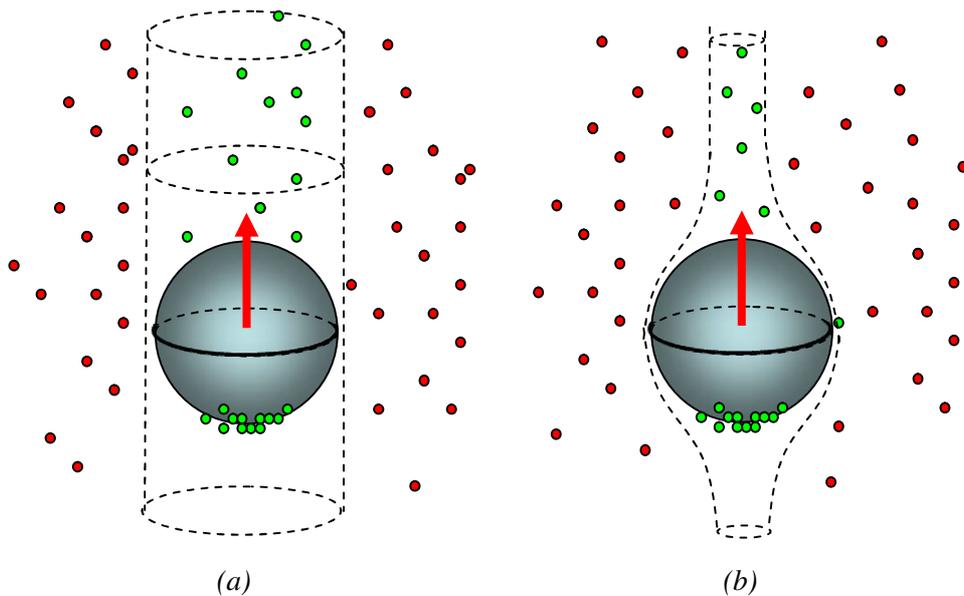
Ce type d'observation tend ainsi à montrer que l'arrière de la bulle est mobile.

4.2.2.2 Fréquence de flottation et efficacité de collision

➤ Modèle de Sutherland

Dans les zones de la cuve où l'écoulement est laminaire, ou très peu turbulent, il est possible d'aborder le processus de collision entre inclusions et bulles de façon purement mécanistique. Dans ce type d'approche, on considère que bulles et inclusions ont des vitesses connues²⁶ et que la fréquence de collision est tout simplement proportionnelle au volume de fluide balayé par la bulle par unité de temps.

La façon la plus simple, pour calculer le volume de fluide balayé par la bulle, consiste à considérer le tube de courant dont la section correspond à l'aire projetée de la sphère collisionnelle de rayon r_p+r_b , comme on peut le voir sur la Figure 58 (a).



(a) (b)
Figure 58. Tube de courant collisionnel sans (a) et avec (b) prise en compte de la géométrie des lignes de courant : toutes les particules à l'intérieur (en vert) entrent en collision avec la bulle, celles à l'extérieur (en rouge) ne touchent pas la bulle.

Cette approche est bien entendu simpliste, et il est nécessaire de la corriger afin de tenir compte de la géométrie des lignes de courant du fluide, comme on peut le voir sur la Figure 58 (b).

²⁶ On peut aussi qualifier cette approche de « déterministe ».

Avec l'hypothèse d'un écoulement potentiel autour de la bulle²⁷, qui est considérée comme une sphère solide, et en négligeant l'inertie des inclusions²⁸, Sutherland [62] a ainsi introduit dans le calcul de la fréquence de collision l'équation de la ligne de courant critique, pour laquelle une inclusion de taille donnée touche la bulle au niveau de l'équateur.

$$\psi = \frac{1}{2} U_{\infty} r_b^2 \sin^2 \theta \left[x^2 - \frac{1}{x} \right] \quad \text{éq. 122}$$

où U_{∞} est la vitesse du fluide loin de la bulle. La position de l'inclusion est exprimée en coordonnées polaires (R, θ) de la sphère (bulle) projetée, comme représentée sur la Figure 59. On note : $x = R/r_b$.

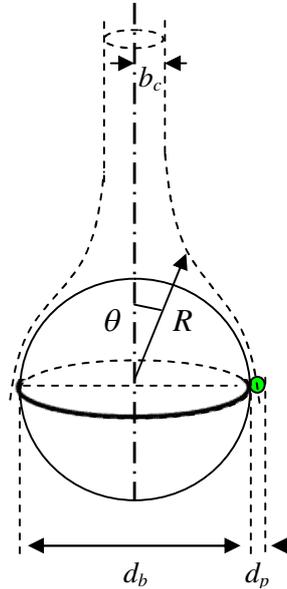


Figure 59. Représentation schématique de la ligne de courant critique.

Pour la ligne de courant critique on a donc, pour $\theta_c = 90^\circ$ ²⁹, $R = r_p + r_b$, soit :

$$\psi = \frac{1}{2} U_{\infty} r_b^2 \left[\frac{(r_p + r_b)^2}{r_b^2} - \frac{r_b}{r_p + r_b} \right] \quad \text{éq. 123}$$

²⁷ L'écoulement potentiel est un modèle théorique négligeant les effets de viscosité. Pour $Re_b \gg 1$, l'écoulement potentiel constitue une bonne approche.

²⁸ On suppose donc que les inclusions suivent parfaitement les lignes de courant.

²⁹ Si on prend en considération l'inertie des inclusions, $\theta_c < 90^\circ$.

Si on note b_c la distance séparant cette ligne de courant de l'axe de la bulle, à une grande distance en aval de celle-ci, alors on a $\sin \theta = b_c / R$, et l'équation 38 se réduit à :

$$b_c^2 = \frac{2\psi}{U_\infty} \quad \text{éq. 124}$$

Compte tenu du fait que $r_p \ll r_b$, on obtient, après simplification, et en combinant les équations 119 et 120, l'expression suivante, proposée par Sutherland :

$$b_c \approx \left(\frac{3d_b d_p}{4} \right)^{1/2} \quad \text{éq. 125}$$

La fréquence de collision avec les bulles s'écrit alors :

$$Z_{bp} = N_b N_p \pi b_c^2 U_{bf} = N_b N_p \pi \frac{3d_b d_p}{4} U_{bf} \quad \text{éq. 126}$$

En introduisant l'efficacité collisionnelle E_{c-Su} , définie comme le rapport entre le nombre de particules entrant en collision avec la bulle et le nombre de particules contenue dans le tube de courant dont la section correspond à l'aire projetée de la sphère collisionnelle³⁰, on peut réécrire la fréquence de collision sous la forme :

$$Z_{bp} = E_{c-Su} N_b N_p \pi r_b^2 U_{bf} \quad \text{éq. 127}$$

avec U_b , la vitesse relative bulle/fluide et :

$$E_{c-Su} = 3 \frac{d_p}{d_b} \quad \text{éq. 128}$$

Cette approche, réalisée par Sutherland a été complétée par Dukhin [63] pour prendre en considération les effets inertiels subis par l'inclusion dans la phase d'approche de la bulle (les inclusions quittent les lignes de courant au voisinage de la bulle). Le modèle résultant est connu dans la littérature sous le nom de *General Sutherland Equation* (GSE).

Son analyse se base sur le nombre de Stokes des inclusions au voisinage des bulles, défini comme le rapport entre le temps de relaxation de la particule et le temps de passage du fluide le long de la bulle :

³⁰ assimilée à la bulle puisque $r_b \gg r_p$

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} = \frac{\frac{2\rho_p r_p^2}{9\mu}}{\frac{r_b}{U}} = \frac{1}{9} \frac{\rho_p}{\rho_f} \left(\frac{r_p}{r_b}\right)^2 Re_b \quad \text{éq. 129}$$

Selon Dukhin, trois situations sont ainsi envisageables pour décrire les mécanismes de collision particules-bulles :

- si $St \gg St_{cr}$ alors les effets inertiels sont prédominants dans le processus d'attachement des inclusions aux bulles – l'efficacité de collision est alors fonction de St ,
- si $St \ll St_{cr}$ alors les effets inertiels jouent un rôle négligeable et les inclusions suivent les lignes de courant au voisinage de la bulle – l'efficacité de collision est alors fonction de r_p , comme on l'a vu dans le modèle de Sutherland,
- si $St \approx St_{cr}$ alors les deux mécanismes d'approche doivent être pris en considération et l'efficacité de collision est alors fonction de r_p et de St .

En pratique la valeur de 0,7 est retenue, dans la littérature, pour St_{cr} .

Comme on peut le voir sur la Figure 60, les nombres de Stokes atteints dans le cadre de notre étude sont toujours inférieurs à St_{cr} et, dans la plupart des cas, on se situe dans la gamme $St \ll St_{cr}$.

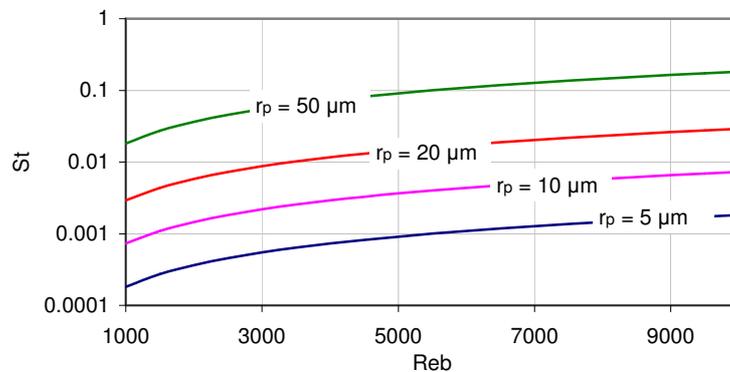


Figure 60. Nombre de Stokes d'une particule d'alumine approchant une bulle de 1 cm de diamètre, pour différentes valeurs de Re_b .

Les effets inertiels au voisinage de la bulle n'ont donc pas, dans notre situation, d'influence majeure sur l'efficacité de collision. Ils ne seront donc pas pris en considération dans notre modèle.

➤ Extension du modèle de Sutherland aux Re_b intermédiaires

Comme on l'a vu, le modèle de Sutherland se base sur l'hypothèse d'un écoulement potentiel au voisinage de la bulle, ce qui schématise assez grossièrement l'écoulement réel.

Afin de rendre le modèle de Sutherland plus général et applicable dans une gamme de Re_b plus étendue, Yoon et Luttrell [64] ont proposé de remplacer la fonction courant employée par Sutherland, décrivant un écoulement potentiel, par une fonction plus générale, en combinant écoulement de Stokes ($Re_b \rightarrow 0$) et écoulement potentiel ($Re_b \gg 1$). L'expression de E_c obtenue est ainsi applicable pour des Re_b intermédiaires :

$$E_{c-YL} = (d_p/d_b)^2 \left(\frac{3}{2} + \frac{4Re_b^{0,72}}{15} \right) \quad \text{éq. 130}$$

Lorsque Re_b tend vers zéro, cette expression tend vers l'efficacité correspondant au régime de Stokes (Figure 61). Lorsque Re_b augmente les valeurs prises par E_c se rapprochent de celle calculée par l'approche de Sutherland. Lorsque Re_b prend des valeurs très grandes, l'expression de Yoon & Luttrell diverge et prend des valeurs supérieures au modèle de Sutherland ; pour de telles valeurs de Re_b , l'expression de Yoon & Luttrell n'est donc plus valide, et il convient d'adopter l'expression de Sutherland.

C'est précisément cette démarche que nous avons retenue pour notre modèle.

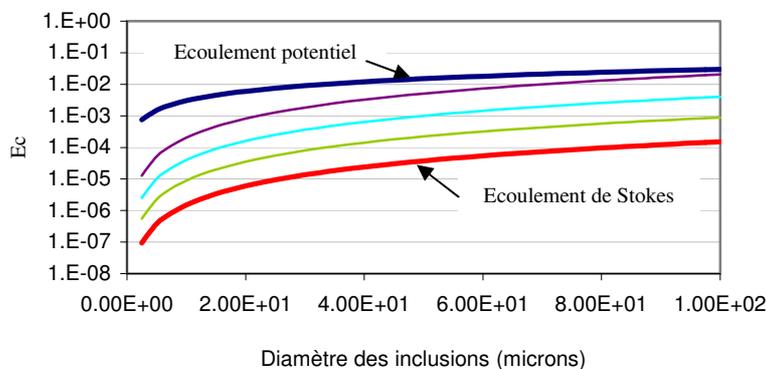


Figure 61. Comparaison de l'efficacité de collision calculée pour un écoulement potentiel, un écoulement de Stokes et un régime intermédiaire (Yoon & Luttrell).
 $Re_b = 100$ (-), 1000 (-), 10000 (-).

Notons que de nombreuses autres approches, faisant appel à des descriptions plus fines de l'écoulement au voisinage de la bulle, pour des Reynolds plus faibles, sont disponibles dans la littérature. Une revue détaillée leur est consacrée

dans [65]. Parmi ces approches, on retiendra notamment celle de Nguyen [66], proposant une description très complète des collisions particules-bulles pour des Re_b intermédiaires inférieurs à 500.

4.2.2.3 Efficacité d'attachement

➤ Définition

La démarche proposée au paragraphe précédent considère que les collisions inclusion-bulle sont efficaces à 100 %. En d'autres termes, toute inclusion touchant la bulle s'y attache instantanément.

En réalité, comme on l'a montré expérimentalement au paragraphe 4.2.2.1, pour qu'une inclusion s'attache à une bulle, il est nécessaire qu'elle parvienne à rompre le film liquide qui la sépare du gaz, afin de former un contact triphasé solide-liquide-gaz.

Lorsqu'une inclusion entre en collision avec une bulle, elle va ainsi glisser à sa surface pendant un temps t_{sl} . Si ce temps de glissement est suffisamment important, l'inclusion parvient à rompre le film liquide et à former un contact triphasé.

Le temps nécessaire à l'attachement de l'inclusion à la bulle est connu dans la littérature sous le terme de temps d'induction, noté t_I .

Il se décompose en trois termes [67] :

- le temps nécessaire au drainage du film liquide jusqu'à l'épaisseur critique de rupture,
- le temps nécessaire à la rupture du film et à la formation d'un contact triphasé,
- le temps nécessaire à l'expansion de la ligne de contact triphasé et à la formation d'un agrégat stable.

Dans la pratique la phase de drainage est beaucoup plus longue que les phases de rupture et d'expansion, et on peut assimiler t_I au temps de drainage.

Ainsi, l'inclusion s'attache à la bulle si :

$$t_{sl} > t_I \quad \text{éq. 131}$$

Ces temps de glissement et d'induction correspondant à des distances parcourues sur la bulle, il est possible de les relier à des angles d'impaction, notés respectivement θ_o et θ_A (notations définies sur la Figure 62).

Avec ces notations, la condition d'attachement peut s'écrire de la façon suivante :

$$\theta_o < \theta_A$$

éq. 132

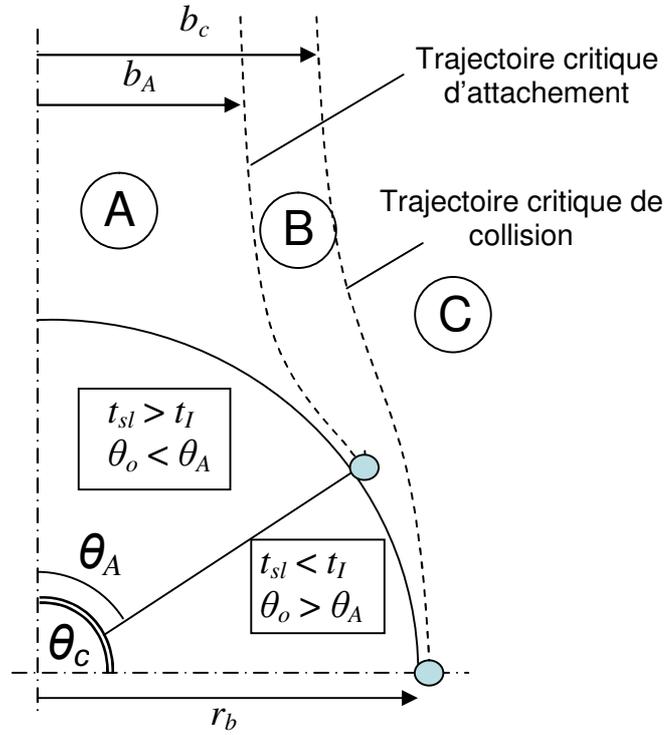


Figure 62. Notions de trajectoire critique de collision et de trajectoire critique d'attachement. Zone A : zone de collision efficace (attachement) ; zone B : zone de collision inefficace ; zone C : zone sans collision.

➤ Modèle de Sutherland

Il est possible de définir l'efficacité d'attachement E_{A-Su} , comme le rapport entre le nombre d'inclusions s'attachant à la bulle sur le nombre d'inclusions entrant en collision avec la bulle :

$$E_{A-Su} = \frac{\pi b_A^2 U_{bf}}{\pi b_c^2 U_{bf}} = \left(\frac{b_A}{b_c} \right)^2 \quad \text{éq. 133}$$

où b_A représente la distance séparant la ligne de courant critique d'attachement de l'axe de la bulle, loin de celle-ci.

En employant la même démarche qu'au paragraphe 4.2.2.2, on peut écrire :

$$\left(\frac{b_A}{r_b}\right)^2 = \sin^2 \theta_A \left\{ \left(\frac{r_p + r_b}{r_b}\right)^2 - \frac{r_b}{r_b + r_p} \right\} \quad \text{éq. 134}$$

Or on a vu que, pour la trajectoire critique de collision (équation 119 et 120) :

$$\left(\frac{b_c}{r_b}\right)^2 = \left\{ \left(\frac{r_p + r_b}{r_b}\right)^2 - \frac{r_b}{r_b + r_p} \right\} \quad \text{éq. 135}$$

On peut donc en déduire :

$$E_{A-Su} = \sin^2 \theta_A \quad \text{éq. 136}$$

Il reste alors à calculer l'angle critique θ_A .

Le temps de contact se calcule de la façon suivante [49]:

$$t_{sl} = (r_p + r_b) \int_{\frac{\pi}{2} - \theta_o}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{u_{p\theta}} \quad \text{éq. 137}$$

où $u_{p\theta}$ désigne la vitesse tangentielle des inclusions au voisinage de la bulle.

Considérant un écoulement potentiel et supposant, comme précédemment, que les inclusions suivent les lignes de courant, la vitesse des inclusions en coordonnées polaires est donnée par :

$$\begin{cases} u_{pr} = -U_{bf} \left(1 - \frac{1}{R^3}\right) \cos \theta \\ u_{p\theta} = U_{bf} \left(1 + \frac{1}{2R^3}\right) \sin \theta \end{cases} \quad \text{éq. 138}$$

Pour $R = r_p + r_b$ on obtient ainsi :

$$t_{sl} = \frac{(r_p + r_b)}{U_{bf} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{r_b}{r_p + r_b}\right)^3 \right\}} \ln \left(\cot \frac{\theta_o}{2} \right) \quad \text{éq. 139}$$

La condition limite d'attachement étant donnée par $\theta_o = \theta_A$, on a aussi $t_{sl} = t_I$.
Donc pour la condition limite d'attachement, on peut écrire :

$$t_I = \frac{(r_p + r_b)}{U_{bf} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{r_b}{r_p + r_b} \right)^3 \right\}} \ln \left(\cot \frac{\theta_A}{2} \right) \quad \text{éq. 140}$$

En combinant les équations 131 et 136, on peut alors éliminer θ_A et écrire :

$$E_{A-Su} = \operatorname{sech}^2 \left(\frac{3t_I U_{bf}}{2r_b} \right) \quad \text{éq. 141}$$

avec :

$$\operatorname{sech} x \equiv \frac{1}{\cosh x} \quad \text{éq. 142}$$

➤ Modèle de Yoon et Luttrell

Une démarche similaire peut être effectuée avec l'écoulement intermédiaire de Yoon & Luttrell. Elle conduit à :

$$t_{sl} = \frac{(r_p + r_b)}{U_{bf} \left\{ \frac{3}{2} + \frac{4}{15} Re_b^{0.72} \right\}} \ln \left(\cot \frac{\theta_o}{2} \right) \quad \text{éq. 143}$$

$$E_{A-YL} = \operatorname{sech}^2 \left(\frac{t_I U_{bf} (45 + 8Re_b^{0.72})}{30r_b (r_b/r_p + 1)} \right) \quad \text{éq. 144}$$

➤ Temps d'induction

Le temps d'induction est en général accessible par l'expérimentation, ce qui est rendu très délicat avec l'aluminium liquide. Schulze, dans [68], a établi une expression générale permettant le calcul de cette grandeur :

$$t_I = \frac{3}{64} \mu \frac{\alpha_d^2}{K\sigma h_{cr}^2} d_p^3 \quad \text{éq. 145}$$

où K est un facteur sans dimension dont la valeur est prise égale à 4, et :

$$\alpha_d = \arccos \left(1 - 1,02 \left(\frac{\pi d_p \rho_p U_{bf}^2}{12\sigma} \right)^{1/2} \right) \quad \text{éq. 146}$$

L'épaisseur critique, h_{cr} , pour laquelle la rupture du film liquide se produit et un contact triphasé est établi, est calculée à l'aide de l'expression suivante, proposée par Zhang & Taniguchi [69] et utilisée par Zhang [70] dans le cas de l'acier liquide :

$$h_{cr} = 2,33 \times 10^{-8} [1000\sigma(1 - \cos\theta_{contact})]^{0,16} \quad (\text{unités S.I.}) \quad \text{éq. 147}$$

Considérant une tension de surface de 0,86 N/m et un angle de contact de 90°, on obtient une valeur de h_{cr} voisine de 70 nm.

➤ Conclusion

On constate que pour une bulle centimétrique, et dans la gamme de Re_b considérée, l'efficacité d'attachement calculée est voisine de l'unité (Tableau 13).

Tableau 13. Efficacité d'attachement calculée avec les modèles de Sutherland et de Yoon & Lutrell pour différentes tailles d'inclusions et conditions d'écoulement (bulle centimétrique).

dp (µm)	Ea Sutherland		Ea Yoon & Lutrell	
	Reb=1000	Reb=10000	Reb=1000	Reb=10000
10	1	1	1	1
30	1	0.99999992	1	0.99999998
50	0.99999997	0.999997	1	0.999998
70	0.9999997	0.99997	0.99999999	0.99997
90	0.999998	0.9998	0.9999999	0.9997
110	0.999993	0.9993	0.9999994	0.998
130	0.99997	0.997	0.999997	0.993
150	0.99994	0.994	0.999991	0.97
170	0.9998	0.98	0.99997	0.93

Dans ce calcul d'efficacité, on met en rapport le temps de glissement de l'inclusion à la surface de la bulle avec le temps nécessaire à la rupture du film liquide.

Dans la réalité, avant de glisser à la surface de la bulle, l'inclusion entre en collision avec celle-ci. Cette collision entraîne une déformation locale de la

surface de la bulle pendant une durée $t_{contact}$, qui peut être calculée de la façon suivante [70]:

$$t_{contact} = \pi \left(\frac{d_p^3 \rho_p}{12\sigma} \right)^{1/2} \quad \text{éq. 148}$$

Si ce temps de contact est supérieur au temps d'induction, alors le film liquide est rompu avant même que l'inclusion ne commence à glisser.

