

Simulation numérique de phénomènes MHD: Application à l'électrolyse de l'aluminium

THÈSE N° 4469 (2009)

PRÉSENTÉE LE 17 JUILLET 2009

À LA FACULTÉ SCIENCES DE BASE

CHAIRE D'ANALYSE ET DE SIMULATION NUMÉRIQUE

PROGRAMME DOCTORAL EN MATHÉMATIQUES

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES

PAR

Gilles STEINER

acceptée sur proposition du jury:

Prof. F. Eisenbrand, président du jury

Prof. J. Rappaz, directeur de thèse

Prof. F. Avellan, rapporteur

Dr A. Masserey, rapporteur

Dr T. Tomasino, rapporteur



ÉCOLE POLYTECHNIQUE
FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Suisse
2009

Version Abrégée

L'objet de cette thèse est l'étude, du point de vue de la simulation numérique, du procédé d'électrolyse de l'aluminium.

Les équations de Navier-Stokes pour le calcul d'un écoulement bifluide avec interface libre sont couplées aux équations de Maxwell décrivant la répartition du courant électrique et du champ d'induction magnétique dans une cuve d'électrolyse.

L'accent est mis sur une méthode efficace pour la résolution du champ d'induction magnétique existant sur un domaine non-borné. L'algorithme s'appuie sur une méthode de décomposition de domaine de type Schwarz et sur les formules de représentation intégrale de Poisson pour les fonctions harmoniques.

Les équations aux dérivées partielles permettant le calcul de l'écoulement sont discrétisées en espace et en temps et intégrées à un logiciel de simulation numérique.

Le code de simulation est testé sur un cas académique et dans une situation réaliste. Les points clés du modèle mathématique sont mis en évidence.

Finalement le modèle dynamique est confronté à un code permettant le calcul de solutions stationnaires et de leur stabilité au sens linéaire.

Mots clés : électrolyse de l'aluminium, couplage magnétohydrodynamique, simulation numérique, méthodes d'éléments finis, stabilité linéaire et dynamique.

Abstract

The purpose of this thesis is the study, from the numerical simulation point of view, of the aluminum electrolysis process.

Navier-Stokes equations for the computation of a two fluids flow with free interface are coupled with Maxwell equations describing the electric current repartition and the magnetic induction field in an electrolysis reduction cell.

The emphasis is set on an efficient method for the computation of the magnetic induction in an unbounded domain. The algorithm is based on a Schwarz domain decomposition method and on the Poisson integral representation formula for harmonic functions.

The partial differential equations that rule the phenomena are discretized in space and time and implemented in an existing numerical simulation software.

This code is then tested on an academic test case and also in a more realistic situation. The key parts of the mathematical model are emphasized.

Finally the time-evolution model is compared with another approach, dealing with stationary situations and their linear stability.

Keywords : aluminum electrolysis, magnetohydrodynamics, numerical simulation, finite element method, linear and dynamic stability.

Remerciements

En premier lieu j'aimerais exprimer ma reconnaissance à mon directeur de thèse, le professeur Jacques Rappaz, qui m'a accordé sa confiance et accueilli dans sa chaire. À son contact, j'ai acquis beaucoup de nouvelles connaissances mais aussi une façon plus scientifique d'aborder les problèmes.

Je remercie également les membres de mon jury, le professeur François Avellan et les docteurs Alexandre Masserey et Thierry Tomasino pour leurs remarques éclairées et le temps passé à relire et juger mon document. Merci aussi au professeur Friedrich Eisenbrand, président du jury.

Merci à l'entreprise RioTinto-Alcan pour avoir financé ce travail et à l'équipe du LRF pour la saine collaboration entretenue du début à la fin de la thèse.

Au sein de l'institut, plusieurs personnes ont joué un rôle clé pour me permettre d'aller au bout de cette aventure. J'aimerais citer Christophe Prud'homme qui m'a permis de démarrer en me présentant et en me recommandant à Jacques, Marco Picasso pour les nombreuses discussions, scientifiques ou non, toujours constructives et bien sûr Michel Flück sans qui rien n'aurait été possible et dont la porte a toujours été ouverte.

Je remercie également tous mes collègues doctorants de l'ASN et de la section de mathématiques, en particulier Vira et Christophe avec qui ces trois années de travail acharné se sont souvent transformées en franches rigolades. Merci encore à eux mais aussi à Andrea et Pierre pour avoir partiellement financé mon travail à travers les nombreuses parties de poker.

Merci à tous mes amis de Lausanne : David, Neil, Matthias, Daniele, Manu, Michael et toute l'équipe universitaire de hockey, mais aussi Franci, Yannick, Roman, Sam, Laura, Nikki et les autres, grâce à qui le canton de Vaud est devenu (et oui) ma deuxième maison.

Merci aussi aux amis valaisans, notamment la fine équipe Brett, Fabrice, Laure et Jordana pour leur bonne humeur et leur amitié sans faille mais aussi à mes cousins et à ma famille pour leurs encouragements et leur patience infinie. Je remercie tout particulièrement Greg pour les nombreux moments passés à Lausanne et en Valais et qui a participé activement à l'écriture de ma conclusion, mais aussi Yann, Cédric, Alex, Valérie, Patchou et les autres qui sont et resteront des piliers (pas seulement de bar) dans ma vie. Un énorme merci à ma soeur Isa et à mes parents, Monique et Roby, pour les sacrifices endurés pendant toutes ces années d'études.

Finalement je ne pourrais pas suffisamment remercier Julie pour son soutien, son aide et son amour. Merci pour ta présence, tes encouragements, tes conseils et tous les bons moments passés depuis le début.

Liste des symboles

$\vec{\nabla}$	Opérateur gradient, page 11
$\vec{\nabla}\cdot$	Opérateur divergence, page 11
T	Opérateur de transposition, page 11
$[\cdot]$	Opérateur de saut sur l'interface aluminium-bain, page 11
\mathbf{I}	Matrice identité de dimension 3, page 11
$:$	Produit scalaire matriciel, $A : B = \text{tr}(A^T B)$, page 13
\wedge	Produit vectoriel dans \mathbb{R}^3 , page 13
$\vec{\nabla}_\Gamma$	Gradient surfacique sur l'interface, page 13
$ \vec{a} $	Norme euclidienne du vecteur \vec{a} , page 14
$\vec{\nabla}\wedge$	Opérateur rotationnel, page 16
Δ	Opérateur laplacien, page 20
ρ	Densité volumique [kg/m^3], page 9
μ	Viscosité [$\text{Pa}\cdot\text{s}$], page 9
σ	Conductivité électrique [S/m], page 9
ρ_{al}	Densité volumique de l'aluminium liquide [kg/m^3], page 10
ρ_{el}	Densité volumique du bain électrolytique [kg/m^3], page 10
μ_{al}	Viscosité de l'aluminium liquide [$\text{Pa}\cdot\text{s}$], page 10
μ_{el}	Viscosité du bain électrolytique [$\text{Pa}\cdot\text{s}$], page 10
γ	Coefficient de tension de surface [N/m], page 11
μ_0	Perméabilité magnétique du vide [$\text{kg m}/\text{A}^2 \text{s}^2$], page 16
μ_r	Perméabilité magnétique relative des matériaux [$\text{kg m}/\text{A}^2 \text{s}^2$], page 16
\mathcal{I}	Intensité de courant total [A], page 17
λ_c	Longueur capillaire, page 68

Σ	Domaine occupé par la cuve d'électrolyse, page 10
Ω	Domaine occupé par les fluides, page 10
$\Omega_{al}(t)$	Domaine occupé par l'aluminium liquide au temps t , page 10
$\Omega_{el}(t)$	Domaine occupé par le bain électrolytique au temps t , page 10
$\Gamma(t)$	Interface aluminium/bain au temps t , page 10
$\partial\Omega$	Bord du domaine fluide Ω , page 12
Γ_D	Partie du bord du domaine fluide où des conditions de Dirichlet sont imposées, page 12
Γ_S	Partie du bord du domaine fluide où des conditions de glissement sont imposées, page 12
$\partial\Gamma(t)$	Bord de l'interface aluminium/bain Γ au temps t , page 13
\vec{m}	Vecteur définissant l'angle de contact, page 13
$\vec{n}, \vec{n}_\Gamma, \vec{n}_{\partial\Omega}, \vec{n}_{\partial\Sigma}$	Normales extérieures unitaires, page 13
$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_{\partial\Gamma}, \vec{t}_{\partial\Omega}$	Tangentes unitaires, page 13
Γ_{in}	Surface d'entrée du courant, page 15
Γ_{out}	Surface de sortie du courant, page 15
$ \Gamma_{in} $	Aire de la surface d'entrée du courant, page 15
$ \Gamma_{out} $	Aire de la surface de sortie du courant, page 15
$\partial\Sigma$	Bord de la cuve d'électrolyse Σ , page 15
Λ	Domaine occupé par le caisson ferromagnétique, page 21
\mathcal{B}_r	Boule ouverte de rayon r centrée à l'origine, page 47
$\partial\mathcal{B}_r$	Sphère de rayon r centrée à l'origine, page 47
$L_0^2(\Omega)$	Espace des fonctions de carré intégrable à moyenne nulle, page 13
$H^1(\Omega)$	Espace de Sobolev des fonctions L^2 avec dérivée faible dans L^2 , page 13
$\tilde{H}_0^1(\Omega)$	Espace de Sobolev pour la formulation faible du problème de Stokes, page 13
$\mathbb{P}_1(K)$	Espace des polynômes de degré 1 sur un élément K , page 30
$H^1(\Sigma)/\mathbb{R}$	Espace de Sobolev H^1 quotienté par \mathbb{R} , page 18
$\mathbb{Q}_m(\mathbb{R}^2)$	Espace des polynômes de degré m dans chaque direction d'espace sur \mathbb{R}^2 , page 40
$W^1(\mathbb{R}^3)$	Espace de Beppo-Levi sur \mathbb{R}^3 , page 47

\vec{g}	Champ d'accélération gravifique terrestre [m/s ²], page 11
\vec{u}	Vitesse dans les fluides [m/s], page 11
\vec{f}	Champ de force agissant sur les fluides [N], page 11
p	Pression dans les fluides [Pa], page 11
$\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)$	Tenseur des contraintes, équations de Navier-Stokes, page 11
$\boldsymbol{\epsilon}(\vec{u})$	Tenseur de cisaillement, équations de Navier-Stokes, page 11
H	Courbure de Gauss sur l'interface, page 11
\vec{v}	Fonction test de $\tilde{H}_0^1(\Omega)$, page 13
\vec{j}	Densité de courant dans la cuve [A/m ²], page 15
φ	Fonction distance à l'interface pour le modèle Level-Set, page 14
$\tilde{\varphi}$	Fonction Level-Set convectée sur un pas de temps, page 14
\vec{B}	Induction magnétique [T], page 15
\vec{E}	Champ électrique [V/m], page 15
\vec{H}	Champ magnétique [A/m], page 16
\vec{A}	Potentiel magnétique vectoriel [V·s/m], page 17
V	Potentiel électrique [V], page 17
\vec{j}^{hor}	Densité de courant associée à une interface horizontale [A/m ²], page 18
$\delta\vec{j}$	Perturbation de la densité de courant due au mouvement de l'interface [A/m ²], page 18
\vec{B}^{hor}	Induction magnétique associée à une interface horizontale [T], page 19
$\delta\vec{B}$	Perturbation de l'induction magnétique due au mouvement de l'interface [T], page 19
\vec{A}^{hor}	Potentiel magnétique associé à une interface horizontale [V·s/m], page 19
$\delta\vec{A}$	Perturbation du potentiel magnétique due au mouvement de l'interface [V·s/m], page 19
\vec{B}^{ext}	Contribution des éléments extérieurs à la cuve sur l'induction magnétique [T], page 77
\vec{B}^{int}	Contribution du système de conducteurs entourant les fluides sur l'induction magnétique [T], page 77
\vec{H}^{hor}	Champ magnétique associé à \vec{B}^{hor} [A/m], page 21
\vec{B}_f^{hor}	Champ d'induction magnétique avec effet d'écran ferromagnétique [T], page 22

\vec{H}_f^{hor}	Champ magnétique associé à \vec{B}_f^{hor} [A/m], page 22
ψ	Potentiel magnétique scalaire, page 22
\mathcal{T}_h^n	Maillage du domaine fluide au temps t_n , page 29
$\hat{\mathcal{T}}_h$	Maillage de référence du domaine fluide construit pour une interface horizontale, page 29
$S(\mathcal{T}_h^n)$	Ensemble des sommets du maillage \mathcal{T}_h^n , page 29
$S(\hat{\mathcal{T}}_h)$	Ensemble des sommets du maillage $\hat{\mathcal{T}}_h$, page 29
$\hat{\Gamma}_h$	Maillage surfacique de l'interface composé de faces du maillage $\hat{\mathcal{T}}_h$, page 35
$\vec{\gamma}_i$	Trajectoire des noeuds fluide pour la déformation du maillage, page 35
Γ_h^n	Maillage surfacique de l'interface au temps t_n , page 36
χ_k	Restriction de la fonction $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$ sur la trajectoire $\vec{\gamma}_k$, page 37
\mathcal{S}_h^n	Maillage de la cuve Σ au temps t_n , page 42
$\hat{\mathcal{S}}_h$	Maillage de référence de Σ associé à une interface horizontale, page 45
B_{rh}^n	Maillage au temps t_n de la boule \mathcal{B}_r , comprenant le maillage de la cuve \mathcal{S}_h^n , page 50
Υ_{rh}	Maillage en triangles d'une approximation polyédrique de la sphère $\partial\mathcal{B}_r$, page 51
$M_h^\Omega, M_h^\Sigma, M_h^\Gamma, M_h^r, M_h^R$	Nombre d'éléments des maillages des domaines $\Omega, \Sigma, \Gamma, \mathcal{B}_r$ et \mathcal{B}_R , page 51
$N_h^\Omega, N_h^\Sigma, N_h^\Gamma, N_h^r, N_h^R$	Nombre de noeuds des maillages des domaines $\Omega, \Sigma, \Gamma, \mathcal{B}_r$ et \mathcal{B}_R , page 51
\hat{B}_{rh}	Maillage de référence de la boule \mathcal{B}_r comprenant le maillage $\hat{\mathcal{S}}_h$, page 52
\mathcal{V}_h^n	Espace éléments finis \mathbb{P}_1 sur \mathcal{T}_h^n pour un champ vectoriel, page 30
\mathcal{Q}_h^n	Espace éléments finis \mathbb{P}_1 sur \mathcal{T}_h^n pour un champ scalaire, page 30
α_S	Paramètre de stabilisation pour l'équation de Stokes discrétisée, page 30
α_t	Paramètre de turbulence, page 32
β	Paramètre de stabilisation SUPG pour le problème de transport, page 34
\mathcal{J}_h^n	Espace éléments finis \mathbb{P}_1 sur \mathcal{S}_h^n pour un champ scalaire, page 43
$\hat{\mathcal{J}}_h$	Espace éléments finis \mathbb{P}_1 sur $\hat{\mathcal{S}}_h$ pour un champ scalaire, page 45
P_h^n	Espace éléments finis \mathbb{P}_1 sur B_{Rh}^n pour un champ scalaire, page 51
$\frac{d\Gamma_h}{dt}(t_n)$	Vitesse moyenne de l'interface au temps t , page 82

