

UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE
Faculté de génie
Département de génie chimique et biotechnologique

ÉTUDE DE FAISABILITÉ DE LA RÉDUCTION
DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE TRANCHE
THERMOÉLECTRIQUE D'UNE CELLULE
D'ÉLECTROLYSE D'ALUMINIUM

Mémoire de maîtrise
Spécialité : génie chimique

Francis LALANCETTE

Sherbrooke (Québec) Canada

Septembre 2022

MEMBRES DU JURY

Martin DÉSILETS

Directeur/Évaluateur (UdeS)

Esma Ines ACHOURI

Rapporteuse (UdeS)

Marc LEBREUX

Évaluateur (UdeS)

Alexandre BLAIS

Évaluateur (RTA)

RÉSUMÉ

L'industrie de l'aluminium est l'une des plus grandes consommatrices d'électricité au Québec. Dans l'objectif d'optimiser l'utilisation de ses actifs, le courant est augmenté pour améliorer la production d'aluminium avec les mêmes équipements. De plus, la variation du marché de l'énergie pousse les alumineries à moduler le courant utilisé. Cette manœuvre modifie le bilan thermique faisant varier l'épaisseur de la couche de protection à l'intérieur de la cellule d'électrolyse. Le contrôle continu du bilan d'énergie est donc crucial. Les mesures manuelles ou automatiques sont extrêmement difficiles dû au milieu hostile aux mesures. Présentement, des modèles mathématiques sont requis pour prédire la formation ou la fonte de la couche de protection. Le modèle numérique tranche thermoélectrique 3D est le plus fréquemment utilisé, mais son temps de résolution n'est pas négligeable, ce qui l'empêche d'être utilisé dans un système de contrôle. La création d'un modèle 2D fiable et suffisamment précis à partir du modèle tranche 3D existant est donc proposée. La faisabilité des méthodes envisagées pour réaliser la réduction dimensionnelle est d'abord étudiée et prouvée à l'aide de mini-modèles. Le choix des composantes du modèle tranche 3D à préserver, qui est basé sur la symétrie et la fonctionnalité du modèle, est détaillé. Les zones critiques qui modifient la densité de courant et le flux de chaleur sont mises en évidence et une méthode d'atténuation basée sur les différences entre les surfaces de réponses du modèle 2D et 3D est présentée. En effet, des paramètres ajustables affectant les coefficients de convection ainsi que les propriétés thermoélectriques des matériaux sont ajoutés dans le modèle 2D. La calibration de ces paramètres qui fait intervenir une boucle itérative et des régressions est présentée. Une fois calibré, le modèle 2D est testé avec une variation de courant d'entrée de $\pm 5\%$. Avec un temps de calcul 40 à 60 fois plus rapide, les résultats du modèle 2D montrent des différences mineures (inférieures à 1 %) avec le modèle 3D pour le comportement de la distribution de la chaleur. Les épaisseurs du talus sont très près dans les deux modèles, la plus grande différence (1,8 cm) étant jugée acceptable. Bien que le modèle 2D créé simule seulement le régime permanent, ses résultats précis et rapides prouvent la pertinence de la réduction dimensionnelle des modèles complexes à des fins de contrôle continu. Avec l'ère du 4.0, c'est une contribution importante pour les industries désirant se tourner vers les jumeaux numériques.

Mots clefs : Modélisation thermoélectrique, cellule d'électrolyse, efficacité énergétique, aluminium, Hall-Héroult.

REMERCIEMENTS

Je vous souhaite à chacun d'avoir la chance de côtoyer le professeur **Désilets**. Merci pour le support ainsi que le partage de vos connaissances et de votre expérience. Vous êtes un mentor remarquable avec des conseils qui me seront utiles pour de nombreuses années encore.

Que dire des rencontres avec l'équipe! Les problèmes et les idées partagés par chacun ont grandement aidé à réaliser ce mémoire, mais surtout, à améliorer mes connaissances et mes talents de détective pour la modélisation. Sans cette dynamique d'équipe, le grattage de tête avec **Marc** et les thermocouples de **Bastien**, ce parcours aurait été beaucoup moins plaisant.

Merci également à **Bastien** pour les cafés avant les rencontres, question de rire un peu et d'entrevoir la fin de nos études.

Je veux également remercier ma famille et mes amis (spécialement **André**), qui ont été d'un grand support moral, surtout avec le contexte pandémique.

Finalement, et non moins important, merci à mes colocos **Malika** et **Phil**, c'était une aventure que l'on a fait dans le même bateau. Ce fut une belle croisière.

Pour le financement de ce projet de maîtrise, je veux remercier le Conseil de recherche en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) ainsi que le partenaire industriel Rio Tinto

TABLE DES MATIÈRES

MEMBRES DU JURY	ii
RÉSUMÉ	iii
REMERCIEMENTS	iv
LISTE DES FIGURES	viii
LISTE DES TABLEAUX	9
1. INTRODUCTION	1
1.1 Mise en contexte et problématique	1
1.2 Question de recherche	3
1.3 Objectifs du projet de recherche	4
1.3.1 Objectif global	4
1.3.2 Objectifs spécifiques	4
1.4 Contributions originales	5
1.4.1 Contribution à l'industrie de l'aluminium	5
1.4.2 Contribution pour le développement technologique de l'industrie	5
1.5 Plan du document	6
2. ÉTAT DE L'ART	7
2.1 Modèles existants pour les cellules d'électrolyse d'aluminium	7
2.1.1 Modèles 1D	7
2.1.2 Modèle thermique 2D	8
2.1.3 Modèle thermoélectrique 3D	9
2.1.4 Modèle thermoélectrique et magnétohydrodynamique (TE-MHD) 3D d'une cuve complète	10
2.2 Hypothèses du modèle tranche 3D	11
2.3 Équations du modèle tranche 3D	12

2.4	Conditions aux frontières et validation du modèle tranche 3D	12
2.5	Temps de calcul du modèle tranche 3D.....	15
2.6	Diminution du temps de calcul	15
3.	DÉVELOPPEMENT	17
3.1	Étude de faisabilité préliminaire	17
3.1.1	Processus de modifications.....	17
4.	MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D’UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE	25
4.1	Abstract.....	25
4.2	Introduction.....	26
4.2.1	Context	26
4.2.2	1D models.....	27
4.2.3	3D thermoelectric model	28
4.2.4	High computing time and needs for model reduction	31
4.2.5	Computation time reduction based on the 3D slice model.....	31
4.3	Material and methods.....	33
4.3.1	2D Thermal-Electric model creation	33
4.3.2	Critical areas.....	35
4.3.3	Adjustable parameters	39
4.3.4	Parameters calibration	43
4.4	Results and discussion	45
4.4.1	Calibration results.....	45
4.4.2	Current variation results	48
4.4.3	Computing time results.....	52
4.5	Acknowledgements.....	53

4.6	Conclusion	53
5.	TRANSFERT INDUSTRIEL.....	55
6.	CONCLUSION	57
	RÉFÉRENCES	60

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1 Schéma d'une cellule d'électrolyse [6].....	2
Figure 2-1 Schématisation du modèle tranche thermoélectrique 3D complet [11].....	9
Figure 2-2 Positionnement des mesures de A) flux de chaleur (HFS) et de B) températures (T) [14]	13
Figure 2-3 Positions des différentes conditions aux frontières du modèle tranche 3D [2]	14
Figure 4-1 Schematic of an aluminum electrolysis cell [2].....	26
Figure 4-2 A) i) and ii) 3D slice model B) projected 2D slice model	34
Figure 4-3 Physical differences for category 1 components A) 3D model and B) 2D model for the i) anodic assembly and ii) cathodic assembly.....	36
Figure 4-4 Physical differences for category 2 components in the y-z plane A) 3D model and B) 2D model for the i) anodic assembly and ii) cathodic assembly	37
Figure 4-5 Contact elements in A) 3D model and B) 2D model for the i) anodic assembly and ii) cathodic assembly	38
Figure 4-6 The iterative loop to adjust the 2D model convective coefficients with the sections on which it applies.....	40
Figure 4-7 Temperature profile (°C)	47
Figure 4-8 Voltage profile (V).....	47
Figure 4-9 Prediction of the ledge position by the models.....	48
Figure 4-10 Heat losses variation as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current).....	49
Figure 4-11 Heat generation variation as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current)	50
Figure 4-12 Ledge position as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current).....	51
Figure 4-13 Shell temperatures as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current).....	52
Figure 4-14 2D model time saving factor based on the elapsed time.....	53

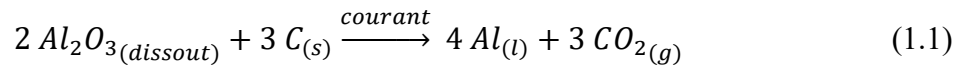
LISTE DES TABLEAUX

Table 4-1 Prediction error for the energy balance obtained with 2D model	45
Table 4-2 Distribution of the total heat losses as predicted by the models	45
Table 4-3 Distribution of the total heat sources as predicted by the models.....	46

1. INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte et problématique

En 1886, le procédé industriel d'électrolyse d'aluminium a été inventé simultanément et indépendamment par Charles Martin Hall aux États-Unis et Paul Louis Héroult en France [1]. Ce procédé consiste à produire de l'aluminium à l'état liquide en électrolysant l'alumine (Al_2O_3) dissoute dans un bain de cryolithe fondue. L'aluminium se réduit à la cathode pour former de l'aluminium liquide. Du côté de l'anode, il y a l'oxydation du carbone en CO_2 avec l'oxygène et le passage des électrons. L'équation (1.1) présente la réaction globale [2].



L'alumine est dissoute à l'intérieur d'un bain électrolytique composé principalement de cryolithe fondue (Na_3AlF_6) à près de $960^\circ C$ [3]. Ce bain est contenu dans une cuve qui fait office de cellule d'électrolyse. L'anode plongée en partie dans le bain et la cathode située au fond de la cuve sont composées de carbone [4]. Lors de son opération habituelle, une couche de bain électrolytique se solidifie sur les parois internes et forme un talus ou gelée. Cette couche agit comme une protection contre la corrosion et l'attaque chimique du bain liquide sur les parois [5]. L'aluminium s'accumule sous le bain, compte tenu de sa densité plus élevée. Cette couche d'aluminium est très conductrice et fait office de cathode. L'aluminium est retiré périodiquement par siphonnage et l'alumine est ajoutée continuellement par une perforation dans le matériel de recouvrement sur le dessus [4]. La configuration d'une cellule d'électrolyse est illustrée à la Figure 1-1.

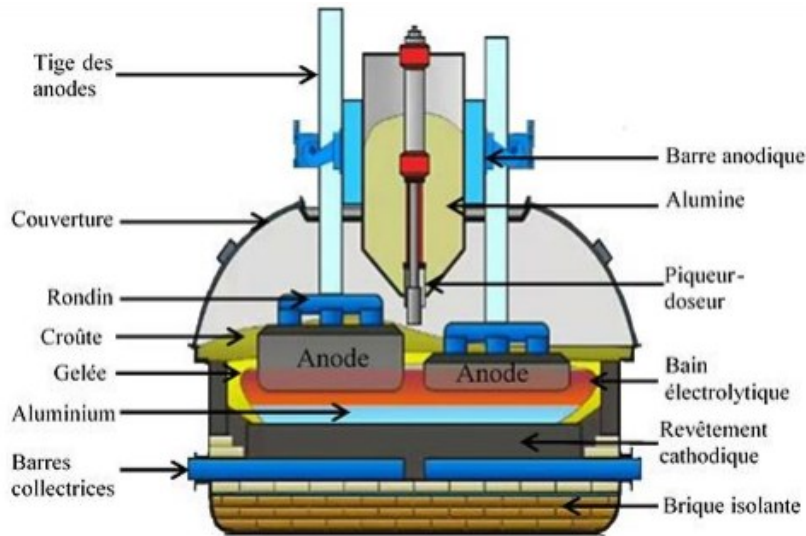


Figure 1-1 Schéma d'une cellule d'électrolyse [6]

Le procédé Hall-Héroult a permis une production annuelle mondiale de 67.3Mt en 2021 [7] dont 3.1Mt sont produites au Canada [8]. Malgré ce marché développé, l'industrie de l'aluminium a plusieurs défis à relever pour rester compétitive. La gestion de l'énergie et la production de gaz à effet de serre en sont deux exemples. En effet, la production d'aluminium est coûteuse en énergie, 1 kg d'aluminium requiert près de 40 MJ [3]. Le Québec, qui compte 8 des 9 alumineries au Canada, souhaite augmenter sa production [8,9]. Une solution est l'augmentation du courant électrique dans les cellules d'électrolyse. Ainsi, la quantité produite augmente tout en gardant un ratio d'énergie consommée par unité de masse produite faible avec les mêmes actifs. Cependant, l'augmentation du courant élève la température du procédé au point de faire fondre la couche protectrice de bain sur la paroi et déséquilibre le bilan thermique de la cellule. La durée de vie d'une cuve sans protection est écourtée ce qui amène des coûts importants en remplacement hâtif et une augmentation de matières résiduelles. Être en mesure de prédire le comportement de la couche de bain solidifiée devient donc essentiel pour comprendre les impacts de la variation du courant. La prise de mesures manuelles ou automatiques s'avère extrêmement difficile dû aux conditions hostiles. Des modèles numériques sont donc nécessaires pour prédire la formation ou la fonte de la couche de protection.

Présentement, il existe des modèles thermoélectriques 3D qui résolvent numériquement le bilan thermoélectrique d'une section de la cellule d'électrolyse en régime permanent [10–13] et en régime transitoire [2,14,15]. À ce propos, plusieurs recherches récentes de l'équipe supervisée

par le Professeur Désilets utilisent ces modèles. Les derniers développements portent sur l'ajout de cavités dans le matériel de recouvrement [12] et la modification de cette cavité en fonction de la température [11,16]. De cette façon, les auteurs obtiennent des prédictions des pertes thermiques plus précises sur le dessus du modèle ce qui concorde davantage avec les mesures industrielles. La résolution du bilan thermoélectrique est essentielle pour obtenir de l'information sur l'utilisation de l'énergie dans la cellule. Ces informations sont utiles pour le design des cuves et l'ajustement de certains paramètres dans l'objectif de minimiser la consommation d'énergie [17]. Ils prédisent, entre autres, l'épaisseur de la couche de protection. Dans l'objectif de modifier le courant de la cellule fréquemment, cette prédiction doit être faite en continu. L'équipe de recherche a étudié la possibilité d'un contrôle en continu à l'aide d'un modèle qui prédit l'épaisseur de la gelée en fonction du temps [2]. C'est un modèle mathématique à variables d'états dont les coefficients sont déterminés avec les résultats des simulations réalisées sur le modèle tranche 3D. Pour chaque scénario d'opération, ce modèle nécessite donc la résolution du modèle 3D. C'est une méthode qui prédit bien l'épaisseur de la gelée, mais demande plusieurs heures de simulations. Une autre option envisagée est d'utiliser directement un modèle thermoélectrique pour le contrôle continu basé sur le concept de jumeau numérique. Selon les ingénieurs de ce domaine industriel, ce modèle devrait avoir au minimum une vitesse de résolution 10 fois plus rapide que le modèle tranche 3D actuel. Cette idée est au centre du projet de recherche de cette maîtrise. Dans l'objectif de diminuer considérablement le temps de simulation, le modèle tranche 3D sera réduit à un modèle 2D. Le modèle produit doit résoudre numériquement le bilan d'énergie avec des résultats de températures et d'épaisseur de gelée comparables au modèle 3D. Le modèle ainsi créé peut être utilisé comme jumeau numérique.

1.2 Question de recherche

La question qui se pose alors est :

Dans un objectif de contrôle continu, est-il possible de réduire suffisamment le temps de calcul pour la résolution de la position du talus (gelée) à l'aide d'un modèle 2D issu de la réduction dimensionnelle d'un modèle tranche thermoélectrique 3D représentant une section d'une cellule d'électrolyse d'aluminium sans en réduire sa qualité d'estimation ?

La pertinence de cette question se trouve principalement au niveau de la méthode utilisée pour obtenir le modèle 2D, du gain de temps de calcul et de la qualité d'estimation. Ces deux derniers critères sont essentiels pour l'utilisation d'un modèle numérique dans un objectif de contrôle continu. Répondre à la question de recherche permet de connaître les résultats de ces deux critères et donc, de valider la pertinence d'utiliser la méthode proposée. La création de modèles fiables et plus rapides peut être un processus exigeant en ressources pour les industries, la réponse à cette question permet de guider leur décision pour réaliser la méthode proposée. La réponse est d'autant plus importante pour les industries possédant déjà des modèles 3D. En effet, la réduction dimensionnelle peut s'avérer très utile si cette enquête est positive.

1.3 Objectifs du projet de recherche

1.3.1 Objectif global

L'objectif global du projet de recherche est de produire un modèle 2D à partir du modèle tranche 3D existant qui peut être utilisé pour du contrôle de procédé. Le modèle produit doit résoudre numériquement le bilan thermique et électrique en régime permanent avec des résultats comparables et optimisés au modèle 3D. Le profil de la gelée devra être solutionné par le modèle selon différentes conditions de courant ou de résistivité électrique.

1.3.2 Objectifs spécifiques

Créer le modèle 2D

L'équipe de recherche de l'Université de Sherbrooke et le partenaire industriel ne disposent pas d'un modèle 2D complet. Il devra donc être créé à partir du modèle 3D existant à partir d'une réduction dimensionnelle. Malgré la suppression d'une dimension, ce modèle devra représenter la géométrie d'une section d'une CEA et inclure le maximum de paramètres et de composantes présents dans le modèle tranche 3D. Le modèle produit devra résoudre le bilan énergétique et électrique en régime permanent.