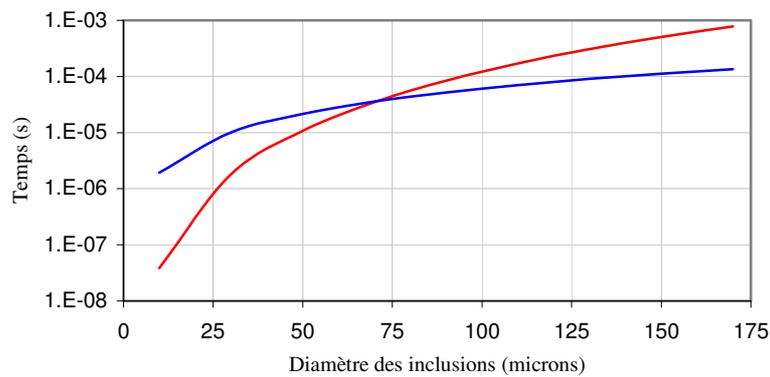


Figure 63. Comparaison des temps de contact (—) et des temps d'induction (—) pour $Re_b=1000$.

Comme on peut le voir sur la Figure 63, le calcul de l'efficacité d'attachement, pour $Re_b=1000$, n'a ainsi lieu d'être que pour des inclusions de diamètre supérieur à 75 μm .

En conclusion, l'efficacité d'attachement des inclusions aux bulles est vraisemblablement très élevée en raison de la faible mouillabilité des inclusions. Celle-ci est ainsi prise égale l'unité dans notre modèle.

4.2.3 Zone d'écoulement turbulent

4.2.3.1 Introduction

L'étude réalisée au paragraphe précédent concerne l'attachement des inclusions aux bulles dans une zone où l'écoulement du fluide est laminaire. Dans une cuve de flottation agitée, une telle approche est impossible, l'écoulement étant turbulent dans la majeure partie de la cuve.

Dans de très nombreuses études, les processus de collisions inclusion-bulle sont décrits de la même façon que les processus de collision inclusion-inclusion. Suivant les cas, on retrouve ainsi les modèles de Abrahamson et de Saffman & Turner pour décrire ces processus.

Comme on l'a vu précédemment, ces modèles sont très restrictifs quant à leurs conditions d'applications. De plus, employer ces modèles revient à supposer que le processus collisionnel est purement stochastique, ce qui à l'évidence, est une approche très réductrice, puisque la vitesse moyenne de glissement de la bulle doit intervenir.

Afin de décrire au mieux le processus de flottation il convient de prendre en considération à la fois les effets stochastiques, liés à la turbulence, et les effets déterministes, abordés dans le paragraphe précédent (Figure 64).

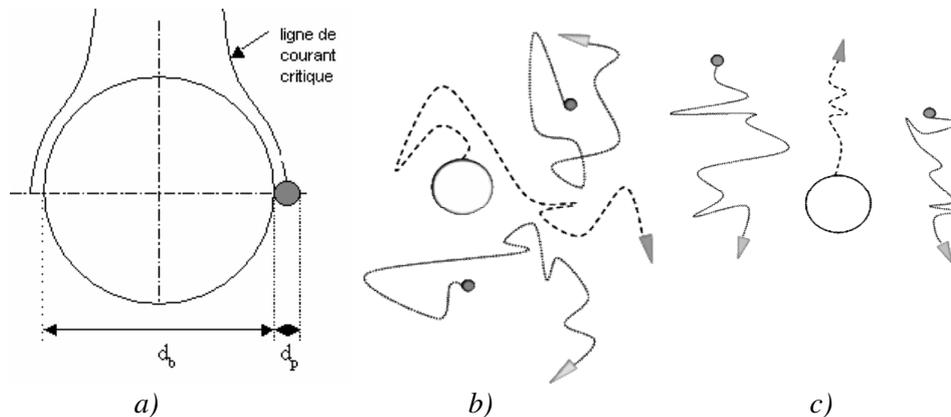


Figure 64. Représentation schématique des approches déterministe (a), stochastique (b) et combinée (c).

Si les études concernant les processus de flottation déterministes et stochastiques sont nombreuses, les études combinant les deux processus sont rares.

Abrahamson [53], et plus récemment Bloom & Heindel [26], ont tenté d'intégrer les vitesses déterministes des bulles et des inclusions dans une approche de type théorie cinétique des gaz. Kostoglou [71] a cependant mis en évidence une erreur dans le calcul analytique de la fréquence de flottation réalisé par ces auteurs.

De plus, les efficacités de collision et d'attachement employées par Bloom & Heindel ne font référence qu'aux vitesses déterministes des bulles et des inclusions, même dans le cas où les processus de collision sont dominés par la turbulence.

4.2.3.2 Démarche combinée de Kostoglou

- Prise en considération des effets stochastiques et déterministes

Afin d'établir un modèle plus complet, Kostoglou [71] propose de commencer par unifier les modèles de Saffman & Turner et de Abrahamson au sein d'un même modèle.

Dans le paragraphe 4.1.2, nous avons montré comment, à partir d'un raisonnement sur le flux de particules pénétrant la sphère collisionnelle, Saffman & Turner ont établi une expression pour calculer la fréquence de collision. Leur approche fait intervenir la vitesse fluctuante relative bulle-inclusion w' .

Le modèle de Abrahamson, appliqué à l'interaction bulles-inclusions est basé sur une approche de type théorie cinétique des gaz, et fait intervenir les vitesses fluctuantes absolues des inclusions u'_p et des bulles U'_b , supposées indépendantes.

Kostoglou, dans son approche, s'intéresse aux vitesses fluctuantes relatives inclusions-fluide u'_{pf} et bulles-fluide U'_{bf} , et à la vitesse fluctuante relative bulle-inclusion w' .

Considérant que les trois vitesses u'_{pf} , U'_{bf} et w' traduisent des processus indépendants, et en admettant une distribution normale pour chacune d'elles, il est possible de les réunir dans une même approche de type théorie cinétique des gaz.

L'expression de la fréquence de collision inclusion-bulle établie par Kostoglou, selon ce principe, est ainsi la suivante :

$$Z_{bp} = \frac{N_p N_b d_{pb}^2}{(2\pi)^{9/2} \left(\sqrt{u_{pf}^{\prime 2}} \sqrt{U_{bf}^{\prime 2}} \sqrt{w^{\prime 2}} \right)^3} \int C$$

$$\exp \left(- \frac{u_{pf,x}^{\prime 2} + u_{pf,y}^{\prime 2} + u_{pf,z}^{\prime 2}}{2 u_{pf}^{\prime 2}} - \frac{U_{bf,x}^{\prime 2} + U_{bf,y}^{\prime 2} + U_{bf,z}^{\prime 2}}{2 U_{bf}^{\prime 2}} - \frac{(w_x^{\prime 2} + w_y^{\prime 2} + w_z^{\prime 2})}{2 w^{\prime 2}} \right) \quad \text{éq. 149}$$

$$du'_{pf,x} du'_{pf,y} du'_{pf,z} dU'_{bf,x} dU'_{bf,y} dU'_{bf,z} dw'_x dw'_y dw'_z$$

Dans cette expression C désigne comme précédemment la norme de la vitesse relative totale entre les bulles et les inclusions, définie par :

$$C = \left[\left(U'_{bf,x} - u'_{pf,x} + w'_x \right)^2 + \left(U'_{bf,y} - u'_{pf,y} + w'_y \right)^2 + \left(U'_{bf,z} - u'_{pf,z} + w'_z \right)^2 \right]^{1/2} \quad \text{éq. 150}$$

A ce stade, Kostoglou propose d'intégrer dans l'équation précédente les processus déterministes, en prenant en considération la vitesse moyenne de glissement des bulles U_{bf} :

$$C = \left[\left(U'_{bf,x} + U_{bxf} - u'_{pf,x} + w'_x \right)^2 + \left(U'_{bf,y} + U_{bfy} - u'_{pf,y} + w'_y \right)^2 + \left(U'_{bf,z} + U_{bfz} - u'_{pf,z} + w'_z \right)^2 \right]^{1/2} \quad \text{éq. 151}$$

Le modèle résultant combine donc les différents mécanismes collisionnels liés à la turbulence et le mécanisme collisionnel déterministe lié à l'ascension de la bulle au sein du liquide.

➤ Calculs de U_{bf} , $\sqrt{U_{bf}^{\prime 2}}$, $\sqrt{U_{pf}^{\prime 2}}$ et de $\sqrt{w^{\prime 2}}$

La vitesse de glissement des bulles est calculée à partir des résultats du calcul de l'écoulement métal liquide-bulles réalisé avec le code de mécanique des fluides numérique FluentTM (voir chapitre 3).

L'écart-type de la vitesse fluctuante relative des bulles par rapport au fluide

$\sqrt{U_{bf}^{\prime 2}}$ est calculé à partir de l'expression suivante :

$$\sqrt{U_{bf}^{\prime 2}} = \left[\left(\frac{0,83\varepsilon^{4/9} r_b^{7/9}}{\nu^{1/3}} \left(\frac{\rho_f - \rho_b}{\rho_f} \right)^{2/3} \right)^{-1} + \left(\frac{2\varepsilon r_b^3}{135\nu^2} \left(\frac{\rho_f - \rho_b}{\rho_f} \right) \right)^{-1} \right]^{-1} \quad \text{éq. 152}$$

Cette expression, proposée par Kostoglou, est la moyenne harmonique des expressions de $\sqrt{U_{bf}^{\prime 2}}$ pour les régimes inertiels et de dissipation visqueuse de la turbulence.

En ce qui concerne la vitesse fluctuante relative des inclusions par rapport au fluide, on adopte comme précédemment l'expression :

$$\sqrt{\overline{u_{pf}^2}} = \frac{2 \varepsilon r_p^3}{135 \nu^2} \left(\frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_f} \right)$$

L'écart type de la vitesse fluctuante relative bulle-inclusion aux petites échelles de turbulence $\sqrt{w^2}$ est donné par :

$$\sqrt{w^2} = (r_p + r_b) \left(\frac{\varepsilon}{15\nu} \right)^{1/2} \quad \text{si } (r_p + r_b) \leq \eta_k \quad \text{éq. 153}$$

et :

$$\sqrt{w^2} = (r_p + r_b)^{1/3} \varepsilon^{1/3} \left(\frac{1}{15} \right)^{1/2} \quad \text{si } (r_p + r_b) > \eta_k \quad \text{éq. 154}$$

En pratique, les bulles étant de taille importante dans le cas de l'aluminium, on se trouve toujours dans la situation où le diamètre collisionnel est supérieur à l'échelle de Kolmogorov ; c'est donc la dernière expression que nous retiendrons pour le calcul de $\sqrt{w^2}$.

➤ Efficacité de collision et d'attachement

A ce stade, l'expression établie pour le calcul de la fréquence de collision inclusion-bulle n'intègre pas les efficacités de collision et d'attachement. Dans les paragraphes 4.2.2.2 et 4.2.2.3, nous avons présenté la démarche employée pour déterminer les expressions de ces efficacités.

Ces expressions font intervenir la vitesse relative des bulles par rapport au fluide.

Dans le calcul de la fréquence de collision inclusion-bulle, présenté précédemment, une intégration est réalisée sur l'ensemble des vitesses possibles. En incluant E_a et E_c directement dans cette intégrale, on évalue, en chaque point d'intégration, l'efficacité correspondante.

L'expression retenue pour le calcul de la fréquence de flottation, comme proposée par Kostoglou, est ainsi :

$$Z_{bp} = \frac{N_p N_b d_{pb}^2}{(2\pi)^{9/2} \left(\sqrt{u_{pf}^{\prime 2}} \sqrt{U_{bf}^{\prime 2}} \sqrt{w_b^{\prime 2}} \right)^3} \int \int \int \int \int \int \int \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} EC$$

$$\exp \left(- \frac{u_{pf,x}^{\prime 2} + u_{pf,y}^{\prime 2} + u_{pf,z}^{\prime 2}}{2 u_{pf}^{\prime 2}} - \frac{U_{bf,x}^{\prime 2} + U_{bf,y}^{\prime 2} + U_{bf,z}^{\prime 2}}{2 U_{bf}^{\prime 2}} - \frac{(w_x^{\prime 2} + w_y^{\prime 2} + w_z^{\prime 2})}{2 w^{\prime 2}} \right) \quad \text{éq. 155}$$

$$du'_{pf,x} \, du'_{pf,y} \, du'_{pf,z} \, dU'_{bf,x} \, dU'_{bf,y} \, dU'_{bf,z} \, dw'_x \, dw'_y \, dw'_z$$

où :

$$E = E_c \left(\left[(U'_{bf,x} + U_{bx})^2 + (U'_{bf,y} + U_{by})^2 + (U'_{bf,z} + U_{bz})^2 \right]^{1/2} \right. \\ \left. \left[u_{pf,x}^{\prime 2} + u_{pf,y}^{\prime 2} + u_{pf,z}^{\prime 2} \right]^{1/2} \right) \times \quad \text{éq. 156}$$

$$E_a \left(\left[(U'_{bf,x} + U_{bx})^2 + (U'_{bf,y} + U_{by})^2 + (U'_{bf,z} + U_{bz})^2 \right]^{1/2} \right. \\ \left. \left[u_{pf,x}^{\prime 2} + u_{pf,y}^{\prime 2} + u_{pf,z}^{\prime 2} \right]^{1/2} \right)$$

Rappelons que dans le cadre de notre modèle, E_a est prise égale à l'unité.

➤ Méthode numérique

L'évaluation numérique de l'intégrale précédente, à 9 dimensions, est relativement lourde d'un point de vue temps de calcul.

Afin d'alléger ce calcul, Kostoglou propose d'autoriser une certaine corrélation entre la vitesse fluctuante relative des bulles U'_{bf} et la vitesse fluctuante relative inclusion-bulle w' au voisinage de ces dernières.

On introduit ainsi un nouveau terme, noté $\overline{U_{cb}^{\prime 2}}$, définit par :

$$\overline{U_{cb}^{\prime 2}} = \sqrt{\left(\overline{U_{bf}^{\prime 2}} + \overline{w^{\prime 2}} \right)} \quad \text{éq. 157}$$

Une telle démarche peut bien entendu induire une erreur d'autant plus importante que les valeurs de $\overline{U_{bf}^{\prime 2}}$ et de $\overline{w^{\prime 2}}$ sont proches. Cependant pour des bulles de taille importante, comme c'est le cas dans notre étude, les valeurs de $\overline{U_{bf}^{\prime 2}}$ sont importantes alors que celles de $\overline{w^{\prime 2}}$ sont très petites, comme on peut le voir sur la Figure 65. L'erreur engendrée par l'introduction de U_{cb} est donc minime.

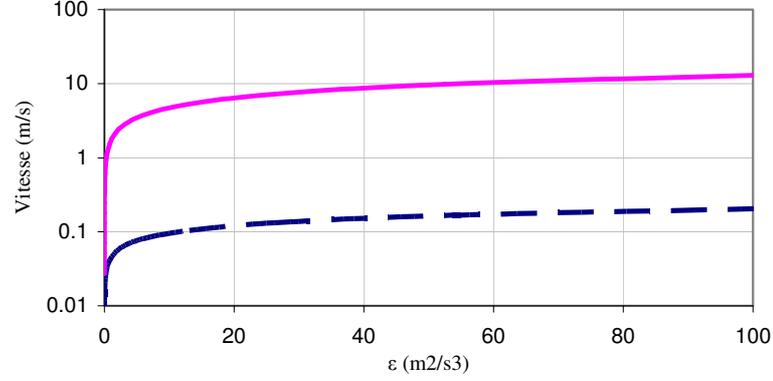


Figure 65. Comparaison entre $\sqrt{U_{bf}'^2}$ (—) et $\sqrt{w'^2}$ (---) pour des bulles centimétriques et des inclusions de $10 \mu\text{m}$ de diamètre.

On est ainsi ramené à une intégrale à 6 dimensions.

L'évaluation numérique de cette dernière peut alors être effectuée à l'aide d'une décomposition d'ordre N_H sur une base de polynômes de Hermite, qui conduit à l'expression suivante :

$$Z_{bp} = N_p N_b \frac{(r_p + r_b)^2}{\pi} \times \sum_{i=1}^{N_H} \sum_{j=1}^{N_H} \sum_{k=1}^{N_H} \sum_{l=1}^{N_H} \sum_{m=1}^{N_H} \sum_{n=1}^{N_H} W_i W_j W_k W_l W_m W_n E_{c,ijklmn} C_{ijklmn} \quad \text{éq. 158}$$

avec

$$E_{c,ijklmn} = E_c \left[\left[\left(\sqrt{2} h_i \sqrt{U_{cb}'^2} + U_{bx} \right)^2 + \left(\sqrt{2} h_j \sqrt{U_{cb}'^2} + U_{by} \right)^2 + \left(\sqrt{2} h_k \sqrt{U_{cb}'^2} + U_{bz} \right)^2 \right]^{1/2} \left[2h_l^2 \overline{u_{pf}'^2} + 2h_m^2 \overline{u_{pf}'^2} + 2h_n^2 \overline{u_{pf}'^2} \right]^{1/2} \right] \quad \text{éq. 159}$$

et :

$$C_{ijklmn} = \left[\left(\sqrt{2}h_i \sqrt{U_{cb}'^2} + U_{bx} - \sqrt{2}h_j \sqrt{u_{pf}'^2} \right)^2 + \right. \\
 \left. \left(\sqrt{2}h_k \sqrt{U_{cb}'^2} + U_{by} - \sqrt{2}h_l \sqrt{u_{pf}'^2} \right)^2 + \right. \\
 \left. \left(\sqrt{2}h_m \sqrt{U_{cb}'^2} + U_{bz} - \sqrt{2}h_n \sqrt{u_{pf}'^2} \right)^2 \right]^{1/2} \quad \text{éq. 160}$$

Dans ces expressions, les valeurs des termes h_x et W_x sont respectivement les points et les poids d'intégration de Hermite. Ceux-ci sont directement lus, à partir d'un fichier texte, lors de l'exécution du code (annexe 2). L'ordre de la décomposition influence fortement le temps de calcul, c'est pourquoi, pour nos calculs, nous nous limiterons à $N_H = 5$ dans nos calculs – Kostoglou ayant montré qu'un tel ordre fournit des résultats de précision satisfaisante.

4.3 Influence du chlore sur l'efficacité de la flottation

4.3.1 Introduction

Depuis des dizaines d'années, du chlore est additionné à l'argon injecté dans le bain liquide, lors du procédé de flottation. Le rôle premier de ce gaz est d'accélérer la cinétique d'élimination de l'hydrogène dissous dans le métal ainsi que des divers alcalins. L'adjonction de chlore au gaz injecté dans le métal a également pour effet d'améliorer de façon très significative l'élimination des inclusions du métal. Selon certains auteurs, la flottation serait même totalement inefficace en absence de chlore [72, 73].

Même si le chlore est ainsi systématiquement utilisé lors de la flottation de l'aluminium, la compréhension des processus physiques justifiant son emploi reste encore très approximative.

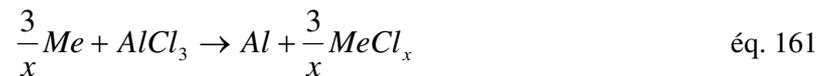
4.3.1.1 Aspects thermodynamiques

Dans leurs études sur la purification de l'aluminium en phase liquide, Sigworth & Engh [74] et Saevarsdottir, Sigfusson & Gudmundsson [75, 76] dressent une revue détaillée des équilibres thermochimiques et des grandeurs associées aux interactions entre le chlore et les différents éléments en présence au sein du bain d'aluminium liquide (Tableau 14).

Tableau 14. *Eléments présents dans un aluminium de qualité commerciale non purifié, et chlorures susceptibles d'être formés (énergies de Gibbs à 1000 K) [75]*

Elément	Concentration (ppm)	Chlorure	$-\Delta G^{\circ}$ (kJ.mol ⁻¹)
K	-	KCl (s)	337.8
Li	-	LiCl	329.5
Ca	11	½ CaCl ₂ (l)	325.0
Na	60	NaCl (l)	318.5
Mg	25	½ MgCl ₂ (l)	245.7
Mn	10	½ MnCl ₂ (l)	180.0
Al		AlCl (g)	135.7
		1/6 Al ₂ Cl ₆ (g)	175.0
Ti	65	¼ TiCl ₄ (g)	160.8
Zn	35	½ ZnCl ₂ (l)	135.8
Cr	4	½ CrCl ₂ (g)	134.7
		1/3 CrCl ₃ (g)	110.8
Si	610	¼ SiCl ₄ (s)	132.8
B	35	1/3 BCl ₃ (g)	117.4
Fe	4	½ FeCl ₂ (l)	112.5
		1/3 FeCl ₃ (g)	78.2
		1/6 Fe ₂ Cl ₆ (g)	78.2
Pb	6	½ PbCl ₂ (l)	110.8
Sn	25	½ SnCl ₂ (g)	106.5
Ni	8	½ NiCl ₂ (s)	79.7
Cu	16	CuCl (g)	90.0

Selon ces auteurs le chlore réagit instantanément avec l'aluminium lors de son injection dans le métal. Les chlorures ainsi formés sont AlCl₃, AlCl₂, Al₂Cl₆ et AlCl. Ces chlorures, gazeux à 1000 K, vont ensuite se dissocier pour donner lieu à des recombinaisons plus stables avec d'autres éléments présents au sein du bain. La réaction bilan de cette recombinaison est alors du type :



où *Me* symbolise un élément métallique dissous (Tableau 14).

4.3.1.2 Comportement des chlorures formés au niveau des bulles

Plusieurs hypothèses existent quant au comportement des chlorures formés au niveau de la surface de la bulle (principalement $AlCl_3$, $MgCl_2$).

Les principales sont représentées schématiquement sur la Figure 66 et correspondent aux conditions suivantes :

- le gaz mouille complètement le chlorure soit $\sigma_{AC} > \sigma_{AG} + \sigma_{CG}$,
- l'aluminium mouille complètement le chlorure soit $\sigma_{CG} > \sigma_{AG} + \sigma_{AC}$,
- l'aluminium est complètement mouillé par le chlorure soit $\sigma_{AG} > \sigma_{AC} + \sigma_{CG}$,
- il y a équilibre entre les 3 phases, soit $\sigma_{AG} = \sigma_{AC} \cos \beta + \sigma_{CG} \cos \alpha$,

où σ_{AC} , σ_{AG} et σ_{CG} sont respectivement les tensions interfaciales Aluminium/Chlorures, Aluminium/Gaz et Chlorures/Gaz, représentées sur la Figure 67.

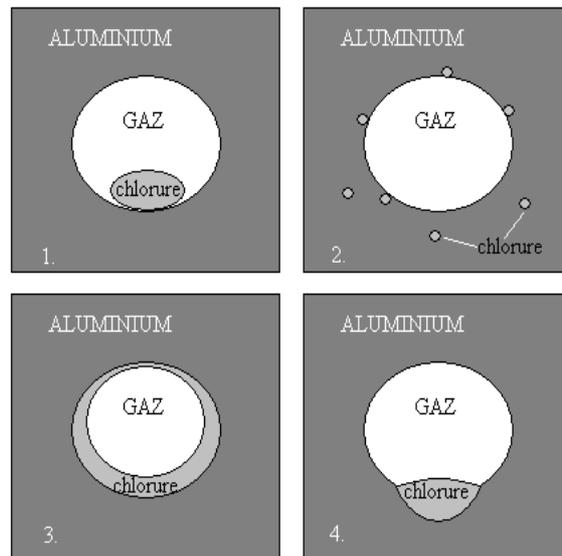


Figure 66. Comportement hypothétique des chlorures liquides à la surface des bulles suivant les conditions de mouillabilité.