Table des matières

Liste des symboles	vii
Introduction	1
1 Modèle dynamique	9
1.1 Hydrodynamique	9
1.1.1 Équations de Navier-Stokes bifluide	10
1.1.2 Interface libre	14
1.2 Électromagnétisme	15
1.2.1 Équations de Maxwell	15
1.2.2 Potentiel électrique et densité de courant	16
1.2.3 Induction et potentiel magnétique	18
1.2.4 Ferromagnétisme	21
1.3 Conclusion	23
2 Aspects numériques	25
2.1 Hydrodynamique	26
2.1.1 Splitting d’opérateur	26
2.1.2 Équation de Stokes	29
2.1.3 Viscosité et turbulence	31
2.1.4 Projection des forces	32
2.1.5 Équation de transport	33
2.2 Déformation du maillage	35
2.2.1 Interface	36
2.2.2 Déformation “élastique”	37
2.2.3 Lissage	39
2.2.4 Conservation du volume	42
2.3 Électromagnétisme	42
2.3.1 Potentiel électrique et densité de courant	42
2.3.2 Induction magnétique	44
2.3.3 Déformation du maillage extérieur	52
2.4 Algorithme général	55
2.5 Validation numérique	56
	xi

TABLE DES MATIÈRES

2.5.1	Calcul de l'induction magnétique	57
2.5.2	Creuset	62
2.6	Conclusion	69
3	Application à la production d'aluminium	73
3.1	Cuve numérique	74
3.2	Quelques résultats	80
3.2.1	Solution stationnaire	80
3.2.2	Tension superficielle	85
3.2.3	Modèles relaxés	89
3.3	Conclusion	92
4	Stabilité linéaire et dynamique	93
4.1	Modèle stationnaire et stabilité linéaire	94
4.1.1	Problème MHD stationnaire	95
4.1.2	Linéarisation	99
4.2	Stabilité linéaire vs stabilité dynamique	101
4.2.1	Critère de stabilité dynamique	101
4.2.2	Résultats numériques	102
4.3	Conclusion	108
5	Aspects informatiques	111
5.1	Le logiciel Aluce11	111
5.1.1	Historique	111
5.1.2	Structure	112
5.1.3	Exemple	113
5.2	Simulation MHD instationnaire	124
5.2.1	Macros évolutives	124
5.2.2	Charge de calcul	129
5.3	Optimisations & Perspectives	132
5.3.1	Solveurs	133
5.3.2	Formule de Biot-Savart en parallèle	135
5.4	Conclusion	137
	Conclusion	139
	A Polynômes de Jacobi	141
	Bibliographie	145

Introduction

Au début du 19^{ème} siècle, plusieurs physiciens et chimistes européens isolent un métal encore inconnu doté de propriétés très intéressantes (faible oxydabilité, légèreté, résistance, etc) : l'aluminium. Quelques années plus tard, dans une mine près des Baux-de-Provence, le géologue Pierre Berthier découvre la haute teneur en aluminium oxydé dans le minerai bauxite. En 1827, le chimiste allemand Friedrich Wöhler développe un procédé de réduction à base de sodium permettant l'extraction d'aluminium pur à partir de bauxite. Ce procédé, utilisé pendant un demi-siècle, s'avère cependant extrêmement coûteux et difficilement utilisable à échelle industrielle.

Dans les années 1886-1887, l'industrie de l'aluminium connaît une progression rapide grâce aux travaux du chimiste autrichien Karl Josef Bayer qui met au point une technique pour obtenir l'alumine (Al_2O_3) à partir de bauxite, appelé *procédé Bayer*. Dans le même temps, Paul Héroult et Charles Martin Hall découvrent, indépendamment l'un de l'autre, une méthode moins coûteuse que celle de Wöhler pour réduire l'oxyde d'aluminium en aluminium pur. Ce procédé, dit de *Hall-Héroult*, est resté quasiment inchangé depuis.

Cette thèse a pour objet l'étude mathématique et numérique de l'électrolyse de l'aluminium, base du procédé de Hall-Héroult.

Électrolyse de l'aluminium

En chimie, l'électrolyse désigne une méthode permettant de modifier des liaisons moléculaires en exploitant l'énergie d'un courant électrique. Cette technique permet par exemple de décomposer l'eau (H_2O) en oxygène (O_2) et hydrogène (H_2) ou, à l'échelle industrielle, d'extraire du chlore (Cl_2) à partir de chlorure de sodium ($NaCl$) ou de l'aluminium (Al) à partir d'alumine (Al_2O_3).

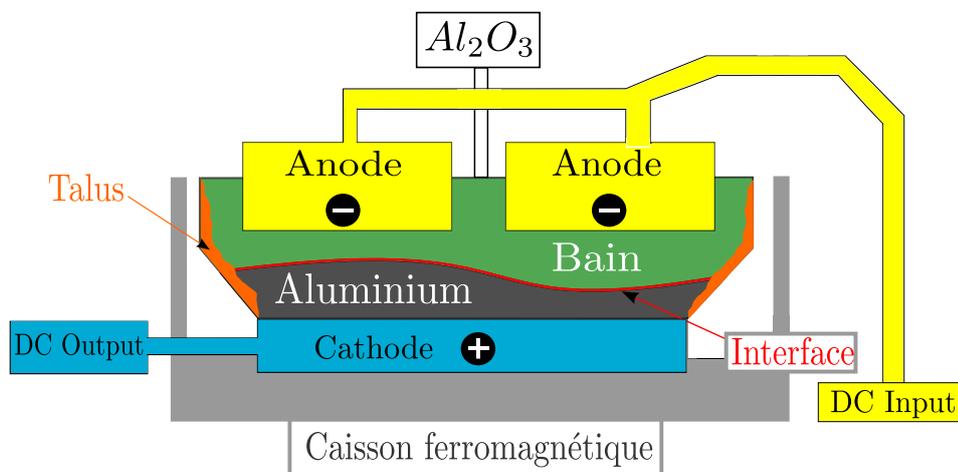
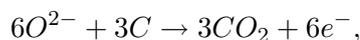


FIG. 1 – Cuve d'électrolyse schématisée

De manière simplifiée, l'électrolyse de l'aluminium repose sur les réactions suivantes : les molécules d' Al_2O_3 sont dissoutes dans une solution fortement corrosive portée à haute température appelée *électrolyte* ou *bain électrolytique* et composée essentiellement de cryolithe (Na_2AlF_6) et d'un mélange de sels fluorés permettant d'abaisser la température de fusion à environ $960^\circ C$. Sous l'effet du solvant, les molécules d'alumine s'ionisent comme suit



Au passage d'un fort courant électrique, appliqué entre une série d'anodes en carbone partiellement immergées dans le bain et un bloc cathodique en carbone constituant le fond de la cuve (voir FIG. 1), les ions d'oxygène réagissent avec le carbone des anodes selon la réaction



en dégageant une importante quantité de gaz carbonique. Cette réaction consomme progressivement les anodes qui doivent être changées périodiquement. Les ions d'aluminium sont alors transformés en aluminium liquide par la réaction de réduction

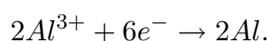




FIG. 2 – Hall d’usine RioTinto-Alcan

Le passage du courant électrique à travers le bain faiblement conducteur (environ 15’000 fois moins conducteur que l’aluminium) dissipe une grande quantité d’énergie par effet Joule¹ sous forme de chaleur. A température de production, le bain et l’aluminium sont à l’état liquide, ne se mélangent pas, et comme l’aluminium liquide est le plus dense des deux fluides, il peut être récolté au fond de la cuve par pompage.

Les flux thermiques entre intérieur et extérieur de la cuve sont étudiés pour permettre la création d’une couche d’électrolyte solidifiée qui se fixe à la paroi. Ces “talus” sont essentiels car ils protègent la structure métallique de la cuve contre l’extrême corrosivité du bain.

Un hall d’usine moderne peut contenir plusieurs centaines de cuves identiques montées en séries et reliées par des conducteurs métalliques (FIG. 2).

En parcourant ce système, le courant engendre un fort champ d’induction magnétique. Dans les cuves, l’interaction entre courant et induction donne naissance à une force, dite de *Lorentz*, qui met en mouvement les fluides.

¹Puissance dissipée \propto Courant² / Conductivité électrique.

En général ces déplacements de fluides sont plutôt horizontaux, permettant un brassage continu des liquides et de ce fait une meilleure répartition de l'alumine et de la chaleur dans le bain. Cependant, en fonction de l'intensité du courant, de la distance entre anodes et métal ou de la quantité de liquide dans la cuve, des mouvements verticaux de l'interface peuvent apparaître. Cette situation, si elle n'est pas contrôlée, perturbe le rendement de production d'une cuve et dans des cas extrêmes peut engendrer des dégâts importants. Dans l'industrie, une cuve est considérée stable si les oscillations verticales de l'interface aluminium-bain sont faibles et ne croissent pas au cours du temps.

Il est connu que le rendement de production est directement proportionnel à l'intensité du courant traversant les cuves qui est de l'ordre, dans les usines modernes, de plusieurs centaines de milliers d'ampères. Une approche pour optimiser le procédé de Hall-Héroult consiste donc à créer des cuves pouvant fonctionner avec des courants de plus en plus forts ; c'est à dire d'augmenter l'intensité électrique tout en limitant au maximum les mouvements verticaux des fluides.

En usine, diverses techniques sont utilisées et expérimentées pour améliorer la stabilité des cuves. Essentiellement, il s'agit de mieux contrôler les forces de Lorentz en agissant soit sur le champ d'induction magnétique, soit sur la distribution du courant dans les fluides. Une disposition appropriée des conducteurs dans un hall permet par exemple de contrôler l'orientation du champ d'induction magnétique dans les fluides et ainsi de diminuer les mouvements verticaux des liquides. L'effet des conducteurs extérieurs peut également être atténué en plaçant un caisson ferromagnétique autour des fluides ce qui a pour effet de dissiper une partie de l'énergie magnétique par effet d'écran.

La répartition et l'orientation du courant électrique dans les fluides sont dépendantes de la géométrie des conducteurs et du choix des matériaux composant les supports de courant. Certaines études tendent à prouver qu'augmenter ou diminuer les conductivités électriques localement peut stabiliser ou déstabiliser une cuve.

Simulation numérique

La compréhension des phénomènes d'instabilité dans les cuves d'électrolyse est rendue difficile par le fait que les observations et mesures y sont très compliquées. La haute température des fluides, la corrosivité du bain et les champs magnétiques importants perturbent les campagnes de mesure. Dans ces conditions les données expérimentales se limitent souvent à des valeurs de potentiel électrique sur les anodes, de résistance globale d'une cuve ou éventuellement du suivi d'un traceur radioactif.

Des expériences à plus petite échelle peuvent néanmoins être menées en laboratoire et fournir des informations utiles à la compréhension de certains phénomènes liés à l'électrolyse. Malgré tout, le travail avec des métaux à température de fusion et soumis à d'importants champs d'induction magnétique n'est pas anodin et est en général coûteux.

Dans ce contexte, la simulation numérique permet d'étudier à moindre coût des phénomènes compliqués en éliminant les contraintes liées à l'observation. Cependant, étant donné la complexité du procédé de Hall-Héroult (multiphysique et multichimique), il est raisonnable soit de décomposer le problème global en sous-problèmes plus abordables du point de vue mathématique, numérique et informatique soit d'idéaliser certaines caractéristiques géométriques ou physiques.

Historiquement, de nombreux travaux ont été effectués pour simuler plus ou moins efficacement les divers phénomènes liés à l'électrolyse. Depuis les années 1970, des études théoriques décrivent des modèles de dispersion pour les ondes d'instabilités dans des cuves simplifiées (voir [1, 2, 3, 4]). Ces études ont révélé les types d'ondes les plus instables et la corrélation entre instabilité et certaines configurations géométriques (épaisseur de liquide, distance anode-métal) ou physiques (effet de la viscosité, orientation du courant et du champ d'induction magnétique).

Un des premiers modèles numériques pour la simulation du mouvement de l'interface aluminium-bain est dû à Sele ([5], 1977). Dans un contexte très simplifié, il établit un critère de stabilité empirique basé sur l'épaisseur des liquides et l'intensité des champs électromagnétiques. D'autres auteurs obtiennent des résultats intéressants en exploitant des modèles 2D, 3D simplifiés ou de type "*shallow water*" ([6, 7, 8]).

Plus récemment, Gerbeau et al. ([9]) développent un modèle mathématique instationnaire pour décrire l'évolution d'instabilités magnétohydrodynamiques (*MHD*). Ces auteurs obtiennent des simulations du mouvement de l'interface dans une cuve cylindrique en discrétisant les équations couplées

de Navier-Stokes et de Maxwell par une méthode d'éléments finis.

Cette thèse s'inscrit dans la continuation d'une longue collaboration, débutée dans les années 1980, entre l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne et l'industrie de l'aluminium. Le but est de développer un logiciel de simulation numérique comprenant divers aspects du processus de Hall-Héroult. Initialement, le code était principalement dédié au calcul d'états stationnaires de cuves mais, en 30 ans, le logiciel s'est étoffé. Des méthodes numériques ont été ajoutées pour permettre : (i) une étude linéaire pour évaluer la stabilité de solutions stationnaires ([10, 11]), (ii) le calcul des effets ferromagnétiques dans un caisson autour de la cuve ([12]), (iii) de déterminer la forme des talus d'électrolyte solidifiée et leur influence sur la vitesse des fluides par un modèle couplé MHD-thermoélectrique ([13]), (iv) une première approche "évolutive" pour simuler de manière instationnaire le mouvement des fluides ([14, 15]).

Le présent travail s'inspire des travaux de Gerbeau et al. ([16]) et se base sur les premiers résultats obtenus dans la thèse de Sonia Pain ([14]). Le but est de développer et de mettre en oeuvre informatiquement un outil de simulation numérique efficace pour un modèle instationnaire du mouvement des fluides dans une cuve de Hall-Héroult. Notons que l'approche choisie pour la modélisation et le traitement numérique des équations est différente de celle considérée par Gerbeau et al.

Organisation du document

Ce document présente une approche numérique permettant de traiter efficacement les équations magnétohydrodynamiques (MHD) qui régissent le procédé de Hall-Héroult. Le but est de développer en collaboration avec une équipe de recherche de la société *Rio Tinto-Alcan*² un outil informatique efficace pour la simulation et l'optimisation de l'électrolyse de l'aluminium.

Le chapitre 1 présente les aspects physiques d'un problème *MHD* ainsi que le modèle mathématique utilisé pour décrire le phénomène. Les équations de Navier-Stokes pour les fluides sont couplées aux équations de Maxwell pour le courant électrique et le champ d'induction magnétique.

Le chapitre 2 est consacré aux aspects numériques. Les équations du modèle sont discrétisées par des méthodes d'éléments finis, un algorithme de déformation de maillage pour le suivi de l'interface est exposé et une méthode de décomposition de domaine pour traiter efficacement les équations de Maxwell sur un domaine non-borné est présentée. En fin de chapitre,

²Laboratoire de recherche et fabrication (LRF), St-Jean de Maurienne, France

quelques résultats numériques illustrent l'efficacité du modèle en reprenant une géométrie cylindrique étudiée chez d'autres auteurs et pour laquelle des mesures expérimentales sont disponibles.

Au chapitre 3 nous nous intéressons aux difficultés inhérentes à l'utilisation de l'outil de simulation sur des géométries industrielles complexes. Une étude est menée sur une cuve, dite numérique, reprenant les dimensions et propriétés caractéristiques d'une cuve réelle.

Dans le chapitre 4 le modèle évolutif est comparé avec un modèle linéaire pour l'étude de la stabilité de solutions stationnaires (voir [10, 11]). Le but est d'évaluer l'importance des effets non-linéaires sur la stabilité d'une cuve d'électrolyse.