Optimiser et valider le modèle 2D

Le modèle se doit de donner des résultats près de ceux du modèle 3D. Cet objectif vise à modifier les paramètres internes ajoutés au modèle 2D pour rapprocher ses résultats à ceux du modèle 3D. Ces résultats sont des profils de températures et de tensions électriques, des flux de chaleur, la génération de chaleur et des épaisseurs de gelée. Une fois le modèle 2D optimisé, il sera

validé. Pour se faire, l'intensité du courant sera variée et le modèle 2D devra répondre avec des résultats près de ceux du modèle 3D. Cette étape de validation se fait sans que le modèle 2D soit optimisé à nouveau à chaque changement de courant.

1.4 Contributions originales

1.4.1 Contribution à l'industrie de l'aluminium

Un modèle tranche 2D thermoélectrique d'une CEA permettrait de prédire l'épaisseur de la couche de protection, les profils de températures et de tensions électriques, les pertes thermiques et la génération de chaleur en fonction de la variation du courant. Avec un temps de résolution envisagé d'une fraction de celui du modèle tranche 3D utilisée actuellement par l'industrie, ce modèle 2D serait un très bon point de départ pour son utilisation comme jumeau numérique. Pour ce qui est de son application périodique, il permettrait une augmentation du nombre de simulation réalisées ainsi que l'utilisation d'ordinateurs moins performants plus accessibles pour les ingénieurs de procédé.

1.4.2 Contribution pour le développement technologique de l'industrie

Les travaux de recherches de ce projet apporteront des connaissances approfondies sur la réduction dimensionnelle des modèles numériques. Plus précisément, des modèles 3D pas complètement symétriques selon l'axe de la profondeur qui résolvent le transfert de chaleur. Ces connaissances se traduiront par une démarche claire construite sur des bases théoriques solides. Les industries touchées par ce nouveau savoir sont nombreuses. L'utilisation des modèles numériques dans les milieux industriels a augmenté avec la montée rapide de la capacité de calcul des ordinateurs. De plus, ils sont souvent utilisés pour résoudre le transfert thermique. Que ce soit dans le domaine de l'énergie [18–21], de la transformation [11,22] ou de la technologie [23], il est important de connaître les flux de chaleur présents et les températures atteintes par le procédé ou les composantes. En effet, la modélisation est un domaine majeur de l'industrie 4.0 qui s'implante dans tous ces secteurs d'activités [24]. De plus, le contrôle continu du procédé est grandement touché par cette nouvelle ère industrielle. L'utilisation de jumeaux numérique est en plein essor [25]. La problématique liée au temps de calcul considérable pour résoudre le modèle numérique 3D deviendra donc une réalité pour plusieurs entreprises. L'intérêt de l'industrie pour un modèle fiable avec un temps de calcul atténué est donc

important. Le protocole proposé par ce projet de recherche pourrait être appliqué par toutes les industries possédant un modèle numérique thermique ou thermoélectrique 3D.

Ce projet sera également un premier pas pour la création de paramètres ajustables basés sur les propriétés des matériaux au sein d'un modèle. Les méthodes d'optimisation demeureront simples et pourront donc être modifiées par la communauté de la recherche industrielle pour améliorer le protocole de réduction dimensionnelle.

1.5 Plan du document

Ce document est séparé en 6 chapitres. Premièrement, l'introduction amène le contexte industriel du projet ainsi que la problématique à laquelle le projet tente de répondre. Le projet est également détaillé pour en comprendre son ampleur. Deuxièmement, le chapitre de l'état de l'art fait le point sur ce qui existe présentement en modélisation dans le domaine de la fabrication de l'aluminium. Les modèles les plus utilisés sont détaillés avec leurs inconvénients dans un objectif de contrôle continu. Les diverses tentatives pour contrer ces inconvénients sont également présentées ainsi que leur applicabilité à la problématique du projet. Troisièmement, le chapitre du développement explique les étapes préliminaires réalisées pour valider la pertinence de la démarche envisagée avant de travailler directement avec le modèle tranche 3D qui peut s'avérer complexe. C'est également une partie essentielle des premiers travaux réalisés durant ce projet et qui permet de bien enchaîner vers l'article produit durant la maîtrise. En effet, le quatrième chapitre présente l'article soumis à la revue *Applied Thermal Engineering*. Cet article inclut la méthodologie complète de la production du modèle 2D jusqu'à sa calibration ainsi que les résultats de ce modèle en fonction de la variation du courant. Pour bien compléter les parties incomplètes de l'article, un cinquième chapitre portant sur le transfert industriel est ajouté. Ce chapitre décrit le processus suivi pour effectuer le transfert des connaissances acquises durant ce projet avec le partenaire industriel. Le dernier chapitre est la conclusion et résume l'ensemble des travaux effectués et les résultats les plus importants ayant un impact dans le domaine industriel. Le document adopte le type bibliographique de la revue *Nature*.

2. ÉTAT DE L'ART

Au niveau du bilan d'énergie, le suivi d'une CEA n'est pas simple. L'instrumentation pour la lecture thermique interne continue y est très difficile. La température élevée, la présence d'un mélange ionique fondu et de gaz fluorés rendent l'environnement hostile pour les sondes. Le changement fréquent d'anodes rend également complexe l'installation d'équipements de mesure fixes. Pour obtenir de l'information sur le fonctionnement de ces cellules, des modèles qui demandent le moins de mesures intrusives possible sont utilisés.

2.1 Modèles existants pour les cellules d'électrolyse d'aluminium

2.1.1 Modèles 1D

Différents types de modèles ont été développés, dont les modèles thermiques en 1D. Kiss et Dassylva-Raymond [26] proposent un de ces modèles, basé sur un réseau de résistances thermiques en parallèle. Les auteurs cherchent à prédire l'effet de la variation de puissance sur l'épaisseur du talus. Ce réseau représente la chaleur passant par la paroi avec et sans couche de protection. Les valeurs des résistances thermiques sont obtenues à l'aide d'un modèle numérique plus complet. Avec les bonnes conditions aux frontières et les propriétés des matériaux, une variation linéaire de l'épaisseur de talus peut être trouvée. Puisqu'il y a seulement une dimension au réseau, un seul résultat d'épaisseur moyenne est obtenu, et non un profil complet variant selon la hauteur dans la CEA. C'est donc une simplification importante de ce qui se passe à l'intérieur. Il est également conclu que le modèle linéaire peut fonctionner seulement pour une certaine zone de variation de puissance, ce qui limite son utilisation. Également dans l'objectif de prédire l'épaisseur du talus à l'intérieur d'une CEA, mais cette fois de façon continue, Marois et al [27] proposent une méthode de transfert de chaleur inverse. Cette méthode de résolution itérative résout le bilan d'énergie à l'intérieur d'une boucle qui minimise la différence entre la température prédite et celle d'une sonde de mesure de température fixée sur la paroi externe. Les auteurs font l'hypothèse que les gradients de température principaux suivent une seule direction, ce qui simplifie le bilan et donne une seule mesure d'épaisseur. Encore une fois, il n'y a pas de profil complet de l'épaisseur de la couche de protection selon la hauteur. Comparativement au modèle de Kiss et Dassylva-Raymond [26], celui-ci n'a pas besoin d'être

calibré avec un modèle plus complet. Cependant, l'ajout d'une sonde de température sur le caisson est nécessaire.

2.1.2 Modèle thermique 2D

Les premiers modèles thermiques numériques ont vu le jour avec l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs. Ces ordinateurs permettaient de résoudre numériquement des modèles en 2D avec la méthode des éléments finis. Il y a plus de 25 ans, un modèle de ce type a été utilisé pour résoudre le bilan d'énergie et la position de la couche de protection d'une CEA fonctionnant entre 160 kA et 180 kA [28]. Les conditions aux frontières, les propriétés des matériaux et la source de chaleur interne permettent de résoudre le bilan d'énergie et d'obtenir le profil de température. La géométrie de ce modèle est incomplète, puisque la tige anodique, la traverse et les rondins y sont absents. De plus, le bilan électrique n'est pas résolu, les auteurs utilisent les tensions mesurées pour calculer l'effet Joule généré. Ce type de modèle n'est plus utilisé aujourd'hui pour connaître la position de la couche de protection. En effet, l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs a permis de résoudre le bilan électrique à l'intérieur du bilan d'énergie et d'ajouter une dimension au modèle dans l'objectif d'augmenter l'exactitude de la géométrie.

Actuellement, le modèle numérique thermique 2D peut être utilisé pour étudier ou expérimenter rapidement différentes dynamiques dans une CEA. Une fois la dynamique prouvée, elle peut être implémentée dans les modèles 3D complets. Un modèle thermique numérique 2D a été produit et utilisé par Lebreux et al [16] pour étudier la transformation du matériel de recouvrement en croûte ainsi que la fusion de cette dernière. Principalement composé d'alumine et de bain broyé, le matériel de recouvrement de l'anode (ACM) sert à isoler thermiquement le dessus de la cuve et à empêcher l'oxydation de l'anode. Il est ajouté sur le dessus de l'anode nouvellement changée et se modifie avec l'augmentation de la température et au contact du bain liquide. Le modèle comprend un terme de conversion, pour résoudre la transformation chimique, et il résout également le bilan thermique. Les propriétés thermophysiques varient avec la transformation chimique et le changement de phase. Encore une fois, la géométrie est incomplète, cette fois c'est la cathode qui n'est pas présente.

2.1.3 Modèle thermoélectrique 3D

Tel que spécifié précédemment, l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs permet maintenant de modéliser une géométrie complexe en 3D et de résoudre simultanément les bilans électrique et thermique. Lorsqu'une dimension est ajoutée, le modèle se rapproche de la réalité, ainsi, le modèle thermoélectrique 3D représente la moitié d'une coupe transversale d'une CEA. Deux options sont possibles; la tranche 3D peut être complète et comprendre tous les matériaux présents dans la cellule, ou partielle et comprendre seulement une section.

Les résultats de la première option sont utilisés pour obtenir de l'information sur le fonctionnement général de la cuve, tel que le profil de température du centre à la paroi, les flux de chaleur à certaines surfaces et la position du talus entre autres. Ce type de modèle a été utilisé par plusieurs groupes de chercheurs dont Allard et al [11,12,14], Lebreux et al [2], Baharvand et al [29], Dupuis [13], Hongliang et al [15] ainsi que Tao et al [30]. Les études effectuées portent sur le profil de gelée, la distribution du courant, les pertes thermiques et l'effet des cavités entre le bain et la croûte. Pour résoudre le bilan thermoélectrique, ces modèles utilisent la méthode des éléments finis. Le changement de phase est résolu avec la méthode enthalpique et les propriétés thermophysiques varient avec la température et le changement de phase. Dans ce travail le modèle tranche 3D est celui qui est utilisé par l'Université de Sherbrooke et leur partenaire industriel Rio Tinto. La géométrie de ce type de modèle est illustrée dans la Figure 2-1.

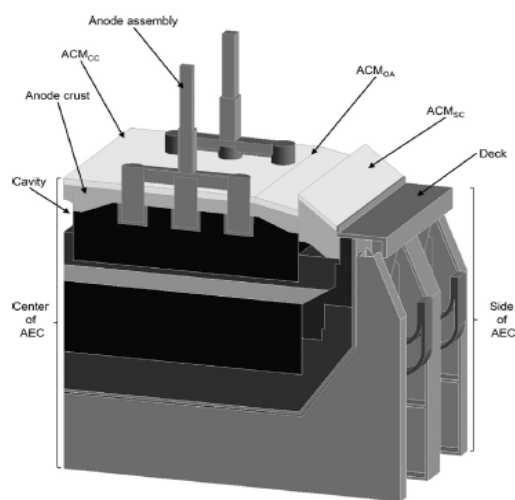


Figure 2-1 Schématisation du modèle tranche thermoélectrique 3D complet [11]

La Figure 2-1 présente la complexité du modèle qui est composé de tous les éléments d'une CEA ainsi que leur position dans la cuve. L'épaisseur de la tranche peut varier selon la technologie de cuve représentée. Il est à noter que le modèle thermoélectrique 3D plus complet peut également représenter le quart d'une CEA, beaucoup moins utilisé vu l'augmentation considérable du temps de calcul. Ce type de modèle utilisé par Dupuis [13] permet d'augmenter la précision des résultats des pertes thermiques et de la densité du courant de la cuve aux extrémités de la cuve. Le modèle en coin est spécifique à cette zone et donne difficilement une idée du comportement moyen de l'ensemble de la CEA, car les flux de chaleur y sont différents.

Quant au modèle tranche thermoélectrique partiel, il est habituellement utilisé lorsqu'une analyse détaillée est requise pour le design d'une section de la cellule, telle que l'ensemble cathodique ou anodique. De cette manière, le bilan est résolu seulement pour la partie désirée. Cette tranche partielle demande de connaître les conditions aux frontières utilisées, qui diffèrent des frontières habituelles de la tranche complète. Ce type de modèle a été produit par Blais et al [31] pour représenter un ensemble cathodique dans le but de l'optimiser. La résolution du bilan thermoélectrique permet d'étudier la densité de courant. Il permet de démontrer l'impact des modifications au design de la barre collectrice et d'optimiser la distribution du courant à la surface du bloc cathodique pour améliorer la durée de la vie de la cuve.

2.1.4 Modèle thermoélectrique et magnétohydrodynamique (TE-MHD) 3D d'une cuve complète

Ce type de modèle est le plus complet. Il donne de l'information sur le profil de vitesse des liquides dans la cuve, la densité de courant et sur le bilan d'énergie de l'entièreté de la CEA. Il a été utilisé par plusieurs groupes dont Langlois et al [32], Dupuis et al [33] ainsi que Hongliang et al [34]. Le modèle TE-MHD fonctionne en chaîne avec le modèle tranche thermoélectrique 3D [32] et aussi de façon itérative [33]. En effet, avec la densité de courant et le profil de températures obtenus avec le modèle tranche 3D, le bilan d'énergie global, les forces électromagnétiques et le profil de vitesse qui en découle peuvent être calculés. Ce profil de vitesse informe également sur la convection de la chaleur à l'intérieur de la cuve, ce qui peut alimenter une autre simulation du modèle tranche 3D et résoudre le bilan d'énergie local pour alimenter à son tour le modèle TE-MHD complet et ainsi de suite. Le modèle TE-MHD à l'avantage de résoudre l'ensemble de la cuve. Il informe de l'épaisseur du talus sur tout le

contour de la cuve et non pour une seule zone moyenne comme le modèle tranche 3D. La position choisie dans la CEA pour le modèle tranche 3D peut diminuer la précision des résultats. Les conditions varient si la position est en amont ou en aval de l'entrée du courant et si c'est un coin ou le centre de la cuve [32]. C'est ce qui limite l'utilisation du modèle tranche 3D. Le modèle TE-MHD complet est un outil essentiel pour la conception des CEA et des systèmes d'alimentation de l'alumine. Le profil de l'épaisseur du talus global permet de situer les zones critiques de la cuve où la couche de protection est mince. De plus, le profil de vitesse informe sur le déplacement de l'alumine alimenté dans la cuve. Cependant, le modèle TE-MHD complet est complexe et gourmand en temps de calcul, ce qui le rend moins inutilisable pour un objectif de contrôle continu.

2.2 Hypothèses du modèle tranche 3D

Les hypothèses utilisées à l'intérieur de ce modèle sont essentielles à son fonctionnement. Les hypothèses présentées dans cette section sont tirées du modèle tranche complet utilisé par Allard et al [11,12,14] et Lebreux et al [2]. Premièrement, une symétrie est assumée sur toutes les surfaces normales à la tranche dans l'objectif de découper la tranche transversale dans la cuve. Deuxièmement, la conductivité du bain liquide est augmentée pour prendre en compte la convection. En effet, tel que discuté pour le modèle TE-MHD complet, le bain et le métal liquides se déplacent dans la CEA, ce qui rend le transfert de chaleur par convection dominant par rapport à la conduction. Cependant, le modèle thermoélectrique 3D actuel n'est pas construit pour insérer un phénomène de convection pour un matériau fixe et il n'y a pas de résolution pour le mouvement des fluides. Par conséquent, la conduction thermique réelle du bain liquide est augmentée dans l'objectif d'imiter l'amélioration du transfert due à la convection. Les auteurs font l'hypothèse que cette correction est suffisante. Troisièmement, la chaleur transportée par transfert de masse par diffusion est négligée par rapport à l'effet convectif dominant dans le bain liquide. Finalement, les auteurs supposent que toutes les propriétés physiques des matériaux sont connues. Cette hypothèse est cohérente puisque la majorité des matériaux présents sont déjà bien connus et répertoriés. De plus, de la caractérisation en laboratoire est habituellement effectuée lorsqu'il n'y a pas suffisamment d'information sur les matériaux. Par exemple, Allard et al [35] ont fait la caractérisation de la conductivité thermique de la croute pour un intervalle de 100°C à 950°C.

2.3 Équations du modèle tranche 3D

Le modèle tranche thermoélectrique 3D résout le bilan thermique et électrique. Les équations (2.1) et (2.2) suivantes illustrent la résolution de la conservation des charges électriques et de l'énergie respectivement [2,11,12,14,15,30].

$$\nabla \cdot [\sigma_{(T)} \nabla V] = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot [k_{(T)} \nabla T] + \ddot{q} = \rho C_p * \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.2)$$

Dans ces équations, σ représente la conductivité électrique, V est le potentiel électrique, k la conductivité thermique, T la température, ρ la densité du matériau, C_p est la capacité calorifique [2] et t le temps. La source de chaleur volumique \ddot{q} est l'effet Joule dans ce cas [2]. Ce terme source est calculé à partir du champ électrique, E et la résistivité électrique $\sigma_{(T)}$ dans l'équation suivante [2,11,12,14,15,30].

$$\ddot{q} = \sigma_{(T)} E^2 \quad (2.3)$$

Le champ électrique est également calculé à partir du potentiel électrique V à l'aide de l'équation ci-dessous [2,11,12,14,15,30].

$$E = -\nabla V \quad (2.4)$$

Il est à noter que les équations présentées dépendent du temps. Cependant, dans le cas d'une résolution en régime permanent, les dérivées relatives au temps sont nulles et les équations se simplifient.