Peu de données existent cependant sur les valeurs des tensions interfaciales aluminium – chlorures (très variables suivant la nature des chlorures), et il est de ce fait hasardeux de vouloir prédire de façon générale le comportement des chlorures. Des mesures, réalisées au LTPCM, dans le cadre du projet CIPAL, à l'aide d'un dispositif de goutte posée sous atmosphère chlorée, ont cependant

montré que l'influence du chlore sur la valeur de la tension interfaciale semble être relativement faible [77].

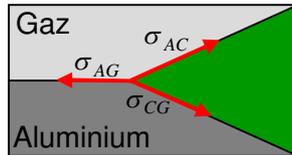


Figure 67. Représentation schématique des différentes tensions interfaciales.

En tout état de cause, une partie des chlorures formés (liquides ou solides) seront vraisemblablement arrachés de la surface des bulles par friction au cours de l'ascension de ces dernières [75] et resteront au sein du bain. De même il est probable qu'une partie des chlorures liquides drainés vers les crasses en surface soient relargués dans le bain. La présence de chlorures $MgCl_2$ dans le bain a ainsi été mise en évidence à l'aide du LIMCA [76].

4.3.1.3 Influence sur l'efficacité de la flottation

➤ Etat des lieux

L'existence d'une phase d'incubation durant laquelle la flottation est inefficace a été mise en évidence expérimentalement par Roy, dans [73] et [72]. Selon les auteurs, en début de traitement au chlore, le nombre d'inclusions dans le métal reste constant pendant une durée qui varie selon les conditions d'agitation et la teneur en chlore du gaz. A l'issue de cette période, appelée période d'incubation, la flottation démarre.

Ceci est clairement visible sur la Figure 68, tirée des travaux de Roy [73]. Ces résultats ont été obtenus dans une cuve contenant 2 kg d'aluminium à 740°C ($Q_g = 500 \text{ cm}^3/\text{min}$ et $N_R = 200 \text{ tr/min}$).

A l'issue de cette phase d'incubation, il est possible, selon Roy, de stopper l'injection de chlore, sans altérer l'efficacité du procédé.

Le constat permet de conclure que la flottation agit dans le volume ou à la surface du bain liquide et non à la surface des bulles, puisque la flottation persiste lorsqu'on stoppe l'injection de chlore.

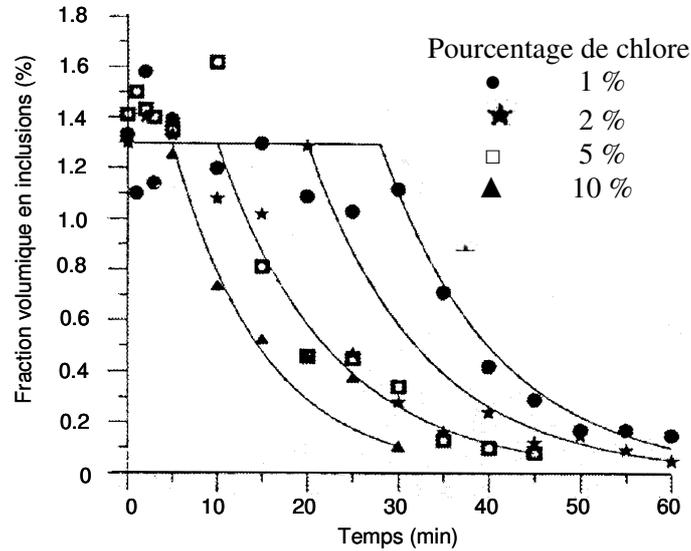


Figure 68. Mise en évidence d'une phase d'incubation. Expérience réalisée avec un alliage A356, contenant 7% de Si et 0,3-0,5% de Mg, ensemencé de particules de SiC [73].

Les auteurs ont réalisé des traitements pour différentes conditions opératoires (débit de gaz et vitesse de rotation) et ont relevé, pour chaque cas, la durée de la période d'incubation. Les résultats sont reportés sur la Figure 69.

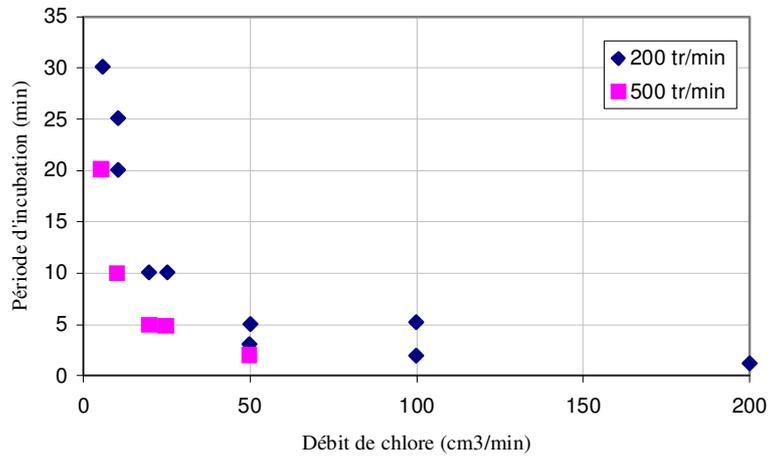


Figure 69. Variation de la période d'incubation avec le débit de chlore, d'après³¹ [72].

³¹ Les courbes de Roy ont été numérisées à l'aide d'un logiciel dédié.

L'analyse de ces résultats conduit les auteurs aux conclusions suivantes :

- la durée de la période d'incubation est une fonction décroissante du débit de chlore,
- la vitesse d'agitation n'a pas d'influence significative sur la durée de la phase d'incubation.

➤ Mise en évidence d'un effet de seuil

Une analyse contradictoire des résultats de Roy peut cependant être menée et conduire à des conclusions différentes.

Pour un débit de chlore de 25 cm³/min, par exemple, la période d'incubation est deux fois plus élevée à 200 tr/min qu'à 500 tr/min. Ceci suggère une influence sensible de la vitesse de rotation, contrairement aux conclusions de Roy.

La quantité de chlore injectée pendant la période d'incubation³² en fonction du débit de chlore est reportée sur la Figure 70. On constate que, pour une vitesse de rotation donnée, la quantité de chlore injectée pendant la phase d'incubation est sensiblement indépendante du débit de chlore. Ainsi, à une vitesse de rotation donnée, semble correspondre une quantité de chlore.

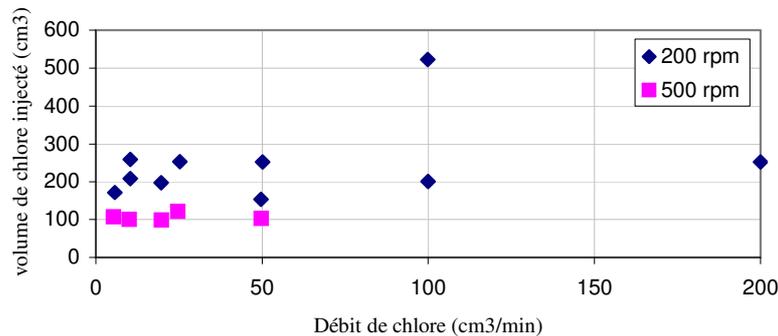


Figure 70. Quantité de chlore injectée (cm³) dans le métal pendant la période d'incubation en fonction du débit de chlore.

En d'autres termes, notre interprétation des résultats de Roy est la suivante :

- la durée de la phase d'incubation correspond au temps nécessaire pour injecter une quantité critique de chlore,
- cette quantité est d'autant plus faible que la vitesse d'agitation est forte.

On met ainsi en évidence l'existence d'un effet de seuil : pour être efficace la flottation nécessite l'injection d'une certaine quantité de chlore au sein du bain.

³² Débit de chlore multiplié par la durée de la période d'incubation.

En-dessous de cette quantité critique, la flottation est inefficace ; une fois ce seuil atteint la flottation est efficace.

Cette dernière remarque semble confirmer le raisonnement, selon lequel le chlore agit dans le bain lui-même (ou à sa surface), et non au niveau de la surface des bulles.

La dépendance de la valeur du seuil avec la vitesse de rotation peut s'expliquer de la façon suivante :

- lorsque l'agitation est faible, le renouvellement de la couche limite des bulles n'est pas optimal, et la résistance au transfert des éléments dissous dans le bain (magnésium par exemple) vers le gaz de la bulle est importante ; tout le chlore ne réagit donc pas au cours de l'ascension de la bulle,
- lorsque l'agitation est forte, le cisaillement est plus important ce qui engendre des bulles de plus petite taille (plus grande surface d'échange) et le renouvellement de la couche limite est meilleur. Une quantité de chlore plus importante réagit donc lors de l'ascension des bulles ; la quantité de gaz injectée pour atteindre la valeur critique est de ce fait plus faible.

➤ Action du chlore, vers une piste

L'origine de ce seuil reste cependant inexplicée à l'heure actuelle. Toutefois, un raisonnement s'appuyant sur les travaux de Roy et les quelques expériences menées sur l'aluminium liquide dans le cadre du projet CIPAL permettent d'avancer quelques pistes d'explication.

L'existence du seuil conduit à penser que les chlorures formés n'ont pas de rôle direct au niveau de la surface des bulles. Ceux-ci migrent vraisemblablement dans le bain d'aluminium liquide, jusqu'à y atteindre une concentration seuil, à partir de laquelle la flottation devient efficace.

Lors du calcul des fréquences de flottation, nous n'avons pas tenu compte de l'action du chlore. Nous avons utilisé la tension de surface aluminium / gaz neutre et l'angle de contact aluminium / alumine sous atmosphère neutre. Dans ces conditions, la faible mouillabilité des inclusions s'est traduite par des efficacités d'attachement très élevées.

Ceci laisse donc supposer que, dans tous les cas (avec ou sans chlore), les inclusions s'attachent aux bulles.

Le chlore ne joue donc pas de rôle majeur dans l'efficacité d'attachement des inclusions aux bulles.

Les hypothèses de nappage des inclusions ou de la surface des bulles par les chlorures semblent donc à rejeter.

En résumé, quelle que soit la situation, les inclusions s'attachent aux bulles. Mais, avant que le seuil en chlore soit atteint, les inclusions restent dans le bain alors qu'après, les inclusions sont capturées à la surface du bain. En d'autres termes, il semble que le rôle des chlorures se situe en surface du bain.

La densité du chlorure de magnésium à température ambiante est 2,32 et son point de fusion se situe à 987 K. A 1000 K, température à laquelle nous travaillons, ces chlorures sont donc liquides et moins denses que l'aluminium liquide, ils vont donc avoir tendance à s'accumuler en surface du bain.

Lors d'une campagne d'essais au CRV, nous avons réalisé plusieurs traitements de flottation sur le four 80, avec et sans chlore.

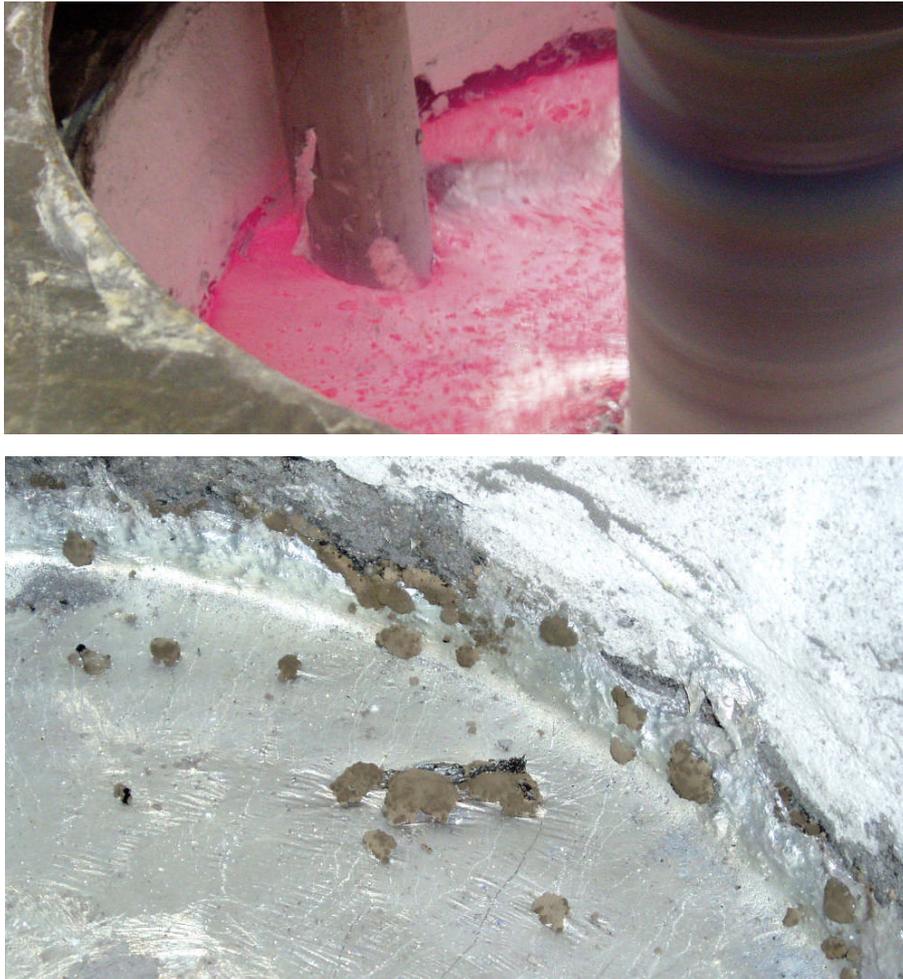
L'observation de la surface du bain en absence de chlore montre que les bulles ne parviennent pas à déchirer la peau d'oxyde. Le gaz s'accumule donc sous la peau d'oxyde qui cède localement de temps à autre, libérant le gaz emprisonné. Des enregistrements vidéo haute définition mettent en évidence que la surface se déforme lors de l'impact de bulle sous la couche d'oxyde. La surface du bain reste grise (couleur de la peau d'oxyde) tout au long du traitement. Lors d'un traitement prolongé, on observe la formation d'un feuilletage de peaux d'oxydes en surface du bain.

Lors d'un traitement au chlore, nous avons pu observer, au bout d'une quinzaine de minutes de bullage, une modification de l'aspect de la surface du bain : des petites tâches rouges sont apparues en surface. Après prélèvement et refroidissement, ces tâches prennent l'aspect de petits « chips » foncés (Figure 71). Aucune analyse n'a malheureusement pu révéler la composition chimique de ces chips.



Figure 71. Prélèvement d'un échantillon de surface présentant des tâches.

Peu après, des petits nodules (≈ 5 mm de diamètre) rouges apparaissent en surface du bain, comme on peut le constater sur la Figure 72. Après observation des vidéos, nous avons pu clairement constater que ces nodules crèvent la peau d'oxyde et viennent se déposer à sa surface.



*Figure 72. Apparition de nodules rouges en surface du bain
(photo sans et avec flash).*

Après solidification, ces nodules prennent une couleur marron / gris. Par ailleurs leur analyse par microscopie électronique à balayage a révélé une structure fractale comme on peut le voir sur la Figure 73.

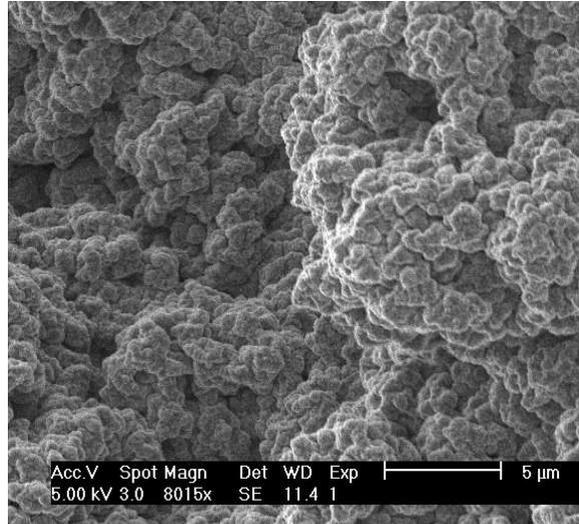


Figure 73. Observation par microscopie électronique à balayage des nodules.

Petit à petit, parallèlement à l'apparition de ces nodules, une poudre grise appelée crasses sèches par les fondeurs fait son apparition à la surface de la peau d'oxyde. Une image de cette poudre est donnée sur la Figure 74. Au bout d'une quarantaine de minutes de traitement environ, la quantité de crasses sèches en surface du bain augmente considérablement. Ceci pourrait correspondre à la fin de la période d'incubation.



Figure 74. Prélèvement d'un échantillon de crasses sèches.

D'autres expériences seraient bien entendu nécessaires pour confirmer ces observations.

Il semble cependant clair que le chlore a eu, au regard des observations précédentes, au cours de ces manipulations, un effet en surface du bain,

occasionnant une fragilisation de la peau d'oxyde et permettant aux inclusions transportées par les bulles de la traverser.

C'est vraisemblablement dans cette direction qu'il faut poursuivre les recherches.

4.4 Récapitulatif

Une revue détaillée des différents modèles proposés dans la littérature, pour décrire les phénomènes d'agglomération et de flottation, a été présentée dans ce chapitre.

Pour décrire les phénomènes d'agglomération entre inclusions, le modèle de Kruis & Kusters, prenant en considération les effets liés au cisaillement et à l'inertie des inclusions a été retenu. La faible mouillabilité des inclusions pouvant donner lieu à la formation de ponts gazeux, ayant pour effet de stabiliser les agglomérats, nous avons l'hypothèse que la probabilité d'attachement, lors d'une collision entre deux inclusions, est de un. De même nous avons émis l'hypothèse selon laquelle, tout agglomérat formé est stable. Les phénomènes de morcellement des agglomérats ne sont donc pas pris en considération dans le modèle.

Concernant la description des phénomènes de flottation, nous avons adopté la démarche proposée par Kostoglou, qui unifie les approches déterministes et stochastiques au sein d'un même modèle. L'efficacité de collision est calculée par le modèle de Yoon & Luttrell pour les Re_b intermédiaires, et par le modèle de Sutherland pour les grandes valeurs de Re_b . Des calculs ont permis de montrer que l'efficacité d'attachement des inclusions aux bulles était très élevée en raison de la faible mouillabilité des inclusions. Dans le modèle, cette efficacité a donc été prise égale à un.

L'étude de la littérature consacrée au rôle du chlore dans le procédé de flottation nous a conduit à mettre en évidence un effet de seuil : en-dessous d'une certaine quantité de chlore injectée dans le bain, la flottation est inefficace, au-dessus, elle devient efficace.

Dans le modèle mathématique développé, nous considérons que la flottation est efficace dès le début du traitement, ce qui revient implicitement à supposer que le seuil en chlore est atteint.

Expérimentalement, nous avons pu montrer que les inclusions capturées par les bulles s'accumulent sur une couronne localisée sur la partie arrière de la bulle.

AGGLOMERATION & FLOTTATION

5 EXPLOITATION ET RESULTATS

Le modèle décrit au cours des chapitres précédents a été appliqué à la cuve 80 kg du CRV, pour différentes conditions opératoires. Les principaux résultats d'un jeu de simulations sont exposés dans ce chapitre.

5.1 Présentation de l'étude de cas

5.1.1 Distribution en taille des inclusions

L'objectif de ce travail est d'étudier l'évolution de la distribution en taille des inclusions présentes dans l'alliage d'aluminium à purifier. La distribution initiale, utilisée pour nos calculs, doit être représentative de la distribution rencontrée dans les alliages commerciaux en sortie de four de maintien. Des mesures de propreté inclusionnaire ont ainsi été réalisées au CRV à l'aide d'un LIMCA³³ sur différents alliages. A partir de la moyenne d'une quinzaine de mesures LIMCA, une distribution type a été établie.

Le LIMCA permet de mesurer des inclusions dont le diamètre équivalent s'étend de 20 à 300 microns. Il est cependant évident qu'un nombre important d'inclusions ont un diamètre inférieur à 20 microns. Pour combler ce manque d'information concernant ces inclusions, nous avons extrapolé la distribution d'inclusions aux petits diamètres. Quatre classes d'inclusions ont ainsi été ajoutées à la distribution mesurée par le LIMCA, ce qui porte à 23 le nombre de classes retenues.

La distribution ainsi retenue pour nos calculs est représentée sur la Figure 75.

³³ LIquid Metal Cleanliness Analyser

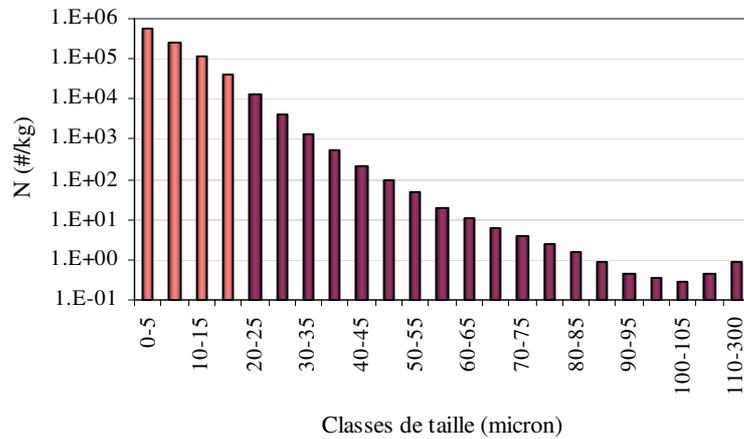


Figure 75. Distribution en taille des inclusions. En couleur pastel, les classes ajoutées par extrapolation.

Sur la Figure 76, nous avons représenté la fraction massique pour chaque classe d'inclusions (masse d'inclusions par kg de métal) de cette distribution. On constate que le maximum est atteint pour la classe 15-20. La fraction massique des classes inférieures est plus faible malgré un nombre d'inclusions beaucoup plus important ; ceci est évidemment dû à la décroissance cubique du volume des inclusions.

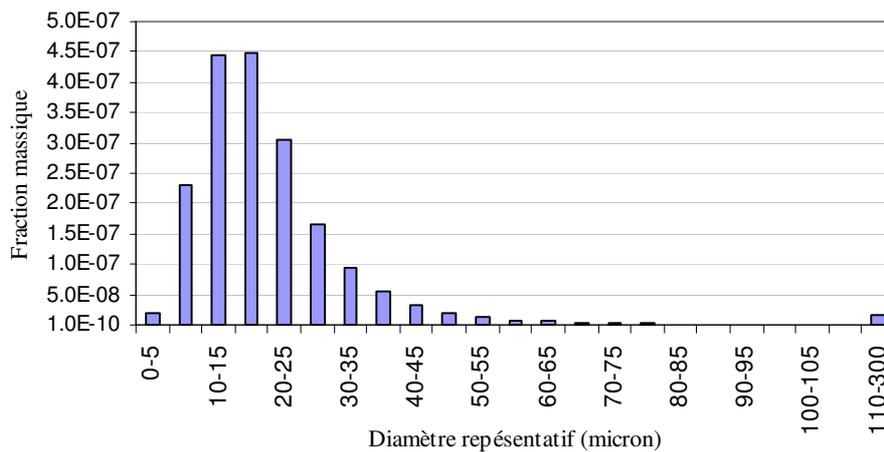


Figure 76. Fraction massique par classe d'inclusions.

Toutes les inclusions considérées sont supposées être de l'alumine dont la masse volumique est égale à 3900 kg/m^3 ; la prise en considération de plusieurs natures d'inclusions n'étant, à ce jour, pas possible dans notre modèle de Bilan de Population.

5.1.2 Caractéristiques du dispositif

La cuve de flottation modélisée est de forme ogivale. Afin de simplifier l'étude, nous avons modélisé cette dernière par un cylindre de 42 cm de hauteur et de 33 cm de diamètre intérieur. L'axe du rotor a un diamètre de 8 cm et l'agitateur est modélisé par une boîte noire de 15,5 cm de diamètre et de 7,5 cm de hauteur.