Enfin le chapitre 5 est dédié aux aspects informatiques de ce travail de thèse. Le logiciel de simulation `Alucell` y est décrit et plusieurs questions liées à la performance et aux optimisations possibles sont présentées.

Chapitre 1

Modèle dynamique

Ce premier chapitre est dédié au rappel des équations régissant la magnétohydrodynamique (abrégé *MHD*) dans l'électrolyse. Les équations de Navier-Stokes, classiques de la mécanique des fluides, sont adaptées à la situation d'un bifluide avec interface libre et couplées aux équations de Maxwell, permettant le calcul des forces électromagnétiques (dites de Lorentz) agissant sur les fluides.

1.1 Hydrodynamique

Pour produire de l'aluminium industriellement un courant continu de forte intensité traverse la cuve du haut vers le bas et, par effet Joule dû à la forte résistivité électrique du bain, fait monter la température moyenne à environ 960 degrés Celsius. En parcourant ses divers supports, ce courant engendre un champ d'induction magnétique ambiant. L'interaction entre ces deux champs crée alors une force dite de Lorentz (cf. Section. 1.2) qui va mettre en mouvement les deux fluides.

L'aluminium liquide et le bain électrolytique étant des fluides supposés *newtoniens*, *visqueux* et *incompressibles*, leur évolution peut être décrite par les équations de Navier-Stokes incompressibles. Notons que les fluides sont considérés comme non-miscibles, et que leur écoulement est en général turbulent. Les données physiques concernant ces deux fluides sont fournies dans le tableau 1.1.

Paramètre	Unité	Symbole	Aluminium	Bain
Densité	kg/m^3	ρ	2270	2130
Viscosité	Pa·s	μ	2e-3	1e-3
Conductivité électrique	S/m	σ	3.33e6	210

TAB. 1.1 – Paramètres physiques caractéristiques

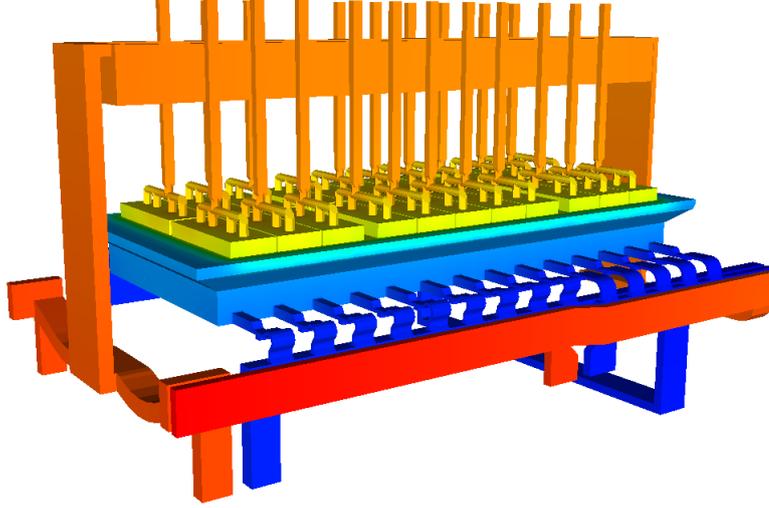


FIG. 1.1 – Exemple de géométrie d’une cuve d’électrolyse : modèle *Lynemouth*.

1.1.1 Équations de Navier-Stokes bifluide

Soit Σ le domaine borné de \mathbb{R}^3 occupé par une cuve d’électrolyse (anodes, cathode, conducteurs, griffes anodiques, fluides, etc) et soit $\Omega \subset \Sigma$ le domaine fluide comprenant l’aluminium liquide $\Omega_{al}(t)$ et le bain électrolytique $\Omega_{el}(t)$, où t désigne le temps (voir FIG. 1.1 et FIG. 1.2). On a bien sûr que $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_{al}(t) \cup \bar{\Omega}_{el}(t)$ pour tout temps t . L’interface entre les fluides est notée $\Gamma(t)$, i.e. $\Gamma(t) = \bar{\Omega}_{al}(t) \cap \bar{\Omega}_{el}(t)$ pour tout $t \geq 0$. On suppose de plus qu’il existe $\Pi \subset \mathbb{R}^2$ et une fonction lisse $g : [0, \infty) \times \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ tels que

$$\Gamma(t) = \left\{ \vec{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid z = g(t, x, y), (x, y) \in \Pi, t \in [0, \infty) \right\}.$$

En d’autres termes, $\Gamma(t)$ peut être vue comme une surface lisse paramétrée par les coordonnées x et y . Pour plus de clarté, la densité et la viscosité de l’aluminium liquide, notées respectivement ρ_{al} et μ_{al} sont considérées constantes en espace et en temps. Il en est de même pour la densité et la viscosité du bain ρ_{el} et μ_{el} . Par la suite, pour autant qu’il n’y ait pas d’ambiguïté, on écrira simplement ρ et μ .

En supposant connus la densité de courant traversant la cuve \vec{j} et le champ d’induction magnétique \vec{B} , la force qui s’applique sur les fluides, somme de la gravité et des forces de Lorentz, est $\vec{f} = \rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$. Sous ces hypothèses, la vitesse \vec{u} et la pression p des fluides satisfont les équations de

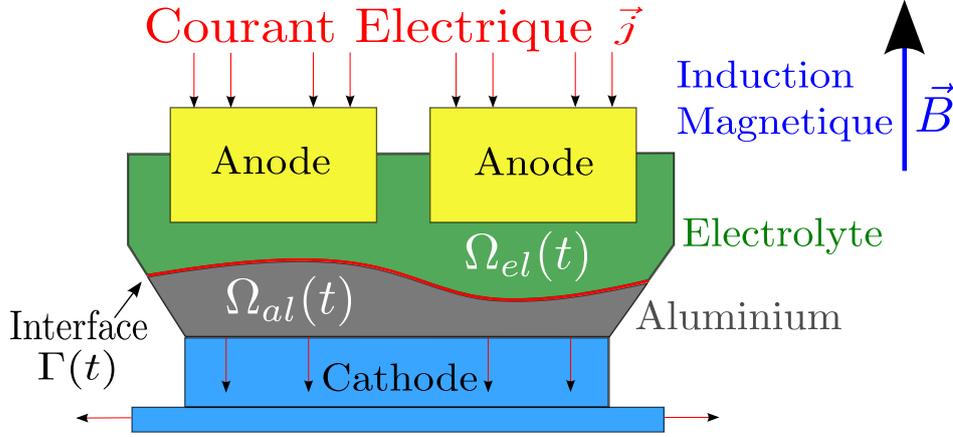


FIG. 1.2 – Domaines et notations.

Navier-Stokes incompressibles :

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)) = \vec{f}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \end{cases} \quad \text{dans } \Omega_{al}(t) \cup \Omega_{el}(t), \quad (1.1)$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes défini par

$$\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) = 2\mu\boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}) - p\mathbf{I}, \quad \text{avec } \boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}) = \frac{1}{2} (\vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\vec{u}^T). \quad (1.2)$$

Sur l'interface il convient d'imposer la continuité de la vitesse, i.e.

$$[\vec{u}] = 0, \quad \text{sur } \Gamma(t), \quad \forall t \geq 0. \quad (1.3)$$

Ici $[\cdot]$ est l'opérateur de saut entre $\Omega_{al}(t)$ et $\Omega_{el}(t)$, i.e. $[\vec{u}] = \vec{u}_{el} - \vec{u}_{al}$ avec \vec{u}_{el} (respectivement \vec{u}_{al}), la restriction de la vitesse sur le domaine $\Omega_{el}(t)$ (respectivement $\Omega_{al}(t)$). De plus, pour tenir compte des effets de tension superficielle, si \vec{n} est la normale unitaire sur $\Gamma(t)$ pointant vers le domaine Ω_{el} , on impose également

$$[\boldsymbol{\tau}\vec{n}] = \gamma H\vec{n}, \quad (1.4)$$

avec γ un coefficient de tension de surface constant qui dépend des fluides et H la courbure de Gauss sur $\Gamma(t)$. L'équation (1.4) doit être complétée par un terme de bord sur l'interface qui contient la valeur de *l'angle de mouillage* (ou *angle de contact*) entre la surface $\Gamma(t)$ et la paroi $\partial\Omega$. En pratique cette

contribution est traitée en suivant la méthode présentée dans [16], c'est à dire en introduisant dans la formulation variationnelle de (1.1) une intégrale sur Γ et en utilisant une forme surfacique du *théorème de la divergence* (voir ci-dessous).

A l'équation (1.1) s'ajoute une condition initiale sur la vitesse

$$\vec{u}(0) = \vec{u}_0 \quad \text{avec} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_0 = 0, \quad (1.5)$$

ainsi que des conditions limites de type Dirichlet homogène, $\vec{u} = 0$, sur une partie Γ_D du bord $\partial\Omega$ et de type glissement parfait,

$$\vec{u} \cdot \vec{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\tau} \vec{n}_{\partial\Omega} \cdot \vec{t}_i = 0, \quad i = 1, 2, \quad \text{sur} \quad \Gamma_S = \partial\Omega \setminus \Gamma_D, \quad (1.6)$$

avec t_1, t_2 deux vecteurs linéairement indépendants orthogonaux à la normale extérieure à $\partial\Omega$ notée $\vec{n}_{\partial\Omega}$. Les domaines Γ_D et Γ_S seront précisés dans la remarque 2.

Il faut noter qu'en principe, en raison d'un gradient de température important entre l'intérieur et l'extérieur de la cuve, des talus d'électrolyte solidifiée se forment à proximité du bord ce qui entraîne un changement de forme du domaine Ω au cours du temps et donc un changement des surfaces Γ_D et Γ_S ¹. Cependant, les effets thermiques ne seront pas pris en compte dans ce modèle et nous renvoyons à [13] pour une étude de cette question.

Formulation faible

Considérons, pour la pression, l'espace des fonctions de carré Lebesgue intégrable à moyenne nulle sur Ω , i.e.

$$L_0^2(\Omega) = \left\{ q \in L^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} q = 0 \right\}, \quad (1.7)$$

et pour la vitesse l'espace suivant :

$$\tilde{H}_0^1(\Omega) = \left\{ \vec{v} \in H^1(\Omega)^3 \mid \vec{v} = 0 \text{ sur } \Gamma_D \text{ et } \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_S \right\}, \quad (1.8)$$

où $H^1(\Omega)$ est un espace de Sobolev usuel. Dès lors, la forme variationnelle de l'équation (1.1) avec les conditions d'interface (1.3) et (1.4) s'écrit : trouver deux applications $\vec{u} : (0, \infty) \rightarrow \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $p : (0, \infty) \rightarrow L_0^2(\Omega)$ satisfaisant

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \cdot \vec{v} + \rho (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} \cdot \vec{v} + \boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{v}) \right) &= \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} + \int_{\Gamma} \gamma H \vec{v} \cdot \vec{n}, \\ \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \vec{u} &= 0, \end{aligned} \quad (1.9)$$

¹La solidification du bain influence également les courants électriques et champs magnétiques car la résistivité électrique augmente dans les talus.

1.1. HYDRODYNAMIQUE

pour tout $\vec{v} \in \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et tout $q \in L_0^2(\Omega)$. Soit $\vec{n}_{\partial\Omega}$ la normale unitaire extérieure à $\partial\Omega$ et $\vec{n}_\Gamma = \vec{n}$ la normale sur $\Gamma(t)$, définissons sur le bord $\partial\Gamma(t) \subset \partial\Omega$ les vecteurs suivants (voir FIG. 1.3) :

$$\vec{t}_{\partial\Gamma} = \vec{n}_\Gamma \wedge \vec{n}_{\partial\Omega}, \quad \vec{t}_{\partial\Omega} = \vec{n}_{\partial\Omega} \wedge \vec{t}_{\partial\Gamma} \quad \text{et} \quad \vec{m} = \vec{t}_{\partial\Gamma} \wedge \vec{n}_\Gamma.$$

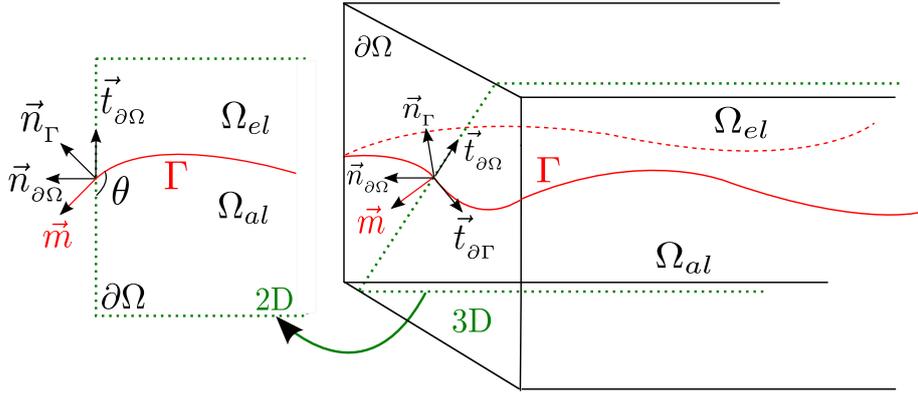


FIG. 1.3 – Normales et tangentes pour le terme de tension de surface.

Si on note $\vec{\nabla}_\Gamma \vec{v}$ le gradient surfacique de \vec{v} sur la surface $\Gamma(t)$ ², i.e.

$$\vec{\nabla}_\Gamma v_i = \vec{\nabla} v_i - \vec{n}_\Gamma (\vec{\nabla} v_i \cdot \vec{n}_\Gamma), \quad \text{pour } i = 1, 2, 3, \quad (1.10)$$

et par θ l'angle de contact physique, défini par l'angle entre $\vec{t}_{\partial\Omega}$ et \vec{m} , le terme de tension de surface dans (1.9) doit alors être réécrit comme

$$\int_\Gamma \gamma H \vec{v} \cdot \vec{n} = \int_{\partial\Gamma} \gamma \cos(\theta) \vec{t}_{\partial\Omega} \cdot \vec{v} - \int_\Gamma \gamma \operatorname{tr} \left(\vec{\nabla}_\Gamma \vec{v} \right). \quad (1.11)$$

Cette approche pour traiter le terme de tension de surface est décrite en détails dans [16]. L'idée est d'exploiter le fait que la courbure de Gauss est donnée par la divergence surfacique de la normale sur l'interface, i.e. $\operatorname{div}_\Gamma \vec{n}_\Gamma = H$ et ainsi

$$\int_\Gamma H \vec{v} \cdot \vec{n} = \int_\Gamma (\operatorname{div}_\Gamma \vec{n}_\Gamma) (\vec{v} \cdot \vec{n}) = \int_{\partial\Gamma} \vec{v} \cdot \vec{m} - \int_\Gamma \operatorname{tr} \left(\vec{\nabla}_\Gamma \vec{v} \right). \quad (1.12)$$

²le gradient surfacique est la projection orthogonale du gradient sur le plan tangent à la surface.