2.4 Conditions aux frontières et validation du modèle tranche 3D

Afin de représenter la réalité des CEA en opération, les simulations sont alimentées et validées avec des mesures industrielles. Allard et al [11,12,14] ont utilisé cette stratégie. Les auteurs ont effectué des campagnes de mesures sur des anodes de demi-vie [11,12] et une anode subissant un traitement de voltage [14]. Ils ont également instrumenté une anode durant la majorité de sa vie [14]. Les mesures effectuées sont géométriques et thermiques. Ces deux types de mesures servent à ajuster les conditions aux frontières et valider les résultats de la simulation.

En ce qui concerne les conditions aux frontières, les mesures géométriques telles que la hauteur du matériel de recouvrement poudreux et de la croûte à différents endroits ont servi à positionner ces frontières dans la simulation [12]. Les mesures thermiques sont également d'une grande utilité pour les conditions aux frontières car elles servent à calculer un coefficient de convection effectif à appliquer dans le modèle. Ces mesures sont la température de l'air ambiant ainsi que les températures et les flux de chaleur sur ces surfaces. Allard et al [11,12,14] ont mesuré ces valeurs à l'aide de thermocouples et de fluxmètres. La Figure 2-2 illustre le positionnement de ces mesures de flux de chaleur et de températures.

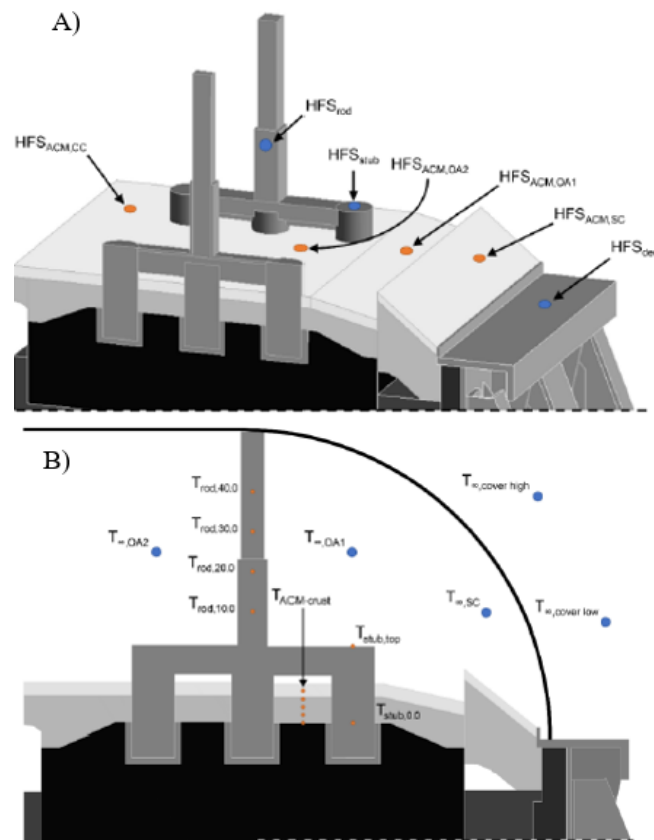


Figure 2-2 Positionnement des mesures de A) flux de chaleur (HFS) et de B) températures (T) [14]

La Figure 2-2 révèle que Allard et al [14] se sont concentrés sur le dessus de la cuve. Plusieurs zones ont été étudiées pour bien ajuster la simulation.

En utilisant le flux de chaleur (q''), la température de surface (T_S) et la température ambiante (T_∞), l'équation (2.5) suivante permet de calculer le coefficient de convection effectif (h_{eff}) [11].

$$q'' = h_{eff}(T_S - T_\infty) \quad (2.5)$$

Le coefficient de convection est effectif car le flux de chaleur mesuré dépend également du rayonnement. Le coefficient calculé avec les mesures considère donc la convection et le rayonnement. Pour chaque zone où un flux de chaleur et des températures sont mesurés, un coefficient est calculé et appliqué aux frontières dans le modèle 3D. Ces frontières sont représentées par Ω_1 à Ω_{15} dans la Figure 2-3 suivante.

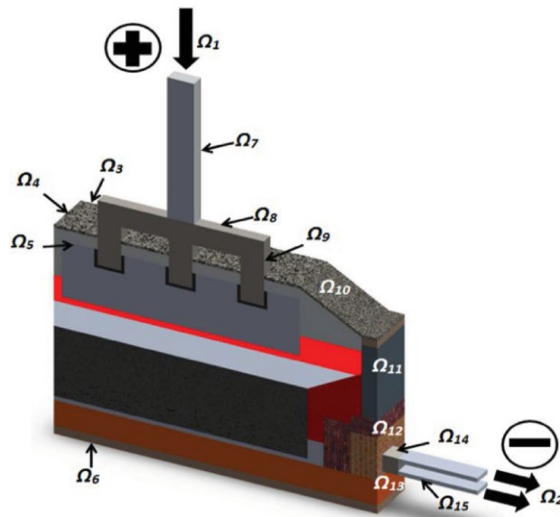


Figure 2-3 Positions des différentes conditions aux frontières du modèle tranche 3D [2]

Quant à la validation du modèle tranche 3D, Allard et al [11,12,14] utilisent directement les mesures de températures et des flux de chaleur à la surface. En effet, ils comparent les résultats du modèle avec ces mesures. Pour ce qui est des températures obtenues dans la simulation, une erreur relative moyenne de 4.7% est constatée comparativement aux mesures des fluxmètres et de 3% comparativement aux lectures des thermocouples [11]. Une autre mesure géométrique est également utilisée pour valider des effets observés dans la simulation. La position du talus prédite par le modèle avant et après une augmentation de voltage est comparée aux mesures. De cette façon, l'effet de la diminution du talus avec l'augmentation du voltage montrée par la simulation a été validé [14]. Pour ce qui est du passage de l'électricité, une intensité électrique

est appliquée sur la tige anodique Ω_1 et une tension nulle est appliquée à l'extrémité des flexibles Ω_2 . Ces conditions sont les mêmes qu'en usine, elles sont facilement validées avec des mesures simples. La mesure de tension à la sortie des flexibles est généralement prise en continue dans les usines.

À la lumière de ces informations, le modèle tranche 3D représente bien les CEA en usine et cette même fiabilité est désirée pour un modèle de contrôle continu.

2.5 Temps de calcul du modèle tranche 3D

Présentement, il y a peu de documentation sur le temps de résolution du modèle tranche 3D utilisé industriellement. L'industrie en est encore à améliorer la précision de ses résultats [11,12,16] ou de l'utiliser pour des études sur la dynamique et les phénomènes à l'intérieur des CEA [2,14,15,29,30,36,37]. Un temps de calcul de 12h pour 72h de simulation transitoire a été rapporté [2]. Ce modèle comprend 153159 éléments pour un total de 508215 nœuds et est résolu pour un pas de temps de 600 secondes. La résolution est effectuée avec ordinateur comprenant un processeur Intel Xeon E5-1650 v4 avec 32 Gb de mémoire vive. Selon les ingénieurs qui travaillent avec ce genre de modèle 3D, le temps de calcul devrait être réduit d'au moins 90% pour être viable en contrôle continu.

2.6 Diminution du temps de calcul

Le temps de résolution est une variable importante pour l'utilisation de ce modèle dans un objectif de contrôle en continu. La diminution du temps de calcul a été abordée par Lebreux et al [2] et par Dupuis [13] par le développement de modèles réduits. Lebreux et al [2] proposent un modèle de variables d'états où les constantes sont calculées avec des résultats générés par le modèle tranche 3D. Une fois le modèle de variables d'états calibré pour plusieurs cas différents, l'épaisseur de la gelée en fonction du temps est calculée en 1 seconde comparativement à 12h. La diminution du temps de résolution est remarquable. Cependant, cette approche requiert la résolution de plusieurs cas différents avec le modèle tranche 3D. Ces résolutions demandent beaucoup de temps et limitent l'application du modèle à des conditions représentées par ces cas. S'il est utilisé en contrôle continu, il faut être certain que ce qui se passe dans la CEA est à l'intérieur des scénarios simulés d'avance, ce qui peut ne pas être le cas. Quant à Dupuis [13], il propose un modèle 2D réduit qui représente une tranche 3D sur le plan x-y où la tige anodique,

la traverse et les rondins sont représentés par des éléments 1D. Son modèle trouve des résultats très près du modèle 3D avec un temps de calcul réduit de 85%. Cependant, l'auteur n'explique pas la méthodologie qu'il a utilisée et n'explique pas les différences entre son modèle réduit 2D et son modèle tranche 3D. L'idée d'enlever une dimension au modèle est logique pour la diminution du temps de calcul, car le nombre d'éléments à résoudre diminue grandement. De plus, l'utilisation du modèle 2D permet de résoudre une panoplie de scénarios différents sans avoir à résoudre le modèle 3D chaque fois au préalable pour ajuster le modèle 2D.

L'idée de modèles compacts est également présente dans le domaine informatique où le transfert de chaleur est essentiel pour le refroidissement thermoélectrique de certaines composantes. La réduction dimensionnelle d'un modèle en trois dimensions vers un modèle compacts en deux dimensions a déjà été étudiée. Prather et Puranik [38] ont créé un modèle thermoélectrique compact représentant un modèle plus complexe en 3D. Cette fois, la méthode pour y parvenir est plus détaillée. Ils ont utilisé les réseaux de résistances thermiques 3D pour trouver les résistances équivalentes qui peuvent être imitées en modifiant les propriétés des matériaux. Il en résulte un modèle compact 3D moins détaillé qui prédit la température et le voltage avec une précision très près de celle du modèle 3D complet pour un régime permanent et transitoire. Le gain de temps n'est toutefois pas mentionné. Dans le même domaine d'application, Chen et Snyder [39] ont créé un modèle compact utilisant les propriétés effectives basé sur le réseau de résistance thermique tel que fait par Prather et Puranik. Les résultats de ce modèle compact sont comparables à ceux d'un modèle 3D complet et il se résout en 100 fois moins de temps que le modèle 3D complet.

Ces informations montrent que la création d'un modèle tranche en 2D à partir du modèle tranche 3D d'une CEA est réalisable et pourraient permettre un gain de temps suffisant pour être applicable au contrôle continu

3. DÉVELOPPEMENT

Avant de commencer la réduction dimensionnelle, une démarche pour créer et modifier le modèle 2D souhaité a été élaborée. Cette démarche détaillée dans le chapitre suivant est basée sur la théorie des phénomènes électriques et de transfert de chaleur. En effet, l'article écrit durant le projet est présenté dans le chapitre suivant et explique la création du modèle 2D et la démarche de la réduction dimensionnelle à partir du modèle tranche 3D. Cependant, un travail important, qui n'est pas mentionné dans l'article, a été effectué au préalable. Ce travail consiste en une étude de faisabilité préliminaire pour valider la démarche élaborée initialement. Cette étude est présentée dans ce chapitre et permet de mettre en lumière le travail qui a mené aux travaux et méthodes présentés dans l'article au chapitre suivant.

3.1 Étude de faisabilité préliminaire

Implanter les méthodes de création et de modifications directement dans le modèle tranche 3D complet est complexe. Il y a plusieurs étapes à réaliser et ça peut être difficile de déterminer si une méthode fonctionne bien avec plusieurs variables en jeu simultanément. C'est pour cette raison que les premières étapes du projet portent sur une étude de faisabilité des méthodes envisagées. Pour ce faire, un modèle 3D grandement simplifié et sa réduction dimensionnelle en 2D ont été créés par étape avec une complexité graduelle. Cette étape est également nécessaire pour assurer un bon apprentissage du langage de programmation du logiciel Ansys™, un outil essentiel pour la suite du projet avec le modèle tranche 3D. L'étude de faisabilité préliminaire faite avec des modèles simplifiés (mini-modèles) sert donc à valider les méthodes proposées ainsi qu'à connaître le logiciel de modélisation en détail.

Cette étude est présentée en deux parties. Premièrement, le processus de modifications présente les mini-modèles 3D et 2D à complexité graduelle avec les modifications étudiées durant ces étapes. Deuxièmement, les résultats de cette étude de faisabilité sont analysés pour valider la pertinence de la démarche envisagée.

3.1.1 Processus de modifications

Le processus de création des mini-modèles 3D et 2D est fait en 3 grandes étapes présentées dans la Figure 3-1 suivante.

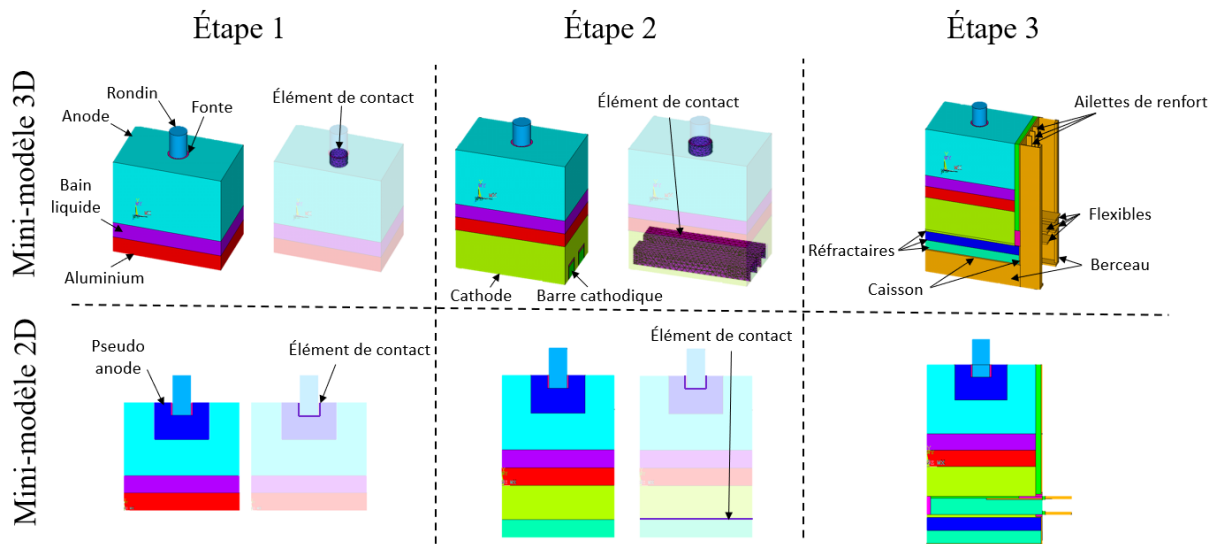


Figure 3-1 Étapes préliminaires avec les mini-modèles

À chaque étape, le mini-modèle 3D est créé et la réduction dimensionnelle est effectuée pour obtenir le mini-modèle 2D. Lors des réductions, les commandes pour créer des volumes et des surfaces sont modifiées pour créer des surfaces et des lignes respectivement. De plus, le maillage est inchangé, la taille des éléments reste la même pour chaque composante conservée du modèle 3D au modèle 2D. C'est le type d'éléments qui est modifié. Les éléments volumiques et surfaciques sont remplacés par des éléments surfaciques et linéaires respectivement. En effet, les éléments 3D *SOLID69* sont substitués par les éléments 2D *PLANE223*. Tous les éléments supportent les échanges thermoélectriques.

Étape 1

La première étape représente seulement la section anodique. Elle comprend les composantes essentielles à l'entrée du courant. Cette étape comporte 5 objectifs. Premièrement, étant l'étape initiale, le but est de créer un mini-modèle 3D thermoélectrique fonctionnel. En effet, c'est à cette étape que les commandes de conception de composantes, de maillage et de création de matériaux avec leurs propriétés thermophysiques sont apprises et effectuées. L'attribution des conditions aux frontières et l'association des composantes à leur matériau sont également réalisées. Le deuxième objectif est d'effectuer la réduction dimensionnelle pour la première fois. Il s'agit donc de modifier les commandes du mini-modèle 3D pour obtenir le mini-modèle 2D.

C'est à cette étape que la méthodologie de réduction dimensionnelle expliquée au paragraphe précédent est développée. Une fois ces deux premiers objectifs complétés, les mini-modèles de l'étape 1 sont fonctionnels et il reste à minimiser les écarts entre leurs résultats. Pour ce faire, le troisième objectif consiste à déterminer le courant à appliquer à la surface du rondin du mini-modèle 2D pour obtenir la même courant total qui passera dans les deux modèles. Cet objectif permet de comprendre le fonctionnement des éléments 2D pour l'attribution de conditions électriques à leur surface. Plus précisément, les éléments 2D considèrent une profondeur unitaire comparativement aux éléments 3D ayant une profondeur spécifiée, ce qui peut grandement modifier la densité du courant qui est appliquée entre les modèles. Ensuite, le quatrième objectif est d'étudier la méthode de modification des propriétés des matériaux du mini-modèle 2D au niveau de l'ensemble anodique pour obtenir la même énergie générée entre les modèles malgré leurs différences physiques causées par la suppression d'une dimension. Finalement, le cinquième objectif est d'évaluer la modification nécessaire des propriétés des éléments de contacts présents dans le mini-modèle 2D. Ces éléments sont clairement identifiés dans la Figure 3-1 et leur différence de surface entre les mini-modèles est notable. C'est cette différence qui nécessite une modification des paramètres. Puisque ces éléments de contact servent à imiter une résistance entre deux surfaces, ils doivent engendrer le même gradient thermique ou électrique dans les deux mini-modèles comparés. De plus, lors de la réduction dimensionnelle, les éléments de contact *TARGE170* et *CONTA173* dans le modèle 3D sont changés pour les éléments 2D *TARGE169* et *CONTA172*.