Dans la configuration étudiée, le rotor est en position basse et sa face inférieure se situe à 2,5 cm du fond de la cuve.

L'ensemble de ces données est récapitulé sur la Figure 77.

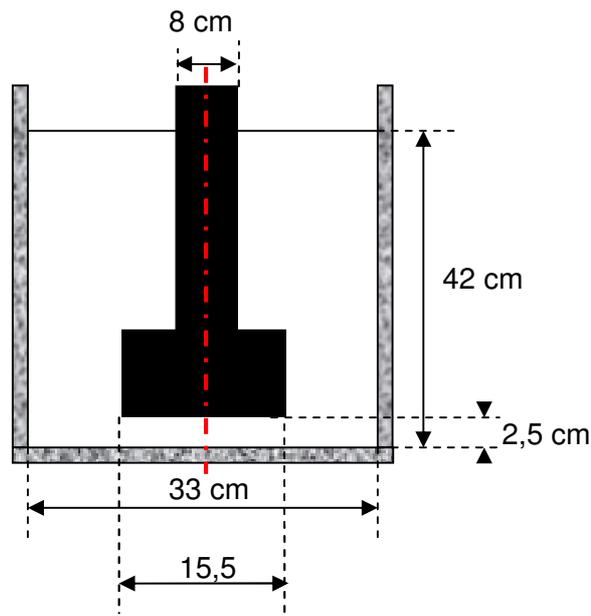


Figure 77. Représentation schématique du four 80 modélisé.

5.1.3 Conditions opératoires

Afin d'étudier l'influence du débit de gaz (Q_g) et de la vitesse de rotation du rotor (N_r) sur l'efficacité du procédé, nous nous proposons de réaliser une étude paramétrique.

Neuf couples débit/vitesse ont ainsi été retenus pour notre étude (Tableau 15).

Tableau 15. Cas d'étude retenus pour l'étude paramétrique.

CAS	Vitesse de rotation (tr.min ⁻¹)	Débit de gaz (Nm ³ .h ⁻¹)
20	250	0.5
80	250	1
10	250	1.5
70	350	0.5
50	350	1
60	350	1.5
30	500	0.5
90	500	1
40	500	1.5

Comme nous l'avons déjà abordé précédemment, pour chaque couple débit/vitesse, la taille des bulles est calculée à l'aide d'une corrélation établie par E. Waz. Pour les conditions opératoires étudiées, le diamètre des bulles est compris entre 7 et 11 mm. Ce dernier varie peu avec le débit de gaz, mais est en revanche fortement dépendant de la vitesse de rotation : plus la vitesse de rotation est grande, plus le cisaillement en bout de pale est important et plus la taille des bulles est faible.

L'ensemble des simulations ont été menées pour un temps de traitement de 600 secondes. Selon les cas, le temps de calcul correspondant varie entre une journée et une semaine.

5.2 Calculs hydrodynamiques

5.2.1 Ecoulement du métal liquide

Dans la cuve 80, la structure globale de l'écoulement est peu sensible aux conditions opératoires. On observe, de façon générale, dans un plan (r, z),

une large boucle de recirculation, montant près de la paroi latérale de la cuve et redescendant au voisinage de l'axe du rotor.

Quelles que soient les conditions opératoires, le régime d'écoulement est contrôlé par l'agitation. Aucune situation de régime contrôlé par l'aération (recirculation en sens inverse) n'a été observée sur le four 80 pour les conditions opératoires étudiées.

Au voisinage du rotor, on observe deux petites zones de recirculation, vraisemblablement engendrées par le cisaillement en bout de pales.

Sous le rotor, plusieurs recirculations liées aux interactions avec le fond de la cuve sont observées.

Dans la zone située au voisinage de l'arbre du rotor, aucun écoulement d'ensemble n'est clairement défini. L'axi-symétrie de l'écoulement dans cette zone est moins bien vérifiée, probablement en raison d'un effet de « swirl³⁴ ». La nature d'un tel écoulement étant purement tridimensionnelle, le champ de vitesses transformé en 2D (par passage par la fonction courant de l'écoulement, voir chapitre 3) est ainsi sensiblement différent de l'écoulement d'origine, dans cette zone.

Dans le reste de la cuve, comme on peut le constater sur la Figure 78, le champ de vitesse calculé, par passage par la fonction de courant, est globalement fidèle à l'écoulement d'origine, tracé à partir de l'interpolation de l'écoulement 3D³⁵ sur le maillage 2D.

Dans le calcul MFN réalisé avec le logiciel FIDAPTM, les parois de la boîte noire simulant le rotor sont des surfaces d'entrée et de sortie de matière sur lesquelles les flux sont fixés. Dans le modèle 2D développé, nous considérons les surfaces de la boîte noire comme des parois solides. Cette modification entraîne localement l'apparition de vitesses très importantes, au niveau des parois de la boîte noire. Ces vitesses assurent la conservation de la masse, mais n'ont pas de signification physique.

Ces fortes vitesses ont pour inconvénient de nous obliger à réduire le pas de temps.

³⁴ Ecoulement de type cyclone.

³⁵ Calculé à l'aide de FIDAPTM.

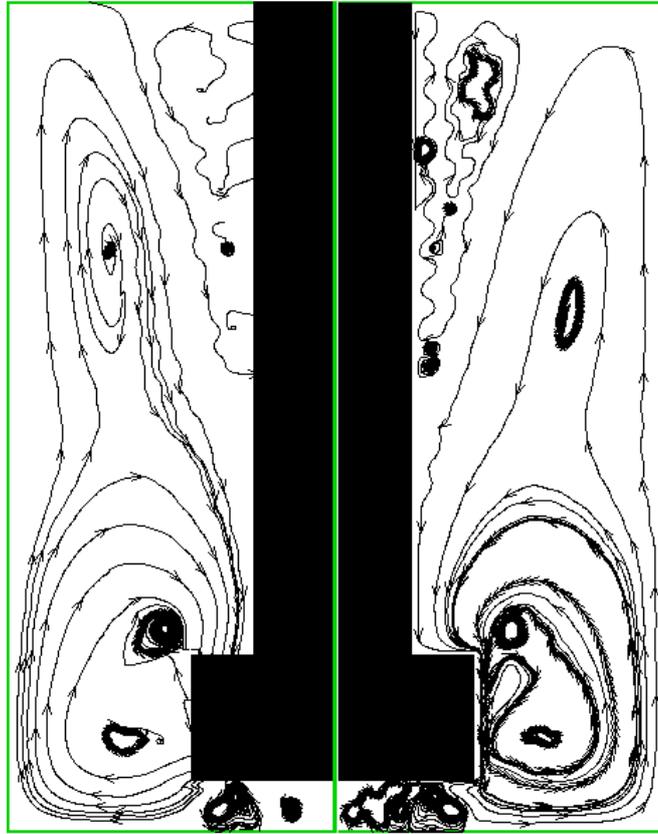


Figure 78. Structure de l'écoulement (lignes de courant) pour le cas 10. A gauche écoulement non conservatif tracé à partir de l'interpolation sur le maillage 2D des résultats 3D fournis par FIDAP. A droite écoulement conservatif 2D obtenu après passage par la fonction courant.

Après analyse des champs de vitesse pour chacun des cas, nous avons pu constater que les cas 80 et 50 présentent des anomalies. Pour ces cas, les calculs n'ont pas abouti à une convergence satisfaisante et nous les supprimons donc de notre étude.

5.2.2 Turbulence

L'énergie cinétique turbulente k_t et sa vitesse de dissipation ε au sein de la cuve ne sont, pour ainsi dire, pas influencées par la présence des bulles, l'essentiel de l'intensité turbulente étant provoquée par le brassage mécanique. Pour une

vitesse de rotation donnée, les propriétés de la turbulence sont donc indépendantes du débit de gaz.

Ces propriétés sont donc sujettes à de fortes variations lorsque N_r varie : plus N_r est grand, plus les valeurs de k_t et de ε sont importantes. Lorsqu'on passe de 250 tr/min à 500 tr/min, l'énergie cinétique turbulente moyenne est multipliée par 4 et son taux de dissipation par 8, comme on peut le voir dans le Tableau 16.

Tableau 16. Energie cinétique turbulente k_{tm} et taux de dissipation ε_m moyens au sein de la cuve.

CAS	N (tr.min ⁻¹)	Q _g (Nm ³ .h ⁻¹)	ε_m (m ² .s ⁻³)	k_{tm} (m ² .s ⁻²)
20	250	0,5	0,462	0,058
10	250	1,5	0,461	0,057
70	350	0,5	1,276	0,116
60	350	1,5	1,271	0,114
30	500	0,5	3,733	0,238
90	500	1	3,793	0,241
40	500	1,5	3,753	0,239

Sur la Figure 79 sont représentées les cartographies de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation. On constate que c'est au niveau du rotor que ces grandeurs prennent les valeurs les plus importantes.

La zone la plus turbulente se situe sous le rotor, au voisinage du bout des pales. Dans cette partie de la cuve, l'interaction du fluide avec le fond de la cuve est particulièrement importante ce qui explique ces fortes conditions de turbulence. Si on calcule l'échelle de Kolmogorov dans la cuve elle varie dans une large échelle allant de 6 micromètres, pour les régions de très forte intensité turbulente, à 100 micromètres pour les zones de très faible intensité turbulente.

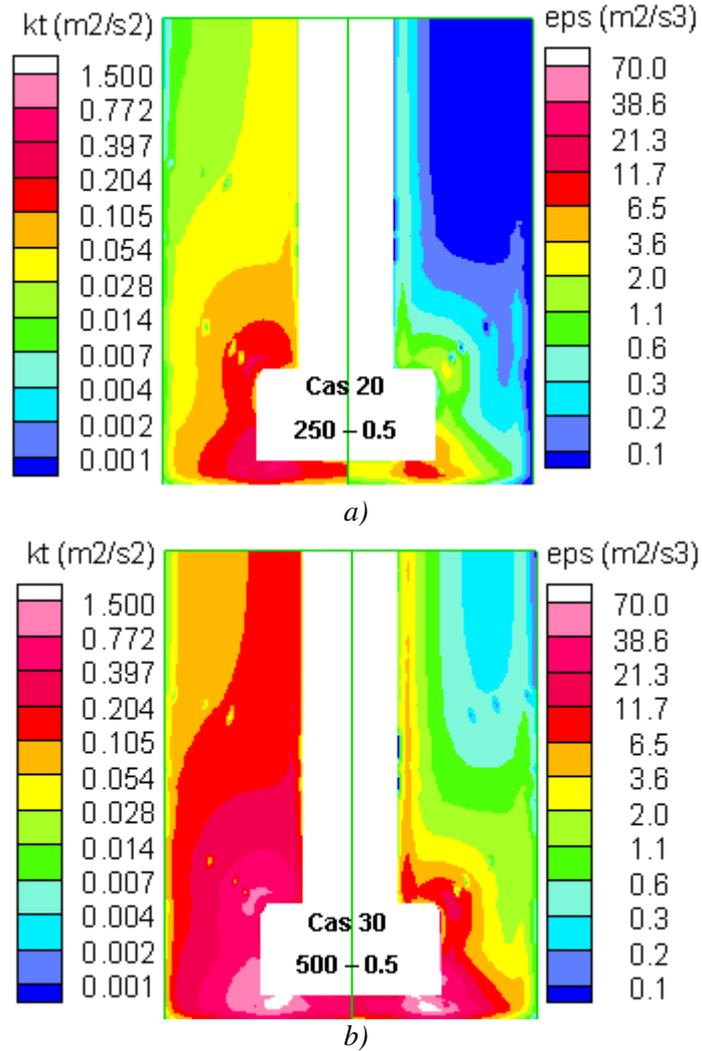


Figure 79. Energie cinétique turbulente et taux de dissipation.
a) cas 20 et b) cas 30.

5.2.3 Comportement des bulles

Le nombre de bulles et leur répartition dans la cuve dépend grandement des conditions opératoires.

Sur les Figures 81, 82 et 83 (en fin de paragraphe), sont représentées les cartographies des rétentions gazeuses et des nombres de Reynolds des bulles, pour chacun des cas abordés.

On constate sans surprise que, plus on augmente la vitesse de rotation, plus les bulles sont dispersées au sein de la cuve.

Ainsi à 250 tr/min, les bulles sont relativement peu dispersées et remontent le long de l'axe du rotor sous forme d'un panache avec des rétentions gazeuses locales de l'ordre de quelques pourcents. L'hydrodynamique tend vers le régime engorgé. L'augmentation du débit de gaz rend le panache plus dense (augmentation du nombre de bulles), sans modifier la dispersion des bulles – cette remarque est valable pour toutes les vitesses étudiées.

A 350 tr/min, le panache s'élargit et les bulles commencent à occuper mieux l'espace de la cuve. A 500 tr/min, le régime est totalement dispersé : les bulles occupent la quasi totalité de l'espace de la cuve.

Plus les bulles sont dispersées, plus leur temps de séjour au sein de la cuve est important (Tableau 17) ; ce qui est favorable à la rétention gazeuse globale.

Tableau 17. Temps de séjour moyen des bulles et nombre moyen de bulles au sein de la cuve.

CAS	N (tr.min ⁻¹)	Q _g (Nm ³ .h ⁻¹)	Temps de séjour (s)	Nombre de bulles
20	250	0,5	0,68	594
10	250	1,5	0,60	1262
70	350	0,5	0,75	1063
60	350	1,5	0,71	2420
30	500	0,5	0,86	2052
90	500	1	0,85	3564
40	500	1,5	0,83	4856

Cette rétention gazeuse est d'autant plus importante que le débit de gaz est grand, comme on peut le voir sur la Figure 80.

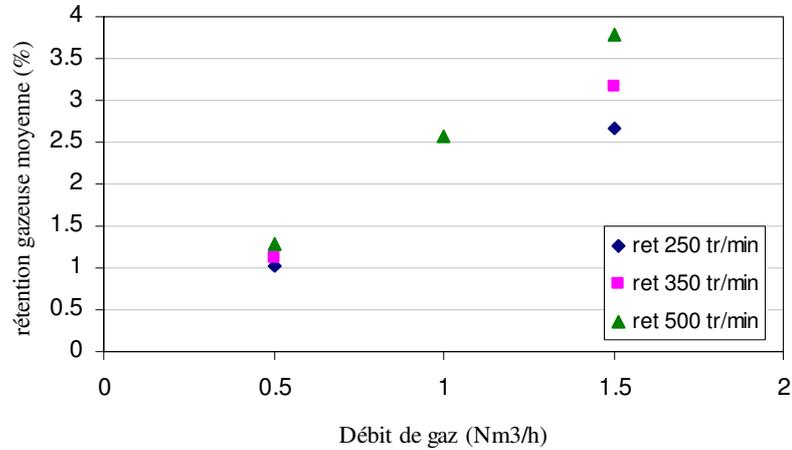


Figure 80. Répartition gazeuse moyenne.

Le nombre de Reynolds des bulles est calculé à partir de la vitesse relative des bulles par rapport au fluide U_{bf} . On constate sur les Figures 73 à 75 que pour les cas à 350 et 500 tr/min, la valeur de Re_b reste comprise entre 7000 et 10000 dans la majeure partie de la cuve. Localement, au voisinage du rotor, Re_b peut atteindre des valeurs plus importantes en raison des très fortes vitesses relatives bulles-fluide.

Pour les simulations à 250 tr/min, les Re_b calculés sont plus importants. L'explication principale vient du diamètre des bulles, presque deux fois plus grand à 250 tr/min qu'à 500 tr/min.

Les vitesses³⁶ relatives moyennes³⁷ des bulles sont consignés dans le Tableau 18. On constate que globalement ces grandeurs moyennes varient peu, dans la gamme de vitesses de rotation et de débits de gaz étudiée.

³⁶ Sont reportées ici, les composantes radiale, axiale et tangentielle correspondant au calcul 3D, réalisé sous FIDAPTM.

³⁷ La valeur indiquée pour la norme de la vitesse relative U_{bf} correspond à la valeur moyenne de la norme, sur l'ensemble de la cuve, et non à la norme du vecteur vitesse moyen.

Tableau 18. Vitesses relatives moyennes des bulles.

CAS	N_r (tr.min ⁻¹)	Q_g (Nm ³ .h ⁻¹)	U_{bfr} (cm/s)	$U_{bf\theta}$ (cm/s)	U_{bfz} (cm/s)	U_{bf} (cm/s)
20	250	0,5	2,8	-17,3	41,7	47,5
10	250	1,5	3,0	-16,0	45,7	50,8
70	350	0,5	1,84	-25,3	32,9	46,7
60	350	1,5	2,34	-25,5	34,1	47,9
30	500	0,5	-7	-35,9	27,4	56,9
90	500	1	-0.06	-30,9	27,1	50,8
40	500	1,5	0.09	-30,8	27,7	51,0

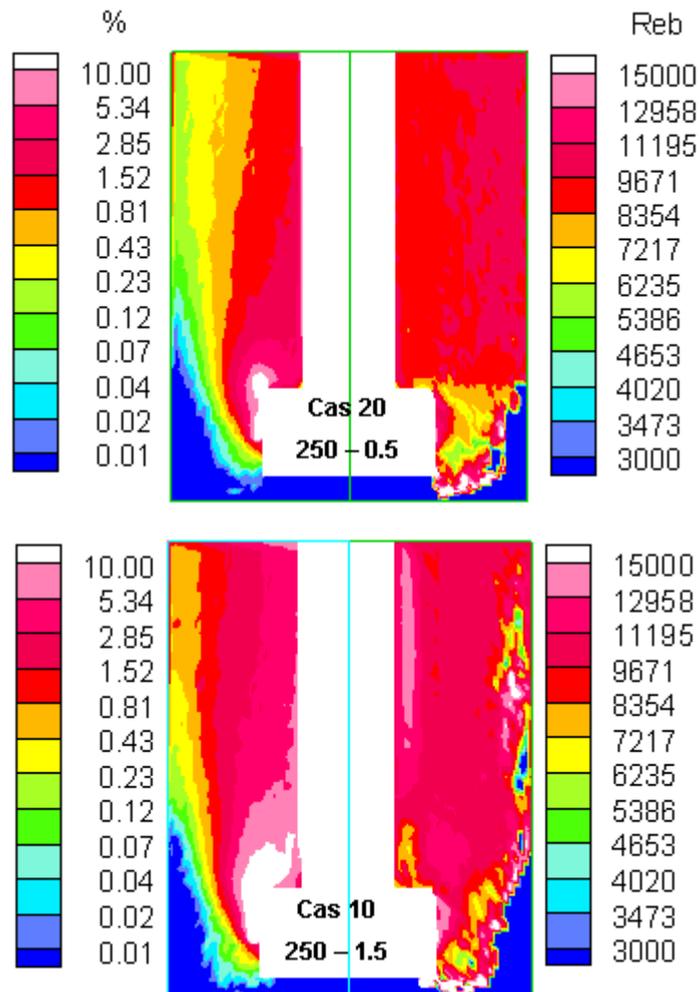


Figure 81. Rétenion gazeuse (à gauche) et Re_b (à droite). Cas 20 et 10.

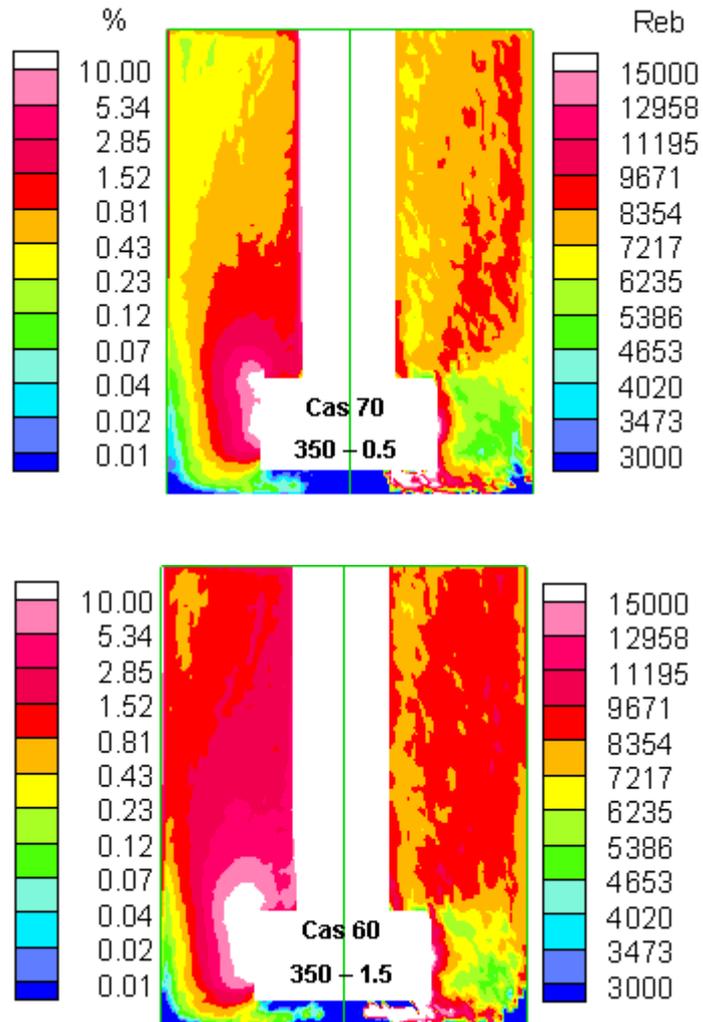


Figure 82. Rétention gazeuse (à gauche) et Re_b (à droite). Cas 70 et 60.

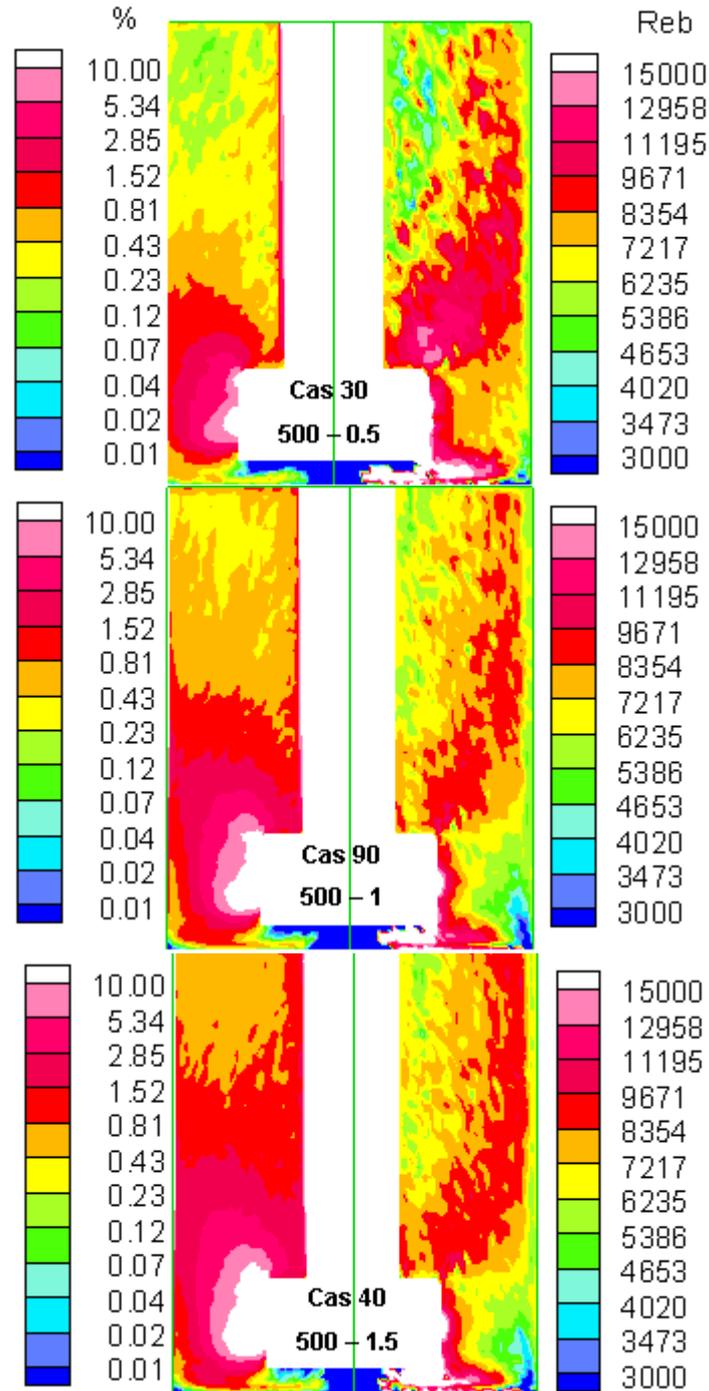


Figure 83. Rétention gazeuse (à gauche) et Re_b (à droite). Cas 30, 90 et 40.