Remarque 1 *La détermination de l'angle de mouillage θ est une question difficile car celui-ci dépend des propriétés des deux fluides et de la paroi. Dans les cuves d'électrolyse, l'effet de tension de surface peut néanmoins être en principe négligé puisqu'il influence la forme de l'interface seulement dans une couche limite proche de la paroi. Cependant, dans certains cas pour lesquels les dimensions sont réduites, ce terme peut avoir une contribution dominante (voir par exemple la section 2.5.2).*

1.1.2 Interface libre

La résolution de (1.1) nécessite la connaissance des domaines $\Omega_{al}(t)$ et $\Omega_{el}(t)$ et a fortiori la position de l'interface $\Gamma(t)$, $\forall t \geq 0$. L'évolution de l'interface au cours du temps peut être décrite en utilisant une méthode de type *Level-Set* (cf. [17]), i.e. en définissant une fonction $\varphi : (0, \infty) \times \Omega$ de classe C^1 qui satisfait pour tout temps t :

$$\varphi(t, \vec{x}) \begin{cases} > 0 & \text{dans le bain,} \\ < 0 & \text{dans l'aluminium,} \\ = 0 & \text{sur l'interface.} \end{cases} \quad (1.13)$$

La surface de niveau donnée par l'équation $\varphi = 0$ détermine ainsi univoquement la position de l'interface. De plus, φ vérifie l'équation d'Hamilton-Jacobi :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v |\vec{\nabla} \varphi| = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (1.14)$$

où v est la vitesse de l'interface et $|\cdot|$ est la norme euclidienne dans \mathbb{R}^3 . En fait si on suppose que les particules de fluides sur l'interface restent sur l'interface au cours du temps, on a $v = \vec{u} \cdot \vec{n}_\Gamma$ sur Γ . De plus, puisque $\vec{n}_\Gamma = \frac{\vec{\nabla} \varphi}{|\vec{\nabla} \varphi|}$, on a

$$v = -\frac{\frac{\partial \varphi}{\partial t}}{|\vec{\nabla} \varphi|} = \vec{u} \cdot \frac{\vec{\nabla} \varphi}{|\vec{\nabla} \varphi|} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = 0 \quad \text{sur } \Gamma. \quad (1.15)$$

Ainsi l'évolution de la position de l'interface entre les temps t et $t + \Delta t$ peut être approchée par la surface de niveau d'une fonction $\tilde{\varphi}$ calculée en transportant la fonction Level-Set φ par l'équation

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\varphi} = 0, & \text{dans } (t, t + \Delta t) \times \Omega, \\ \tilde{\varphi}(t, \vec{x}) = \varphi(t, \vec{x}), & \forall \vec{x} \in \Omega. \end{cases} \quad (1.16)$$

Numériquement, cette approche nécessite de reconstruire la condition initiale à chaque pas de temps comme la fonction distance à l'interface.

1.2. ÉLECTROMAGNÉTISME

Remarque 2 Une caractéristique fondamentale d'un fluide visqueux est d'adhérer à la paroi. La condition de bord appropriée pour la vitesse du fluide dans ce cas est alors de type Dirichlet homogène :

$$\vec{u} = 0, \text{ sur } \partial\Omega. \quad (1.17)$$

Cette condition fait apparaître une couche limite sur le bord du domaine de taille proportionnelle à la viscosité. Imposer (1.17) dans notre modèle a comme conséquence négative d'empêcher l'interface de glisser le long des parois, c'est pourquoi dans la suite, sur la paroi latérale du domaine fluide notée Γ_S , une condition de glissement parfait (sans frottement) est imposée, i.e.

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = 0 \text{ et } \tau \vec{n} \cdot \vec{t}_i = 0, \quad i = 1, 2 \text{ sur } \Gamma_S, \quad (1.18)$$

tandis que sur le reste de la frontière $\Gamma_D = \partial\Omega \setminus \Gamma_S$ on impose $\vec{u} = 0$.

1.2 Électromagnétisme

Dans ce paragraphe nous considérons la cuve d'électrolyse dans son ensemble, notée Σ , comprenant le domaine fluide Ω , les anodes, la cathode et l'ensemble des conducteurs (griffes anodiques, barres cathodiques, etc) qui composent le domaine dans lequel le courant électrique circule (voir FIG. 1.1). Ce réseau de conducteurs peut s'avérer très complexe et, pour certains types de cuve, son *design* permet de modifier le champ d'induction magnétique pour stabiliser le mouvement des fluides dans la cuve.

Le courant est donc supposé entrer par une surface $\Gamma_{in} \subset \partial\Sigma$, traverser les fluides des anodes vers la cathode et sortir de la cuve au travers de la surface $\Gamma_{out} \subset \partial\Sigma$, avec bien sûr $\Gamma_{in} \cap \Gamma_{out} = \emptyset$.

Le but de cette section est d'établir, à partir des équations de Maxwell, un modèle permettant le calcul des forces de Lorentz $\vec{f} = \vec{j} \wedge \vec{B}$, \vec{j} désignant la densité de courant et \vec{B} le champ d'induction magnétique.

La technique choisie ici est de traiter séparément sur un pas de temps la densité de courant et le champ d'induction magnétique.

1.2.1 Équations de Maxwell

Pour décrire les phénomènes électromagnétiques, on a recours aux équations de Maxwell qui mettent en relation, au travers d'équations différentielles (ou intégrales), la densité de courant $\vec{j}(t, \vec{x})$, le champ d'induction magnétique $\vec{B}(t, \vec{x})$ et le champ électrique $\vec{E}(t, \vec{x})$.

La première équation, dite *loi d'induction de Faraday*, lie la circulation d'un champ électrique \vec{E} à la variation temporelle du champ d'induction magnétique, et s'écrit

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = 0. \quad (1.19)$$

La seconde équation, la *loi d'Ampère*, relie le champ magnétique $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} \vec{B}$ avec la densité de courant de déplacement $\frac{\partial(\epsilon \vec{E})}{\partial t}$ et la densité de courant de conduction \vec{j} , i.e.

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \frac{\partial(\epsilon \vec{E})}{\partial t} + \vec{j}. \quad (1.20)$$

Ici $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ kg m/A}^2 \text{ s}^2$ est la perméabilité magnétique absolue du vide, μ_r la perméabilité relative des matériaux et ϵ est la permittivité. Négligeant les courants de déplacement (cf. [8] pour une justification classique) et, pour l'instant, les effets ferromagnétiques ($\mu_r = 1$) l'équation (1.20) se simplifie comme

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \mu_0 \vec{j}. \quad (1.21)$$

Les deux lois (1.19) et (1.21) sont complétées par une équation de conservation du flux d'induction magnétique dans l'espace \mathbb{R}^3

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.22)$$

et par la *loi d'Ohm* qui lie la densité de courant \vec{j} au champ électrique \vec{E} , à l'induction magnétique \vec{B} et à la vitesse des fluides \vec{u} :

$$\vec{j} = \sigma \left(\vec{E} + \vec{u} \wedge \vec{B} \right), \quad (1.23)$$

où σ est la conductivité électrique des divers matériaux (fonction discontinue, constante par morceaux). La vitesse \vec{u} est donnée par (1.1) dans le domaine fluide Ω et est prolongée par 0 dans $\Sigma \setminus \bar{\Omega}$. Notons enfin que la loi (1.21) implique l'équation de continuité suivante

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0. \quad (1.24)$$

1.2.2 Potentiel électrique et densité de courant

Supposons connus à un instant t la vitesse des fluides $\vec{u}(t, \vec{x})$ pour tout $\vec{x} \in \Omega$ et l'induction magnétique $\vec{B}(t, \vec{x})$ pour tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ et construisons un modèle pour le calcul de la densité de courant \vec{j} . Tout d'abord, l'équation (1.22) assure l'existence d'un potentiel magnétique vectoriel $\vec{A}(t, \vec{x}) \in \mathbb{R}^3$ défini pour tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ et satisfaisant

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A} \quad \text{et} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \quad (1.25)$$

1.2. ÉLECTROMAGNÉTISME

En injectant cette nouvelle variable dans la loi de Faraday (1.19), on a

$$\vec{\nabla} \wedge \left(\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{E} \right) = 0, \quad (1.26)$$

et donc l'existence d'un potentiel scalaire $V(t, \vec{x}) \in \mathbb{R}$ tel que

$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{E} = -\vec{\nabla}V. \quad (1.27)$$

En réécrivant la loi d'Ohm (1.23) comme

$$\vec{j} = \sigma \left(-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}V + \vec{u} \wedge \vec{B} \right), \quad (1.28)$$

et en la combinant à l'équation de continuité (1.24), il s'ensuit la relation suivante entre V , \vec{B} , \vec{A} et \vec{u}

$$-\vec{\nabla} \cdot (\sigma \vec{\nabla}V) = -\vec{\nabla} \cdot \left(\sigma \left[-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{u} \wedge \vec{B} \right] \right) \quad \text{dans } \Sigma. \quad (1.29)$$

Remarquons que puisque $\vec{u} = 0$ en dehors de Ω , on a

$$-\vec{\nabla} \cdot (\sigma \vec{\nabla}V) = \vec{\nabla} \cdot \left(\sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) \quad \text{dans } \Sigma \setminus \bar{\Omega}. \quad (1.30)$$

Lorsque \vec{A} , \vec{u} et \vec{B} sont donnés, l'équation (1.29) est elliptique et peut être résolue en ajoutant des conditions aux limites d'entrée et de sortie de courant

$$-\vec{j} \cdot \vec{n} = \mathcal{I}/|\Gamma_{in}| = \sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} + \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{n}, \quad \text{sur } \Gamma_{in}, \quad (1.31)$$

$$\vec{j} \cdot \vec{n} = \mathcal{I}/|\Gamma_{out}| = -\sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} - \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{n}, \quad \text{sur } \Gamma_{out}, \quad (1.32)$$

avec \vec{n} la normale unitaire extérieure sur $\partial\Sigma$, \mathcal{I} l'intensité du courant total fourni et $|\Gamma_{in}|$ et $|\Gamma_{out}|$ les aires des surfaces d'entrée et de sortie de courant. Ailleurs sur le bord on impose un flux de courant nul, i.e.

$$\vec{j} \cdot \vec{n} = 0 = -\sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} - \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{n}, \quad \text{sur } \partial\Sigma \setminus (\Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}). \quad (1.33)$$

Formulation faible

En supposant \vec{A} , \vec{u} et \vec{B} connus³, l'équation (1.29) avec conditions aux limites (1.31), (1.32) et (1.33) s'écrit sous forme faible : chercher $V \in H^1(\Sigma)/\mathbb{R}$ tel que

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} \sigma \vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} W = & - \int_{\Sigma} \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{\nabla} W + \int_{\Omega} \sigma (\vec{u} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{\nabla} W \\ & + \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{in}|} \int_{\Gamma_{in}} W - \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{out}|} \int_{\Gamma_{out}} W, \end{aligned} \quad (1.34)$$

pour tout $W \in H^1(\Sigma)/\mathbb{R}$. Dès que V est connu, la densité de courant \vec{j} s'obtient explicitement de (1.28).

1.2.3 Induction et potentiel magnétique

Supposons à présent que la vitesse \vec{u} et la densité de courant \vec{j} sont connus et voyons comment calculer le champ d'induction magnétique \vec{B} et le potentiel magnétique vectoriel \vec{A} . En l'absence d'effets ferromagnétiques, une formule intégrale, appelée *loi de Biot et Savart*, permet de calculer directement pour tout $t > 0$ et tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$,

$$\vec{B}(t, \vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \vec{j}(t, \vec{y}) \wedge \frac{\vec{x} - \vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} d\vec{y} \quad \text{et} \quad \vec{A}(t, \vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\vec{j}(t, \vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} d\vec{y}. \quad (1.35)$$

D'un point de vue numérique, la résolution de ces formules intégrales est très coûteuse en temps de calcul et, puisque \vec{A} et \vec{B} doivent être recalculés à chaque pas de temps, la formulation (1.35) n'est donc pas adaptée.

En supposant que le mouvement de l'interface⁴ au cours du temps ne modifie que les courants à l'intérieur de la cuve Σ , une technique efficace pour optimiser le calcul de \vec{B} consiste à décomposer la densité de courant en deux parties, i.e.

$$\vec{j}(t, \vec{x}) = \vec{j}^{hor}(\vec{x}) + \delta\vec{j}(t, \vec{x}), \quad \forall t > 0, \quad (1.36)$$

où la partie \vec{j}^{hor} est la densité de courant lorsque l'interface Γ est un plan horizontal tandis que $\delta\vec{j}$ est la perturbation du courant due à la déformation de l'interface au temps t (voir FIG. 1.4). En général, le support de \vec{j}^{hor} ne se limite pas au domaine Σ . En fait, on considère souvent pour les calculs un réseau de plusieurs cuves connectées en série.

³la résolution pour \vec{B} et \vec{A} est donnée à la section 1.2.3.

⁴Rappelons que l'interface aluminium/bain est en mouvement ce qui crée des variations de densité de courant électrique \vec{j} et donc d'induction magnétique \vec{B}

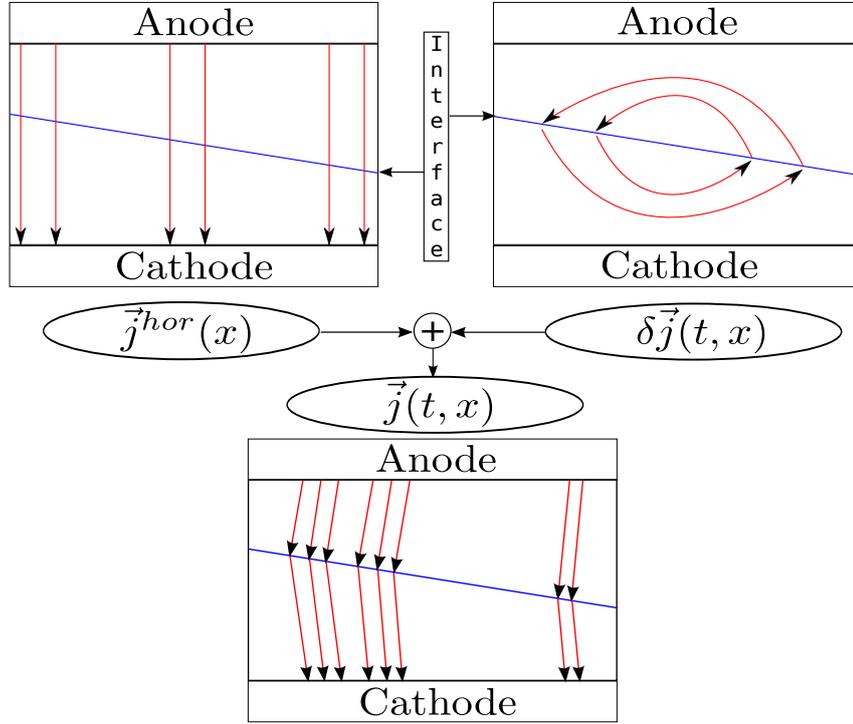


FIG. 1.4 – Décomposition de la densité de courant totale \vec{j} (en bas) en courant lié à une interface horizontale \vec{j}^{hor} (à gauche) et courant perturbé $\delta\vec{j}$ (à droite).

La densité de *courant perturbé* $\delta\vec{j}$ vérifie les hypothèses suivantes :

$$\begin{aligned} \delta\vec{j} &= 0, & \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Sigma}, \\ \delta\vec{j} \cdot \vec{n} &= 0, & \text{sur } \partial\Sigma. \end{aligned} \quad (1.37)$$

De plus, si on note \vec{B}^{hor} le champ induit par \vec{j}^{hor} et $\delta\vec{B}$ celui induit par $\delta\vec{j}$, i.e.