Étape 2

L'étape 2 consiste à ajouter les composantes qui forment l'ensemble cathodique. Avec cet ajout, 2 objectifs peuvent être réalisés. Le premier objectif est semblable à l'objectif de l'étape 1 de tester la méthode de modification des propriétés des matériaux du mini-modèle 2D. En revanche, pour l'étape 2, c'est au niveau de la cathode et des barres cathodiques que l'énergie générée doit être semblable entre les modèles. Le deuxième objectif concerne la modification des propriétés des éléments de contact à l'interface cathode/barre cathodique où la différence physique est importante entre les modèles. Encore une fois, le but est d'obtenir le même gradient thermique et électrique entre ces composantes dans les deux mini-modèles.

Étape 3

Le mini-modèle 3D de l'étape 3 comporte plusieurs ajouts au niveau des parois extérieures. En effet, pour imiter la tranche complète 3D, les ailettes, le berceau, le caisson, les flexibles et les matériaux réfractaires sont ajoutés. C'est à cette étape que plusieurs coefficients convectifs sont attribués sur diverses zones à la surface des parois extérieures. La Figure 3-1 montre que le mini-modèle 2D associé à l'étape 3 comprend des parois externes différentes du mini-modèle 3D. L'objectif de l'étape 3 est donc de valider la méthode proposée pour la modification des coefficients convectifs du mini-modèle 2D. Cette méthode doit minimiser la différence des pertes thermiques convectives entre les modèles pour différentes zones analysées.

Étapes itératives

Une fois que l'objectif de l'étape 3 est réalisé, les étapes 1 à 3 sont revisitées avec les mini-modèles complets de l'étape 3. Les phénomènes validés à l'étape 1 et 2 sont revalidés avec le modèle complet qui découle de l'étape 3. Ainsi, la méthode de modification des propriétés des matériaux et des propriétés des éléments de contacts est réajustée pour l'ensemble anodique (étape 1) et pour l'ensemble cathodique (étape 2). Ensuite, la méthode pour la modification des coefficients convectifs est relancée (étape 3). Ce processus est répété jusqu'à l'obtention d'un profil de températures semblable entre les mini-modèles. Des profils semblables peuvent valider l'efficacité des méthodes de modification.

3.1.2 Résultats

Une fois les trois étapes présentées à la Figure 3-1 ainsi que les itérations d'ajustement effectuées, l'écart des profils de température entre les mini-modèles est minimisé. Pour valider que les méthodes de modifications envisagées sont robustes, les mini-modèles sont soumis à une variation de courant de $\pm 10\%$ du courant appliqué (courant nominal). Le profil de température découle de plusieurs températures calculées le long d'un vecteur qui commence dans le bas du modèle et qui se termine sur le dessus du rondin (selon l'axe y). Ce vecteur est positionné dans le milieu, soit au centre de l'axe x et z pour le mini-modèle 3D et au centre de l'axe x pour le mini-modèle 2D. La Figure 3-2 présente ces profils pour les deux mini-modèles en fonction de la variation de courant appliquée.

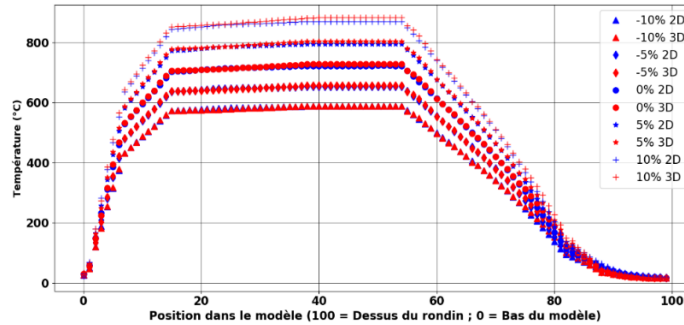


Figure 3-2 Profil de température des mini-modèles pour différentes variations de courant d'entrée

La Figure 3-2 montre clairement que le profil de température dans le mini-modèle 2D est toujours similaire à celui du mini-modèle 3D et ce, pour toutes les variations de courant effectuées. De plus, lors de ces essais, la résolution du modèle 2D est de 3 secondes comparativement à 466 secondes pour le 3D, soit 155 fois plus rapide.

3.1.3 Conclusion

L'étude de faisabilité préliminaire a permis d'évaluer la pertinence des méthodes de création et de modifications envisagées à l'amorce de ce projet ce qui a également favorisé l'apprentissage du logiciel de simulation. Ces méthodes ont été testées par étape avec des mini-modèles 3D et 2D à complexité graduelle. Malgré la simplicité de ces mini-modèles, leur profil de températures semblables ainsi que le gain de temps remarquable valide la pertinence de l'approche de travail. Pour la suite du projet, les méthodes de création et de modification peuvent être utilisées avec confiance pour la réduction dimensionnelle du modèle tranche 3D complet. Le chapitre suivant présente l'article qui détaille cette réduction dimensionnelle et qui en analyse sa performance finale

Chapitre 4 : Avant-propos

Auteurs et affiliation :

Francis Lalancette : étudiant à la maîtrise, Université de Sherbrooke, Faculté de génie, Département de génie chimique et biotechnologique.

Martin Désilets : professeur titulaire, Université de Sherbrooke, Faculté de génie, Département de génie chimique et biotechnologique.

Bastien Pansiot : étudiant au doctorat, Université de Sherbrooke, Faculté de génie, Département de génie chimique et biotechnologique.

Marc Lebreux : professionnel de recherche et chargé de cours, Université de Sherbrooke, Faculté de génie, Département de génie chimique et biotechnologique.

Jean-François Bilodeau : Conseiller principal R&D, Rio Tinto, Centre de recherche et de développement d'Arvida

Date de soumission : 08-07-2022

Revue : Applied Thermal Engineering

Titre Français : Réduction dimensionnelle d'un modèle thermoélectrique 3D pour créer un modèle 2D fiable et rapide représentant une cellule d'électrolyse d'aluminium.

Contribution au document : Cet article remplace une grande partie du chapitre de développement. Il est essentiel à la compréhension du projet de recherche, car il explique la méthodologie employée, détaille le travail de création du modèle 2D et analyse les résultats finaux obtenus avec ce modèle. Il s'insère à la suite de l'étude de faisabilité préliminaire, car c'est cette étude qui montre la pertinence de créer le modèle 2D présenté dans cet article. C'est le cœur de ce mémoire.

Résumé français : Afin d'optimiser l'utilisation de leurs actifs, les alumineries visent à augmenter le courant de leur ligne de production. De plus, les fluctuations du marché de l'énergie poussent l'industrie à exploiter des stratégies de modulation de puissance. Ces conditions de fonctionnement variables affectent directement l'épaisseur de la couche protectrice (talus) à

l'intérieur de la cellule d'électrolyse. La surveillance continue du bilan énergétique est donc de la plus haute importance, mais les mesures physiques sont difficiles en raison de l'environnement hostile. Le modèle numérique tranche thermoélectrique 3D est le plus fréquemment utilisé pour résoudre le bilan énergétique, mais son temps de résolution important l'empêche d'être utilisé dans un système de contrôle. Pour la première fois, la création d'un nouveau modèle 2D à partir d'un modèle tranche 3D existant est proposée à des fins de diagnostic thermique continu et de contrôle de procédé. La création commence avec un protocole de réduction dimensionnelle détaillé, ce qui constitue une contribution industrielle importante puisqu'il peut être appliqué à toutes les industries utilisant des modèles physiques 3D. La méthodologie rigoureuse développée implique l'identification de paramètres ajustables qui sont insérés dans le modèle 2D pour minimiser les écarts causés par les différences physiques entre les modèles et assurer sa fiabilité. Une fois calibré, le modèle 2D est testé avec une variation de courant d'entrée de $\pm 5\%$. Les résultats montrent des différences mineures (inférieures à 1 %) entre les modèles 3D et 2D pour le comportement de la distribution des pertes de chaleur et de la distribution de la chaleur générée. Les épaisseurs du talus sont très près dans les deux modèles, la plus grande différence (1,8 cm) étant sous l'erreur de mesure manuelle typique (2,5 cm). Au cours des simulations, le temps de calcul du modèle 2D était 40 à 60 fois plus rapide que le modèle 3D. A l'ère du 4.0, il s'agit d'un outil fiable et rapide pour les industries souhaitant se tourner vers des jumeaux numériques.

4. MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

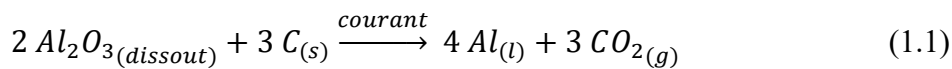
4.1 Abstract

In order to optimize the use of their assets, aluminum smelters aim at increasing the line current. In addition, the fluctuations of the energy market push the industry to exploit power modulation strategies. These variable operating conditions directly affect the thickness of the protective layer (ledge) inside the electrolysis cell. Continuous monitoring of the energy balance is therefore of utmost importance, although physical measurements are difficult due to the hostile environment. The 3D thermoelectric slice digital model is the most frequently used to solve the energy balance, but its high computation time prevents it from being used in a control system. For the first time, the creation of a novel 2D model from an existing 3D slice model is proposed for online thermal diagnosis and process control purposes. The creation starts with a detailed dimensional reduction protocol, which is a significant industrial contribution since it can be applied to any industries relying on 3D physical models. The rigorous methodology developed involves the identification of adjustable parameters that are inserted in the 2D model to minimize deviations caused by physical differences between models and ensure its reliability. Once calibrated, the 2D model is tested using a $\pm 5\%$ input current variation. The results show minor differences (below 1 %) between 3D and 2D models for the predicted behavior of the heat losses distribution and generated heat distribution. Side ledge profiles are very close in both models, the largest difference (1.8 cm) being in an acceptable range for this key operational parameter. During all simulations, the 2D model computing time was 40 to 60 times faster than the 3D model. With the 4.0 era, this is a reliable and time-efficient tool for industries wishing to turn to digital twins.

4.2 Introduction

4.2.1 Context

In 1886, the industrial process of aluminum electrolysis was invented simultaneously and independently by Charles Martin Hall in the United States and Paul Louis Hérault in France [1]. This process consists of producing aluminum in liquid state by electrolyzing the alumina (Al_2O_3) dissolved in a molten salt. On one side, the aluminum is reduced at the cathode to form liquid aluminum. On the anode side, carbon is oxidized to CO_2 . The above equation represents the overall reaction [2].



The alumina is dissolved inside an electrolytic bath composed mainly of molten cryolite (Na_3AlF_6) at nearly $960^\circ C$ [3] contained in a reactor called aluminum electrolysis cell (AEC), see Figure 4-1. The partially immersed anode and the cathode block, which is located at the bottom of the AEC, are all made of carbon [4]. During its usual operation, a layer of electrolytic bath solidifies on the internal walls and forms a ledge that plays a protective role against the chemical attack of the corrosive bath on the walls [5]. Given its higher density, liquid aluminum accumulates under the bath and acts as the chemical cathode. The aluminum level is maintained around an operational target since it is extracted periodically by siphoning. Semi-continuous alumina feeding is done through the use of point feeders that performs overtures through crust and anode covering material on top of AEC [4].

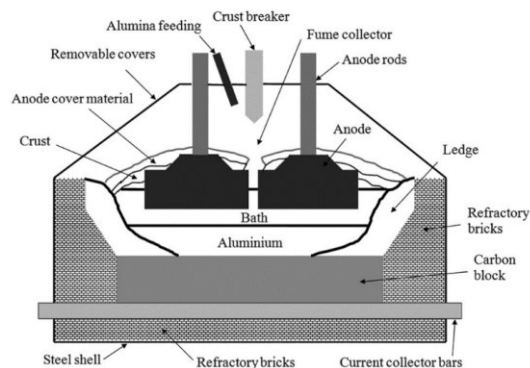


Figure 4-1 Schematic of an aluminum electrolysis cell [2]

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

Thanks to the Hall-Héroult process, the annual world's production was 67.2 Mt in 2021 [7] of which 3.1 Mt have been produced in Canada [8]. Despite this developed market, the aluminum industry faces several challenges to remain competitive. Energy management and the production of greenhouse gases are two examples. Indeed, the production of aluminum is energy-intensive; 1 kg of aluminum requires nearly 40 MJ [3]. Producers in the province of Quebec, where 8 of the 9 Canadian aluminum smelters are located, want to increase their production [8,9]. One solution is to increase the electric current in the electrolysis cells thus increasing the production using the same assets. However, the increase of current leads to rise the process temperature in turn leading to melting of the protective bath layer on the wall and unbalancing the AEC heat balance. The life span of an AEC is shortened for cells without ledge protection, which leads to significant costs due to early replacement and to a significant increase of residual materials. Being able to predict the behavior of the ledge is therefore essential to understand the impacts of the current increase. Taking either manual or automatic ledge measurements is difficult due to the hostile conditions prevailing inside AEC and cannot be done on a daily routine basis. Numerical models are therefore needed to predict the formation or melting of the ledge submitted to various changes in operating conditions. Despite the variety of numerical models already available to represent the behavior of AEC, none are used for continuous monitoring, either due to prohibitive computational resources demanded by rigorous 3D model or to the lack of reliability of simpler and CPU lean 1D models. The quantity and quality of information transmitted by these models as well as their costly computational time are two critical criteria that hinder their use for continuous control purposes.

4.2.2 1D models

Kiss and Dassylva-Raymond [26] proposed a 1D model based on a parallel thermal resistances network. The authors seek to predict the effect of power variation on the thickness of the ledge. Their thermal resistances network, which represents the simplified heat flow through the side wall, have been obtained using a 2D numerical model. Adding appropriate boundary conditions and representative material properties, a linearly varying ledge thickness is found as a function of power variations. Since there is only one dimension, an average ledge thickness is obtained and the vertical profile is sacrificed. Furthermore, no heat losses nor generated heat can be predicted with their 1D model.

Marois et al [27] also put forward an inverse heat transfer method to predict the ledge thickness dynamic inside an AEC. This methodology relies on the iterative resolution of the thermal energy balance equation inside an optimization loop that minimizes the difference between the predicted temperature and signal from a temperature probe installed on the side wall. Like Kiss and Dassylva-Raymond's [26] model, the authors assume a 1D temperature gradient which simplifies the heat balance but only gives the mean ledge thickness. No calibration is needed but the use of a temperature sensor on the side wall is necessary.

Ledge thickness variation with height being an important information for process engineers, 1D models are clearly not appropriate for continuous process monitoring, which requires several heat and temperature information as well as a precise ledge profile.

4.2.3 3D thermoelectric model

The 3D thermoelectric model typically represents half of a cross-sectional slice of an AEC. The results of such models are used to obtain detailed information on the general behavior of the AEC, such as the temperature profile inside the reactor, the heat fluxes and the ledge position, among others. This type of model has been used by several groups of researchers including Allard et al [11,12,14], Lebreux et al [2], Baharvand et al [29], Dupuis [13], Hongliang et al [15] as well as Tao et al [30]. It uses the finite element method to solve the thermoelectric balance equations. The phase change is tackled using the enthalpy method or other phase change tracking method, taking into account the very large variation of thermophysical properties with temperature and phase change. The 3D slice model used in the present study is shown in Figure 4-2 (A) i) and ii)). The complexity of such a model, which is composed of all significant elements of the AEC, can be seen in the figure. The design and thickness of the slice may vary depending on the technology. Note that a more complete, thus more complex, 3D thermoelectric model representing a quarter cell AEC is also developed but more rarely used due to prohibitive computational resources needed. This type of model is used by Dupuis [13] to increase the precision of heat losses predictions and the current density distribution at the extremities of AEC. It gives specific results on this area which is not representative of the average AEC side behavior given the corner's different heat losses. A full cell model, coupling magneto-hydrodynamics with thermoelectric physics, is also presented by Langlois [32] for tackling localized ledge distribution issues, although even more computationally expensive.

Robustness and reliability of 3D thermoelectric slice model for design

purposes

The thermoelectric slice model is widely used in this industry. Its popularity is based on validated assumptions, solid theoretical background based on numerous balance equations, well-known boundary conditions and industrial validated results.

Critical assumptions that are presented in this section need to be used when slice models are developed, see Allard et al [11,12,14] and Lebreux et al [2]. First, symmetry is assumed on all surfaces normal to the slice. Second, the conductivity of the liquid bath is increased to account for important convection due to MHD forces since the fluids dynamics inside AEC is typically not resolved in thermoelectric models. Indeed, the liquid bath and metal move through the AEC, boosting convective heat transfer that becomes dominant over conduction inside liquids. Therefore, the actual thermal conductivity of the liquid bath and metal is increased in order to mimic the enhanced heat transfer due to convection. Third, the heat transported by diffusion is neglected compared to the convective effect in the liquid bath and metal. Finally, the authors assume that all material physical properties are well known, which is consistent with other studies relying on a complete industrial database. In addition, laboratory characterization is usually carried out when such data is missing. For example, Allard et al [35] have characterized the thermal conductivity of the crust for temperatures between 100°C and 950°C.

The 3D thermoelectric slice model solves the heat and electrical balance. The following equations illustrate the resolution of the electric potential and energy conservation respectively [2].

$$\nabla \cdot [\sigma_{(T)} \nabla V] = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot [k_{(T)} \nabla T] + \ddot{q} = \rho C_p * \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.2)$$

In these equations, $\sigma_{(T)}$ stands for the electrical conductivity, V the electrical potential, $k_{(T)}$ the thermal conductivity, T the temperature, ρ the density of the material, C_p the heat capacity, t the time and \ddot{q} the volumetric heat source, which is the Joule effect in this case [2]. This source term is calculated from the electric field, E and the electric conductivity using the following equation [2].

$$\ddot{q} = \sigma_{(T)}E^2 \quad (2.3)$$

The electric field is also calculated from the electric potential using the equation below.

$$E = -\nabla V \quad (2.4)$$

In order to represent the reality of an AEC, the simulations are validated with industrial measurements. Allard et al [11,12,14] used the same strategy. They carried out measurement campaigns on half-life anodes [11,12] and studied an anode undergoing a voltage treatment [14]. They also monitored an anode for most of its life [14]. Geometric measurement such as the height of the covering material and the crust position, and thermal measurements have been taken to adjust the boundary conditions and validate the results of the simulations [6]. Thermal measurements such as ambient and surface temperatures as well as heat fluxes were taken to calculate effective convection coefficients to be integrated in the model, as illustrated in the following equation.

$$q'' = h_{eff}(T_s - T_\infty) \quad (2.5)$$

where q'' is the measured heat flux, T_s the surface temperature and T_∞ the ambient temperature.