5.2.4 Gaz alimentant le film gazeux en surface du rotor

Comme nous l'avons expliqué au Chapitre 3, une condition de sortie a été placée sur la surface supérieure du rotor, afin d'éliminer du système les bulles collectées par le film gazeux.

D'un point de vue pratique, ces bulles ne participent pas au processus de flottation.

Si on compare les rétentions gazeuses moyennes dans la cuve avec et sans cette condition de sortie, on constate qu'une quantité très importante de gaz alimente le film gazeux : 5 à 60 % du gaz injecté dans la cuve quitte ainsi le système sans intervenir dans le procédé de purification.

Ces valeurs peuvent sembler élevées, et nous tenons à rappeler que la condition de sortie des bulles au niveau de la face supérieure du rotor correspond au cas extrême où toutes les bulles touchant le rotor coalescent et remontent le long de l'axe du rotor sous forme d'un film gazeux. La fraction de gaz perdue calculée par le modèle correspond ainsi à une limite supérieure.

Le Tableau 19 montre que les rétentions gazeuses moyennes obtenues sont sensiblement différentes dans les deux situations limites, sans et avec film gazeux. On constate aussi que, lorsque tout le gaz participe à la flottation (sans film gazeux), des rétentions locales supérieures à 100 % sont atteintes, ce qui met en évidence l'inadéquation de cette condition.

Tableau 19. Comparaison des rétentions gazeuses moyennes avec et sans film gazeux le long du rotor.

CAS	N_r (tr.min ⁻¹)	Q_g (Nm ³ .h ⁻¹)	Rétention (%) Sans film gazeux	Rétention (%) Avec film gazeux	Pourcentage de gaz alimentant le film gazeux
20	250	0,5	1,49	1,03	30
10	250	1,5	3,24	2,67	17
70	350	0,5	1,18	1,12	5
60	350	1,5	6,37	3,16	50
30	500	0,5	2,39	1,29	46
90	500	1	4,86	2,56	47
40	500	1,5	9,00	3,78	58

Dans l'état actuel, nous considérons donc la condition où une fraction non négligeable du gaz ne participe pas à la flottation. Cependant, il faut garder à

l'esprit qu'il serait nécessaire d'améliorer le modèle hydrodynamique actuel, en intégrant une meilleure description physique du comportement des bulles au niveau de l'agitateur.

5.3 Efficacité du procédé de flottation

5.3.1 Fréquence de flottation

5.3.1.1 *Distribution spatiale dans la cuve*

L'efficacité locale de la flottation, au sein de la cuve, est fortement liée aux valeurs locales du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε et de la rétention gazeuse (ie le nombre de bulles local).

Rappelons que pour une classe i d'inclusions, la vitesse d'élimination volumique par flottation (en $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) est de la forme :

$$Z_{bp} = N_i N_b \beta \quad \text{éq. 162}$$

où β désigne le noyau de flottation et N_b le nombre de bulles par unité de volume.

Sur la Figure 84, sont représentés séparément le noyau de flottation β et la fréquence de flottation βN_b , pour des inclusions de $2,5 \mu\text{m}$ de diamètre, dans les conditions de traitement du cas 20 (régime engorgé). On constate que le noyau de flottation β prend des valeurs maximales dans les zones où ε est maximum.

En revanche la cartographie des fréquences de flottation révèle que les valeurs maximales sont atteintes dans les zones où la rétention gazeuse locale est maximale.

L'efficacité du procédé sera donc optimale si on parvient à augmenter la rétention gazeuse dans les zones de forte turbulence.

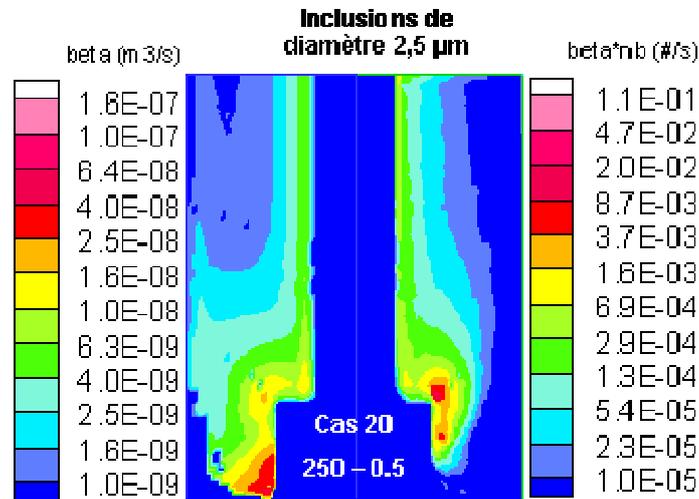


Figure 84. Noyau de flottation β et fréquence de flottation (βN_b) pour des inclusions de 2,5 μm de diamètre – cas 20.

Sur la Figure 85 on constate qu'en régime dispersé (cas 40) la fréquence de flottation atteint des valeurs élevées dans une large partie de la cuve, notamment dans les zones de forte turbulence.

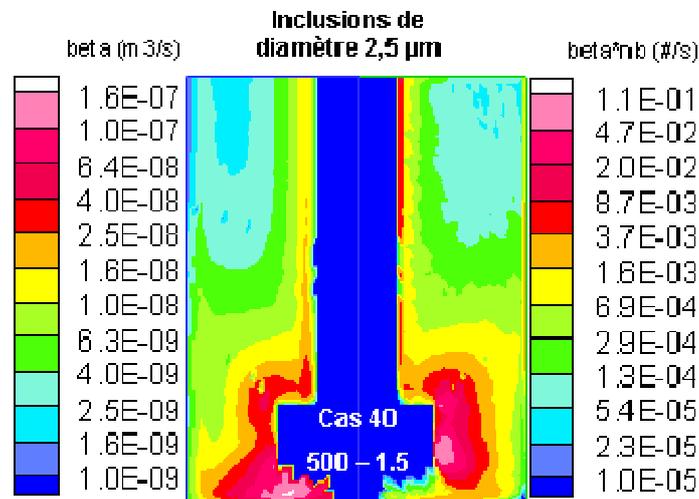


Figure 85. Noyau de flottation et fréquence de flottation pour des inclusions de 2,5 μm de diamètre – cas 40.

5.3.1.2 Pertinence du modèle de flottation adopté

Comme nous l'avons vu au chapitre 4, le modèle collisionnel adopté pour décrire la fréquence de flottation combine les aspects déterministes et stochastiques.

Il est intéressant d'étudier le positionnement de ce modèle par rapport à un modèle purement déterministe ou à un modèle purement stochastique.

Sur la Figure 86 sont représentés les noyaux de flottations β calculés au sein de la cuve, selon les trois modèles collisionnels, en fonction de la valeur locale de ε . Chaque point reporté sur le graphique correspond à une cellule du maillage.

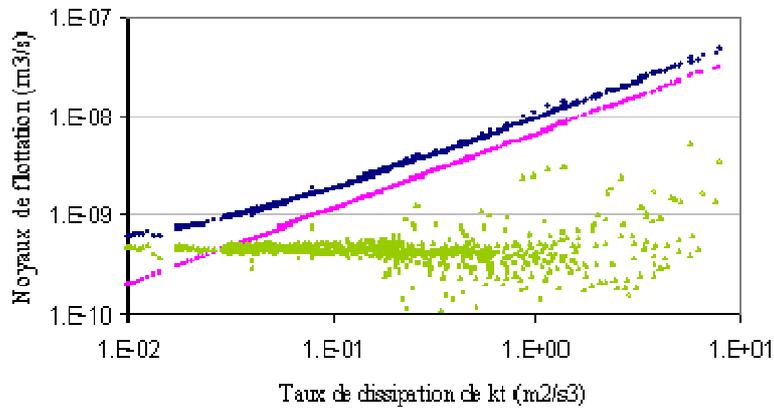


Figure 86. Comparaison des noyaux de flottation calculés dans la cuve à l'aide du modèle retenu (bleu), du modèle purement stochastique (rose) et du modèle purement déterministe (vert).
Cas 20, classe 1.

On constate que pour les petites valeurs de ε , les valeurs calculées par le modèle universel retenu tendent vers celles obtenues avec le modèle déterministe, qui ne prend en considération que la vitesse relative inclusion-bulle.

Pour les grandes valeurs de ε , les valeurs calculées par le modèle universel tendent vers celles prédites par le modèle stochastique.

Ces observations sont conformes à nos attentes et mettent clairement en évidence l'intérêt du modèle, développé par Kostoglou, que nous avons choisi.

5.3.2 Fréquence d'agglomération

Il est relativement difficile de donner une représentation simple de la fréquence d'agglomération au sein de la cuve. En effet, pour chaque cellule du système, et chaque classe d'inclusions, il existe 23 fréquences d'agglomération binaire différentes.

Afin de clarifier l'étude, nous allons ainsi nous intéresser à la vitesse d'évolution volumique Z_i d'une classe d'inclusion donnée, définie de la façon suivante :

$$Z_i = B_i - D_i \quad \text{éq. 163}$$

où B_i et D_i sont les termes de naissance et de mort relatifs aux phénomènes d'agglomération.

Dans notre modèle nous n'avons considéré que les phénomènes d'agglomération liés à la turbulence de l'écoulement. La distribution spatiale des fréquences d'agglomération au sein du réacteur est donc directement liée à la répartition de la turbulence au sein de la cuve.

Sur la partie droite de la Figure 87, est représentée la vitesse d'évolution volumique, liée à l'agglomération, de la classe 10 ($45 < d_p < 50 \mu\text{m}$), pour les conditions opératoires du cas 20. On constate ainsi que les zones où cette vitesse est importante correspondent précisément aux zones de forte turbulence.

Cette vitesse correspond à une vitesse de création (signe positif), ce qui signifie que pour cette classe, le terme de naissance est plus important que le terme de mort.

Sur la partie gauche de cette même figure est représentée la vitesse d'élimination des inclusions par flottation (le signe négatif de cette vitesse n'est pas reporté sur la figure). On constate que dans une partie importante de la cuve, cette vitesse d'élimination est du même ordre de grandeur que la vitesse de création liée à l'agglomération.

Ceci est également visible sur la Figure 88 où l'on a reporté ces deux vitesses calculées au sein de la cuve 2D, en fonction de ε (chaque point reporté sur le graphique correspond à une cellule du maillage).

Cette remarque est importante car elle signifie que, dans certaines zones, un équilibre entre élimination par flottation et création par agglomération peut être atteint.

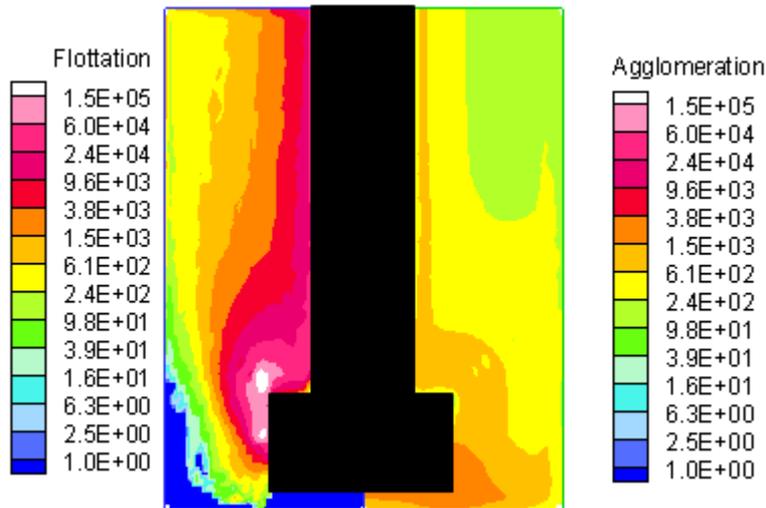


Figure 87. Vitesse d'élimination volumique ($m^3.s^{-1}$) des inclusions par flottation (à gauche) et vitesse de création volumique liée à l'agglomération (à droite). La classe considérée est la classe 10 et les conditions opératoires sont celles du cas 20.

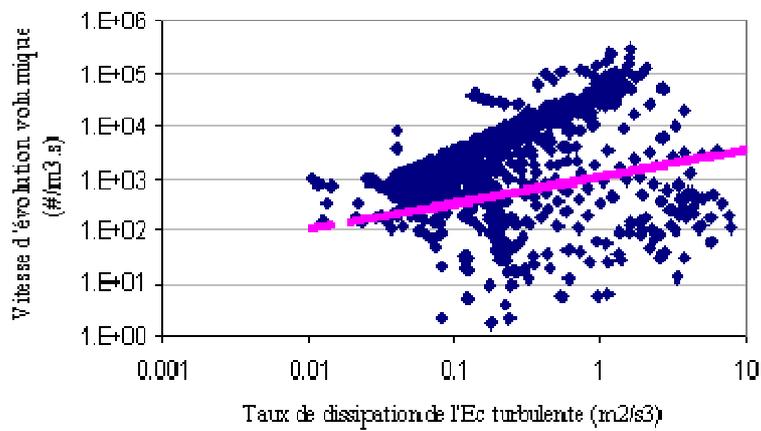


Figure 88. Vitesses d'évolution volumiques de la classe 10 en fonction des valeurs de ϵ rencontrées dans la cuve : la vitesse d'élimination par flottation (en bleu) et la vitesse de création par agglomération (en rose).

Pour les classes d'inclusions les plus petites, le terme de naissance lié à l'agglomération est très faible en raison du faible nombre de classes de plus petites tailles (ce terme est nul pour la première classe). De ce fait, la vitesse

d'évolution volumique liée à l'agglomération est négative, et correspond donc à une vitesse d'élimination.

5.3.3 Influence du débit de gaz

Pour les conditions opératoires étudiées, l'augmentation du débit de gaz, à vitesse de rotation constante, ne change pas significativement la répartition du gaz dans la cuve.

En augmentant le débit de gaz, on augmente donc le nombre de bulles dans la cuve, mais on ne fait que rendre le panache de bulles plus dense, sans changer significativement sa morphologie.

Sur les graphiques de la Figure 89 (en fin de paragraphe), sont reportés la fraction d'inclusions restant au sein de la cuve, pour différentes valeurs du débit de gaz, à vitesse de rotation constante.

On constate que l'augmentation du débit de gaz améliore l'efficacité du procédé³⁸, et ceci pour toutes les vitesses de brassage étudiées. Ce comportement était tout à fait prévisible dans le sens où l'augmentation du nombre de bulle, au sein du système, augmente la probabilité de collisions entre bulles et inclusions.

Dans le Tableau 20, est reporté le nombre d'inclusions éliminées en fin d'opération, pour différentes conditions de traitement. On constate que multiplier par trois le débit de gaz ne permet d'éliminer que 7 % d'inclusions en plus, à 250 tr/min, et 15 % d'inclusions en plus à 500 tr/min.

Tableau 20. Influence du débit de gaz sur le nombre d'inclusions éliminées en fin de traitement.

N_r (tr.min ⁻¹)	Pourcentage d'inclusions éliminées 0,5 Nm ³ .h ⁻¹	Pourcentage d'inclusions éliminées 1,5 Nm ³ .h ⁻¹	Différence (%)
250	36,8	44,2	7,4
350	51,9	62,8	10,1
500	67,8	82,8	15

Bien que cette amélioration de l'efficacité du procédé ne puisse être négligée, elle est relativement faible compte tenu des quantités de gaz mises en jeu.

³⁸ Par efficacité du procédé, on entend «pourcentage d'inclusions éliminées ».

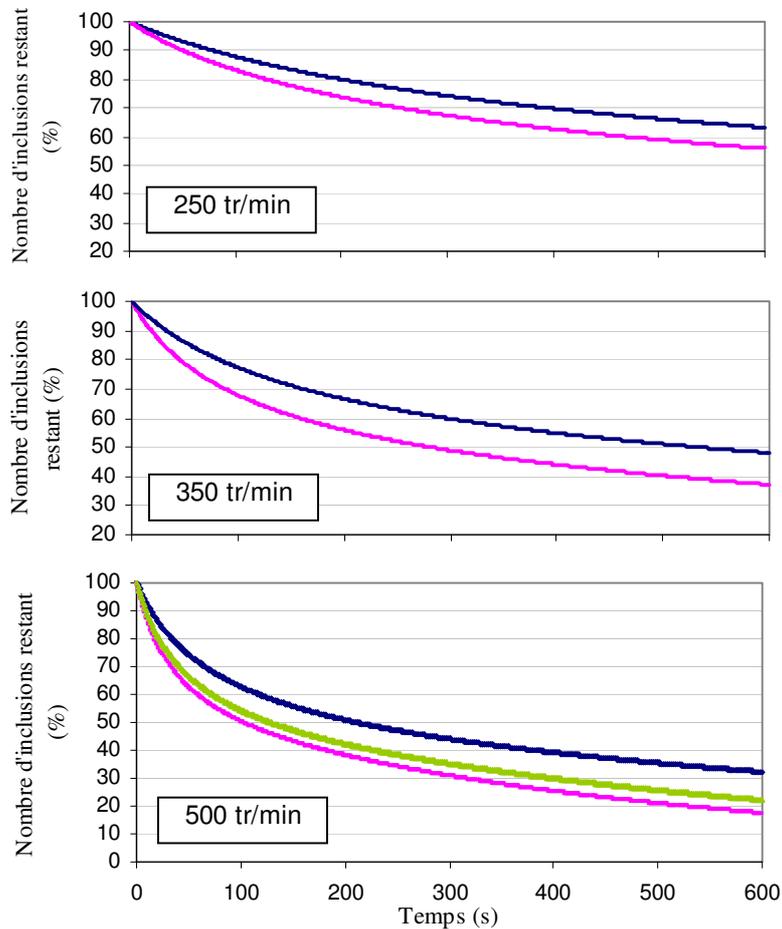


Figure 89. Pourcentage d'inclusions restant dans la cuve en fonction du temps pour trois débits de gaz (en bleu $Q_g = 0,5 \text{ Nm}^3/\text{h}$, en vert $Q_g = 1 \text{ Nm}^3/\text{h}$ et en rose $Q_g = 1,5 \text{ Nm}^3/\text{h}$), et pour trois vitesses de brassage.

5.3.4 Influence de l'agitation

Comme on l'a vu précédemment, lorsqu'on augmente l'agitation du bain, l'écoulement devient plus turbulent et la dispersion des bulles, au sein de la cuve est améliorée. La taille des bulles étant réduite par le cisaillement en bout de pales, le nombre de bulles dans le bain (à débit de gaz constant) est également plus important.

Pour de fortes conditions d'agitation, les bulles sont ainsi réparties dans l'ensemble de la cuve, y compris les zones de forte turbulence, ce qui augmente considérablement les fréquences de flottation.

Sur les graphiques de la Figure 90 est représentée, pour deux débits de gaz, l'évolution de la fraction d'inclusions restant au sein de la cuve en fonction du temps, pour les différentes vitesses de rotation étudiées.

L'étude de ces graphiques nous montre qu'à débit de gaz constant, plus la vitesse d'agitation est importante, plus l'efficacité du procédé est importante.

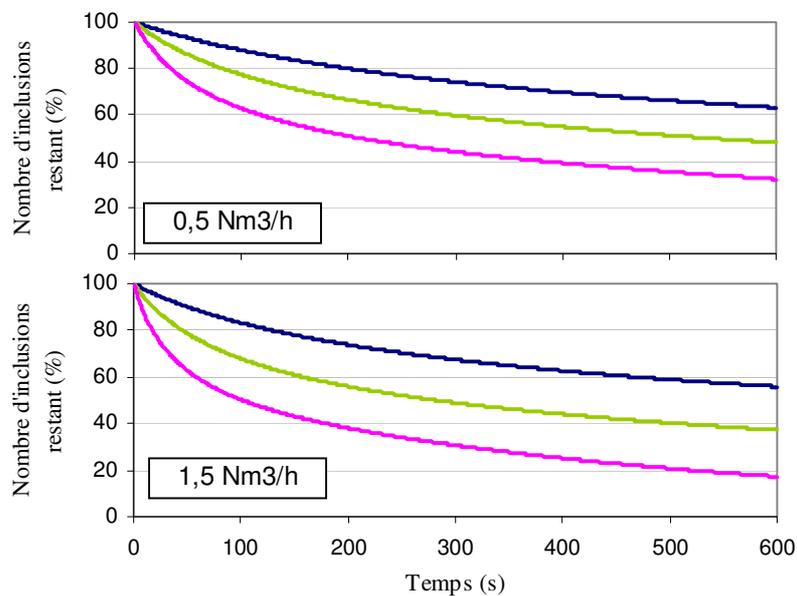


Figure 90. Pourcentage d'inclusions restant dans la cuve en fonction du temps pour différentes vitesses de rotation (en bleu $N_r = 250$ tr/min, en vert $N_r = 350$ tr/min et en rose $N_r = 500$ tr/min) et pour deux débits de gaz.

Cette amélioration de l'efficacité du procédé avec l'augmentation de la vitesse de rotation est nettement plus spectaculaire que celle constatée au paragraphe précédent. Lorsqu'on passe de 250 à 500 tr/min on élimine en effet 30 à 40 % d'inclusions en plus, comme on peut le voir dans le Tableau 21.

L'agitation du bain est donc un paramètre très important pour optimiser l'efficacité du procédé.

Tableau 21. Influence de la vitesse de rotation sur le nombre d'inclusions éliminées en fin de traitement.

Q_g (Nm ³ .h ⁻¹)	Pourcentage d'inclusions éliminées 250 tr.min ⁻¹	Pourcentage d'inclusions éliminées 500 tr.min ⁻¹	Différence (%)
0.5	36,8	67,8	31
1.5	44,2	82,8	38,6

5.3.5 Agitation vs Débit de gaz

Seuls trois paramètres opératoires interviennent dans le procédé de flottation en cuve fermée:

- le débit de gaz,
- la vitesse de rotation,
- le temps de traitement.

Le temps de traitement sera discuté par la suite et nous nous intéressons ici uniquement au débit de gaz et à la vitesse de rotation.

Nous avons montré, dans le paragraphe 5.3.1, que l'efficacité du procédé repose en grande partie sur la présence de bulles dans des zones de forte turbulence. Or cette condition n'est atteinte que pour une forte agitation du bain.

Pour optimiser le procédé, il convient donc de garantir une bonne dispersion des bulles dans la cuve de façon à maximiser leur présence dans les zones de forte turbulence.

Si cette condition n'est pas vérifiée, rien ne sert d'augmenter le débit de gaz.

A titre d'exemple, l'efficacité du procédé est meilleure à 350 tr/min et 0,5 Nm³/h (cas 70), qu'à 250 tr/min et 1,5 Nm³/h (cas 10).