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B}^{hor} = \mu_0 \vec{j}^{hor} \quad \text{et} \quad \vec{\nabla} \wedge \delta\vec{B} = \mu_0 \delta\vec{j}, \quad (1.38)$$

on a également, par linéarité,

$$\vec{B}(t, \vec{x}) = \vec{B}^{hor}(\vec{x}) + \delta\vec{B}(t, \vec{x}), \quad \forall t > 0 \text{ et } \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (1.39)$$

et, a fortiori, si \vec{A}^{hor} et $\delta\vec{A}$ sont tels que

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{A}^{hor} = \vec{B}^{hor} \quad \text{et} \quad \vec{\nabla} \wedge \delta\vec{A} = \delta\vec{B}, \quad (1.40)$$

on a aussi

$$\vec{A}(t, \vec{x}) = \vec{A}^{hor}(\vec{x}) + \delta\vec{A}(t, \vec{x}), \quad \forall t > 0 \text{ et } \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (1.41)$$

avec $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}^{hor} = 0$ et $\vec{\nabla} \cdot \delta \vec{A} = 0$ dans \mathbb{R}^3 . Appliquant la loi d'Ampère (1.21) à $\delta \vec{j}$ et $\delta \vec{A}$, on a

$$\vec{\nabla} \wedge (\vec{\nabla} \wedge \delta \vec{A}) = -\Delta(\delta \vec{A}) = \mu_0 \delta \vec{j}, \text{ dans } \mathbb{R}^3. \quad (1.42)$$

De plus, puisque $\text{supp}(\delta \vec{j}) \subseteq \bar{\Sigma}$ et que $\bar{\Sigma}$ est compact on a

$$-\Delta \delta \vec{A} = 0 \text{ dans } \mathbb{R}^3 \setminus \Sigma, \quad (1.43)$$

et $\delta \vec{A}$ possède le comportement asymptotique suivant

$$|\delta \vec{A}| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), \text{ lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \quad (1.44)$$

En résumé, le calcul de l'induction magnétique est effectué en résolvant

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{B}^{hor}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \vec{j}^{hor}(\vec{y}) \wedge \frac{\vec{x} - \vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} d\vec{y}, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3, \\ -\Delta(\delta \vec{A}) = \mu_0 \delta \vec{j}, \quad \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ |\delta \vec{A}(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), \quad \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty, \\ \delta \vec{B}(\vec{x}) = \vec{\nabla} \wedge \delta \vec{A}(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \end{array} \right. \quad (1.45)$$

Remarque 3 Le problème (1.42) est à résoudre sur un domaine non borné, \mathbb{R}^3 en l'occurrence. Dans ce cas, étant donné l'absence de conditions aux limites, une méthode d'éléments finis classique est difficilement applicable. Certains auteurs proposent cependant d'exploiter le comportement asymptotique décroissant de $\delta \vec{A}$ et d'approcher la solution de (1.42) par la solution d'un problème similaire résolu dans une boule de rayon R contenant Σ en imposant des conditions de type Dirichlet homogène sur le bord du domaine. Plus R est grand, plus la solution du problème borné converge vers celle du problème non-borné mais d'un autre côté le nombre de degrés de liberté du problème numérique associé augmente fortement avec R .

Une autre approche est de limiter la résolution de (1.42) au domaine Σ et d'imposer des conditions de flux sur le bord $\partial\Sigma$ du type

$$\delta \vec{A} \cdot \vec{n}_{\partial\Sigma} = q \text{ ou } \delta \vec{A} \wedge \vec{n}_{\partial\Sigma} = \vec{k}, \quad (1.46)$$

où $\vec{n}_{\partial\Sigma}$ est la normale unitaire extérieure sur $\partial\Sigma$. La difficulté dans ce cas est d'obtenir des valeurs adéquates pour q et \vec{k} à partir de mesures ou d'études empiriques.

1.2. ÉLECTROMAGNÉTISME

Une troisième possibilité consiste à appliquer une technique dite de conditions aux limites transparentes (ou artificielles) dans laquelle des conditions au bord sous forme intégrale sont imposées sur une frontière artificielle du domaine de calcul.

Dans ce document nous présentons une autre méthode largement utilisée pour la résolution de problèmes extérieurs, basée sur un algorithme de décomposition de domaine de type Schwarz avec recouvrement (cf. section 2.3.2) et s'appuyant sur le fait que $\delta\vec{A}$ est harmonique à l'extérieur de $\bar{\Sigma}$.

1.2.4 Ferromagnétisme

Afin de réduire l'effet du champ magnétique sur le mouvement des fluides, les cuves d'électrolyse sont entourées d'un caisson composé de matériaux ferromagnétiques. L'intensité du champ de force agissant sur les fluides peut ainsi être atténué par *effet d'écran* et le mouvement de l'interface rendu plus stable.

Soit $\Lambda \in \mathbb{R}^3$ le domaine ouvert borné de l'espace occupé par le caisson ferromagnétique dont la perméabilité magnétique $\mu_r(|\vec{H}|) \geq 1$ dépend de la norme euclidienne du champ magnétique \vec{H} . Comme on peut le voir sur la figure 1.5 ce coefficient de perméabilité est grand lorsque l'intensité du champ magnétique est faible et tend vers 1 lorsque cette intensité devient grande.

En supposant connu le champ d'induction magnétique \vec{B}^{hor} associé à une interface horizontale⁵ et calculé sans effets ferromagnétiques par la formule de Biot-Savart (cf. première équation du système (1.45)), on introduit un modèle, dit de *potentiel scalaire*, pour tenir compte de l'effet d'écran dû au caisson Λ . Tout d'abord rappelons que si \vec{H}^{hor} est le champ magnétique correspondant à \vec{B}^{hor} , alors, en l'absence de matériaux ferromagnétiques, on a dans tout l'espace \mathbb{R}^3

$$\vec{B}^{hor} = \mu_0 \vec{H}^{hor}, \quad (1.47)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}^{hor} = 0, \quad (1.48)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H}^{hor} = \vec{j}^{hor}. \quad (1.49)$$

A présent, si on note \vec{B}_f^{hor} l'induction magnétique et \vec{H}_f^{hor} le champ magnétique modifié par la présence du caisson, alors \vec{B}_f^{hor} ne peut pas être

⁵Rappelons que, étant donné la décomposition (1.36), le champ \vec{B}^{hor} est indépendant du temps.

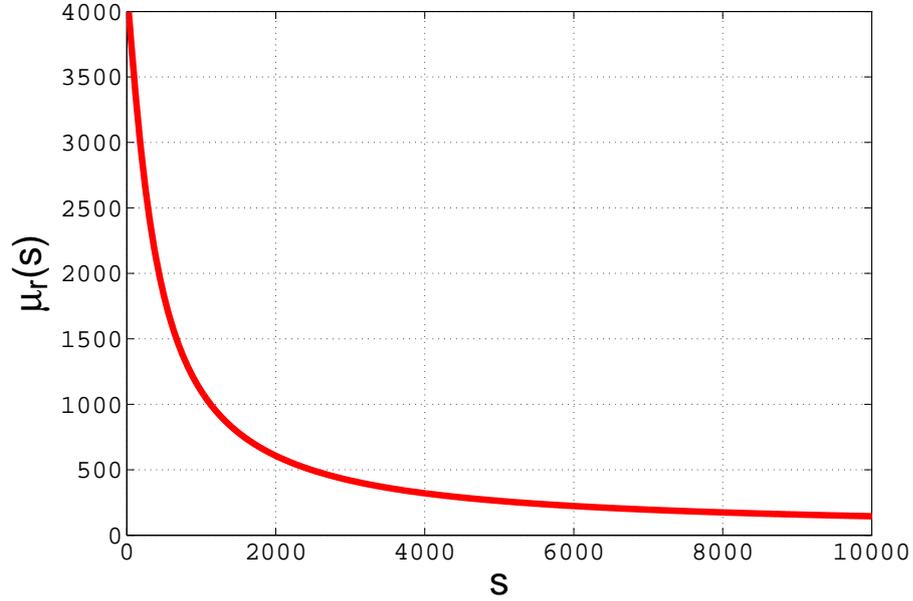


FIG. 1.5 – Perméabilité magnétique du caisson ferromagnétique.

explicitement calculé à partir de \vec{j}^{hor} mais vérifie dans tout l'espace \mathbb{R}^3

$$\vec{B}_f^{hor} = \mu_0 \mu_r (|\vec{H}_f^{hor}|) \vec{H}_f^{hor}, \quad (1.50)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}_f^{hor} = 0, \quad (1.51)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H}_f^{hor} = \vec{j}^{hor}. \quad (1.52)$$

Soustrayant les équations (1.49) et (1.52), on a l'existence d'un potentiel scalaire continu $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ tel que

$$\vec{H}_f^{hor}(\vec{x}) - \vec{H}^{hor}(\vec{x}) = \vec{\nabla} \psi(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (1.53)$$

De plus en combinant (1.53) avec les équations précédentes on peut voir que ψ vérifie pour tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$,

$$-\vec{\nabla} \cdot (\bar{\mu}(\vec{x}, s(\vec{x})) \vec{\nabla} \psi(\vec{x})) = -\vec{\nabla} \cdot (H^{hor}(\vec{x}) - \bar{\mu}(\vec{x}, s(\vec{x})) \vec{H}^{hor}(\vec{x})), \quad (1.54)$$

où $s(\vec{x}) := |\vec{H}^{hor}(\vec{x}) + \vec{\nabla} \psi(\vec{x})|$ et $\bar{\mu} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ est défini par

$$\bar{\mu}(\vec{x}, s) = \begin{cases} \mu_r(s), & \text{si } \vec{x} \in \Lambda, s \in \mathbb{R}_+, \\ 1, & \text{si } \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Lambda}, s \in \mathbb{R}_+. \end{cases} \quad (1.55)$$

Finalement, pour garantir une énergie finie, on admet le comportement asymptotique suivant

$$|\psi(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), \quad \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \quad (1.56)$$

1.3. CONCLUSION

Remarquons que, puisque $\bar{\mu} = 1$ à l'extérieur du caisson Λ , on a

$$\Delta\psi = 0, \quad \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Lambda}. \quad (1.57)$$

En conclusion, l'effet d'écran ferromagnétique sur le champ d'induction \vec{B}^{hor} peut être calculé en résolvant le problème non-linéaire suivant

$$\begin{cases} -\vec{\nabla} \cdot (\bar{\mu} \vec{\nabla} \psi) = -\vec{\nabla} \cdot ((1 - \bar{\mu}) \vec{H}^{hor}), & \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ |\psi(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (1.58)$$

et en posant

$$\vec{B}_f^{hor}(\vec{x}) = \left(\vec{B}^{hor}(\vec{x}) + \mu_0 \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) \right), \quad \forall \vec{x} \in \Sigma. \quad (1.59)$$

Remarque 4 Dans ce document les détails de la résolution du problème ferromagnétique (1.58) ne sont pas présentés mais peuvent être trouvés dans [12]. Signalons simplement que le problème non-borné pour le potentiel ψ étant proche du problème (1.42) pour le champ $\delta\vec{A}$, les mêmes méthodes de résolution peuvent être appliquées (voir remarque 3). Néanmoins, étant donné le caractère non-linéaire de l'équation (1.58), un algorithme de type point fixe est nécessaire pour résoudre le problème ferromagnétique.

1.3 Conclusion

Le terme *magnétohydrodynamique (MHD)* désigne les phénomènes physiques mêlant mécanique des fluides et électromagnétisme. Décrire ce genre de phénomènes via une simulation numérique requiert un modèle couplant les équations de Navier-Stokes, (1.1) dans notre cas, et les équations de Maxwell (1.11) à (1.17).

Essentiellement, le couplage intervient d'une part au niveau du calcul de la force agissant sur les fluides, somme de la gravité et des *forces de Lorentz*,

$$\vec{f} = \rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}, \quad (1.60)$$

nécessitant la connaissance de la densité de courant \vec{j} et du champ d'induction magnétique \vec{B} dans les fluides. D'autre part, ces quantités sont liées à la vitesse des fluides via la *loi d'Ohm* :

$$\vec{j} = \sigma \left(\vec{E} + \vec{u} \wedge \vec{B} \right). \quad (1.61)$$

Dans ce travail, le choix a été fait de traiter séparément sur un pas de temps les équations de Navier-Stokes et les équations de Maxwell. Si on se donne $\Delta t > 0$, $t_n = n\Delta t$ pour tout $n \in \mathbb{N}$ et la discrétisation temporelle suivante :

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n < \dots \quad (1.62)$$

l'algorithme itératif pour calculer l'évolution temporelle des phénomènes physiques MHD résidant dans la cuve Σ s'écrit alors :

A. Initialisation

- En plaçant la cuve Σ dans une situation statique, i.e. $\vec{u} = 0$ et Γ horizontale, calculer \vec{j}^{hor} en résolvant (1.34)-(1.28) et \vec{B}^{hor} , \vec{A}^{hor} par la loi de Biot-Savart. Ajouter l'effet du caisson ferromagnétique en calculant \vec{B}_f^{hor} d'après les équations (1.58) et (1.59) en suivant une des méthodes décrites dans [12]. Substituer alors \vec{B}^{hor} par \vec{B}_f^{hor} .
- Au temps $t = t_0$, étant données une vitesse initiale u_0 et une position initiale de l'interface Γ_0 , définir : $\vec{u}(t_0) = u_0$ et $\Gamma(t_0) = \Gamma_0$.

B. Itérations

Pour tout $n \in \mathbb{N}$, calculer sur (t_n, t_{n+1}) :

- Potentiel et courant : la densité de courant $\vec{j} = \vec{j}(t_{n+1})$ est donnée en résolvant (1.34) et (1.28). On pose alors

$$\delta\vec{j} = \vec{j} - \vec{j}^{hor}. \quad (1.63)$$

- Induction magnétique : Étant donné $\delta\vec{j}$, on résout le problème non-borné (1.42) pour $\delta\vec{A}$ (voir section 2.3.2) et on pose

$$\vec{B} = \vec{B}^{hor} + \vec{\nabla} \wedge \delta\vec{A}. \quad (1.64)$$

- Connaissant la force qui s'exerce sur les fluides au temps t_{n+1} :

$$\vec{f} = \rho\vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}, \quad (1.65)$$

et les domaines $\Omega_{al}(t_n)$ et $\Omega_{el}(t_n)$, on résout la forme faible des équations de Navier-Stokes (1.9) pour trouver la vitesse des fluides $\vec{u}(t_{n+1})$.

- La fonction $\tilde{\varphi}(\vec{x}, t_n)$ est construite comme la distance (verticale) signée entre $\vec{x} \in \Omega$ et l'interface $\Gamma(t_n)$ et transportée via l'équation (1.16) sur l'intervalle de temps (t_n, t_{n+1}) avec $\vec{u}(t_{n+1})$ comme champ de convection. L'interface $\Gamma(t_{n+1})$ est alors définie comme la surface de niveau $\tilde{\varphi}(\cdot, t_{n+1}) = 0$.

Dans ce chapitre, on a vu comment traiter les équations *MHD* pour simuler le mouvement de l'interface dans une cuve d'électrolyse de l'aluminium. Dans le chapitre à venir, voyons comment traiter numériquement ces équations pour résoudre effectivement les problèmes aux dérivées partielles introduits ici.

Chapitre 2

Aspects numériques

Ce chapitre est consacré aux méthodes numériques utilisées pour discrétiser les équations MHD du chapitre 1. L'accent est mis principalement sur la partie électromagnétique pour laquelle une méthode de décomposition de domaine est introduite pour traiter le problème non-borné (1.42). Cependant, dans un premier temps, une méthode de *splitting en temps* pour résoudre les équations de Navier-Stokes tirée de [18] est présentée.