This convection coefficient is called effective because the measured heat fluxes also depend on the radiation. Therefore, convection and radiation heat transfer mechanisms are both considered. For each area where heat flux and temperatures are measured, a coefficient is calculated and applied to the corresponding 3D model boundaries. Electrical boundaries are also applied on the anode stem, where nominal current is applied, and on the extremities of the cathodic assembly collectors, where zero reference voltage is assumed.

Allard et al [11,12,14] validated their 3D slice model using temperature and heat fluxes measurements. The comparison between their modeling results and measurements led to satisfying results. An average relative error of 4.7 % for heat flux and 3 % for temperature have been obtained [11]. The authors also validated the effect of energy increase on the ledge thickness in the 3D model [14] by comparing model predictions to industrial measurements.

In the light of this information, one can conclude that the 3D slice model is a reliable tool to represent the thermal and electrical behavior of an AEC and could be used for a continuous control purpose. However, a lean computing time is as important as the reliability for online

diagnostic and, with the actual computational technology, the 3D slice model requires prohibitive CPU resources.

4.2.4 High computing time and needs for model reduction

Currently, very scarce documentation is publicly available on the resolution time of 3D slice model. The industry is still working on the accuracy of its results [11,12,16] or using it for offline studies on dynamics and phenomena inside AEC [2,14,15,29,30,36,37].

According to the author, the steady state 3D slice model used in this paper contains about 200 000 nodes, a number already optimized to ensure the required precision. It needs a computation time of about 4 hours on a computer built with an Intel Xeon W-2133 processor with 32 Gb of RAM. A calculation time of 12h for 72h of simulation has been reported [2] for transient model that includes 153159 elements for a total of 508215 nodes, solved with a 600 seconds time step. The solution is carried out with a computer built with an Intel Xeon E5-1650 v4 processor with 32 Gb of RAM.

According to the needs of the industrial engineers who work with such 3D models, computational time must be reduced by at least 90 % to be considered for continuous control purpose. Such a high time saving requires a significant complexity reduction.

4.2.5 Computation time reduction based on the 3D slice model

Researchers used the well-founded and validated 3D slice model to obtain a less complex model to reduce the computation time while trying to maintain its reliability. Some proposed a state-space model which is based on the 3D model outputs while others developed 2D models removing the depth dimension from the 3D slice.

State-space model

The computation time reduction has been addressed by Lebreux et al [2] through the development of a reduced model. Lebreux et al [2] proposed a state-space model where the parameters are calculated based on the results generated by a 3D slice model. Once the state-space model is calibrated for several different cases, the transient ledge thickness is calculated in 1 second as compared to 12 h with the 3D model. The resolution time decrease is remarkable. However, the calibration of the model on different cases is time-consuming and limits the application of the state-space model to the conditions represented by these cases. For continuous

control purpose, users must be certain that the conditions of AEC are well represented by these scenarios, which might not always be the case and limits its reliability.

2D model

The idea of developing a reduced model based on the 3D slice is interesting for saving computing time, but it must give trustworthy results, a task that can be done with a 2D model since it retains most of the 3D slice features.

More than 25 years ago, a finite element thermal model, which represents the geometry of a cross-sectional section of half an AEC, was used to solve the energy balance and the position of the ledge inside a cell operating between 160 kA and 180 kA [11]. The boundary conditions, the material properties and the internal heat source were needed to solve the energy balance and obtain temperature and the ledge profiles. This model's geometry was incomplete since important parts like the anode stem, yoke and pins were not included. Furthermore, the electrical balance was not resolved numerically, the authors having used the measured voltages to calculate the generated Joule effect. This type of model is no longer used today, the access to affordable computing power now makes it possible to solve the electrical balance within the energy balance and to accurately represents all geometrical features of the AEC. The outputs of this model are not complete enough to be used in continuous control.

Currently, 2D numerical models can still be used to make a quick study or to test different cell dynamics before analyzing them with more rigorous and complete 3D models. A 2D numerical thermal model was produced and used by Lebreux et al [16] to assess the chemical transformation of the covering material into crust and its fusion. Thermophysical properties of covering materials are dependent on chemical transformation and phase change. However, this model does not solve the ledge position and the geometry is incomplete. More precisely, many important cathodic and anodic parts are missing.

Dupuis [13] proposes a 2D reduced model that represents a 3D geometry on the x-y plane. Although the obtained results are close to those of the 3D model with a computing time reduced by 85 %, important parts, like anode stem, pins and yoke, are represented with 1D elements thus reducing the reliability of the results for these components that cannot be sacrificed. Close to 50% of the heat losses are dissipated through the anodic assembly. Furthermore, this part of the model is providing important information for online diagnostic such as voltage drop for process

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

optimization, temperature profile for heat loss prediction and hot spot identification. Finally, the author scarcely describes the methodology that was taken which raises questions about the conditions used and the modifications made.

The dimensional reduction of a 3D model to a more compact 2D model has already been explored to study thermoelectric applications and cooling of computer components. Prather and Puranik [38] created a compact thermoelectric model representing a more complex 3D geometry using a detailed and rigorous approach. They used a 3D thermal resistance network to find equivalent resistances, which can be mimicked with modified material properties, thus ending up with a less detailed 3D model. Such a compact model predicts temperatures and voltages very close to the 3D model for a steady-state and transient regimes. However, the time factor gain is not mentioned. In the same application area, Chen and Snyder [39] created another compact model using the effective properties based on the approach developed by Prather and Puranik. Again, the obtained results are comparable to those of a full 3D model and a time factor gain of 100 is reported.

Previous work clearly demonstrates the need to develop a reliable and robust but efficient model for online thermal diagnosis and process control of AEC. For the first time, this work is showing the results obtained with an original and promising tool developed using a rigorous methodology based on the reduction of the renowned 3D thermoelectric slice model. All construction steps are thoroughly described while explaining some of the minor compromises that have been made when going from 3D to 2D.

4.3 Material and methods

4.3.1 2D Thermal-Electric model creation

The choice of model components kept in the dimensional reduction from 3D to 2D is based on symmetry. If the component is not symmetric, its priority for the model is evaluated. The priority of a component increases with the industrialist's interest in obtaining information from it. The necessity of the component for the operation of the model also increases its relevance.

Symmetric components

There are 2 types of components: those that are uniform along the z axis and those that are only present in the center of the 3D model. These two kinds of components are kept in the 2D model.

This is the case for the anode covering material, ledge, liquid bath, liquid aluminum, cathode block, anode, shell and the majority of refractory materials. For the components present in the center, like the collector bar or anode pins, their symmetry with z axis makes it possible to minimize temperature and voltage gradients. Despite the thermal and electrical transfer along the z axis within these components, the transfer along x and y axes is greater which minimizes their error done in the 2D model.

Asymmetric components

For typical AEC technology, the following asymmetric components, the anodic stem, clad, and yoke, and the cathodic assembly are all key components needed to represent the current and heat flow in the model, with appropriate boundary conditions. On the other side, other asymmetric components, like cradles and the reinforcing stiffeners, can be neglected in the 2D model. However, they play an important role in the convective heat transfer, due to their significant fin effect. Their absence in the 2D model will impact heat losses, a subject that is discussed later in the *Critical areas* subsection.

Once the key components have been selected, the 2D slice model for the technology initially chosen is created. The following Figure 4-2 is an example of a 2D slice model (B) created from a 3D slice model (A (i) and A (ii)) for a chosen technology. The 2D model in Figure 4-2 has been projected in the z axis to highlight the major physical differences between models.

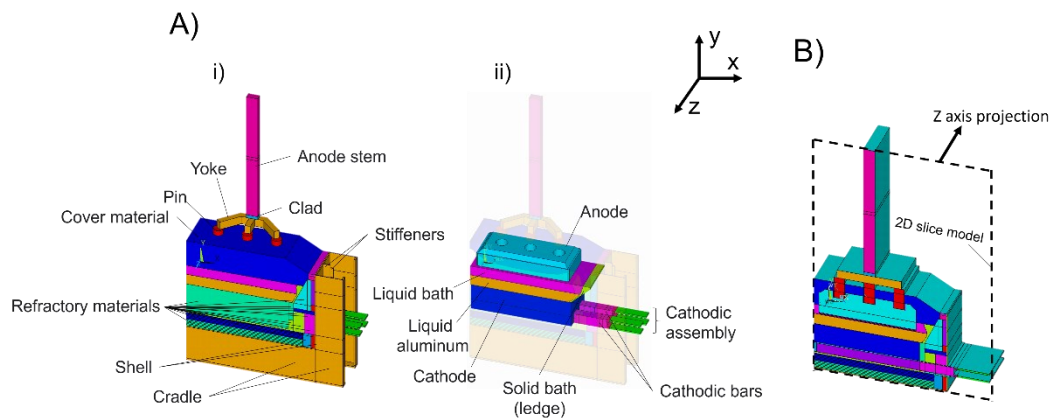


Figure 4-2 A) i) and ii) 3D slice model B) projected 2D slice model

4.3.2 Critical areas

Critical areas refer to sections of the 2D model inclined to cause differences between the results obtained with 2D and 3D models due, among other things, to the physical differences of certain components between models. These differences change the current density and the heat flux inside the components and have an impact on neighboring parts as well. Furthermore, these physical distinctions change the contact resistance that are typically used to tackle imperfect contact between components submitted to current and heat transfer. Some are located in areas that were modified during the transition from 3D to 2D. Also, some components were neglected in the construction of the 2D model thus affecting the results.

Areas showing different current density and heat flux

The physical differences causing a change in the heat flux and the current density are divided into two categories. Components of category 1, like current collector bars, are not uniform in the z axis. Their representation in a 2D model, which implicitly assumes a uniform behavior in the omitted z axis, results in a larger equivalent cross-sectional area (normal to the y and/or x axis). Consequently, the resulting heat flux and current density are thus reduced. For components of category 2, the differences come from neighboring components. In the 3D model, when a uniform component is connected to a nonuniform component, there is a local increase in the current density and heat flux. Once again, since all the components are considered uniform over a unit depth, these local effects are not captured in the 2D model. Both categories are explained in details in the following.

Category 1

Anodic and cathodic assemblies are made of several non-uniform components resulting in a larger cross-sectional area in the 2D model. Figure 4-3 shows these components in a projected view to illustrate the major differences between 3D and 2D and their anticipated impact on the current density and heat flux.

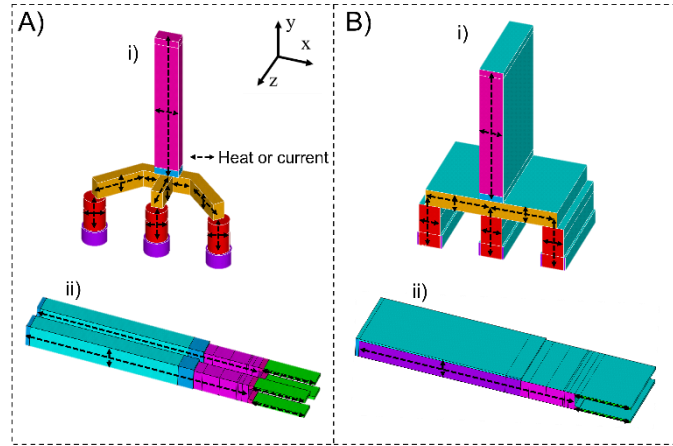


Figure 4-3 Physical differences for category 1 components A) 3D model and B) 2D model for the i) anodic assembly and ii) cathodic assembly

The input and output boundary conditions for current are located on the anode stem and at the end of the cathodic assembly respectively. These conditions cause the current to pass along a certain path between these two positions. Figure 4-3 shows that the current passing through the anode stem, clad, yoke and pins is always facing a larger cross-sectional area in the 2D model. Furthermore, for the cathodic assembly, cross-sectional surfaces in the x and y directions are different between models, generating a different current density profile in these components.

On the other hand, heat generated by Joule effect is transferred in all directions and depends on the local thermal resistances. The cross-sectional surfaces and the outer surfaces modify the internal and external thermal resistances respectively. In addition to a larger cross-sectional area, the 2D model of the anode assembly results in a larger external area onto which convection boundary conditions apply. It is also true for the exterior part of the cathodic assembly in the 2D model. These differences have a large impact on the resulting heat flux as they can decrease or increase the thermal gradients within the material. Adjustable parameters are created in the 2D model to correct these discrepancies as explained later in this paper.

Category 2

The 2D model has two sections which are considered category 2. These two sections are the pins-anode interface and the cathode block-bars interface. They are exhibited in Figure 4-4.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

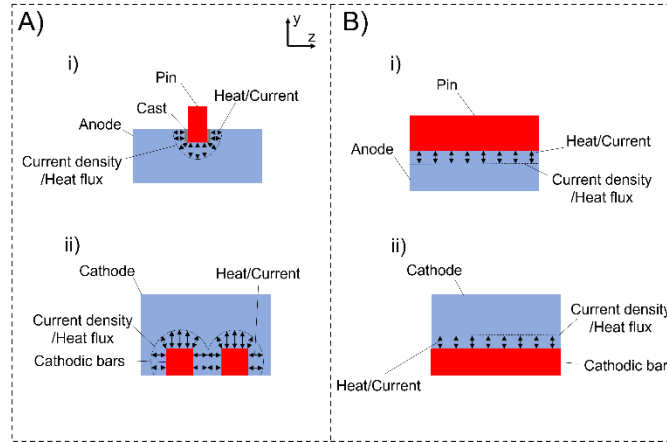


Figure 4-4 Physical differences for category 2 components in the y-z plane A) 3D model and B) 2D model for the i) anodic assembly and ii) cathodic assembly

Figure 4-4 (A)i) and B)i)) clearly shows the physical difference between models along the pin-anode interface in the y-z plane. The current and heat flux between the pin and anode are facing a smaller surface in the 3D model. Moreover, the geometry of the pin has two right angles along the z axis which are not represented in the 2D model. For the same current or heat generated, the current density and the heat flux will be locally higher in the 3D representation. The Joule effect is likely to decrease in this location when going from 3D to 2D, because of the decrease in the current density. Given the lower heat flux, the temperature gradient will also be lower in 2D. On the other hand, the surface between the cathode collector bars and the cathode block does not have the same geometry. Depending on the design, this area can be similar, higher, or lower between the two models but will lead to important changes in the path taken by the current and heat thus impacting on resulting current densities and heat fluxes in this zone. The adopted methodology to correct discrepancies using adjustable parameters is the same as for category 1.

Areas having an impact on contact resistances

In order to mimic the imperfect thermal or electrical transfer between two components, contact resistances are introduced in the 3D model between components in the critical path of current and heat. The thermal and electrical contact conductance coefficients are adjusted to reproduce the quality of contact between components. Although these contact elements are kept in the 2D model, major differences between models are shown in Figure 4-5. The surfaces covered by these contact elements are completely different. If the thermal and electrical contact conductances are kept the same between models, temperature and voltage gradients through the

contact element will be different. To obtain the same current or heat transfer in these components, these conductances need to be adjusted in the 2D model. One option is to calibrate 2D contact coefficients based on the surface ratio between the surface of the 2D contact elements and the corresponding surface in the 3D model. Contact elements that are similar in 2D and in 3D and those with high thermal and electrical contact conductance are kept unchanged.

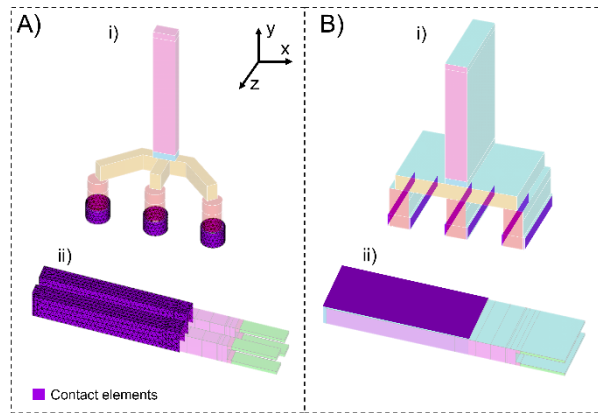


Figure 4-5 Contact elements in A) 3D model and B) 2D model for the i) anodic assembly and ii) cathodic assembly

Areas including missing components

Some 3D components could not be kept in the 2D model since these asymmetrical parts are not located in the center of the 3D model, like the liquid bath volume in front of the anode as well as the cradles and stiffeners on the side and bottom shell.

Liquid bath in front of the anode

The liquid bath is largely responsible for the heat generated by the Joule effect. A portion of the anode is immersed in the liquid bath. While the liquid bath volumes under the anode, at its right and left are modeled in 2D, the volume of bath located in front of the anode in the z axis has been neglected in the construction of the 2D model and replaced by anode carbon material. The effective bath section is therefore artificially increased, resulting in lower bath current density and joule effect. An adjustable parameter described later is added in the 2D model to modify the liquid bath electrical resistivity and correct this discrepancy. This modification allows an increase in the heat generation inside liquid bath that will compensate for the missing bath.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

Cradles and stiffeners

As shown in Figure 4-2, the cradles and stiffeners outside of the 3D model occupy a very small fraction of the depth of the model. These surfaces have not been added in the 2D model to avoid large surfaces of steel dissipating its thermal energy to the environment. Although cradles and stiffeners are good heat conductors, only side and bottom shell surfaces are represented in the 2D model. Their absence from the 2D model decreases the heat losses through these critical areas. The 2D model convective coefficients are modified to correct these heat losses offsets using a procedure that will be described in the *Convective coefficients* subsection.