Il faut donc avant toute chose privilégier la vitesse de rotation, ce qui présente l'avantage d'économiser du gaz qui, rappelons-le, contient du chlore.

Le modèle hydrodynamique développé ici ne tient cependant pas compte de la déformation de la surface libre produite par un fort vortex. Un tel phénomène peut être observé pour des vitesses élevées de rotation, et les peaux d'oxydes de surfaces sont alors susceptibles de se morceler et d'être réintroduites dans le bain, ce qui n'est pas souhaitable. L'abaissement du niveau du métal au niveau

de l'axe du rotor, occasionné par la formation d'un vortex est, en outre, susceptible de favoriser l'échappement du gaz au niveau dans cette zone.

Dans la pratique, il convient donc de se placer à une vitesse de rotation suffisamment importante pour occasionner une forte turbulence et une bonne dispersion des bulles, tout en prenant garde à ne pas former de vortex trop prononcé en surface du bain.

Une fois ce critère atteint, la valeur du débit de gaz n'aura qu'une influence minime sur l'efficacité du procédé.

5.3.6 Influence de la décantation

L'élimination des inclusions par décantation de Stokes, joue principalement un rôle pour les inclusions les plus grosses.

Pour ces dernières l'élimination se fait dès les premiers instants du traitement. Leur nombre étant très faible, les grosses inclusions sont en effet rapidement éliminées du système par effet cumulé de la décantation et de la flottation.

Pour le cas 20, par exemple, toutes les inclusions de la classe la plus grande, sont éliminées après 40 secondes de traitement.

Sur la Figure 91, est représentée la fraction d'inclusions éliminées par décantation à différents instants du traitement. On constate que la fraction d'inclusions éliminées par décantation pour les plus grandes classes ($d_p > 70 \mu\text{m}$) n'évolue plus au-delà de 50 secondes. Pour ces classes, la décantation ne joue donc que pour 15 à 35 % (en fonction de la taille) du processus d'élimination, le reste étant provoqué par la flottation.

Par contre pour les plus petites classes ($d_p < 50 \mu\text{m}$) le nombre d'inclusions éliminées par décantation continue à augmenter avec le temps de traitement.

Suivant l'agitation de la cuve, l'élimination des inclusions par décantation peut avoir plus ou moins d'ampleur. Typiquement, lorsque l'agitation est forte les inclusions sont entraînées par l'écoulement et la décantation est de ce fait réduite. De plus, lorsque l'agitation du bain est forte, l'élimination par flottation est plus rapide, et un nombre important d'inclusions sont ainsi éliminées, avant d'atteindre le fond de la cuve.

Dans le cadre de notre étude, le cas 20, présenté sur la Figure 91, correspond au cas pour lequel la décantation sera la plus forte.

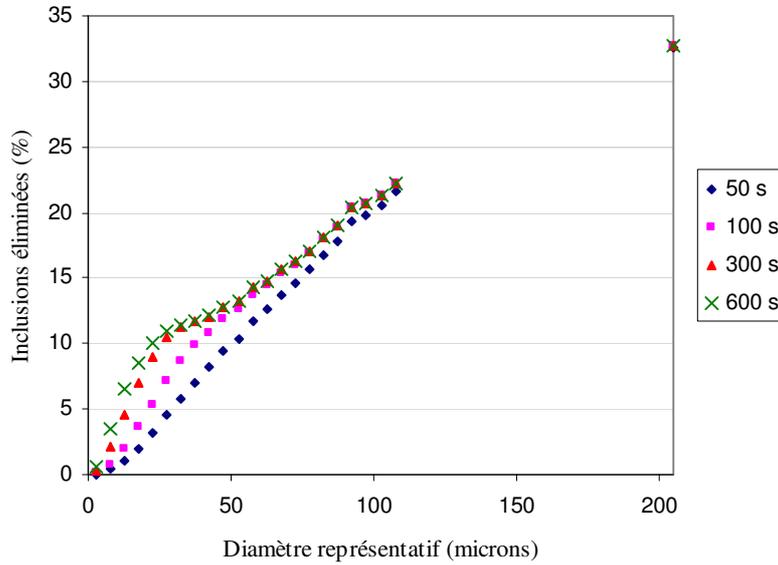


Figure 91. Nombre d'inclusions éliminées par décantation à différents instants, pour le cas 20.

Sur la Figure 92, on constate ainsi que pour un brassage plus intense (500 tr/min), le nombre d'inclusions éliminées par décantation est beaucoup plus faible que pour un cas faiblement agité (250 tr/min).

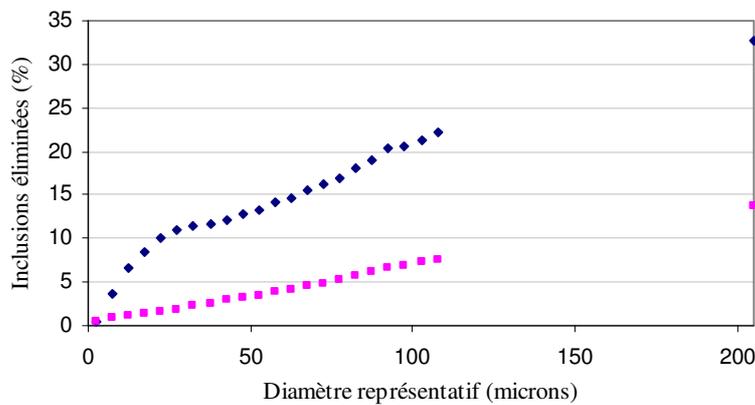


Figure 92. Inclusions éliminées par décantation au bout de 600 secondes, pour les cas 20 (bleu) et 30 (rose).

5.3.7 Influence du temps de traitement en cuve fermée

Aucun phénomène de relargage d'inclusions en surface du bain n'étant pris en considération, il va de soit que plus le temps de traitement est long, plus le nombre d'inclusions éliminées est important.

La simulation numérique peut cependant contribuer à déterminer un temps de traitement utile en fonderie industrielle.

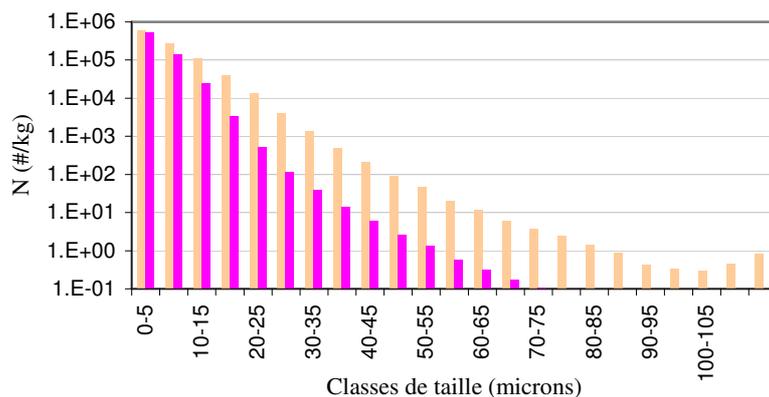
5.3.7.1 Observations

A 250 tr/min et 1,5 Nm³/h (cas 10), la distribution d'inclusions, à 300 secondes et à 600 secondes, est sensiblement la même, comme on peut le voir sur la Figure 93.

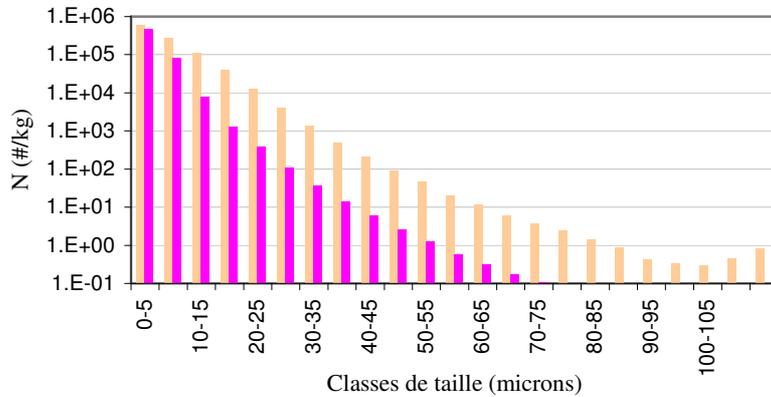
Entre 300 et 600 secondes, seules les petites classes continuent à perdre des inclusions, l'évolution des grandes classes étant quasi nulle.

En début de traitement, les inclusions les plus grosses ($d_p > 70 \mu\text{m}$) sont rapidement éliminées en raison de leur forte probabilité de collision avec les bulles et de leur vitesse de décantation élevée, comme on l'a vu au paragraphe précédent.

Pour les inclusions dont le diamètre est compris entre 40 et 70 μm , un équilibre se crée entre élimination (flottation et décantation) et génération par agglomération. Ceci explique une densité numérique à peu près constante pour ces classes.



a) 300 s.



b) 600 s.

Figure 93. Distribution en taille des inclusions pour le cas 10 à 300 secondes (a) et 600 secondes (b). En jaune est rappelée pour mémoire la distribution initiale.

La vitesse d'élimination des petites inclusions est quant à elle quasiment constante au cours du temps comme on peut le voir sur la Figure 94. Ces inclusions étant cependant très petites, leur contribution à la fraction massique totale en inclusions est faible.

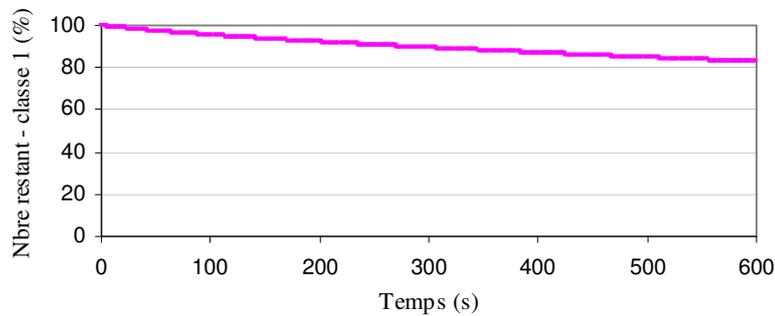


Figure 94. Pourcentage d'inclusions restant pour la classe 1 (0 à 5 microns).

Ainsi, on constate sur la Figure 95 que l'évolution de la fraction massique totale devient sensiblement linéaire à partir d'environ 300 secondes de traitement, ce qui correspond à la fin de l'élimination des grosses inclusions.

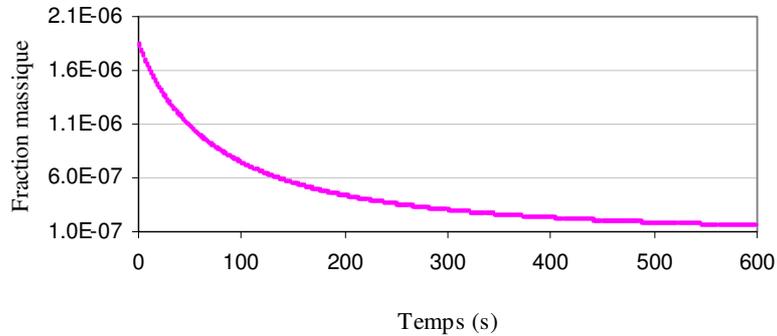


Figure 95. Évolution de la fraction massique inclusionnaire pour le cas 10.

Pour le cas 10, la fraction massique en inclusions est divisée par approximativement 7 au cours des 300 premières secondes de traitement, alors qu'elle n'est divisée que par deux au cours des 300 secondes suivantes.

5.3.7.2 Critère de décision

Dans les fonderies d'aluminium, on s'intéresse souvent au nombre d'inclusions comprises entre 20 et 40 microns de diamètre (classe N20), pour caractériser la qualité de l'alliage.

Nous pouvons donc adopter un critère de décision basé sur la concentration dans la classe N20 (Figure 96), pour déterminer le temps de traitement utile.

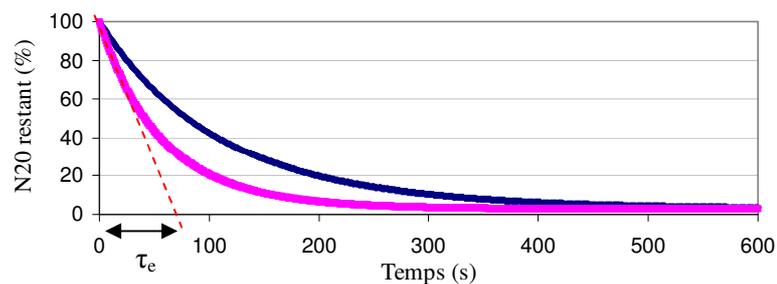


Figure 96. Pourcentage de N20 restant en fonction du temps, pour les cas 10 (rose) et 20 (bleu).

Deux critères peuvent alors être envisagés :

- un critère basé sur la qualité de l'alliage : on estime que le traitement peut être stoppé dès que la concentration dans la classe N20 passe sous un seuil fixé,
- un critère basé sur l'efficacité du procédé : on estime que lorsque la cinétique d'élimination des N20 passe sous un seuil fixé, on peut stopper le traitement.

Le premier critère garantit une qualité inclusionnaire constante, mais à l'inconvénient majeur de ne pas fixer de limite en temps au traitement. Si la vitesse d'élimination des N20 est très faible, le temps de traitement sera démesurément long, et le rapport « nombre d'inclusions éliminées / gaz injecté » sera très mauvais.

Le second critère restreint le temps de traitement à la période où le procédé est efficace, et garanti le meilleur rapport « nombre d'inclusions éliminées / gaz injecté ». En revanche il n'assure pas une qualité inclusionnaire constante, ce qui n'est pas souhaitable du point de vue des exigences de la fonderie.

A titre d'exemple, sur le cas 10, si on adopte le premier critère et que l'on fixe la qualité inclusionnaire en N20 à 5 % de la concentration initiale, on obtient un temps de traitement utile en cuve fermée de 235 secondes.

Si on opte pour le second critère, on peut considérer que la courbe d'évolution numérale varie suivant une loi de la forme « $\exp(-t/\tau_e)$ », où τ_e est la constante de temps d'élimination. D'après la Figure 96, τ_e est estimée, pour le cas 10, à 75 secondes. Le critère d'arrêt peut alors être fixé à un temps de traitement correspondant à un nombre entier de constantes de temps τ_e . Pour le cas 10, si on fixe ce critère à trois constantes de temps, on obtient quasiment la même qualité inclusionnaire qu'avec le premier critère.

Il appartient donc à l'industriel de fixer, en fonction de ses exigences, le critère de décision approprié.

5.3.8 Conclusions

Le modèle développé nous a permis de mettre en évidence l'importance de l'agitation dans le procédé de purification par flottation.

Plus l'écoulement est turbulent, plus la probabilité de collision entre inclusions et bulles est importante. Il est donc primordial d'opérer dans des conditions où les bulles sont bien dispersées dans la cuve, en particulier dans les zones de forte turbulence. De telles conditions sont atteintes pour de fortes vitesses de rotation.

Pour les conditions opératoires étudiées, le débit de gaz ne joue qu'un rôle plus secondaire dans l'efficacité du procédé.

Une forte agitation associée à un faible débit de gaz, garantit ainsi une efficacité meilleure qu'avec une faible agitation associée à un fort débit de gaz.

Notons enfin l'importance d'établir en cuve fermée un critère d'arrêt du traitement, afin d'éviter de gaspiller du gaz inutilement.

5.4 Comparaison avec le modèle en cuve homogène

5.4.1 Introduction

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 2, une approche simplifiée est possible, pour modéliser la cuve de flottation : l'approche en système homogène.

La cuve est supposée parfaitement agitée, si bien que toutes les grandeurs d'intérêt sont considérées constantes au sein du bain.

Ainsi, le transport des inclusions n'est pas pris en considération et l'évolution du système est calculée à partir des grandeurs moyennées sur l'ensemble de la cuve.

Un tel modèle ayant été développé en tout début de thèse [6], nous nous proposons ici de comparer les résultats obtenus à l'aide des modèles homogène et hétérogène.

5.4.2 Mise en œuvre

D'un point de vue pratique, le modèle en cuve homogène a directement été intégré au code de calcul en cuve hétérogène. Ainsi les modèles d'agglomération et de flottation sont strictement identiques. Les données nécessaires au modèle homogène sont directement obtenues à partir des grandeurs moyennées sur le système hétérogène.

Ces données d'entrée sont les suivantes :

- rétention gazeuse moyenne dans la cuve,
- taille des bulles,
- vitesse moyenne des bulles³⁹,
- énergie cinétique turbulente moyenne dans la cuve,
- taux de dissipation moyen dans la cuve,
- volume de métal traité.

Puisque seule l'équation du bilan de population est à résoudre, le temps de calcul est très faible. A titre d'exemple, un calcul correspondant à 600 secondes de traitement ne prend que quelques dizaines de secondes en système homogène, contre quelques jours en système hétérogène.

5.4.3 Fréquences de flottation

L'écart à l'homogénéité de la cuve, qui a été constaté avec les résultats du calcul hydrodynamique, peut entraîner une erreur non-négligeable dans les calculs des fréquences de flottation en cuve homogène.

Sur la Figure 97 sont reportées les fréquences de flottations calculées au sein de la cuve 2D, en fonction de ε , pour la classe 1 (cas 20). Chaque point reporté sur le graphique correspond à une cellule du maillage. On rappelle que la fréquence de flottation est le produit du noyau de flottation, faisant intervenir les propriétés de l'écoulement, et de la concentration locale en bulle.

En rose est reportée la fréquence calculée en système homogène.

On constate que la valeur calculée en système homogène semble légèrement élevée par rapport au barycentre de l'ensemble des valeurs calculées en système hétérogène.

Si cette observation est vérifiée, on peut s'attendre à une surestimation de l'efficacité du procédé en système homogène.

³⁹ Moyenne calculée sur l'ensemble des bulles.

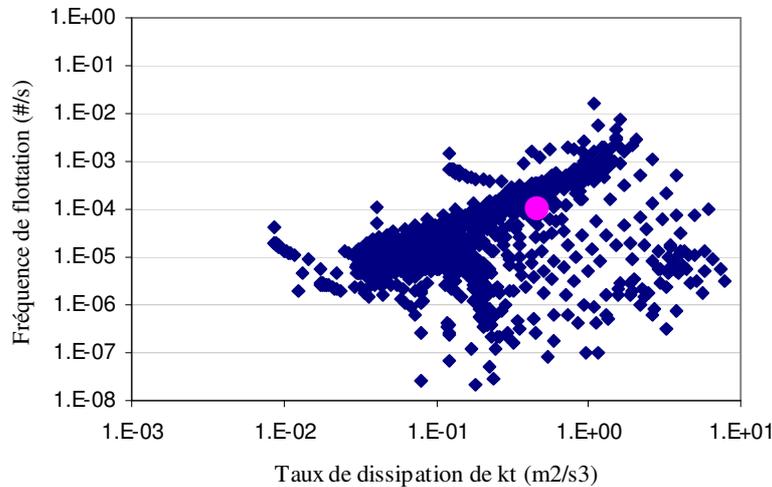


Figure 97. Fréquences de flottation calculées pour la classe 1 dans chaque cellule de la cuve, pour le cas 20 (bleu). La fréquence calculée en système homogène est indiquée en rose.

5.4.4 Efficacité du procédé

Afin de comparer les deux approches, nous avons reporté sur le graphique de la Figure 98 l'évolution de la fraction numérique d'inclusions restant au sein de la cuve en fonction du temps, en système homogène et en système hétérogène.

Deux cas sont reportés sur cette figure : le cas 20, correspondant à un régime engorgé, et le cas 40, correspondant à un régime dispersé.

On constate, dans un cas comme dans l'autre, une efficacité plus importante en système homogène qu'en système hétérogène. L'approche en cuve homogène induit donc bien une légère surestimation de la fréquence de flottation.

La différence entre les efficacités calculées par les deux modèles est cependant étonnamment faible, dans les deux situations analysées. En fin de traitement, elle n'est que de 3 % pour le cas engorgé et de 3,8 % pour le cas dispersé.

La faible différence observée entre les deux modèles, nous permet de conclure que le modèle en cuve homogène constitue une très bonne approche, pour prédire l'évolution du nombre total d'inclusions au sein de la cuve 80.

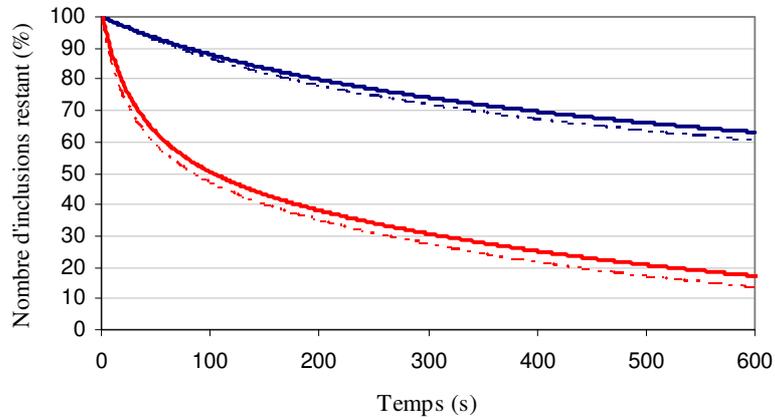


Figure 98. Fraction numérique d'inclusions restant au sein de la cuve pour les cas 20 (bleu) et 40 (rouge). Les résultats du modèle homogène sont représentés en traits pointillés.

5.4.5 Distribution en taille

Sur la Figure 99 sont reportées les distributions en tailles des inclusions calculées en système homogène et en système hétérogène, après 300 secondes de traitement (cas 20).

Pour les petites classes, où le nombre d'inclusions est très important, la légère surestimation de la fréquence de flottation en système homogène ne se ressent quasiment pas. En revanche pour les grandes classes, où le nombre d'inclusions est faible, on constate une nette différence entre les deux modèles.

La surestimation de la fréquence de flottation, en système homogène, n'est cependant pas la seule explication à la différence observée pour les grandes classes. Il est en effet probable que les phénomènes d'agglomération, qui ont essentiellement lieu dans les zones de forte turbulence, soient minimisés par l'effet de moyenne.

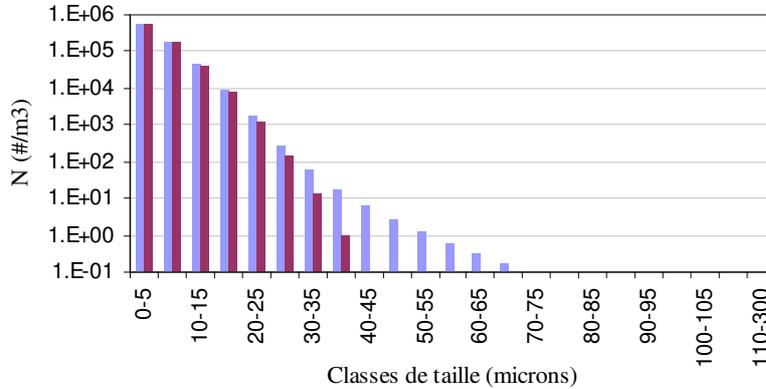


Figure 99. Comparaison des distributions en tailles calculées par les modèles homogène (violet) et hétérogène (bleu), après 300 secondes de traitement (cas 20).

5.4.6 Conclusions

Le modèle développé en système homogène fournit des résultats très proches du modèle en système hétérogène.

Le modèle homogène ne prend pourtant en considération ni le transport des inclusions, ni les hétérogénéités de l'écoulement aluminium liquide - bulles.