Les équations traitées ici étant assez *classiques*, aucune étude d'existence ou d'unicité des solutions n'est reprise dans ce document et le lecteur est renvoyé aux nombreux ouvrages de référence qui traitent de la question comme [19], [20], [21], [22], [18], [23] et [16], pour une analyse théorique détaillée.

Le modèle numérique est construit à partir d'éléments finis continus de type Galerkin de degré 1 pour la discrétisation en espace et de différences finies de type Euler implicite pour la discrétisation temporelle. Le but est d'effectuer les calculs instationnaires à l'aide d'un logiciel d'éléments finis \mathbb{P}^1 , appelé `Aluce11`¹, qui permet déjà d'étudier divers aspects de l'électrolyse (voir [14, 13, 11] par exemple).

A la fin de ce chapitre, en guise de validation, le modèle est appliqué à la simulation de l'écoulement dans un creuset cylindrique déjà étudié chez d'autres auteurs et pour lequel des données expérimentales existent.

¹Le logiciel `Aluce11` est décrit en détails au chapitre 5.

2.1 Hydrodynamique

On a vu au chapitre précédent que la vitesse \vec{u} et la pression p des fluides satisfont les équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)) = \vec{f}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\varphi} = 0, \\ \Omega_{al}(t) = \{ \vec{x} \in \Omega \mid \tilde{\varphi}(t, \vec{x}) < 0 \}, \\ \Omega_{el}(t) = \{ \vec{x} \in \Omega \mid \tilde{\varphi}(t, \vec{x}) > 0 \}, \end{array} \right. \quad \text{dans } \Omega_{al}(t) \cup \Omega_{el}(t), \quad (2.1)$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes défini par

$$\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) = 2\mu\boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}) - pI, \quad \text{avec } \boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}) = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\vec{u}^T \right), \quad (2.2)$$

et avec les conditions limites et d'interface suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} [\vec{u}] = 0, & \text{sur } \Gamma(t), \\ [\boldsymbol{\tau}\vec{n}] = \gamma H\vec{n}, & \text{sur } \Gamma(t), \\ \vec{u} = 0, & \text{sur } \Gamma_D, \\ \vec{u} \cdot \vec{n} = 0, & \text{sur } \Gamma_S, \\ \boldsymbol{\tau}\vec{n} \cdot \vec{t}_i = 0, \quad i = 1, 2 & \text{sur } \Gamma_S. \end{array} \right. \quad (2.3)$$

Grâce à la théorie du *splitting d'opérateur* développée dans [18] on va montrer que la résolution de cette équation est équivalente à la résolution d'un problème de Stokes et d'un problème de transport linéaire. Commençons par rappeler les bases de cette technique.

2.1.1 Splitting d'opérateur

Considérons dans un premier temps le problème à valeur initiale suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \omega}{\partial t} + A_1\omega + A_2\omega = 0, \\ \omega(0) = \omega_0, \end{array} \right. \quad (2.4)$$

où $\omega(t) \in \mathbb{R}^d$, $\forall t > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}^d$ et où A_1 et A_2 sont des matrices $d \times d$ réelles indépendantes. La solution de ce problème est alors donnée par

$$\omega(t) = e^{-(A_1+A_2)t}\omega_0, \quad \forall t \geq 0. \quad (2.5)$$

2.1. HYDRODYNAMIQUE

Soit $\Delta t > 0$ un pas de discrétisation temporelle et posons pour tout $n \in \mathbb{N}$ et $\alpha \in \mathbb{R}$, $t_{n+\alpha} = (n + \alpha)\Delta t$. L'équation (2.5) implique alors

$$\omega(t_{n+1}) = e^{-(A_1+A_2)\Delta t}\omega(t_n), \quad \forall n \geq 0. \quad (2.6)$$

Supposons maintenant que les matrices A_1 et A_2 commutent, nous avons alors de (2.6) :

$$\omega(t_{n+1}) = e^{-A_2\Delta t}e^{-A_1\Delta t}\omega(t_n), \quad \forall n \geq 0, \quad (2.7)$$

et ainsi $\omega(t_{n+1})$ peut être obtenu *exactement* de $\omega(t_n)$ en résolvant

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + A_1 v = 0, & \text{sur } (t_n, t_{n+1}), \\ v(t_n) = \omega(t_n), \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\omega^{n+1/2} = v(t_{n+1}), \quad (2.9)$$

et

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + A_2 w = 0, & \text{sur } (t_n, t_{n+1}), \\ v(t_n) = \omega^{n+1/2}, \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\omega(t_{n+1}) = w(t_{n+1}). \quad (2.11)$$

Dans (2.9) et (2.10), $\omega^{n+1/2}$ dénote une valeur prédite de ω à $t = t_{n+1}$; en effet (2.9) peut être vu comme un pas de *prédiction* tandis que le pas (2.11) agit comme *correcteur*. Le problème (2.4) peut donc être résolu en initialisant

$$\omega^0 = \omega_0, \quad (2.12)$$

puis, pour tout $n \geq 0$, en cherchant ω^{n+1} en suivant le schéma (2.8) à (2.11).

Cette technique est du type *splitting d'opérateur* et est exacte si A_1 et A_2 commutent. De plus, si A_1 et A_2 ne commutent pas, on peut prouver que le schéma est de *premier ordre* en précision.

Le problème de Navier-Stokes peut être considéré comme un cas particulier de

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{\omega}}{\partial t} + (A + B)\vec{\omega} = 0, \\ \vec{\omega}(0) = \vec{\omega}_0, \end{cases} \quad (2.13)$$

où A est l'opérateur de Stokes et B est l'opérateur de transport non-linéaire. Nous savons alors (cf.[18]) que ce problème peut être résolu par le schéma d'ordre 1 en temps suivant : considérer la vitesse initiale,

$$\vec{u}(0) = \vec{u}_0; \quad (2.14)$$

puis chercher, pour $n \geq 0$, \vec{u}^{n+1} à partir de \vec{u}^n en résolvant sur (t_n, t_{n+1}) ,

$$(Stokes) \left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)) = \vec{f}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \\ [\vec{u}] = 0 \quad \& \quad [\boldsymbol{\tau} \vec{n}] = \gamma H \vec{n}, \\ \vec{u}(t_n) = \vec{u}^n, \\ \vec{u}^{n+1/2} = \vec{u}(t_{n+1}), \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{dans } \Omega_{al}(t_n) \cup \Omega_{el}(t_n), \\ \text{sur } \Gamma(t), \end{array} \quad (2.15)$$

puis sur $(0, \Delta t)$,

$$(Trsp) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u}^{n+1/2} \cdot \nabla) \vec{u} = 0, \\ \vec{u}(0) = \vec{u}^{n+1/2}, \\ \vec{u}^{n+1} = \vec{u}(\Delta t), \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} + \vec{u}^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\varphi} = 0, \\ \tilde{\varphi}(0) = \varphi(t_n). \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{dans } \Omega_{al}(t_n) \cup \Omega_{el}(t_n), \\ \text{dans } \Omega_{al}(t_n) \cup \Omega_{el}(t_n), \end{array} \quad (2.16)$$

En d'autres termes, la résolution des équations de Navier-Stokes instationnaires peut être ramenée à la résolution successive d'un *problème de Stokes évolutif* et d'un *problème de transport linéaire*. Nous allons donc nous intéresser à la discrétisation en éléments finis de ces deux sous-problèmes.

2.1.2 Équation de Stokes

En reprenant les espaces fonctionnels $L_0^2(\Omega)$ et $\tilde{H}_0^1(\Omega)$ définis au chapitre précédent dans (1.7) et (1.8), la formulation faible de l'équation de Stokes (2.15) avec les conditions d'interface (1.3) et (1.4) s'écrit alors : chercher $\vec{u} : (0, \infty) \rightarrow \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $p : (0, \infty) \rightarrow L_0^2(\Omega)$ tels que

$$\int_{\Omega} \left(\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \cdot \vec{v} + \boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{v}) \right) = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} + \int_{\partial\Gamma} \gamma \cos(\theta) \vec{t}_{\partial\Omega} \cdot \vec{v} - \int_{\Gamma} \gamma \operatorname{tr} \left(\vec{\nabla}_{\Gamma} \vec{v} \right),$$

$$\int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0,$$
(2.17)

pour tout $\vec{v} \in \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et tout $q \in L_0^2(\Omega)$.

Soit $\Delta t > 0$. On introduit une discrétisation temporelle uniforme de pas Δt , i.e. $t_n = n\Delta t$, pour tout $n \in \mathbb{N}$. Soit $h > 0$, un maillage en tétraèdres \mathcal{T}_h^n du domaine $\bar{\Omega}$ est construit de sorte que :

- Le maillage \mathcal{T}_h^n est composé de M_h^Ω éléments tétraédriques K_i tels que $h_{K_i} = \operatorname{diam}(K_i) < h$, pour tout $i = 1, \dots, M_h^\Omega$;
- Le maillage est conforme dans le sens où deux éléments adjacents partagent exactement une face commune ;
- L'ensemble composé des sommets du maillage \mathcal{T}_h^n est noté $S(\mathcal{T}_h^n)$ et est de cardinalité N_h^Ω ;
- Le maillage est compatible avec l'interface $\Gamma(t_n)$ dans le sens où un élément de \mathcal{T}_h^n est considéré soit entièrement dans le bain $\bar{\Omega}_{el}(t_n)$, soit entièrement dans l'aluminium liquide $\bar{\Omega}_{al}(t_n)$. Dans cette configuration l'interface est approchée par un maillage surfacique Γ_h^n composé de faces triangulaires de \mathcal{T}_h^n .

Remarque 5 *A la section 2.2 on verra comment construire une suite de maillages $(\mathcal{T}_h^n)_{n=0}^\infty$ qui conservent la même topologie (même nombre de noeuds, même nombre d'éléments et même voisins) en déformant à chaque pas de temps un maillage de référence $\hat{\mathcal{T}}_h$. L'avantage principal de cette technique est que l'interface aluminium-bain coïncide en tout temps avec une surface composées de faces de \mathcal{T}_h^n , ce qui facilite l'évaluation des intégrales volumiques sur Ω_{al} et Ω_{el} et des termes de tension de surface sur Γ et $\partial\Gamma$.*

Suivant une approche éléments finis classique, on définit les espaces de dimension finie suivants

$$\mathcal{V}_h^n = \left\{ \vec{v}_h \in [C^0(\bar{\Omega})]^3 \mid \vec{v}_h|_K \in [\mathbb{P}_1(K)]^3, \forall K \in \mathcal{T}_h^n \right\}, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{Q}_h^n = \left\{ q_h \in C^0(\bar{\Omega}) \mid q_h|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \mathcal{T}_h^n \right\}, \quad (2.19)$$

où $\mathbb{P}_1(K)$ est l'espace des polynômes de degré 1 sur l'élément K . La semi-discrétisation en espace avec stabilisation du type Brezzi-Pitkäranta (voir [24] et [20]) du problème de Stokes sur (t_n, t_{n+1}) s'écrit alors : pour tout $t \in (t_n, t_{n+1})$, chercher $\vec{u}_h(t) \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $p_h(t) \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$ tels que :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\partial \vec{u}_h(t)}{\partial t} \cdot \vec{v}_h + \boldsymbol{\tau}(\vec{u}_h(t), p_h(t)) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{v}_h) \right) \\ & = \int_{\Omega} \vec{f}_h(t) \cdot \vec{v}_h + \int_{\partial\Gamma} \gamma \cos(\theta) \vec{t}_{\partial\Omega} \cdot \vec{v}_h - \int_{\Gamma} \gamma \operatorname{tr} \left(\vec{\nabla}_{\Gamma} \vec{v}_h \right), \\ & - \int_{\Omega} q_h \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_h(t) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h^n} \frac{\alpha_S h_K^2}{\mu} \int_K \vec{\nabla} p_h(t) \cdot \vec{\nabla} q_h, \end{aligned} \quad (2.20)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $q_h \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$. Ici, $\vec{f}_h(t)$ est l'interpolé de Lagrange du champ de force sur \mathcal{T}_h^n et α_S est un paramètre de stabilisation positif indépendant de h , ρ et μ .

Remarque 6 Les termes de stabilisation dans (2.20) sont nécessaires en raison de l'utilisation d'éléments finis \mathbb{P}_1 pour la vitesse et la pression (voir [20], [25] et [24]). Un autre choix classique serait l'utilisation d'éléments dits stables, \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 en pression (voir [22] et [18]) pour lesquels aucun terme supplémentaire n'est nécessaire. Dans notre cas, étant donné que les équations sont discrétisées dans l'optique d'être intégrées à un code de simulation \mathbb{P}_1 (Alucell voir chapitre 5), la première solution est appropriée.

Introduisons encore la forme complètement discrétisée de (2.17) en utilisant un schéma d'Euler rétrograde en temps : étant donné une approximation de la vitesse au temps t_n , $\vec{u}_h^n \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$, chercher $\vec{u}_h^{n+1/2} \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et

2.1. HYDRODYNAMIQUE

$p_h^{n+1/2} \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$ au temps t_{n+1} tels que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\vec{u}_h^{n+1/2} - \vec{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \vec{v}_h + \boldsymbol{\tau}(\vec{u}_h^{n+1/2}, p_h^{n+1/2}) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{v}_h) \right) = \\ \int_{\Omega} \vec{f}_h^{n+1/2} \cdot \vec{v}_h + \int_{\partial\Gamma} \gamma \cos(\theta) \vec{t}_{\partial\Omega} \cdot \vec{v}_h - \int_{\Gamma} \gamma \operatorname{tr}(\vec{\nabla}_{\Gamma} \vec{v}_h), \\ - \int_{\Omega} q_h \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_h^{n+1/2} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h^n} \frac{\alpha_S h_K^2}{\mu} \int_K \vec{\nabla} p_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla} q_h, \end{aligned} \quad (2.21)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $q_h \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$.

Remarque 7 *Étant donné que le schéma de splitting (2.14)-(2.16) est d'ordre 1 en précision, il est inutile de choisir un schéma d'ordre plus élevé pour la discrétisation temporelle de (2.17). Un schéma d'Euler implicite est donc approprié.*

2.1.3 Viscosité et turbulence

Pour mieux prendre en compte la turbulence des écoulements dans notre code, nous optons pour des modèles dits de *mélange* (cf. [26], [27]), purement algébriques, qui peuvent être facilement pris en compte dans les équations. Notons que nous laissons de côté des modèles plus complexes tels que les modèles de type $k - \epsilon$ (voir par exemple [28, 29]).

L'idée est de remplacer la viscosité scalaire μ dans les équations (1.2) et (2.17) par un tenseur $\boldsymbol{\mu} = (\mu_{ij})$, $i, j = 1, 2, 3$ qui fait apparaître une dépendance entre viscosité et vitesse. Plusieurs candidats sont alors possibles :

- *Cas laminaire isotrope*

$$\mu_{ij} = \mu_L, \quad \forall i, j = 1, 2, 3. \quad (2.22)$$

C'est le cas trivial où l'introduction du tenseur est équivalente à la formulation avec une viscosité scalaire.

- *Cas turbulent isotrope*

$$\mu_{ij} = \mu_L + \rho \alpha_t h^2 \sqrt{2\boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}_h) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}_h)}, \quad \forall i, j = 1, 2, 3. \quad (2.23)$$

où h est le pas d'espace de la discrétisation en éléments finis et α_t est un paramètre numérique à calibrer. Ce tenseur est proportionnel aux variations locales du champ de vitesse via le tenseur $\boldsymbol{\epsilon}(\vec{u}_h)$. Il modélise

ainsi l'augmentation des effets visqueux quand les particules de fluides subissent de forts gradients de vitesse, sans toutefois tenir compte de la direction de ces gradients.