4.3.3 Adjustable parameters

Several critical areas in the 2D model bring differences in the prediction of current density, heat flux and heat losses. In the 2D model, adjustable parameters are used to minimize these differences. More precisely, there are internal parameters which influence the current density and heat flux and convective coefficients which affect the heat losses. These two types of adjustable parameters are discussed in the following subsections.

Convective coefficients

The absence of the cradles and the stiffeners on the external side wall of the 2D model reduces the heat exchange surface submitted to convection. Geometrical differences at the top and bottom of models also modify the heat exchange surfaces. The method used to minimize the differences between the heat losses of both models is based on the convective heat flow using the following equation.

$$h_{2D_i} * A_{2D_i} * (T_{2D_i} - T_{2D_{ext_i}}) = h_{3D_i} * A_{3D_i} * (T_{3D_i} - T_{3D_{ext_i}}) \quad (4.1)$$

The left-hand side and the right-hand side represent the total heat losses through a section i of the 2D model and the 3D model respectively. As shown in Figure 4-6, the surface of the 2D model A_{2D_i} is not always the same as the 3D model A_{3D_i} . The exterior temperatures $T_{2D_{ext_i}}$ and $T_{3D_{ext_i}}$ are the same and represent the ambient conditions around the cell. The surface temperatures T_{2D_i} and T_{3D_i} depend on the location where they are calculated within the same section. The temperature average of the section surface is therefore used. The 2D model convective coefficient is identified based on equation (4.1).

$$h_{2Di} = \frac{h_{3Di} * A_{3Di} * (T_{3Di} - T_{3Dext})}{A_{2Di} * (T_{2Di} - T_{2Dexti})} \quad (4.2)$$

All the variables are known except the 2D surface temperature that depend on the solution. Consequently, the identification of h_{2Di} is done inside an iterative loop where T_{2Di} are first guessed.

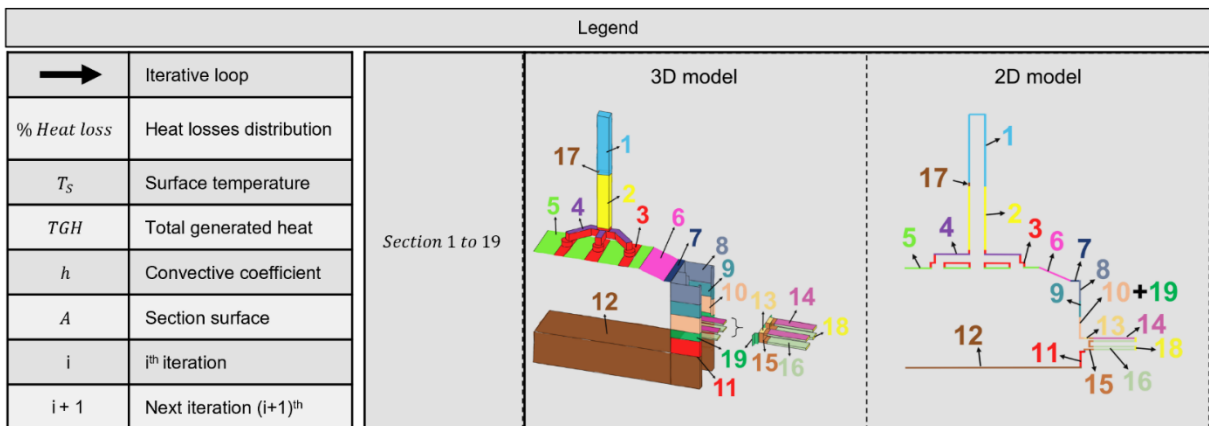
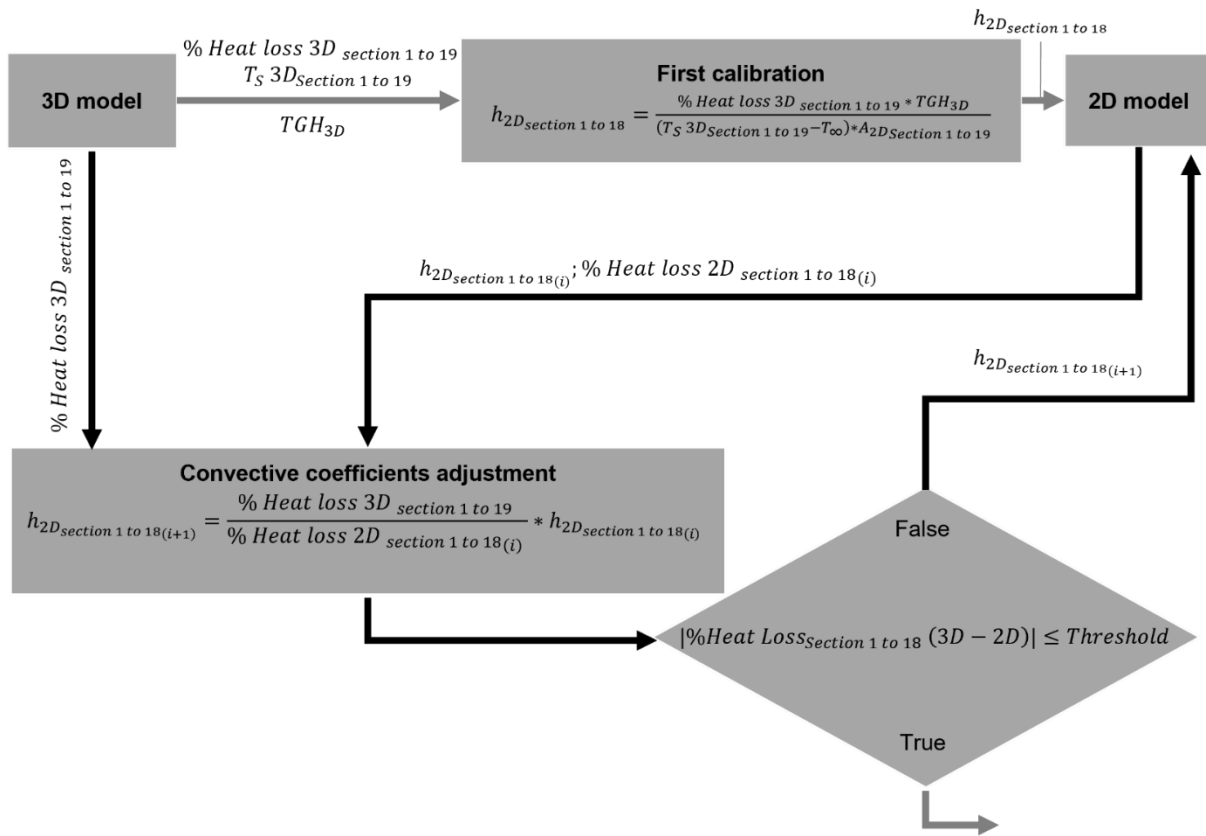


Figure 4-6 The iterative loop to adjust the 2D model convective coefficients with the sections on which it applies

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

Internal parameters

When going from 3D to 2D, some cross-sectional areas facing the current flow are modified thereby affecting the predicted current densities. These areas play a major role in the heat generated in the materials by Joule effect which is directly related to the resulting electrical resistance. The following equations relate the heat generation term \ddot{q} previously presented in equation 4, the electrical resistance R_{elec} and the cross-sectional area A .

First, the electrical resistance can be estimated from the electrical conductivity $\sigma_{(T)}$ of the material and the thickness of the component l in the direction of the current flow [40].

$$R_{elec} = \frac{l}{\sigma_{(T)} * A} \quad (4.3)$$

Second, combining equation 9 with the Ohm's law ($R_{elec} = \frac{\Delta V}{I}$), where I is the current, and with the heat generation term (equation 2.3) and the electric field (equation 2.4) resolved for a constant electric field in one direction, one can easily obtain:

$$\ddot{q} = \frac{I^2}{\sigma_{(T)} * A^2} \quad (4.4)$$

Since the source term \ddot{q} is volumetric, it can be multiplied by the volume $l * A$ of the component to obtain the total generated heat q .

$$q = \frac{l * I^2}{\sigma_{(T)} * A} \quad (4.5)$$

This energy should be similar in the 2 models: $q_{3D} = q_{2D}$. At this stage, an adjustable parameter F_{elec} multiplying the electrical resistivity is added to the 2D model to make the equality true.

$$\frac{l_{3D} * I_{3D}^2}{\sigma_{(T)_{3D}} * A_{3D}} = \frac{l_{3D} * I_{2D}^2}{F_{elec} * \sigma_{(T)_{2D}} * A_{2D}} \quad (4.6)$$

Since i) the applied current is the same in both models ($I_{3D} = I_{2D}$), ii) the component thickness in the direction of the current flow is similar ($l_{3D} = l_{2D}$), and the material of the component is the same, ($\sigma_{(T)_{3D}} = \sigma_{(T)_{2D}}$). The adjustable parameter becomes a ratio of the 2D to the 3D component surface, the following equation is obtained.

$$F_{elec} = \frac{A_{3D}}{A_{2D}} \quad (4.7)$$

Equation 10 is especially useful in the case of category 2 components because of the 3D nature of electrical current and heat flow in these parts. For instance, in the cathodic assembly, the current is entering vertically (y plane) in the cathode block through the y-z plane and leaves horizontally (x direction). Thus within the same component, the cross-sectional area can vary as a function of the current flow direction. and the adjustable parameter can therefore only be calculated approximately. It will be used as an adjustable parameter to minimize the difference in internal heat generated between the same components of both models.

The heat flow distribution depends on the thermal resistance network, made of conductive and convective thermal resistances. The equation 14 shows the relation between the component total generated heat, the thermal gradient ΔT and the total thermal resistance $R_{th_{tot}}$ [41].

$$q = \frac{\Delta T}{R_{th_{tot}}} \quad (4.8)$$

As the total generated heat in the component of both models should be similar, one can conclude that:

$$\frac{\Delta T_{3D}}{R_{th_{tot}3D}} = \frac{\Delta T_{2D}}{R_{th_{tot}2D}} \quad (4.9)$$

Since the thermal gradients should also be identical ($\Delta T_{3D} = \Delta T_{2D}$), the total thermal resistances must therefore be the same ($R_{th_{tot}3D} = R_{th_{tot}2D}$). The idea is to have the same conduction and convection thermal resistances in the 2 models. As previously discussed, the thermal convective resistances should be close between models since the convective coefficients are modified in order to have the same heat losses. Therefore, the conduction thermal resistances remain to be adjusted using an adjustable parameter F_{th} which multiplies the thermal conductivity in the 2D model.

$$\frac{l_{3D}}{k_{(T)3D} * A_{3D}} = \frac{l_{2D}}{F_{th} * k_{(T)2D} * A_{2D}} \quad (4.10)$$

Once again, since i) the thickness of the component in the direction of the heat flow l is considered identical ($l_{3D} = l_{2D}$), ii) the same materials are used in both models thus thermal conductivities are the same ($k_{(T)3D} = k_{(T)2D}$), the adjustable parameter becomes a ratio of surfaces which can only be an approximation as described earlier.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

$$F_{th} = \frac{A_{3D}}{A_{2D}} \quad (4.11)$$

For the same reasons as the electrical adjustable parameter, the thermal parameter becomes an adjustable parameter.

Several adjustable parameters have been added in the 2D model, most of them being applied to both electrical and thermal conductivities for the same component. The paths taken by the current and the heat in these components are practically identical which implies that the associated cross-sectional areas are substantially the same. Some components of the 2D model such as the cathode block and collector bar have different adjustment parameters for thermal and electrical conductivity. In these areas, the cross-sectional area associated with current is considered different from that of heat.

4.3.4 Parameters calibration

The convective coefficients of the 2D model and its internal parameters, which are used to adjust the electric and the thermal conductivities, need to be calibrated. This calibration is based on the minimization of the differences between both models for the heat losses distribution, the heat generated and the ledge position. The 2D model convective coefficients are calibrated using an iterative loop which compares the heat loss of 19 sections of both models (see Figure 4-6). The internal parameters are calibrated through the use of regressions.

Convective coefficients calibration iterative loop

The operation of the iterative loop as well as the convective areas where it applies are shown in the Figure 4-6. For the first iteration, the convection coefficients are calculated with equation 8 using the 3D temperatures as initial guesses for the 2D surface temperatures since the latter are not known initially. The heat loss distribution, surface temperatures and total heat generated come from a completed simulation of the 3D model. For subsequent iterations, the 2D convective coefficients are calibrated using previously obtained values that are multiplied by the ratio of the models heat loss distribution, as shown in the *Convective coefficients' adjustment* step of Figure 4-6. This calibration procedure is followed for each convective surfaces until convergence, which is obtained when the maximum difference between models is below or equal to a 0.1 % threshold fixed by the user.

Internal parameters calibration based on regression

Regressions are performed to calibrate the internal adjustable parameters added in the 2D model. Each adjustable parameter is associated with a dependent variable, which is, for most parameters, the difference in the heat generated in the 2 models. For example, the pins adjustment parameter is associated with the difference between the heat generated in the pins of both models. A minimization is sought for this dependent variable. In the case of the cathode block and collector bar, the calibration procedure aims at the adjustment of internal parameters that will modify the thermal conductivity of materials in order to minimize the difference between the ledge position of the 2D and 3D models.

The sequence is based on the impact of adjustable parameters on the modeling results. For example, the parameter for the missing bath volume greatly changes the total heat generated in the model. It is therefore the first to be calibrated. The calibration procedure is based on the adjustment by regression of a correlation between each parameter and its dependent variable. Each correlation is obtained by varying the targeted parameter around an initial guess obtained from equations 13 or 17. Typically, 3 values are used for most parameters. The correlation function obtained is then used to find the value of the internal parameter that minimizes the difference between the thermal results of both models. The parameters that modify the thermal conductivity of the cathode block and collector bar are analyzed together. Given their strong interaction, a centered composite plan is taken. The resulting regression provides a response surface, which is used to find optimal parameter values. It is important to mention that the iterative calibration loop for the convection coefficients is always active at this point.

Due to the non-linearity of the thermoelectrical slice model and to the linear approach adopted here, the adjustment of some parameters may have influenced the dependent variable associated with other parameters. Once all internal adjustment parameters are sequentially calibrated, additional loops can be done until the parameters do not change. On the other hand, according to the authors, two iterations of the calibration steps are usually sufficient to adjust all parameters and to minimize the differences between the models. The objective of this work is to analyze the performance of 2D model mimicking a 3D slice model, the automatization of the calibration steps is left for future work.

4.4 Results and discussion

4.4.1 Calibration results

Once the optimization is complete, the results of the calibrated 2D model are compared to those obtained with the 3D model to validate this optimization. The total heat losses and the total heat input generated in models are compared in Table 4-1. The 2D model prediction errors for heat losses and heat inputs are -0.29% and -0.21% respectively. These errors being under 1%, the models are considered similar for the energy balance.

Table 4-1 Prediction error for the energy balance obtained with 2D model

Energy balance	2D model prediction error (%) (Compared to 3D model)
Total heat loss	-0.29%
Total generated heat	-0.21%

Total heat loss can be split in four areas as shown in Table 4-2 for both models. Top area sums up all heat losses by the upper parts of the electrolysis cell, those in contact with air under the hoods. The same approach applies to the side and to the bottom areas. The head area represents the heat losses by each extremity of the model in the z direction. Although these surfaces are considered adiabatic in the model, a calculation is conducted based on the ratio of cell end area relative to the global cell. A heat sink is put in the modelled bath to take these losses into account. Total heat losses distribution is very close for both models, the highest difference being 1.16% for the side losses. This is small enough to assume that the 2D model optimization is satisfactory for the heat losses. This good result is mainly attributed to the iterative adjustment loop of the convective coefficients.

Table 4-2 Distribution of the total heat losses as predicted by the models

Area	3D model (%)	2D model (%)	Differences (%)
Top	30.58	29.61	-0.97
Bottom	7.25	6.94	-0.31
Side	51.97	53.13	1.16
Heads	10.30	10.32	0.02

Total heat generation can also be split in its principal components as revealed in Table 4-3. Differences between models are below 1 %. As expected, the adjustable parameters calibration

identification worked also very well for heat generation in the 2D model. Bath heat generation source term shows that the missing bath parameter worked fine. Minor differences for anodic and cathodic assembly indicate that the adjustment parameters related to the electrical resistivity of these parts are effectively optimized.