Au cours des simulations réalisées en système hétérogène, nous avons plusieurs fois tracé des cartographies, à différents instants, de la concentration numérale en inclusions au sein de la cuve. Ces cartographies révèlent que la concentration inclusionnaire est quasi homogène au sein de la cuve, quel que soit le temps de traitement. Les inclusions sont donc parfaitement mélangées dans la cuve 80 du CRV, ce qui limite fortement l'intérêt de modéliser leur transport convectif au sein de la cuve.

Au niveau de la décantation gravitaire, en revanche, transport et sédimentation peuvent entrer en compétition et limiter de ce fait le nombre d'inclusions éliminées par ce processus. Ce nombre étant naturellement faible, le rôle du transport des inclusions reste minime.

La prise en considération du transport convectif des inclusions au sein de la cuve ne joue ainsi qu'un rôle de second plan, pour la modélisation du procédé de purification par flottation.

En revanche la répartition spatiale de la turbulence et des bulles a un rôle majeur sur l'efficacité du procédé. Comme on l'a montré, l'efficacité du procédé dépend grandement de la présence de bulles dans les zones de forte turbulence. En ce sens, on peut s'étonner de la faible différence obtenue entre les deux modèles. La prise de moyenne, dans notre cas d'étude, rend compte fidèlement de l'état du système. En d'autres termes, la fréquence moyenne de flottation est peu éloignée de la moyenne des fréquences.

Il serait cependant hasardeux de conclure à l'inutilité du modèle hétérogène. En effet, le système étudié ici est relativement confiné, très bien mélangé, et la prise de moyenne est bien adaptée.

Si on venait à plonger le même rotor, dans une cuve deux fois plus grande, la répartition des bulles et de la turbulence ne serait quasiment pas affectée ; le nombre d'inclusions éliminées serait donc, à peu de choses près, le même qu'avec le dispositif étudié précédemment.

Le modèle hétérogène permettrait de faire ce constat sans difficulté. En revanche, en doublant le volume de métal la prise de moyenne serait fortement affectée et conduirait en toute logique à une sous estimation de l'efficacité du procédé avec le modèle homogène.

Il est donc important de garder à l'esprit que la faible différence entre les efficacités calculées par les deux approches ne peut pas être généralisée à d'autres cuves fermées.

Enfin, si le modèle en cuve homogène permet de prédire ici avec fidélité l'évolution du nombre total d'inclusions au sein de la cuve, on a pu constater que l'élimination des grosses inclusions, par flottation et décantation, est surestimée avec le modèle homogène.

5.5 Système ouvert

5.5.1 Principe

Dans les fonderies d'aluminium, la poche de flottation peut fonctionner soit en réacteur fermé « batch » (exemple traité dans les paragraphes 5.1 à 5.4), soit en réacteur continu « inline ». Dans ce cas, le système est ouvert et la cuve reçoit en permanence du métal à purifier, tout en évacuant le métal traité vers le métier de coulée.

La qualité inclusionnaire du métal en sortie de la cuve dépend alors de son temps de passage au sein de celle-ci.

Les deux approches développées tout au long de ce manuscrit, à savoir le modèle en cuve hétérogène et le modèle en cuve homogène, peuvent être mis en œuvre pour cette nouvelle configuration. Cependant, nous avons rencontré des difficultés majeures pour transposer les résultats hydrodynamiques 3D vers un maillage 2D axisymétrique. Quelques incohérences demeurent et un travail reste à effectuer à ce niveau. Nous ne présenterons donc que les résultats en réacteur continu homogène.

5.5.2 Entrée et sortie de matière en système homogène

5.5.2.1 Principe

L'équation de bilan de population est complétée avec un terme d'entrée/sortie de matière :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = B_i - D_i + \frac{Q_{ES}(N_i^o - N_i)}{V_{cuve}} \quad \text{éq. 164}$$

où N_i^o est la concentration inclusionnaire en entrée, Q_{ES} est le débit volumique de métal (identique en entrée et en sortie) et V_{cuve} est le volume de métal contenu dans la cuve.

L'équation de conservation précédente peut être réécrite en faisant apparaître le temps de passage τ , défini comme le rapport entre le volume de la cuve et le débit volumique de métal :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = B_i - D_i + \frac{(N_i^o - N_i)}{\tau} \quad \text{éq. 165}$$

Dans le Tableau 22, sont reportés les débits massiques équivalents (sur cuve industrielle) aux temps de passages étudiés dans les paragraphes suivants.

Tableau 22. Equivalence entre temps de passage sur la cuve pilote 80 et débits massiques sur une cuve industrielle.

Temps de passage τ (s)	Débit massique équivalent sur cuve industrielle (en tonnes par heure)
2000	2
1000	5
500	10
250	20

5.5.2.2 Résultats

On considère, dans le cas traité, qu'à l'instant initial, la cuve est remplie de métal impropre, dont la distribution en taille des inclusions est la même que dans les paragraphes précédents (cf Figure 75). La cuve est ensuite alimentée avec un métal impropre, de distribution inclusionnaire N_i^o identique.

Sur la Figure 100 est représentée l'évolution de la fraction numérale d'inclusions restant au sein du bain, pour le cas 20, avec des temps de passage compris entre 250 et 2000 secondes.

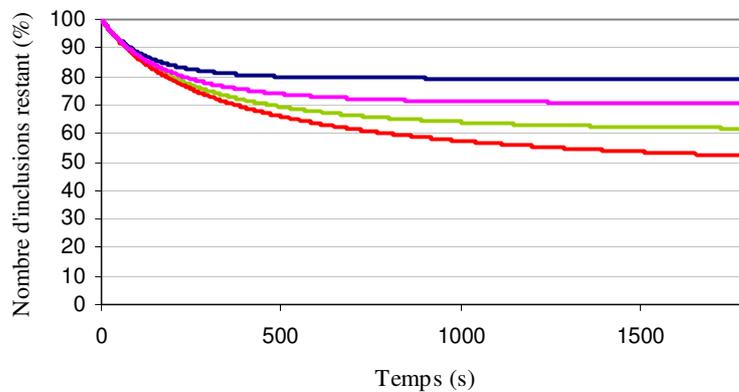


Figure 100. Evolution de la fraction numérale d'inclusions restant au sein du bain, en système homogène (cas 20). Temps de passage de 250 s (bleu), 500 s (rose), 1000 s (vert) et 2000 s (rouge).

On constate qu'après 1800 secondes de traitement, le régime permanent peut être considéré comme atteint pour des temps de passage de 250 et 500 secondes. Pour des temps de passage plus élevées, la durée du régime transitoire est plus longue.

Avec un temps de passage de 250 secondes, l'efficacité du procédé en régime permanent est de l'ordre de 20 % ; elle atteint 30 % pour un temps de passage de 500 secondes, de l'ordre de 40 % pour un temps de passage de 1000 secondes et elle devrait avoisiner les 50 % pour un temps de passage de 2000 secondes.

En situation industrielle, des régimes transitoires si longs peuvent être pénalisants, car la qualité inclusionnaire du métal évacué pendant cette période évolue.

Il est cependant possible d'éliminer cette phase transitoire, en commençant le traitement en cuve fermée. Une fois la qualité inclusionnaire du régime permanent atteinte, il est alors possible de passer en système ouvert et la qualité inclusionnaire du métal en sortie de cuve est ainsi quasi constante.

A titre d'exemple, si on considère un temps de passage de 500 secondes, on a vu qu'en régime permanent l'efficacité du procédé est de l'ordre de 30 %. En système fermé, une telle efficacité est atteinte au bout de 335 secondes de traitement.

En premier lieu, on s'aperçoit que pour obtenir une même efficacité de 30 %, le temps de passage en système ouvert doit être supérieur au temps de traitement en système fermé. On retrouve ici le résultat bien connu en Génie Chimique, où la performance du réacteur fermé est supérieure à celle du réacteur ouvert.

Si après avoir rempli la cuve de métal liquide, on réalise un prétraitement de 335 secondes avant d'ouvrir le système et de débiter la coulée, la qualité inclusionnaire en sortie de la cuve sera constante.

Ceci est clairement visible sur la Figure 101.

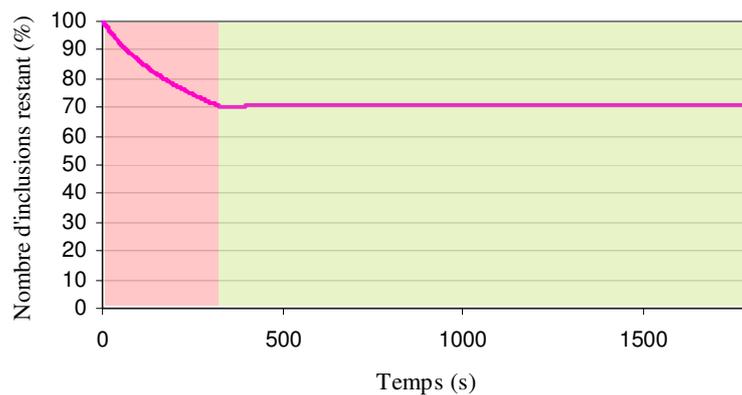


Figure 101. Evolution de la fraction numérique d'inclusions restant en régime mixte : système fermé pendant 335 secondes puis système ouvert.

5.5.2.3 Distribution en taille des inclusions

Sur la Figure 102, est représentée la distribution en taille des inclusions en sortie de cuve pour un temps de passage de 500 secondes (cas 20), en régime permanent ; l'efficacité du procédé est égale à 30 %.

Sur la même figure est également reportée la distribution en taille des inclusions, pour le cas 20, en système fermé homogène, après 335 secondes de traitement, lorsque l'efficacité du procédé est égale à 30 %.

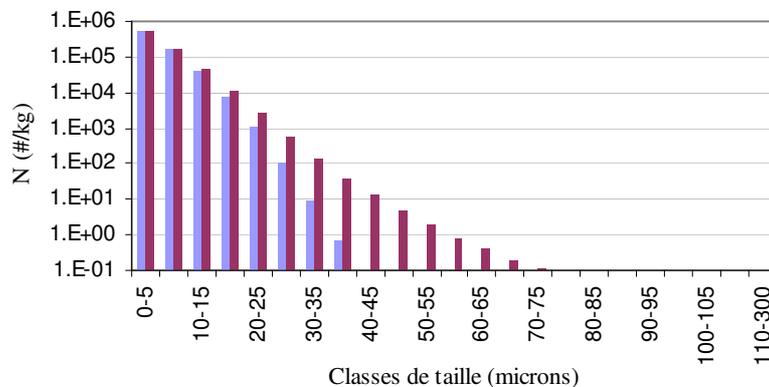


Figure 102. Distribution en taille des inclusions pour une efficacité de 30 % (cas 20), pour les systèmes homogènes fermé (en bleu) et ouvert ($\tau = 500$ s) (en violet).

Pour une même efficacité, on constate, dans le cas du système ouvert, une nette augmentation de la concentration inclusionnaire dans les classes intermédiaires, comprises entre 20 et 70 μm . Cela n'est pas visible sur la figure, mais la concentration dans la plus petite classe est par ailleurs légèrement plus faible en système ouvert qu'en système fermé.

Cette différence entre les deux distributions s'explique par le fait qu'en système ouvert, la performance du procédé est plus faible qu'en système fermé. Cela se ressent d'abord sur les inclusions les plus grandes, dont la cinétique d'élimination est plus importante.

Par ailleurs, cette augmentation du nombre d'inclusions de grandes tailles a pour effet d'augmenter la cinétique d'agglomération (plus de classes, donc plus de combinaisons possibles). Ceci explique la concentration inclusionnaire réduite dans la première classe.

5.5.2.4 Conclusions

Le développement d'un outil de modélisation en système hétérogène ouvert s'est heurté à un certain nombre de difficultés qui n'ont pour l'heure pas été levées.

Seul un modèle en système homogène ouvert a été développé à ce jour. Ce modèle est, par définition, moins complet que le modèle hétérogène initialement prévu, mais il permet néanmoins d'obtenir rapidement des données importantes.

Il est ainsi possible de déterminer, en fonction des conditions opératoires, l'efficacité du procédé, ainsi que l'allure de la distribution en taille des inclusions, en régime permanent.

A efficacité égale, nous avons pu constater que la distribution en taille des inclusions est plus étalée en système ouvert qu'en système fermé.

EXPLOITATION & RESULTATS

Conclusions & perspectives

La qualité des alliages est au cœur des préoccupations des fonderies d'aluminium industrielles. Devant satisfaire à des exigences de plus en plus drastiques en matière de qualité inclusionnaire et, afin de rester très réactif dans un marché concurrentiel, ALCAN a mis en place, avec un certain nombre de partenaires universitaires, et avec le soutien du Ministère de l'Industrie, de l'Economie et des Finances, un projet de recherche ambitieux, le projet CIPAL. L'objectif de ce projet était de comprendre et de modéliser les processus physiques fondamentaux intervenant dans les opérations de purification de l'aluminium – la filtration et la flottation – afin de pouvoir établir des modèles complets de ces procédés et de pouvoir optimiser leur efficacité.

Nous nous sommes intéressés, dans ce mémoire, au procédé de purification de l'aluminium par flottation en cuve agitée.

Modélisation 2D axisymétrique du procédé en cuve fermée

Une analyse de la littérature a révélé que l'essentiel des modèles existants sont basés sur une approche en système homogène. Suivant la géométrie de la poche industrielle et les conditions de traitement, les propriétés locales de l'écoulement peuvent cependant être très hétérogènes au sein de la poche, et une approche en système homogène risque ainsi de ne pas être appropriée.

Nous avons donc développé un modèle 2D d'une cuve de flottation, qui prend en compte le transport convectif des inclusions, au sein de l'écoulement diphasique métal liquide-bulles, et localement les phénomènes d'agglomération entre inclusions ainsi que les processus d'attachement des inclusions aux bulles.

Le modèle mis en place couple la mécanique des fluides numérique à un Bilan de Population local :

- dans un premier temps, le calcul 3D de l'écoulement diphasique aluminium liquide – bulles, en régime permanent, est réalisé par une approche de type Euler – Lagrange, à l'aide du code commercial de MFN FIDAPTM,
- dans un second temps, les propriétés de cet écoulement (champs de vitesses du fluide et des bulles, condition de turbulence et rétention gazeuse) sont exportées sur un maillage 2D axisymétrique, et le calcul de l'évolution temporelle de la population inclusionnaire, au sein de cet écoulement, est réalisé par une méthode des volumes finis, couplée localement à une résolution discrète de l'équation de Bilan de Population.

Le calcul de l'écoulement diphasique aluminium liquide – bulles s'est appuyé sur le modèle développé par E.Waz au cours de son doctorat, et qui est aujourd'hui intégré à la plateforme de calcul du CRV. Dans le cadre de notre étude, ce modèle a été adapté, par E. Waz, à la cuve 80 kg du CRV. Une réflexion sur le comportement des bulles au niveau des parois du rotor, a été menée. Elle a conduit à adopter une condition de sortie des bulles, au niveau de la paroi supérieure du rotor, traduisant la formation d'un film gazeux. Les simulations menées ont alors montré qu'une quantité de gaz importante quitte ainsi la cuve, sans participer au processus de flottation.

Une modélisation plus fine du comportement des bulles au niveau du rotor (notamment par la prise en considération des phénomènes de coalescence), pourrait permettre à terme de modifier la géométrie du rotor, afin de minimiser la formation de ce film gazeux.

Le calcul local des fréquences d'agglomération et de flottation a été réalisé à l'aide de modèles récents, valables pour l'ensemble des tailles d'inclusions et de bulles rencontrées dans la cuve, et n'imposant aucune restriction quant aux conditions de turbulence. Suivant les régions de la cuve, les fréquences d'agglomération et de flottation calculées peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur. Par ailleurs nous avons montré que, pour certaines régions de la cuve et pour certaines classes de taille inclusionnaire, les mécanismes d'agglomération compensent l'élimination des inclusions par flottation. Cet équilibre se traduit par une évolution très réduite des concentrations numériques des classes considérées.

L'analyse de la distribution en taille des inclusions au cours du temps a révélé que très rapidement, les inclusions les plus volumineuses sont éliminées du système, par effets conjugués de la flottation et de la décantation.

Les différentes simulations ont mis clairement en évidence une efficacité optimale du procédé lorsqu'un nombre important de bulles est présent dans les

zones de forte turbulence. D'un point de vue pratique cette condition est atteinte lorsque la vitesse d'agitation est importante.

A vitesse d'agitation constante, l'augmentation du débit de gaz n'a qu'un effet limité sur l'efficacité du procédé. Le débit de gaz ne joue ainsi qu'un rôle secondaire, par rapport à la vitesse d'agitation, dans l'efficacité du procédé.

Comparaison avec un modèle en cuve homogène

La comparaison avec un modèle en cuve homogène a révélé que, pour la cuve 80 kg du CRV, la prise de moyenne permet d'obtenir des résultats satisfaisants. Ce constat ne peut cependant pas être, a priori, généralisé à d'autres géométries de poche.

Un modèle en système homogène ouvert a par ailleurs été réalisé. Son utilisation permet d'évaluer l'efficacité du procédé en régime permanent, de la comparer à celle d'un réacteur fermé, et aussi d'étudier la phase transitoire de mise en régime.

Rôle du chlore dans la flottation

L'analyse de la littérature consacrée et la réinterprétation des résultats de R. Roy [72, 73] a permis la mise en évidence d'un effet de seuil : en-dessous d'une certaine quantité de chlore injectée dans le bain, la flottation est inefficace, au-dessus elle devient efficace.

L'origine de ce seuil reste, à ce jour, indéterminée.

L'existence de ce seuil nous amène à penser que les chlorures formés n'ont pas de rôle direct au niveau de la surface des bulles. Les réflexions menées et la campagne de manipulations réalisée au CRV, semblent indiquer que c'est en surface du bain que les chlorures agissent.

Des travaux restent cependant encore à effectuer pour étayer cette hypothèse.

Perspectives

Le modèle mathématique développé dans le cadre de ce doctorat n'a, à l'heure actuelle, pas encore été validé expérimentalement. Le choix de modéliser la cuve pilote de 80 kg, dans notre étude, a cependant été effectué à cette fin.

Lors de la campagne de manipulation réalisée au CRV en février 2007, nous avons montré que le LIMCA, appareil dédié à la mesure dynamique de la qualité

inclusionnaire dans les goulottes, ne pouvait malheureusement pas être employé dans la cuve 80 kg.

Dès lors, la mesure de la qualité inclusionnaire du métal n'est possible que par le biais de prélèvements et d'analyses après solidification (mesures PODFA) ; ce qui, bien entendu, est beaucoup plus long.

Par manque de temps, la campagne de validation n'a ainsi pas pu être réalisée au cours du doctorat.

Il va de soi que, dans la mesure du possible, il serait souhaitable de réaliser cette campagne de validation, afin d'évaluer la fiabilité du modèle.

Par ailleurs, le raisonnement mené pour établir le rôle du chlore dans les processus de flottation n'est que partiel et des travaux expérimentaux complémentaires seraient nécessaires pour approfondir notre connaissance à ce sujet.

En ce qui concerne le modèle développé, l'étude du comportement des inclusions au niveau des parois de la cuve et de la surface du bain constitue une piste de recherche de première importance. Un nombre important d'inclusions est en effet très certainement capturé au niveau des parois et de la surface du bain. La compréhension et la modélisation du comportement des inclusions en surface du bain est cependant délicate, puisqu'elle implique, la prise en considération de la déformation de la surface libre et des effets du chlore.

Un enjeu de premier plan réside donc à ce niveau.

Au niveau des processus d'agglomération, nous n'avons pas considéré la géométrie des agglomérats formés. Dans notre modèle, toutes les inclusions sont sphériques, ce qui revient implicitement à supposer une coalescence des inclusions. Pour améliorer cette approche, l'introduction d'une dimension fractale des agglomérats est envisageable, si on parvient expérimentalement à déterminer cette dimension.

Nous avons par ailleurs supposé que l'efficacité d'attachement des inclusions était égale à l'unité, et que les agglomérats formés étaient stables. Ces hypothèses ont été justifiées par la faible mouillabilité des inclusions, pouvant occasionner la formation de ponts gazeux, stabilisant les agglomérats. Une étude plus approfondie de la physico-chimie des interactions entre inclusions serait cependant utile, afin d'améliorer la description de ces phénomènes, et de pouvoir introduire une fréquence de rupture des agglomérats dans le modèle.

De même, nous avons considéré qu'une fois les inclusions attachées aux bulles, leur probabilité de détachement était nulle. Pour de grosses inclusions, le cisaillement occasionné par l'écoulement, dans les zones de forte turbulence, peut cependant aboutir à l'arrachement des inclusions de la surface des bulles. La prise en considération de ce phénomène conduirait à une amélioration certaine du modèle.

Enfin, comme on l'a vu, le développement d'un modèle en système ouvert, à deux dimensions s'est heurté à des difficultés, qui ne sont, à ce jour, pas levées. Un travail reste donc à effectuer pour finaliser ce modèle.

Bibliographie

1. C. Vargel, "Propriétés générales de l'aluminium et de ses alliages," *Etude et propriétés des métaux*, vol. MB4 661, Techniques de l'ingénieur, 2005.
2. C. Leroy and G. Pignault, *The use of rotating-impeller gas injection in aluminum processing*, JOM (1991).
3. D. G. Altenpohl, *Aluminum: Technology, applications, and environment. A profile of a modern metal. 6th edition.*, 1999.
4. J. Carré, "Purification de l'aluminium liquide. Modélisation du traitement en poche," Thèse INPL, 2001.
5. V. Warke, M. Maniruzzaman and M. Makhlouf, *Computer simulations for the removal of solid particles from molten aluminium in the rotating impeller degasser*, TMS - Light Metals (2003), 893-899.
6. O. Mirgaux, "Contribution à la modélisation de la purification de l'aluminium en cuve agitée par flottation," DEA LSG2M, INPL, 2004.
7. ABB, "Metallographic analyses," 2006.
8. C. E. Eckert, R. E. Miller, D. Apelian and R. Mutharasan, *Molten aluminium filtration: Fundamentals and models*, Light Metals (1984), 1281-1304.
9. C. Rivière, "Etude de la filtration de l'aluminium liquide: Modélisation et expérimentation à l'échelle pilote," thèse Ecole Centrale Paris, 2005.
10. E. Lae, H. Duval, C. Rivière, P. Le Brun and J. B. Guillot, *Experimental and numerical study of ceramic foam filtration*, TMS Light Metals **2006** (2006), 753-758.
11. E. Waz, "Approche lagrangienne et expérimentale des écoulements gaz-liquide en cuve agitée. Application à un procédé de purification de l'aluminium liquide," thèse INPT, Toulouse, 2001.
12. E. Loth, *Numerical approaches for motion of dispersed particles, droplets and bubbles.*, Progress in Energy and Combustion Science **26** (2000), 161-223.
13. C. Anh Ho and M. Sommerfeld, *Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows*, Chemical Engineering Science **57** (2002), no. 15, 3073-3084.
14. A. Eibeck and W. Wagner, *Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems*, Stochastic Analysis and Applications **18** (2000), no. 6, 921-948.