- *Cas turbulent anisotrope*

$$\mu_{ij} = \mu_L + \rho\alpha_t h^2 |\epsilon_{ij}(\vec{u}_h)|, \quad \forall i, j = 1, 2, 3. \quad (2.24)$$

Le tenseur proposé ici diffère de (2.23) dans le fait important que cette fois le terme de turbulence tient compte *séparément* des directions de variation du champ de vitesse.

2.1.4 Projection des forces

Pour accroître la précision du schéma de résolution pour le problème de Stokes, on peut éliminer dans le terme de densité de force la contribution qui n'engendre pas de mouvements. On rappelle pour ça le résultat suivant tiré de [22] :

Théorème 1 *Tout champ de forces $\vec{f} \in [L^2(\Omega)]^3$ possède la décomposition orthogonale suivante :*

$$\vec{f} = \vec{\nabla}\phi + \vec{\nabla} \wedge \vec{\vartheta}, \quad (2.25)$$

où $\phi \in H^1(\Omega)/\mathbb{R}$ est l'unique solution de

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla}\phi \cdot \vec{\nabla}\eta = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\nabla}\eta, \quad \forall \eta \in H^1(\Omega)/\mathbb{R}, \quad (2.26)$$

et $\vec{\vartheta} \in [H^1(\Omega)]^3$ satisfait

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{\vartheta} \in L^2(\Omega) \quad \text{et} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{\vartheta} = 0. \quad (2.27)$$

Le théorème 1 signifie qu'un champ de forces peut être décomposé en une contribution rotationnelle, moteur du mouvement des fluides, et une contribution gradient qui peut être intégrée dans la pression. L'idée est d'appliquer ce résultat à chaque pas de temps pour éliminer la partie gradient de la force \vec{f} dans l'équation de Stokes discrétisée (2.21), i.e. de résoudre : étant donné $\vec{u}_h^n \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$, chercher $\vec{u}_h^{n+1/2} \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $\tilde{p}_h^{n+1/2} \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$

tels que

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\vec{u}_h^{n+1/2} - \vec{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \vec{v}_h + \boldsymbol{\tau}(\vec{u}_h^{n+1/2}, \tilde{p}_h^{n+1/2}) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{v}_h) \right) = \\
 & \int_{\Omega} \left(\vec{f}_h^{n+1/2} - \vec{\nabla} \phi_h^{n+1/2} \right) \cdot \vec{v}_h + \int_{\partial\Gamma} \gamma \cos(\theta) \vec{t}_{\partial\Omega} \cdot \vec{v}_h - \int_{\Gamma} \gamma \operatorname{tr} \left(\vec{\nabla}_{\Gamma} \vec{v}_h \right), \\
 & - \int_{\Omega} q_h \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_h^{n+1/2} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h^n} \frac{\alpha s h_K^2}{\mu} \int_K \vec{\nabla} \tilde{p}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla} q_h,
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ et $q_h \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$ et où $\phi_h^{n+1/2} \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega)$ est solution de

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \phi_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla} \eta_h = \int_{\Omega} \vec{f}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla} \eta_h, \quad \forall \eta_h \in \mathcal{Q}_h^n \cap L_0^2(\Omega). \tag{2.29}$$

Notons que $\tilde{p}_h^{n+1/2}$ ne représente plus la pression des fluides mais est reliée à $p_h^{n+1/2}$ par l'équation

$$\vec{\nabla} p_h^{n+1/2} - \vec{\nabla} \phi_h^{n+1/2} = \vec{\nabla} \tilde{p}_h^{n+1/2}. \tag{2.30}$$

2.1.5 Équation de transport

Une résolution efficace du problème de transport (2.16) est cruciale, car comme nous le verrons par la suite, les écoulements de fluides dans les cuves d'électrolyse sont des écoulements à Reynolds très élevés ($\geq 10^5$ typiquement), rendant ainsi les phénomènes physiques dûs au transport de particules dominants devant les effets visqueux.

Sous forme variationnelle, le problème de transport linéaire (2.16) pour la vitesse s'écrit : chercher $\vec{u} : (0, \Delta t) \rightarrow [H^1(\Omega)]^3$ vérifiant $\vec{u}(0) = \vec{u}^{n+1/2}$ et

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \cdot \vec{v} + \int_{\Omega} (\vec{u}^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} \cdot \vec{v} = 0, \quad \forall \vec{v} \in [H^1(\Omega)]^3. \tag{2.31}$$

En appliquant une méthode de Galerkin \mathbb{P}_1 avec stabilisation *SUPG* (voir [30] et [31]), la semi-discrétisation en espace de (2.31) prend la forme suivante : pour $t \in (0, \Delta t)$, on cherche $\vec{u}_h(t) \in \mathcal{V}_h^n$ satisfaisant, $\vec{u}_h(0) = \vec{u}^{n+1/2}$ et

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \frac{\partial \vec{u}_h}{\partial t} \cdot \vec{v}_h + \int_{\Omega} (\vec{u}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h \cdot \vec{v}_h \\
 & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h^n} \frac{\beta h_K}{2 \|\vec{u}_h^{n+1/2}\|_{L^2(K)}} \int_K (\vec{u}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h \cdot (\vec{u}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}_h = 0,
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n$. Le réel β est un paramètre de stabilisation indépendant du pas de discrétisation spatial.

Comme avant, appliquons encore un schéma d'Euler implicite en temps. Le problème complètement discrétisé est alors : étant donné $\vec{u}_h^{n+1/2} \in \mathcal{V}_h^n \cap \tilde{H}_0^1(\Omega)$ issu de la résolution du problème de Stokes (2.21), on cherche $\vec{u}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h^n$ satisfaisant :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\vec{u}_h^{n+1} - \vec{u}_h^{n+1/2}}{\Delta t} \cdot \vec{v}_h + \int_{\Omega} (\vec{u}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h^n} \frac{\beta h_K}{2 \|\vec{u}_h^{n+1/2}\|_{L^2(K)}} \int_K (\vec{u}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{n+1} \cdot (\vec{u}_h^{n+1/2} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}_h = 0, \end{aligned} \quad (2.33)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n$.

Remarque 8 *D'un point de vue numérique, la résolution du problème (2.33) est très rapide étant donné que les trois composantes de la solution \vec{u}_h^{n+1} sont indépendantes.*

Transport de l'interface

La discrétisation de l'équation de transport pour la fonction $\tilde{\varphi}$ (1.16) est similaire à (2.33). Connaissant $\tilde{\varphi}_h^n \in \mathcal{Q}_h^n$ (reconstruite à chaque pas de temps comme la distance à l'interface) et la vitesse de convection $\vec{u}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h^n$ issue de la résolution de (2.33), on cherche $\tilde{\varphi}_h^{n+1} \in \mathcal{Q}_h^n$ tel que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\tilde{\varphi}_h^{n+1} - \tilde{\varphi}_h^n}{\Delta t} \cdot v_h + \int_{\Omega} (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\varphi}_h^{n+1} v_h \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h^n} \frac{\beta h_K}{2 \|\vec{u}_h^{n+1}\|_{L^2(K)}} \int_K (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\varphi}_h^{n+1} (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla}) v_h = 0, \end{aligned} \quad (2.34)$$

pour tout $v_h \in \mathcal{Q}_h^n$.

Remarque 9 *La vitesse de convection utilisée ici est la vitesse du fluide issue du schéma de splitting complet \vec{u}_h^{n+1} . On pourrait, pour gagner du temps, résoudre une seule équation de transport pour calculer \vec{u}_h^{n+1} et $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$ en prenant comme vitesse de convection la vitesse intermédiaire du schéma $\vec{u}_h^{n+1/2}$.*

2.2 Déformation du maillage

En général, la technique Level-Set est associée à l'utilisation d'un maillage fixe. Si on veut bien capter l'interface entre les fluides dans ce cas, des maillages suffisamment fins sont nécessaires, au moins dans un voisinage de l'interface. Cette contrainte ne se prête pas très bien aux simulations sur cuve d'électrolyse car, d'un point de vue numérique, il est difficile de mailler suffisamment finement les fluides tout en tenant compte de la géométrie complète des cuves. Typiquement, le maillage du domaine fluide ne représente en effet que 50% du maillage total. D'autre part, la construction des matrices élémentaires pour les divers problèmes éléments finis à résoudre est plus difficile dans ce cas puisqu'il faut à chaque pas de temps détecter l'intersection entre maillage et interface et effectuer les différentes intégrations sur des polyèdres qui ne sont plus exclusivement des tétraèdres.

De ce fait, il est raisonnable d'introduire une technique de déformation de maillage pour suivre le mouvement de l'interface au cours du temps. L'idée est de déplacer certains noeuds en fonction de la surface de niveau $\tilde{\varphi} = 0$ pour que l'interface soit en tout temps composée de faces du maillage, puis dans un deuxième temps de *détendre* les mailles restantes pour conserver une bonne qualité de maillage au cours du temps.

Pour simplifier cette partie, il est commode de considérer un maillage *original* du domaine fluide, noté $\hat{\mathcal{T}}_h$, dans lequel l'interface aluminium/bain est une surface plane d'altitude $z_0 \in \mathbb{R}$ et dont le maillage en triangles est noté $\hat{\Gamma}_h$. Dans les sections 2.2.1 et 2.2.2 on va montrer comment, à chaque pas de temps t_n , construire le maillage \mathcal{T}_h^n du domaine $\bar{\Omega}_{al}(t_n) \cup \bar{\Omega}_{el}(t_n)$ en déformant le maillage original $\hat{\mathcal{T}}_h$.

Pour être assuré de conserver un maillage conforme au cours du temps, on commence par associer à chaque noeud $\underline{x}_i \in S(\hat{\mathcal{T}}_h)$, $i = 1, \dots, N_h^\Omega$ une *ligne trajectoire*, i.e. une courbe dans \mathbb{R}^3 paramétrée par une fonction lisse $\tilde{\gamma}_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ le long de laquelle le noeud peut se déplacer. En tout temps t_n , un noeud \underline{x}_i du maillage original atteint sa nouvelle position $\underline{x}_i^n \in S(\mathcal{T}_h^n)$ sur la trajectoire $\tilde{\gamma}_i$, i.e. pour tout $i = 1, \dots, N_h^\Omega$ il existe $\underline{s}_i \in \mathbb{R}$ tel que $\underline{x}_i = \tilde{\gamma}_i(\underline{s}_i)$ et il existe $s_i^n \in \mathbb{R}$ tel que $\underline{x}_i^n = \tilde{\gamma}_i(s_i^n)$ est un noeud du maillage \mathcal{T}_h^n . Notons que ces lignes trajectoires ne dépendent en principe que de la forme de la cuve et peuvent, en général, être choisies comme des segments de droite (voir FIG. 2.1). En particulier si les bords latéraux de la cuve sont verticaux les lignes trajectoires seront toutes semblables, parallèles aux bords. Par contre si les bords de la cuve sont inclinés, comme c'est le cas pour beaucoup de cuves industrielles, il faut modifier les trajectoires en conséquence.

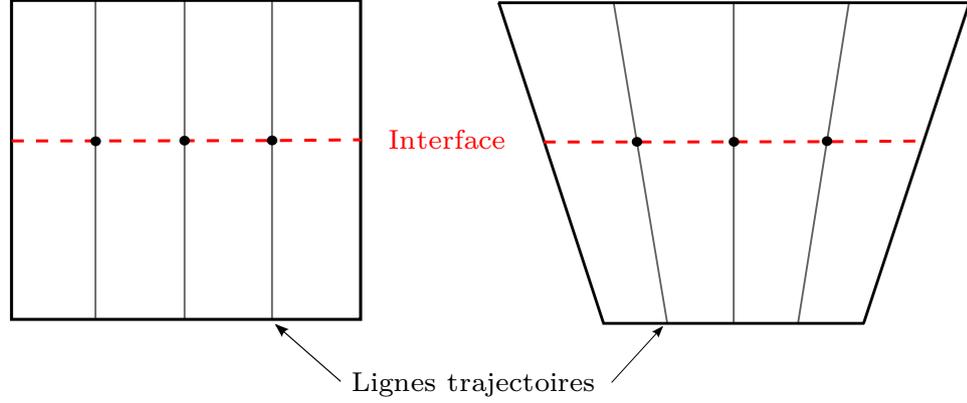


FIG. 2.1 – Exemples de trajectoires possibles en fonction de la géométrie des cuves. Gauche : bords verticaux, droite : bords inclinés. Les noeuds du maillage ne peuvent se déplacer que sur ces lignes.

2.2.1 Interface

Supposons connu, au temps t_n , le maillage en tétraèdres du domaine fluide \mathcal{T}_h^n de sorte que le maillage 2D de l'interface, noté Γ_h^n , soit exclusivement composé de faces (triangles) du maillage \mathcal{T}_h^n . On peut définir, en chaque noeud $\vec{x}_i^n \in S(\mathcal{T}_h^n)$, la fonction $\varphi_h^n(\vec{x}_i^n)$ comme distance signée à l'interface, i.e.

$$\varphi_h^n(\vec{x}_i^n) = \begin{cases} \text{dist}(\vec{x}_i^n, \Gamma_h^n), & \text{si } \vec{x}_i^n \in S(\mathcal{T}_h^n) \cap \Omega_{el}(t_n), \\ -\text{dist}(\vec{x}_i^n, \Gamma_h^n), & \text{si } \vec{x}_i^n \in S(\mathcal{T}_h^n) \cap \Omega_{al}(t_n), \end{cases} \quad (2.35)$$

où $\text{dist}(\vec{x}, \Gamma_h^n)$ désigne la distance verticale entre un point $\vec{x} \in \Omega$ du domaine fluide et la surface Γ_h^n . On remarque que le maillage Γ_h^n coïncide avec la surface de niveau $\varphi_h^n = 0$.

Supposons connue la vitesse \vec{u}_h^{n+1} sur \mathcal{T}_h^n calculée de (2.33). En résolvant l'équation de transport (2.34) sur (t_n, t_{n+1}) avec φ_h^n comme condition initiale, on peut trouver la fonction Level-Set convectée sur \mathcal{T}_h^n : $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$. La surface de niveau $\tilde{\varphi}_h^{n+1} = 0$ détermine la nouvelle position de l'interface. Ainsi la première étape de l'algorithme de déformation consiste à déplacer les noeuds \vec{x}_k^n de Γ_h^n vers une nouvelle position \vec{x}_k^{n+1} vérifiant

$$\varphi_h^{n+1}(\vec{x}_k^{n+1}) = 0, \quad \forall k = 1, \dots, N_h^\Gamma, \quad (2.36)$$

où N_h^Γ est la cardinalité de $S(\Gamma_h^n)$.