Table 4-3 Distribution of the total heat sources as predicted by the models

Main components	3D model (%)	2D model (%)	Differences (%)
Anodic assembly	21.73	21.79	0.06
Cathodic assembly	10.88	10.64	-0.24
Bath	67.35	67.52	0.17
Metal	0.03	0.04	0.01

With these minor differences for both the total heat losses and the total heat generation distributions, a similar temperature profile can be expected as exhibited in Figure 4-7. There are two sectional views of the 3D model to effectively show the pins and the cathodic bar areas which are present in the 2D model. The temperature gradient in the cathodic bar in the transition zone between the inside and the outside of the cell are slightly lower in the 2D model. This is expected since there is a significant physical difference between the two models in this area. The exact same temperature profile would be difficult to obtain. This is a small compromise that has been made to get a 2D model representing a 3D geometry. Despite this difference, slight heat generation differences between models reveal an adequate fit of the main components of the Joule effect, directly associated with the electrical field and thus the voltage profile shown in Figure 4-8. Once again, the voltage profiles of both models show a good agreement. This figure reveals that the voltage gradient is also very close in value and in position for both models.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

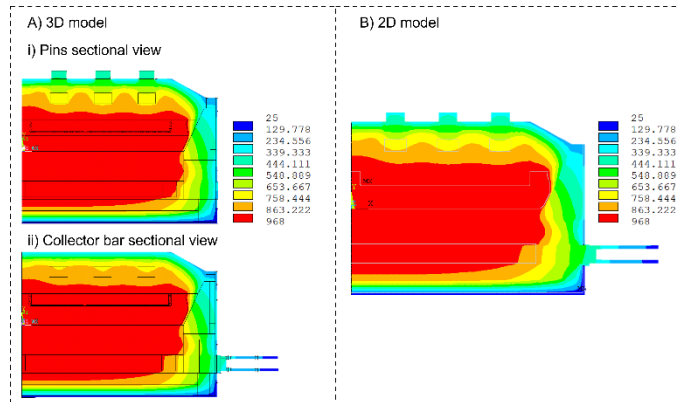


Figure 4-7 Temperature profile (°C)

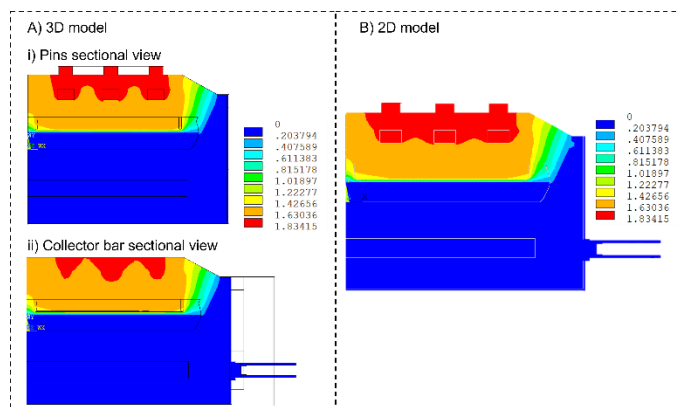


Figure 4-8 Voltage profile (V)

Energy balance of both models being very close, the ledge position prediction should also be good.

Figure 4-9 exhibits the ledge position prediction of both models. The 2D model prediction is really close to the 3D model, the highest difference being about 1 cm located on the top of the ledge. It is important to underline that this prediction error is well under the manual measurement error of ± 2.5 cm. Furthermore, interesting positions of the ledge that are located on the cathode (bottom part of the ledge) and at the interface between bath and liquid aluminum, where the thinnest ledge is typically found, are well predicted. In both positions, the 2D model predictions fit those of the 3D model within 0.25 cm. These critical results for the industrial utilization of the 2D model in design analysis are scrutinized in the calibration process. The results obtained in

Figure 4-9 are satisfactory enough to move forward with other tests.

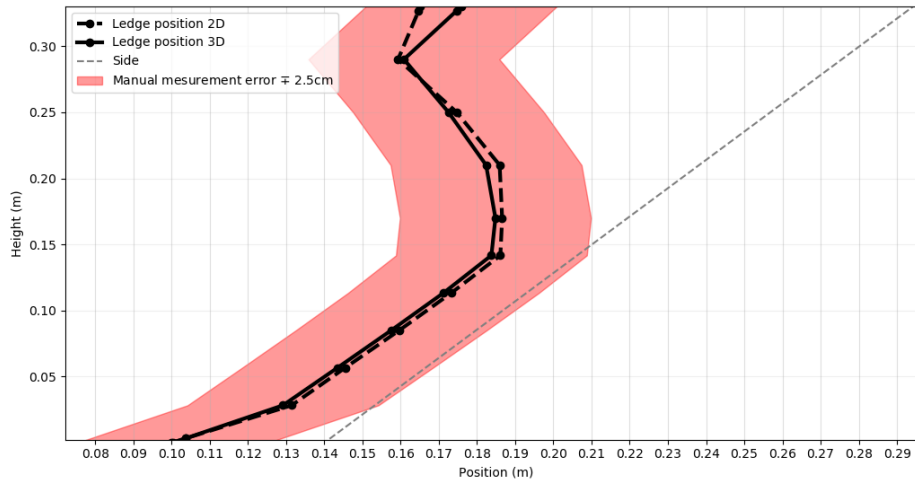


Figure 4-9 Prediction of the ledge position by the models

4.4.2 Current variation results

The 2D model is now validated for a nominal operating point. To be effective for continuous process control purposes, it must also predict the same output variations as the 3D model for different variations around the nominal operating point. In this paper, the results obtained from both models are compared when the nominal current undergoes a variation of $\pm 5\%$ from the nominal operation target, which roughly represents twice of an acceptable operation range given a typical cell design.

The current variation affects the heat losses in both the 3D and the 2D models. Figure 4-10 shows heat loss variations with respect to nominal current variations. For both models, the heat loss variations are calculated based on their relative values at nominal current. The 2D model predicts the same behavior as 3D model for the heat losses in the top area, the maximum difference between models being less than 1%. The general behavior for the side heat losses is also well predicted by the 2D model. Despite lower heat loss variations through the bottom area, the 2D model predictions fit the behavior forecast by the 3D model.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

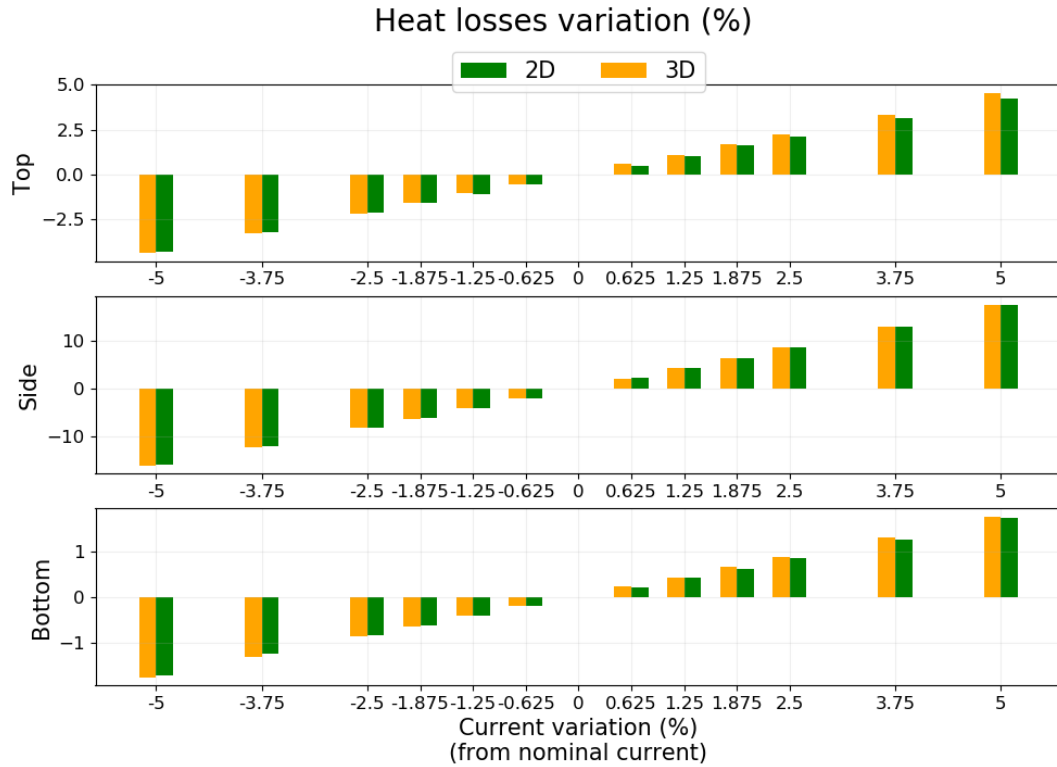


Figure 4-10 Heat losses variation as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current)

Heat generation input variations in function of nominal current changes are also analyzed, see Figure 4-11. For all areas, the 2D model predicts identical heat generation input variations when compared to the 3D model predictions.

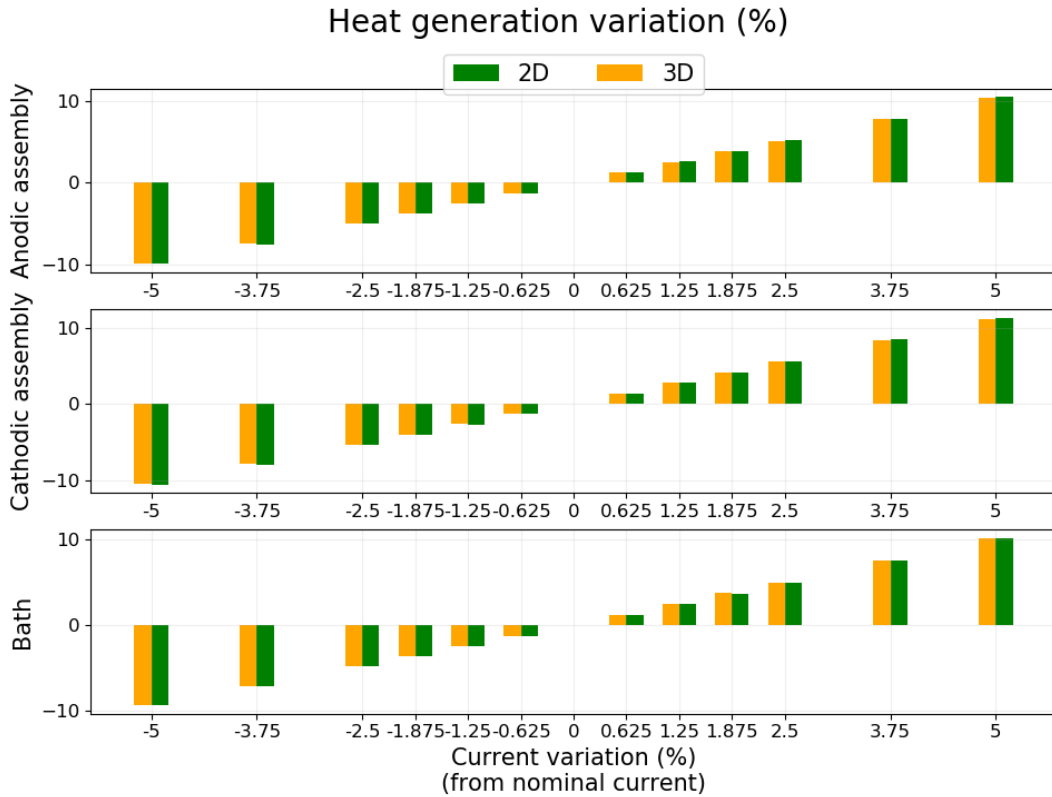


Figure 4-11 Heat generation variation as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current)

These results reveal the excellent behavior of the 2D model to assess the energy balance variations caused by the changes in the nominal current. Moreover, the associated ledges in Figure 4-12 are similar to for both 3D model for each nominal current variation. The average difference for each ledge prediction is less than 0.5 cm. The maximum absolute difference between models is 1.8 cm, found at the bottom of the ledge for a - 5 % nominal current variation. The maximum average relative error is + 15.8 % found at +5 % of the nominal current variation in the area where the ledge is the thinnest. According to the authors, the 2D model ledge predictions are close enough to the 3D predictions to be used for continuous control purpose.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

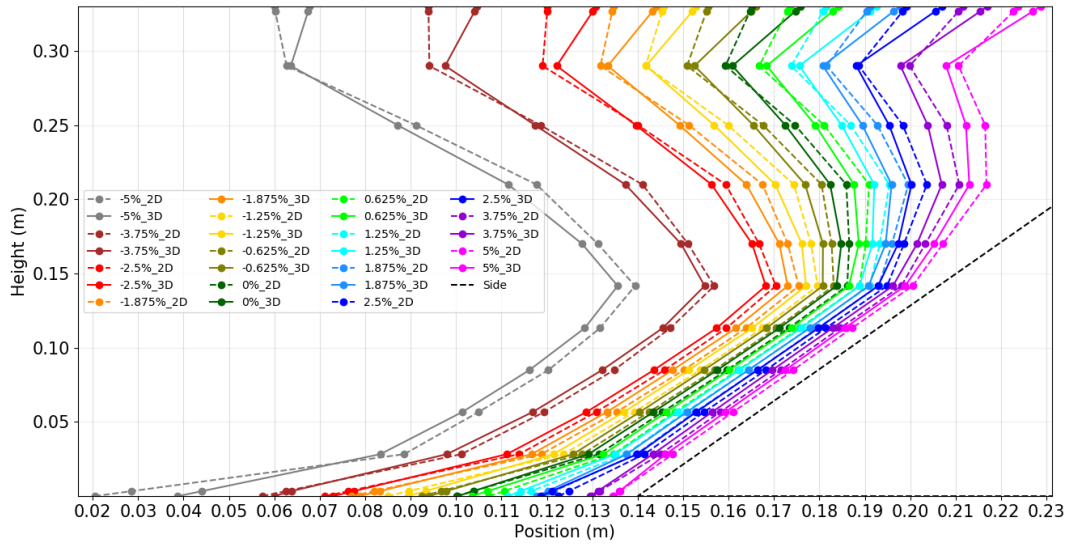


Figure 4-12 Ledge position as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current)

As shown before, there is a significant physical difference between the sides of both models. There is less surface for the convective heat transfer in the 2D model. It is also important to note that the iterative loop used to adjust the 2D convective coefficients is done for the nominal current only. Therefore, it is important to study the variation of the side shell temperatures in terms of nominal current variation to validate that there are no important differences between models. Figure 4-13 shows the side shell temperatures at 17 vertical positions (y axis). The bottom position (0 cm) is located at the top level of the cathode block. The highest differences are found in a zone between 0 and 40 cm and between 70 and 80 cm. These differences decrease with the temperature rise which follows the current increase. The 2D model temperature predictions are always lower than those obtained with the 3D model. The temperatures between 40 and 70 cm are similar for both models.

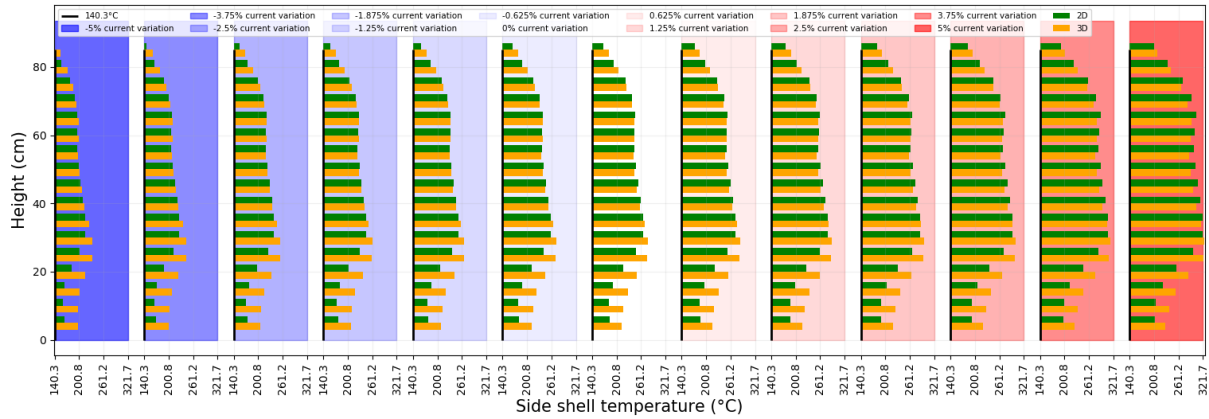


Figure 4-13 Shell temperatures as a function of current input variation (-5% to 5% of nominal current)

Despite similar heat losses through the side between models at nominal current, there are small shell temperature offsets. Once the 2D convective coefficients are calibrated to minimize differences between heat losses distribution of both models, resulting surface temperatures may be higher or lower than the 3D model. For the time being, the iterative loop method cannot adjust the convective coefficients to have the same heat losses and the same surface temperatures. Major physical differences between models lead to these offsets judged as an acceptable compromise. On the other hand, it must be well known and understood.

4.4.3 Computing time results

The simulations conducted with both models for the same conditions were run on the same computer with 6 processors assigned for the computational task. The performance in terms of CPU resources was compared using a time saving factor for the 2D model, see Figure 4-14.

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE

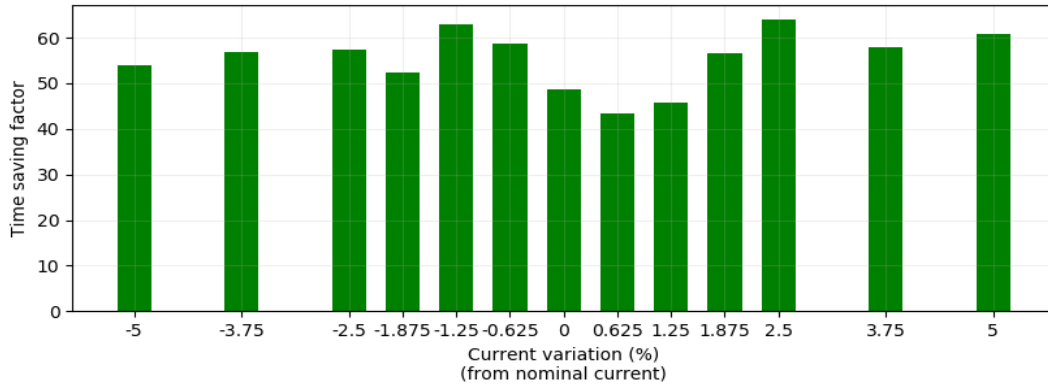


Figure 4-14 2D model time saving factor based on the elapsed time

The lowest time saving factor is found for the + 0.625 % current variation. For this test, the 2D model was 43.3 times faster than the 3D model. Figure 4-14 also exhibits a maximum time saving factor of 64. Furthermore, the 2D model is more than 50 times faster than the 3D model for 10 runs. These time saving factor magnitudes are required to have an efficient 2D model aiming at continuous process control purpose.

4.5 Acknowledgements

The authors are very grateful to the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) and to RioTinto for their financial support.