15. A. Vikhansky and M. Kraft, *Modelling of a rdc using a combined cfd-population balance approach*, Chemical Engineering Science **59** (2004), no. 13, 2597-2606.
16. A. Eibeck and W. Wagner, *Stochastic particle approximations for the smoluchovski's coagulation equation*, Annals of applied probability **11** (2001), no. 4, 1137-1165.
17. M. Goodson and M. Kraft, *Simulation of coalescence and breakage: An assessment of two stochastic methods suitable for simulating liquid-liquid extraction*, Chemical Engineering Science **59** (2004), no. 18, 3865.
18. D. Ramkrishna, *Population balances: Theory and applications to particulate systems in engineering*, Academic Press, 2000.
19. A. D. Randolph and M. A. Larson, *Theory of particulate processes*, Academic Press, New York, 1971.
20. G. A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flow*, Oxford Science, 1994.
21. M. Maniruzzaman and M. Makhlof, *Mathematical modeling and computer simulation of the rotating impeller particle flotation process: Part ii. Particle agglomeration and flotation*, Metallurgical and materials transactions B **33B** (2002), 305-314.
22. V. S. Warke, S. Shankar and M. M. Makhlof, *Mathematical modeling and computer simulation of molten aluminum cleansing by the rotating impeller degasser: Part ii. Removal of hydrogen gas and solid particles*, Journal of Materials Processing Technology **168** (2005), no. 1, 119.
23. S. T. Johansen and S. Taniguchi, *Prediction of agglomeration and break-up of inclusions during metal refining*, Light Metals (1998), 855-861.
24. J. Duan, D. Fornasiero and J. Ralston, *Calculation of the flotation rate constant of chalcopyrite particles in an ore*, International Journal of Mineral Processing **72** (2003), no. 1-4, 227.
25. F. Bloom and T. J. Heindel, *Modeling flotation separation in a semi-batch process*, Chemical Engineering Science **58** (2003), no. 2, 353.
26. ---, *On the structure of collision and detachment frequencies in flotation models*, Chemical Engineering Science **57** (2002), no. 13, 2467.
27. F. Wouters and B. Haut, *Equation de bilan de population couplée à des simulations par mécanique des fluide numérique*, Journée du groupe de travail "Réacteurs" de la Société Française de Génie des Procédés (2004).
28. M. J. Hounslow, R. L. Ryall and V. R. Marshall, *A discretized population balance for nucleation, growth and aggregation*, A.I.Ch.E.J **34** (1988), 1821-1832.
29. S. Kumar and D. Ramkrishna, *On the solution of population balance equations by discretization--i. A fixed pivot technique*, Chemical Engineering Science **51** (1996), no. 8, 1311-1332.

30. S. Bove, T. Solberg and B. H. Hjertager, *A novel algorithm for solving population balance equations: The parallel parent and daughter classes. Derivation, analysis and testing*, Chemical Engineering Science **60** (2005), no. 5, 1449-1464.
31. F. Gelbard and J. H. Seinfeld, *Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems*, Journal of Computational Physics **28** (1978), no. 3, 357.
32. R. A. Hamilton, J. S. Curits and D. Ramkrishna, *Beyond log-normal distributions: Hermite spectra for solving population balances*, A.I.Ch.E **49** (2003), 2328-2343.
33. A. Alexiadis, M. Vanni and P. Gardin, *Extension of the method of moments for population balances involving fractional moments and application to a typical agglomeration problem*, Journal of Colloid and Interface Science **276** (2004), no. 1, 106.
34. R. B. Diemer and J. H. Olson, *A moment methodology for coagulation and breakage problems: Part 2--moment models and distribution reconstruction*, Chemical Engineering Science **57** (2002), no. 12, 2211.
35. M. Frenklach and S. J. Harris, *Aerosol dynamics modelling using the method of moments*, Journal of Colloid and Interface Science **118** (1987), no. 1, 252-261.
36. R. McGraw, *Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments*, Aerosol Science and Technology **27** (1997), 255-256.
37. C. Yoon and R. McGraw, *Representation of generally mixed multivariate aerosols by the quadrature method of moments: I. Statistical foundation*, Journal of Aerosol Science **35** (2004), no. 5, 561.
38. R. Fan, D. L. Marchisio and R. O. Fox, *Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas–solid fluidized beds*, Powder Technology **139** (2004), no. 1, 7-20.
39. H. M. Hulburt and S. Katz, *Some problems in particle technology - a statistical mechanical formulation*, Chemical Engineering Science **19** (1964), 555-574.
40. W. T. Scott, *Analytical studies of cloud droplet coalescence i*, Journal of Atmospheric Science (1968), no. 25, 54-65.
41. E. F. Toro, *Riemann solver and numerical methods for fluid dynamics: A practical introduction.*, Springer, Berlin, 1999.
42. R. F. Warming, Hyett, B.J., *The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite difference methods*, J. Comp. Phys. (1974), no. 14, 159-179.
43. J. Mahaffy, "www.personal.psu.edu/faculty/j/h/jhm/me540/lectures/c-curve-vg.pdf," Lectures on numerical solutions applied to heat transfer and fluid mechanics.
44. C. Hirsch, *Numerical computation of internal and external flows*, vol. 2, John Wiley & Sons, 1992.

45. T. Warburton, "Numerical methods for partial differential equations," *CAAM 452. Lecture 11.*, 2005.
46. S. Chakravarthy and S. Osher, *A new class of high accuracy tvd schemes for hyperbolic conservation laws*, American Institut of Aeronautics and Astronautics (1985).
47. S. Osher and S. Chakravarthy, *Very high order accurate tvd schemes*, ICASE report no. 84-44, ICASE-NASA Langley Research Center, Hampton, Virginia (1984).
48. F. B. Campos and P. L. C. Lage, *A numerical method for solving the transient multidimensional population balance equation using an euler-lagrange formulation*, *Chemical Engineering Science* **58** (2003), no. 12, 2725-2744.
49. A. V. Nguyen and H. J. Schulze, *Colloïdal science of flotation*, New York, 2004.
50. P. G. Saffman and J. S. Turner, *On collision of drops in turbulent clouds*, *J. fluid Mech.* **1** (1956), 16-30.
51. G. I. Taylor, *Statistical theory of turbulence*, *Proc. Roy. Soc.* **151** (1935), 421.
52. A. A. Townsend, *The measurement of double and triple correlation derivatives in isotropic turbulence*, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **43** (1947), 560.
53. J. Abrahamson, *Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid*, *Chemical Engineering Science* **30** (1975), no. 11, 1371.
54. F. E. Kruis and K. A. Kusters, *The collision rate of particles in turbulent media*, *Journal of Aerosol Science* **27** (1996), no. Supplement 1, S231.
55. J. J. E. Williams and R. I. Crane, *Particle collision rate in turbulent flow*, *International Journal of Multiphase flow* **9** (1983), 421.
56. K. Higashitani, R. Ogawa, G. Hosokowa and Y. Matsuno, *Kinetic theory of shear coagulation for particles in a viscous fluid*, *Journal of Chemical Engineering Japan* **15** (1982), 299-304.
57. K. A. Kusters, J. G. Wijers and D. Thoenes, *Aggregation kinetics of small particles in agitated vessels*, *Chemical Engineering Science* **52** (1997), 107-121.
58. M. Cournil, F. Gruy, P. Gardin and H. Saint-Raymond, *Modelling of solid particle aggregation dynamics in non-wetting liquid medium*, *Chemical Engineering and Processing* **45** (2006), no. 7, 586.
59. N. Eustathopoulos, M. G. Nicholas and B. Drevet, *Wettability at high temperatures*, Pergamon, 1999.
60. T. Tadaki and S. Maeda, *On the shape and velocity of single air bubbles rising in various liquids*, *Kagaku Kogaku* **25** (1961), 254-264.
61. S. T. Johansen, *Particle flotation to bubbles in rotor-stirred reactors for melt treatment*, TMS, Light Metals (1995), 1203-1205.
62. K. L. Sutherland, *Physical chemistry of flotation xi. Kinetics of the flotation process.*, *J. Phys. Chem.* **52** (1948), 394-425.

63. Z. Dai, S. Dukhin, D. Fornasiero and J. Ralston, *The inertial hydrodynamic interaction of particles and rising bubbles with mobile surfaces*, Journal of Colloid and Interface Science **197** (1998), no. 2, 275.
64. R. H. Yoon and G. H. Luttrell, *The effect of bubble size on fine particle flotation*, Miner. Process. Extr. Metall. Rev. **5** (1989), 101-122.
65. Z. Dai, D. Fornasiero and J. Ralston, *Particle-bubble collision models -- a review*, Advances in Colloid and Interface Science **85** (2000), no. 2-3, 231.
66. A. Nguyen-Van, *The collision between fine particles and single air bubbles in flotation*, Journal of Colloid and Interface Science **162** (1994), no. 1, 123-128.
67. C. M. Phan, A. V. Nguyen, J. D. Miller, G. M. Evans and G. J. Jameson, *Investigations of bubble-particle interactions*, International Journal of Mineral Processing **72** (2003), no. 1-4, 239.
68. H. J. Schulze, *Hydrodynamics of bubble-mineral particle collisions*, Miner. Process. Extr. Metall. Rev. **5** (1989), 43-76.
69. L. Zhang and S. Taniguchi, *Fundamentals of inclusion removal from liquid steel by bubble flotation*, International Materials Reviews **45** (2000), no. 2, 59-82.
70. L. Zhang, J. Aoki and B. G. Thomas, *Inclusion removal by bubble flotation in a continuous casting mold*, Metallurgical and Materials Transactions B **37B** (2006), 361-379.
71. M. Kostoglou, T. D. Karapantsios and K. A. Matis, *Modeling local flotation frequency in a turbulent flow field*, Advances in Colloid and Interface Science **122** (2006), no. 1-3, 79-91.
72. R. R. Roy, T. A. Utigard and C. Dupuis, *Inclusion removal kinetics during chlorine fluxing of molten aluminum*, Light Metals, TMS (Warrendale, Pennsylvania) (2001), 991.
73. ---, *Inclusion removal during chlorine fluxing of aluminium alloys*, Light Metals, TMS (1998), 871-875.
74. G. K. Sigworth and T. A. Engh, *Refining of liquid aluminium - a review of important chemical factors*, Scandinavian Journal of Metallurgy **11** (1982), 143-149.
75. G. A. Saevarsdottir, T. I. Sigfusson and T. Gudmundsson, "A study of the chlorine-aluminium interface," *Gas interactions in nonferrous metals processing*, D. Saha (Editor), The Minerals, Metals & Materials Society, 1996.
76. T. Gudmundsson, G. A. Saevarsdottir, T. I. Sigfusson and D. G. McCartney, "Chlorination of TiB_2 grain refined aluminium melts," *Light metals*, R. Huglen (Editor), The Minerals, Metals and Materials Society, 1997.
77. ALCAN, "Projet cipal, rapport final," 2006.

78. P. D. Lax, *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*, SIAM Publisher, Philadelphia, 1973.
79. A. Jameson and P. D. Lax, "Conditions for the construction of multi-point total variation diminishing difference schemes," M. R. 1650 (Editor), Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of Princeton, 1984.
80. S. K. Godunov, *A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of hydrodynamics equations*, Translated US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226 (1969) **47** (1959), 271-306 (in Russian).

ANNEXES

A.1 Les schémas TVD (Total Variation Diminishing)

- Généralités

Afin de palier aux oscillations créées par les schémas d'ordre supérieur à un, une nouvelle classe de schémas a été développée au début des années 80 par Osher⁴⁰. Cette classe de schémas, dite TVD pour « Total Variation Diminishing », cherche à réduire avec le temps la somme des gradients de la grandeur transportée. Cette méthode puise son origine dans une propriété importante des lois de conservation de scalaires : toute solution physiquement acceptable à l'équation $N_t + f_z = 0$ ne voit pas sa variation totale, définie par :

$$TV = \int \left| \frac{\partial N}{\partial z} \right| dz \quad \text{éq. 166}$$

augmenter dans le temps [78]. Cette propriété se traduit, de façon discrète, par la relation suivante :

$$TV(N^{n+1}) \leq TV(N^n) \quad \text{éq. 167}$$

avec :

$$TV(N) \equiv \sum_j |N_{j+1} - N_j| \quad \text{éq. 168}$$

Un schéma vérifiant cette propriété est dit TVD.

Note : pour des raisons de clarté et de généralisation, nous abandonnons momentanément la notation rose des vents. L'indice j désigne le point P, et on désigne par $(j+1)$ le point N, $(j-1)$ le point S, comme le montre la Figure 103.

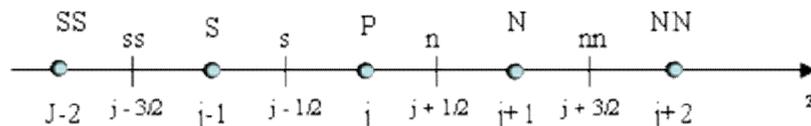


Figure 103. Notations rose des vents et indicielle.

⁴⁰ Voir : Osher, S. and Chakravarthy, S., *Very high order accurate TVD schemes*. ICASE report no. 84-44, ICASE-NASA Langley Research Center, Hampton, Virginia. 1984.

D'un point de vue pratique Jameson & Lax [79] ont montré que cette relation se traduit, pour un schéma linéaire d'ordre quelconque, par des conditions simples. Si on considère par exemple un schéma à $2J+1$ points, noté sous la forme semi-discrétisée synthétique suivante :

$$\frac{dN_j}{dt} = -\frac{1}{\Delta z} \sum_{k=1}^J \left(C_{j+k-1/2}^{-(k)} \delta N_{j+k-1/2} + C_{j-k+1/2}^{+(k)} \delta N_{j-k+1/2} \right) \quad \text{éq. 169}$$

avec :

$$\delta N_{j+1/2} = N_{j+1} - N_j \quad \text{éq. 170}$$

alors le schéma précédent est TVD si et seulement si :

$$\begin{aligned} C_{j+1/2}^{-(1)} &\leq C_{j+1/2}^{-(2)} \leq \dots \leq C_{j+1/2}^{-(k)} \leq 0 \\ C_{j+1/2}^{+(1)} &\geq C_{j+1/2}^{+(2)} \geq \dots \geq C_{j+1/2}^{+(k)} \geq 0 \end{aligned} \quad \text{éq. 171}$$

Afin d'expliquer plus avant les propriétés des schémas TVD, il est nécessaire d'introduire les notions de *schémas monotones* et de *conservation de la monotonie*.

- Schémas monotones

Un schéma est dit monotone s'il ne conduit pas à une solution numérique oscillante. En d'autres termes, la solution convergée d'un schéma monotone correspond toujours à une solution physiquement acceptable.

- Propriété de conservation de la monotonie

Un schéma numérique conserve la monotonie si les propriétés suivantes sont maintenues dans le temps :

- aucun nouvel extremum en z ne peut être créé,
- la valeur d'un minimum local ne diminue pas, la valeur d'un extremum local n'augmente pas.

Ces propriétés mènent aux conclusions suivantes :

- tout schéma monotone est TVD,
- tout schéma TVD conserve les propriétés de monotonie.

Godunov [80] a montré que tout schéma monotone linéaire ne peut être d'ordre supérieur à un. Or pour ce type de schémas, monotonie et conservation de la monotonie sont deux propriétés équivalentes.

Il résulte de ces remarques qu'il ne peut exister de schéma TVD linéaire d'ordre supérieur à un. L'obtention de schémas TVD d'ordre plus élevé passera donc

nécessairement par l'introduction de termes correctifs non-linéaires, encore appelés limiteurs.

○ Construction d'un schéma TVD d'ordre deux

La méthodologie classique [44] à suivre pour la construction d'un schéma TVD d'ordre deux est la suivante :

- choisir un schéma monotone d'ordre un,
- étendre l'expression des flux numériques à l'ordre deux,
- restreindre l'amplitude des gradients apparaissant dans les termes additionnels, à l'aide de limiteurs non-linéaires, afin d'assurer les conditions TVD,
- sélectionner une méthode d'intégration temporelle et modifier si nécessaire les limiteurs pour maintenir les conditions TVD

A titre d'exemple, reprenons le schéma upwind du second ordre dans le cas général ⁴¹:

$$\begin{aligned}
 N_P^{n+1} - N_P^n = & \\
 & - \frac{U_z^+ \Delta t}{\Delta x} \left((N_P^n - N_S^n) + \frac{1}{2} (N_P^n - N_S^n) - \frac{1}{2} (N_S^n - N_{SS}^n) \right) \\
 & - \frac{U_z^- \Delta t}{\Delta x} \left((N_N^n - N_P^n) + \frac{1}{2} (N_N^n - N_P^n) - \frac{1}{2} (N_{NN}^n - N_N^n) \right)
 \end{aligned} \quad \text{éq. 172}$$

Cette équation correspond au schéma upwind du premier ordre dans lequel l'expression des flux a été extrapolée au second ordre.

Afin de rendre ce schéma TVD, il est nécessaire d'introduire des limiteurs non-linéaires, notés Ψ , sur les termes additionnels (par rapport au schéma du premier ordre) responsables des oscillations :

$$\begin{aligned}
 N_P^{n+1} - N_P^n = & \\
 & - \frac{U_z^+ \Delta t}{\Delta x} \left((N_P^n - N_S^n) + \frac{1}{2} \Psi_s^+ (N_P^n - N_S^n) - \frac{1}{2} \Psi_{ss}^+ (N_S^n - N_{SS}^n) \right) \\
 & - \frac{U_z^- \Delta t}{\Delta x} \left((N_N^n - N_P^n) + \frac{1}{2} \Psi_n^- (N_N^n - N_P^n) - \frac{1}{2} \Psi_{nn}^- (N_{NN}^n - N_N^n) \right)
 \end{aligned} \quad \text{éq. 173}$$

⁴¹ On reprend la notation rose des vents

L'expression de ces limiteurs, en fonction des variables du problème, s'obtient en calculant la variation totale TV du schéma aux instants n et $n+1$ et en imposant la condition $TV(N^{n+1}) \leq TV(N^n)$.

Cette opération, détaillée dans [44], montre que les limiteurs doivent être de la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Psi_s^+ &= \Psi(r_s^+) & \Psi_{ss}^+ &= \Psi(r_{ss}^+) \\ \Psi_n^- &= \Psi(r_n^-) & \Psi_{nn}^- &= \Psi(r_{nn}^-) \end{aligned} \quad \text{éq. 174}$$

Où les ratios successifs r , sont définis par :

$$\begin{aligned} r_s^+ &= \frac{N_N - N_P}{N_j - N_{j-1}} & r_n^- &= \frac{N_P - N_S}{N_N - N_P} \\ r_{ss}^+ &= \frac{N_P - N_S}{N_S - N_{SS}} & r_{nn}^- &= \frac{N_N - N_P}{N_{NN} - N_N} \end{aligned} \quad \text{éq. 175}$$

Sous ces hypothèses, différents limiteurs ont pu être déterminés. Les principaux sont les suivants :

- superbee :

$$\text{superbee}(r) = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)] \quad \text{éq. 176}$$

- minmod :

$$\text{minmod}(r, 1) = \begin{cases} \min(r, 1) & \text{if } r > 0 \\ 0 & \text{if } r \leq 0 \end{cases} \quad \text{éq. 177}$$

- limiteur de Osher & Chakravarthy :

$$\Psi(r) = \max[0, \min(r, \beta)] \quad 1 \leq \beta \leq 2 \quad \text{éq. 178}$$

A.2 Points et coefficients des polynômes de Hermite

Sont présentés ci-dessous les points et les coefficients des polynômes de Hermite, utilisés pour le calcul des fréquences de flottation avec la méthode de Kostoglou.

Ordre	i	x_i	W_i
3	1	-1.224744871391589	0.2954089751509193
3	2	0.e-257	1.181635900603677
3	3	1.224744871391589	0.2954089751509193
4	1	-1.650680123885785	0.08131283544724518
4	2	-0.5246476232752903	0.8049140900055128
4	3	0.5246476232752903	0.8049140900055128
4	4	1.650680123885785	0.08131283544724518
5	1	-2.020182870456086	0.01995324205904591
5	2	-0.9585724646138185	0.3936193231522412
5	3	0.e-258	0.9453087204829419
5	4	0.9585724646138185	0.3936193231522412
5	5	2.020182870456086	0.01995324205904591
6	1	-2.350604973674492	0.004530009905508846
6	2	-1.335849074013697	0.1570673203228566
6	3	-0.4360774119276165	0.7246295952243925
6	4	0.4360774119276165	0.7246295952243925
6	5	1.335849074013697	0.1570673203228566
6	6	2.350604973674492	0.004530009905508846

AUTORISATION DE SOUTENANCE DE THESE
DU DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL
POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

o/o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :

Monsieur Frédéric GRUY, Maître de Recherche, Ecole Nationale Supérieure des Mines, Saint-Etienne

Monsieur Jean-Bernard GUILLOT, Professeur, Ecole Centrale de Paris, Châtenay-Malabry

Le Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, autorise :

Monsieur MIRGAUX Olivier

à soutenir devant un jury de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE,
une thèse intitulée :

"Modélisation de la purification de l'aluminium par procédé de flottation en cuve agitée"

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

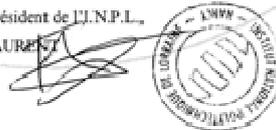
Spécialité : « Science et Ingénierie des matériaux »

NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 54 5 0 1
VANDOEUVRE CEDEX

Fait à Vandoeuvre, le 30 novembre 2007

Le Président de l'I.N.P.L.,

F. LAURENT



Résumé

L'élimination des inclusions indésirables par flottation en cuve agitée est un procédé largement utilisé dans l'industrie de l'aluminium. Ce procédé consiste en l'injection de gaz au sein de la cuve par le biais d'un rotor ; les bulles ainsi formées captent, lors de leur ascension dans le métal liquide, les inclusions et les drainent en surface où elles sont éliminées mécaniquement.

Dans le but de prédire l'évolution numérique de la population d'inclusions dans la cuve de flottation au cours du temps, un modèle 2D a été développé. Afin de rendre compte du transport convectif des inclusions au sein de l'écoulement diphasique métal liquide – bulles, des phénomènes de décantation, d'agglomération et de flottation, ce modèle couple la Mécanique des Fluides Numérique et la technique des Bilans de Population. Une attention particulière a été portée aux modèles d'agglomération et de flottation pour qu'ils soient applicables sur une grande plage de conditions de turbulence.

Les simulations numériques réalisées, nous ont notamment permis de mettre en évidence l'importance de veiller à une bonne répartition des bulles dans la cuve, en particulier dans les zones de forte turbulence.

En parallèle de ce travail de modélisation, une analyse de la littérature et des travaux expérimentaux sur métal liquide ont été réalisés, afin de mieux comprendre le rôle du chlore dans le procédé de flottation. Un effet de seuil a ainsi pu être mis en évidence : une certaine quantité de chlore injectée dans le métal est nécessaire pour que la flottation devienne efficace. La compréhension du rôle du chlore reste cependant partielle, mais des pistes de recherche prometteuses ont pu être identifiées.

MOTS-CLES : Flottation, agglomération, bilan de population, mécanique des fluides numérique, volumes finis, schémas TVD.

Abstract

Inclusions removal by flotation in mechanically agitated vessels is widely used in liquid aluminium treatments. This process consists of gas injection in a molten aluminium reactor using an impeller. Inclusions are attached to the bubbles while rising into the liquid bulk and released in the froth at the vessel surface.

With the aim of both a better understanding of the physical processes acting during flotation and the optimization of the refining process, a 2D mathematical modelling of the flotation tank was set up.

Transport phenomena, sedimentation, agglomeration and flotation of inclusions were considered here. The model couples Population Balance with convective transport of the inclusions, in the multiphase flow field.

Simulations showed that a good dispersion of the bubbles into the tank, especially in the high turbulence zones, is essential for an efficient process. This situation was achieved with a strong agitation. Gas flow affected the process efficiency weakly.

Theoretical and experimental studies on chlorine effects were done. It was noticed that a critical amount of chlorine into the melt is required for the flotation to be efficient. Complete understanding of chlorine role is not achieved yet, but promising ideas for future research have been exhibited.

KEY-WORDS : Flotation, agglomeration, population balance, computational fluid dynamics, finite volumes, TVD schemes