4.6 Conclusion

With the aim of continuously monitoring the dynamics inside an AEC, a model which predicts the heat balance and ledge profile while demanding limited CPU resources is necessary. The methodology to build a 2D thermoelectric model from an existing 3D model used by engineers to design industrial aluminum electrolysis cells (AEC) was presented. Critical areas in the 2D model, where physical differences impact most on the current density and heat losses distribution, have been identified. A methodology is proposed to decrease these impacts based on the identification of adjustable parameters, which are effective convective coefficients and modified thermal and electrical conductivities of selected materials. The calibration process includes an iterative loop for the convection coefficients and statistical regressions for modified conductivities. The results of the calibration showed that the 2D and 3D models give similar results of temperature and voltage profiles and acceptable differences for the overall energy

balance (under 1% difference) and distribution of heat losses (under 1.16% difference). The maximum deviation between the ledge position predicted by the two models is below 1 cm, which is an acceptable range for this AEC key operational parameter. In order to test the calibrated 2D model, it was subjected to a variation of $\pm 5\%$ from its nominal target. Predictions of ledge profiles as a function of line current variation are very close between 2D and 3D models, with a maximum difference of 1.8 cm found at one specific level, at -5% current variation. The predicted behavior of distribution of the heat losses and generated energy is similar between the models and gives differences below 1%. According to the authors, the most important discrepancies between models are found for the side temperature distribution and are explained from the physical differences that originates from the passage from 3D to 2D. These differences are considered as an acceptable compromise to speed up the computational time needed to solve the model. In terms of computation time, a time reduction factor between 40 and 60 has been obtained, largely exceeding the initial target of 10. The 2D model created is therefore sufficiently precise while offering remarkable computational time savings and is thus considered as a promising tool for the continuous monitoring of the AEC. The 2D creation process proposed could be extended to different industrial applications where the resolution of a 3D models is prohibitive. It can also be used for industrial engineers who are looking for a digital twin. Future developments should be devoted to transient models and the identification of additional adjustment parameters representing thermal inertia, like density and heat capacity, as this work was focused on steady state regime.

5. TRANSFERT INDUSTRIEL

L'article présenté au chapitre précédent se termine avec la création d'un modèle thermoélectrique 2D fiable et plus rapide que le modèle tranche 3D. Il est donc intéressant pour le partenaire industriel du projet d'être en mesure de l'utiliser, de le retravailler selon leurs exigences précises ou de le modifier pour une application plus poussée en contrôle continu. Dans cet objectif, un transfert de connaissance concernant la méthodologie employée ainsi que les outils informatiques utilisés est essentiel. Ce transfert s'est effectué sous forme de rencontres soutenues avec le personnel du centre de recherche et de développement d'Arvida (CRDA) de Rio Tinto. En complément à ces rencontres, des documents contenant tous les modèles créés durant ce projet ainsi que les fichiers nécessaires à leur fonctionnement ont été transférés à l'équipe du CRDA. Le projet de recherche est donc une contribution réelle pour l'industrie de l'aluminium puisque qu'elle détient maintenant les outils et prévoit s'en servir pour des projets de modélisation à court terme.

6. CONCLUSION

Le marché de la production d'aluminium primaire est très compétitif ce qui pousse les alumineries à augmenter leur production tout en utilisant les mêmes actifs. Cette augmentation implique une augmentation du courant de ligne, ce qui peut élever la température interne des CEA suffisamment pour faire fondre la couche de protection de bain solidifié sur les parois. Il est donc essentiel de bien connaître le bilan d'énergie à tout moment, ce qui reste très difficile avec les instruments de mesure actuels en raison du milieu interne hostile des CEA. Le modèle tranche thermoélectrique 3D est le plus souvent utilisé pour résoudre le bilan énergétique d'une section d'une CEA, mais il requiert un temps de calcul trop élevé pour le faire en continu dans un objectif de diagnostic en ligne ou de contrôle. Une réduction dimensionnelle de ce modèle 3D pour créer un modèle thermoélectrique 2D fiable et plus rapide est donc proposée. Avant de commencer à travailler avec le modèle tranche 3D complexe, une étude de faisabilité préliminaire a été réalisée pour maîtriser l'utilisation du logiciel de simulation AnsysTM et démontrer la pertinence de la méthodologie envisagée. Cette étude s'est effectuée à l'aide de mini-modèles 3D et 2D créés par étape apportant une complexité graduelle. Ces étapes ont permis de tester les méthodes de modifications des propriétés de certains matériaux et des coefficients convectifs du mini-modèle 2D, méthodes qui se sont avérées pertinentes pour la suite du projet. En effet, les profils de températures semblables en fonction de la variation du courant entre les mini-modèles finaux 2D et 3D et le temps de calcul 150 fois plus rapide du mini-modèle 2D final témoignent d'une méthodologie adéquate. Une fois cette étude réalisée, les travaux suivants effectués directement à partir du modèle tranche thermoélectrique 3D ont été présentés dans l'article présent à la section

MÉTHODOLOGIE DE LA RÉDUCTION DIMENSIONNELLE D'UN MODÈLE THERMOÉLECTRIQUE 3D POUR CRÉER UN MODÈLE 2D FIABLE ET RAPIDE. Le choix des composantes à conserver lors de la réduction dimensionnelle, qui est basé sur la symétrie et le fonctionnement du modèle, a été détaillé et a permis de créer le modèle tranche 2D. Le premier objectif spécifique de cette recherche portant sur la création d'un modèle thermoélectrique 2D à l'aide d'une réduction dimensionnelle a donc été réalisé. Ce modèle 2D contient des zones critiques qui ont été clairement identifiées avec leurs différences physiques et des méthodes pour diminuer les divergences occasionnées ont également été présentées. En effet, des paramètres ajustables qui sont i) les coefficients convectifs et ii) des paramètres internes qui impactent les conductivités thermiques et électriques de certains matériaux ont été utilisés. La procédure de calibration de ces paramètres qui consiste en une boucle itérative pour les coefficients et des régressions pour les paramètres internes a été détaillée et validée. Le bilan d'énergie ainsi que la position du talus ont été comparés entre les modèles et cette comparaison a montré que les modèles sont semblables à moins de 1 % d'écart pour le bilan d'énergie globale, un maximum de 1.16 % d'écart au niveau de la distribution des pertes de chaleur et un écart maximum de 1 cm pour la position de la gelée. Le modèle tranche 2D ainsi optimisé et validé, répond directement au second objectif spécifique du projet, et par conséquent, à l'objectif global. Pour bien répondre à la question de recherche, le modèle tranche 2D et 3D ont été soumis à une variation de +/- 5 % du courant de calibration. Les profils de gelée en fonction de la variation du courant ont un écart maximum de 1.8 cm pour la plus grande variation de courant de -5 %, ce qui est acceptable. La prédiction pour le comportement de la distribution de la chaleur perdue et générée était identique entre les modèles avec des différences en dessous de 1 %. Des différences marquées ont été observées entre les températures de côté des modèles, ce qui est un compromis accepté pour améliorer le temps de calcul. Le modèle 2D est de 40 à 60 fois plus rapide que le modèle 3D, ce qui est largement supérieur à la valeur cible initiale de 10 fois. La réponse à la question est donc qu'il est possible de réduire suffisamment le temps de calcul pour la résolution de la position de la gelée à l'aide d'un modèle 2D issu de la réduction dimensionnelle d'un modèle tranche thermoélectrique 3D représentant une section d'une CEA sans en réduire sa qualité d'estimation.

Les contributions envisagées pour l'industrie de l'aluminium et pour le développement technologique de l'industrie ont été réalisées. Premièrement, le modèle créé s'applique

directement à une CEA, ce qui lui permet d'être utilisé directement par l'industrie de l'aluminium. Comme mentionné à la section TRANSFERT INDUSTRIEL, un transfert de connaissances adéquat ainsi que l'accessibilité aux dossiers créés lors de ce projet permettent au partenaire industriel d'utiliser le modèle pour réaliser des simulations et obtenir rapidement de l'information. La création d'un jumeau numérique à partir de ce modèle 2D peut également être envisagée. Deuxièmement, la méthodologie est suffisamment détaillée pour que la réduction dimensionnelle puisse être réalisée par plusieurs industries. En effet, une industrie qui dispose d'un modèle 3D thermique ou thermoélectrique peut suivre la méthodologie développée dans ce projet et créer leur propre modèle 2D. De plus, la théorie portant sur les paramètres d'ajustement et leur calibration a été décrite de façon suffisamment complète pour guider les industries à développer leur protocole pour ajuster leur modèle 2D.

Les nouvelles perspectives de recherche sont nombreuses à la suite de la réalisation de ce projet. Dans le but d'améliorer la méthodologie proposée, le processus de calibration pourrait être automatisé tout en utilisant des outils statistiques plus avancés que des régressions. De plus, le modèle développé fonctionne en régime permanent seulement. Les développements futurs devraient être axés sur l'identification de paramètres d'ajustement supplémentaires qui représentent l'inertie thermique, tels que la masse volumique et la capacité thermique massique. Le modèle 2D peut également être couplé à des modèles 3D plus complexes pour améliorer leur temps de calcul.

RÉFÉRENCES

1. Frank, W. B. *et al.* Aluminum. in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* (American Cancer Society, 2009). doi:10.1002/14356007.a01_459.pub2.
2. LeBreux, M., Désilets, M., Allard, F., Micheau, P. & Blais, A. An on-line estimation tool for predicting the time-varying ledge profile inside aluminum electrolysis cells. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* **77**, 134–161 (2020).
3. Oldham, K. B., Myland, J. C. & Bond, A. M. *Electrochemical science and technology: fundamentals and applications*. (Wiley, 2013).
4. Kvande, H. Occurrence and Production of Aluminum. in *Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry* 1–10 (American Cancer Society, 2015). doi:10.1002/9781119951438.eibc2350.
5. Haupin, W. E. Principles of Aluminum Electrolysis. in *Essential Readings in Light Metals: Volume 2 Aluminum Reduction Technology* (eds. Bearne, G., Dupuis, M. & Tarcy, G.) 3–11 (Springer International Publishing, 2016). doi:10.1007/978-3-319-48156-2_1.
6. Ahoutou, Y. Détermination du niveau de brai dans une anode crue par analyse d'images. (Université du Québec à Chicoutimi, 2017).
7. Primary Aluminium Production. *International Aluminium Institute* <https://international-aluminium.org/statistics/primary-aluminium-production/>.
8. Association de l'aluminium du Canada. <https://aluminium.ca/fr/industrie>.
9. Stratégie québécoise de développement de l'aluminium 2015-2025. <https://www.quebec.ca/gouv/ministere/economie/publications/strategie-quebecoise-de-developpement-de-laluminium-2015-2025/>.

10. Dupuis, M. Thermo-Electric Design of a 400 kA Cell Using Mathematical Models: A Tutorial. in vol. 2 303–308 (John Wiley and Sons, 2013).
11. Allard, F., Desilets, M., LeBreux, M. & Blais, A. Improved heat transfer modeling of the top of aluminum electrolysis cells. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **132**, 1262–76 (2019).
12. Allard, F., Desilets, M., Lebreux, M. & Blais, A. The impact of the cavity on the top heat losses in aluminum electrolysis cells. in *Light Metals 2016 - TMS 2016: 145th Annual Meeting and Exhibition, February 14, 2016 - February 18, 2016* vols 2016-January 289–294 (Minerals, Metals and Materials Society, 2016).
13. Dupuis, M. Computation of Aluminum Reduction Cell Energy Balance Using ANSYS Finite Element Models. in vol. 2 294–302 (John Wiley and Sons, 2013).
14. Allard, F., Desilets, M. & Blais, A. A Modeling Approach for Time-Dependent Geometry Applied to Transient Heat Transfer of Aluminum Electrolysis Cells. *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science* **50**, 958–980 (2019).
15. Zhang, H. *et al.* Study on side ledge behavior under current fluctuations based on coupled thermo-electric model. in *Light Metals Symposium held at the TMS Annual Meeting and Exhibition, 2019, March 10, 2019 - March 14, 2019* 647–655 (Springer International Publishing, 2019). doi:10.1007/978-3-030-05864-7_80.
16. LeBreux, M., Désilets, M., Allard, F. & Blais, A. Modeling and measurements of anode cover behavior inside aluminum electrolysis cells. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* **69**, 128–145 (2016).
17. Gupta, A. & Basu, B. Sustainable Primary Aluminium Production: Technology Status and Future Opportunities. *Trans Indian Inst Met* **72**, 2135–2150 (2019).

18. Huang, W., Xu, Q. & Hu, P. Coupling 2D thermal and 3D optical model for performance prediction of a parabolic trough solar collector. *Solar Energy* **139**, 365–380 (2016).
19. A dimension reduction algorithm for numerical simulation of multi-borehole heat exchangers | Elsevier Enhanced Reader.
<https://reader.elsevier.com/reader/sd/pii/S0960148121011885?token=4278869AAC891AD4285B79A277B41A895D7D97F65A361216BD1E85135E59352A6A986DACFD88F0D379E8AE85EE2DF789&originRegion=us-east-1&originCreation=20220121144402>
doi:10.1016/j.renene.2021.08.028.
20. A semi-analytical model for detailed 3D heat flow in shallow geothermal systems - ScienceDirect.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931017353498?via%3Dihub>.
21. Efficient numerical modeling of borehole heat exchangers - ScienceDirect.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098300410001937?via%3Dihub>.
22. Kong, Y., Chen, D., Liu, Q., Chen, H. & Long, M. Research on the On-Line Simulation of a Three-Dimensional Temperature Field Model of Slab Continuous Casting. *steel research international* **89**, 1800091 (2018).
23. Salvi, S. S. & Jain, A. A Review of Recent Research on Heat Transfer in Three-Dimensional Integrated Circuits (3-D ICs). *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology* **11**, 802–21 (2021).
24. Ogumerem, G. S. & Pistikopoulos, E. N. Smart Manufacturing. in *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology* 1–10 (John Wiley & Sons, Ltd, 2019).
doi:10.1002/0471238961.koe00048.
25. Perno, M., Hvam, L. & Haug, A. Enablers and Barriers to the Implementation of Digital Twins in the Process Industry: A Systematic Literature Review. in *2020 IEEE International*

- Conference on Industrial Engineering and Engineering Management (IEEM)* 959–964 (2020). doi:10.1109/IEEM45057.2020.9309745.
26. Kiss, L. I. & Dassylva-Raymond, V. Freeze thickness in the aluminum electrolysis cells. in *Light Metals 2008, March 9, 2008 - March 13, 2008* 431–436 (Minerals, Metals and Materials Society, 2008).
27. Marois, M. A., Desilets, M. & Lacroix, M. What is the most suitable fixed grid solidification method for handling time-varying inverse Stefan problems in high temperature industrial furnaces? *International Journal of Heat and Mass Transfer* **55**, 5471–8 (2012).
28. Valles, A., Lenis, V. & Rao, M. Prediction of ledge profile in Hall-Heroult cells. in *Proceedings of the 124th TMS Annual Meeting, February 12, 1995 - February 16, 1995* 309–313 (Minerals, Metals & Materials Soc (TMS), 1995).
29. Baharvand, B., Ameri Siahooei, M. & Khanbabapoor, S. Thermo-electrical modeling of an aluminum reduction cell. in *International symposium on Light Metals, 2018, March 11, 2018 - March 15, 2018* 761–768 (Springer International Publishing, 2018). doi:10.1007/978-3-319-72284-9_98.
30. Tao, W. *et al.* Numerical Simulation of Current Distribution in Cathode Carbon Block of an Aluminum Reduction Cell. *JOM* **67**, 2675–2680 (2015).
31. Blais, M., Désilets, M. & Lacroix, M. Optimization of the cathode block shape of an aluminum electrolysis cell. *Applied Thermal Engineering* **58**, 439–446 (2013).
32. Langlois, S. *et al.* 3D Coupled MHD and Thermo-Electrical Modelling Applied to AP Technology Pots. in *Light Metals 2015* (ed. Hyland, M.) 771–775 (Springer International Publishing, 2016). doi:10.1007/978-3-319-48248-4_130.
33. Dupuis, M. & Bojarevics, V. Weakly coupled thermo-electric and MHD mathematical models of an aluminium electrolysis cell. *Light Metals* **1**, 449–454 (2005).

34. Zhang, H. *et al.* Study on 3D full cell ledge shape calculation and optimal design criteria by coupled thermo-flow model. in *International symposium on Light Metals, 2018, March 11, 2018 - March 15, 2018* 587–596 (Springer International Publishing, 2018). doi:10.1007/978-3-319-72284-9_76.
35. Allard, F., Desilets, M. & Blais, A. Thermal, chemical and microstructural characterization of anode crust formed in aluminum electrolysis cells. *Thermochimica Acta* **671**, 89–102 (2019).
36. Arita, Y., Urata, N. & Ikeuchi, H. Estimation of Frozen Bath Shape in an Aluminum Reduction Cell by Computer Simulation. in vol. 2 279–285 (John Wiley and Sons, 2013).
37. Gupta, A. & Namboothiri, S. Impact of Carbon Seam on Freeze Profile in Aluminum Reduction Cell. *Trans Indian Inst Met* **70**, 1563–1574 (2017).
38. Prather, E. & Puranik, B. Three-Dimensional Simulation of Thermoelectric Devices With Compact Numerical Models. in *2003 International Electronic Packaging Technical Conference and Exhibition, Volume 1* 335–342 (ASME/EDC, 2003). doi:10.1115/IPACK2003-35110.
39. Chen, M. & Snyder, G. J. Analytical and numerical parameter extraction for compact modeling of thermoelectric coolers. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **60**, 689–699 (2013).
40. Perkin, R. M. Electrically Generated Heat. in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* (John Wiley & Sons, Ltd, 2000). doi:10.1002/14356007.b03_15.
41. Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer, 6th Edition | Wiley. *Wiley.com*
<https://www.wiley.com/en-us/Fundamentals+of+Momentum%2C+Heat+and+Mass+Transfer%2C+6th+Edition-p-9781118804278>.