2.2. DÉFORMATION DU MAILLAGE

Pour tout $k = 1, \dots, N_h^\Gamma$, la restriction de la fonction $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$ sur la trajectoire $\vec{\gamma}_k$ associée au noeud \vec{x}_k^n est donnée par la fonction $\chi_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\chi_k(s) = (\tilde{\varphi}_h^{n+1} \circ \vec{\gamma}_k)(s). \quad (2.37)$$

Ainsi la recherche de la nouvelle position du noeud de l'interface \vec{x}_k^{n+1} se ramène à la recherche du zéro de χ_k sur \mathbb{R} , i.e. pour tout $k = 1, \dots, N_h^\Gamma$, trouver $\bar{s} \in \mathbb{R}$ tel que

$$\chi_k(\bar{s}) = 0 \text{ et poser } \vec{x}_k^{n+1} = \vec{\gamma}_k(\bar{s}). \quad (2.38)$$

Notons que la recherche des zéros de la fonction χ_k peut être réalisée par n'importe quelle méthode de point fixe. Cependant, comme $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$ est en général proche d'une fonction linéaire, la méthode la plus naturelle est un algorithme de la sécante qui converge très rapidement dans ce cas, i.e. étant donné deux points s_0 et s_1 dans \mathbb{R} , proches si possible de la solution \bar{s} , on calcule jusqu'à convergence

$$s_{m+1} = s_m - \frac{s_m - s_{m-1}}{\chi_k(s_m) - \chi_k(s_{m-1})} \chi_k(s_m), \quad m = 1, 2, \dots \quad (2.39)$$

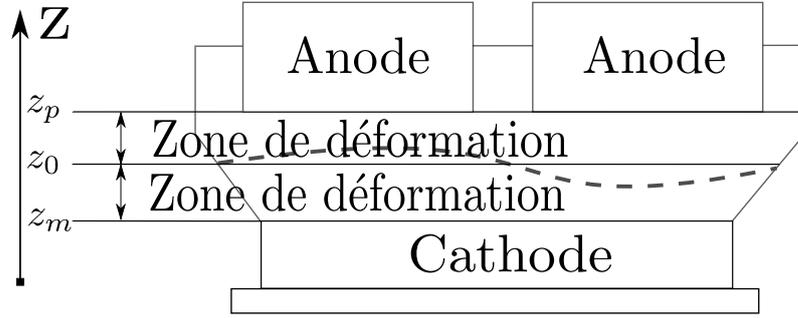
La principale difficulté de cette recherche est de calculer efficacement $\chi_k(s_m)$ pour tout m par interpolation 3D de la fonction $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$ au point $\vec{\gamma}_k(s_m)$ qui n'est, en principe, pas un noeud du maillage \mathcal{T}_h^n .

2.2.2 Déformation "élastique"

Ci-dessus on a vu comment combiner la technique Level-Set avec un algorithme de déformation pour reconstruire à chaque pas de temps le maillage de l'interface Γ_h^{n+1} . Ci-dessous nous allons décrire la technique permettant de propager cette déformation au maillage des fluides \mathcal{T}_h^n .

Tout d'abord, afin de conserver un maillage correct au cours du temps, il convient de définir une zone autour de l'interface dans laquelle les noeuds peuvent être déplacés. Soient $z_m, z_p \in \mathbb{R}$ avec $z_m < z_0 < z_p$ et tels que l'espace entre z_m et z_p ne soit composé que de fluide (ni anodes, ni cathode, ni conducteurs). Dans la majorité des cas z_m est l'altitude de la surface supérieure de la cathode et z_p est l'altitude inférieure des anodes (voir FIG. 2.2).

Les seuls noeuds qui peuvent se déplacer sont donc ceux dont l'altitude se situe entre z_m et z_p . Le reste du maillage des fluides est gardé fixe. Cette spécification permet de conserver inchangé le maillage des anodes même lorsque celles-ci sont plongées dans le bain.


 FIG. 2.2 – Zone de déformation du maillage du domaine fluide \mathcal{T}_h^n .

Le maillage \mathcal{T}_h^{n+1} au temps t_{n+1} est construit à partir de $\hat{\mathcal{T}}_h$ et Γ_h^{n+1} de la manière suivante :

- *Aluminium* : Pour tout noeud $\vec{x}_i \in S(\hat{\mathcal{T}}_h)$ d'altitude $z \in \mathbb{R}$ vérifiant $z_m \leq z \leq z_0$ on définit $\lambda \in [0, 1]$ tel que

$$\lambda = \frac{z - z_m}{z_0 - z_m}. \quad (2.40)$$

Si $\vec{\gamma}_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ est la paramétrisation de la trajectoire passant par \vec{x}_i , alors il existe $a, b \in \mathbb{R}$ tels que $\vec{\gamma}_i(a)$ est sur la surface formée par les triangles de $\hat{\mathcal{T}}_h$ et $\vec{\gamma}_i(b)$ sur celle formée par ceux de Γ_h^{n+1} (voir FIG. 2.3). On pose alors

$$\vec{x}_i^{n+1} = \vec{x}_i + \lambda \cdot (\vec{\gamma}_i(b) - \vec{\gamma}_i(a)). \quad (2.41)$$

Le coefficient λ assure que la déformation soit proportionnelle à la distance entre un noeud et l'interface dans le maillage de référence. En particulier, si $z \rightarrow z_m$ la déformation tend vers zéro. La transformation entre $\hat{\mathcal{T}}_h$ et \mathcal{T}_h^{n+1} peut être vue comme une déformation *élastique* du maillage de référence.

- *Bain* : Pour tout noeud $\vec{x}_i \in \hat{\mathcal{T}}_h$ d'altitude $z \in \mathbb{R}$ vérifiant $z_0 \leq z \leq z_p$ on définit $\lambda \in [0, 1]$ tel que

$$\lambda = \frac{z_p - z}{z_p - z_0}. \quad (2.42)$$

La nouvelle position de \vec{x}_i est alors donnée par (2.41) et ici la déformation tend vers zéro lorsque $z \rightarrow z_p$.

Pour illustrer cet algorithme, la figure 2.4 présente un exemple de déformation effectuée avec cette technique sur un maillage 2D.

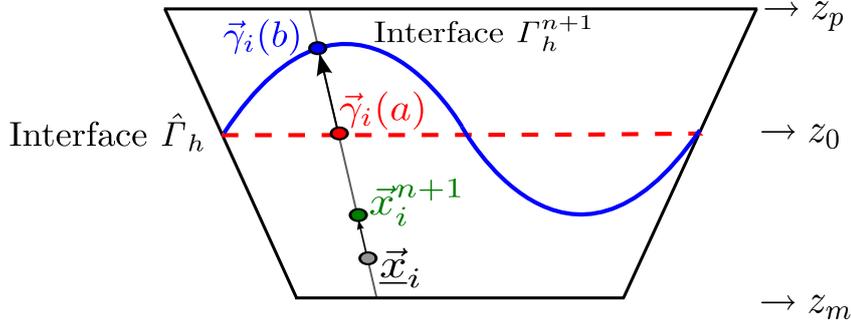
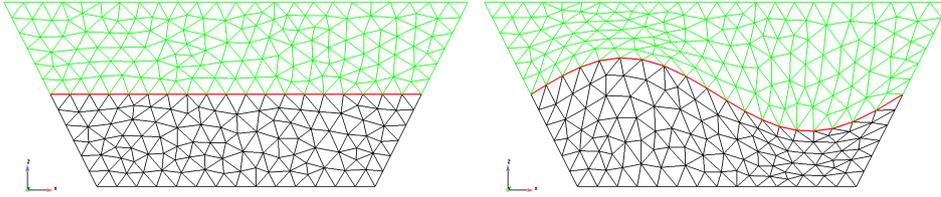


FIG. 2.3 – Déformation “élastique” du maillage.


 FIG. 2.4 – Déformation “élastique” du maillage. A gauche \hat{T}_h , à droite T_h^{n+1} .

2.2.3 Lissage

Suivant le choix des pas de discrétisation h et Δt ou des paramètres de stabilisation α_S et β , des instabilités numériques peuvent engendrer des oscillations dans la fonction $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$. La construction du maillage de l'interface Γ_h^{n+1} comme la surface de niveau $\tilde{\varphi}_h^{n+1} = 0$ peut alors faire apparaître des pics et des creux sur la surface (voir FIG. 2.5). Ces discontinuités non physiques de l'interface sont problématiques dans la mesure où elles peuvent provoquer de fortes perturbations dans la distribution du courant électrique, qui aura tendance à être surestimé au voisinage des pics et sous-estimé au voisinage des creux.

Pour palier à ce problème, on introduit une technique de lissage de l'interface. Si le maillage de l'interface Γ au temps t_n compte $N := N_h^\Gamma$ noeuds $(x_k, y_k, z_k) \in \mathbb{R}^3$, $k = 1, \dots, N$, étant donné un entier $m \geq 1$ on construit une surface lisse $S^{m,n}$ définie par

$$S^{m,n} = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid z = g_h^{m,n}(x, y)\}, \quad (2.43)$$

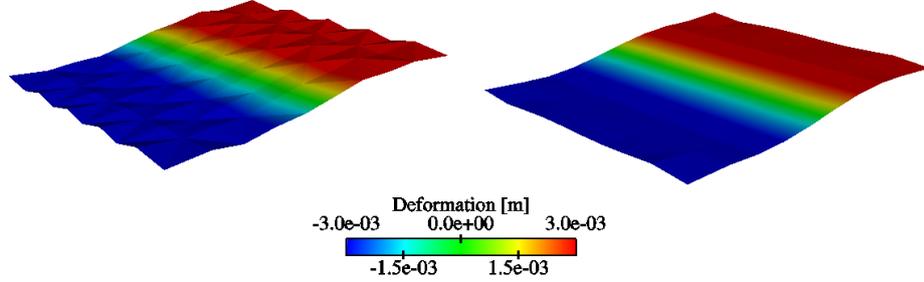


FIG. 2.5 – Oscillations numériques sur l’interface (gauche) et effet du lissage (droite).

où $g_h^{m,n} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ est un polynôme de degré m (dans chaque direction d’espace) et qui minimise la distance à Γ_h^n au sens des moindres carrés suivant :

$$g_h^{m,n} = \operatorname{argmin}_{g \in \mathbb{Q}_m(\mathbb{R}^2)} \sum_{k=1}^N (z_k - g(x_k, y_k))^2. \quad (2.44)$$

L’espace $\mathbb{Q}_m(\mathbb{R}^2)$ désigne l’ensemble des fonctions polynomiales de degré m dans chaque direction d’espace, i.e.

$$\mathbb{Q}_m(\mathbb{R}^2) = \operatorname{span} \left\{ x^i y^j \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \text{ et } 0 \leq i, j \leq m, i, j \in \mathbb{N} \right\}. \quad (2.45)$$

Si $\{p_{ij}\}_{0 \leq i, j \leq m}$ est une base de $\mathbb{Q}_m(\mathbb{R}^2)$, le calcul de $g_h^{m,n}$ est équivalent à chercher les coefficients $\hat{g}_{ij}^n \in \mathbb{R}$, $0 \leq i, j \leq m$ tels que

$$g_h^{m,n}(x, y) = \sum_{i,j=0}^m \hat{g}_{ij}^n p_{ij}(x, y), \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2. \quad (2.46)$$

Dès lors, si on construit la matrice jacobienne du problème (2.44), i.e. la matrice rectangulaire de dimension $N \times (m+1)^2$ suivante :

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} p_{00}(x_1, y_1) & \cdots & p_{mm}(x_1, y_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{00}(x_N, y_N) & \cdots & p_{mm}(x_N, y_N) \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

et les vecteurs $\vec{z} \in \mathbb{R}^N$ et $\vec{g} \in \mathbb{R}^{(m+1)^2}$ définis comme

$$\vec{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{g} = \begin{pmatrix} \hat{g}_{00}^n \\ \vdots \\ \hat{g}_{mm}^n \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

2.2. DÉFORMATION DU MAILLAGE

alors le problème de minimisation (2.44) est équivalent au problème matriciel suivant

$$\mathbf{J}^T \mathbf{J} \vec{g} = \mathbf{J}^T \vec{z} \Leftrightarrow \vec{g} = (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}^T \vec{z}. \quad (2.49)$$

Résoudre l'équation (2.49) à chaque pas de temps permet de reconstruire une interface lisse en posant, pour $k = 1, \dots, N$,

$$z_k^{new} := \sum_{i,j=0}^m \hat{g}_{ij}^n p_{ij}(x_k, y_k). \quad (2.50)$$

Noter que cette dernière opération peut être effectuée efficacement sous forme d'un produit matrice-vecteur en calculant

$$\vec{z}^{new} := (z_1^{new}, \dots, z_N^{new})^T = \mathbf{J} \vec{g}. \quad (2.51)$$

Remarque 10 *La résolution du problème linéaire (2.49) est très rapide car le système associé est de taille assez réduite $(m+1)^2$. En fait, il faut imposer que $(m+1)^2$ soit petit en comparaison avec N puisque le déterminant de $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$ tend vers zéro lorsque $(m+1)^2$ tend vers N . Cependant, cette contrainte n'est pas très restrictive puisqu'en général $N \propto \frac{1}{h^2}$ est suffisamment grand.*

Remarque 11 *Le choix de la base polynomiale $\{p_{ij}\}_{i,j=0}^m$ n'est pas anodin car il détermine le conditionnement de la matrice $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$. Un choix judicieux est l'utilisation de polynômes orthogonaux construits par tensorisation de polynômes de Jacobi 1D. Nous renvoyons à l'annexe A pour une discussion plus détaillée sur le sujet.*

D'autres techniques de lissage sont bien sûr possibles. Précédemment, une méthode de lissage *locale* était utilisée : pour éliminer un "pic" en un noeud une moyenne de la déformation sur les éléments voisins du noeud était substituée à l'altitude du noeud considéré. Cette manière de procéder est extrêmement facile à mettre en oeuvre mais est très diffuse. En effet, si on applique plusieurs fois un lissage localisé sur le même maillage Γ_h , celui-ci va s'aplanir de plus en plus jusqu'à être complètement plan. Ainsi plus le pas de temps est petit, plus ce type de lissage diffuse, ce qui doit bien sûr être évité. Au contraire, la technique des moindres carrés appliquée sur un maillage déjà lisse ne produit pas d'effet. Ainsi la diffusion numérique engendrée par le lissage est faible et devient presque indépendante du pas de temps.

2.2.4 Conservation du volume

Il est bien connu que les schémas numériques utilisés ici, au contraire d'une formulation de type *Volume of fluid*, ne garantissent pas que les volumes de l'aluminium et du bain soient conservés au cours du temps. En particulier, si le pas de temps est grand, on observe une tendance à perdre du volume d'aluminium liquide au profit du volume de bain électrolytique.

Pour contrer ce phénomène il est utile d'appliquer un ajustement vertical de la position de l'interface à chaque pas de temps pour compenser la perte volumique.

2.3 Électromagnétisme

Cette section est dédiée à la discrétisation des équations de Maxwell pour le calcul numérique des forces de Lorentz $\vec{f} = \vec{j} \wedge \vec{B}$. On commence par discuter le calcul de la densité de courant par une méthode de Galerkin classique puis on présente une méthode de décomposition de domaine de type Schwarz pour la résolution du champ d'induction magnétique \vec{B} .

Contrairement à la section 2.1 ici le domaine de calcul n'est plus le domaine fluide Ω mais, pour le courant \vec{j} , la cuve complète Σ (amenées et sorties de courants, anodes, cathode, fluides, etc) et pour le champ \vec{B} tout l'espace \mathbb{R}^3 . Une attention particulière doit donc être apportée à la gestion des maillages de ces domaines pour garantir un calcul efficace (voir 2.3.3). En fait, une *hiérarchie* de maillage doit être construite pour permettre aux différentes solutions d'être prolongées ou restreintes d'un domaine vers un autre.

2.3.1 Potentiel électrique et densité de courant

Dans le chapitre précédent on a vu que la densité de courant électrique \vec{j} était liée à la vitesse des fluides \vec{u} , au champ d'induction magnétique \vec{B} (et potentiel magnétique \vec{A}) et au potentiel électrique V via la loi d'Ohm (1.28) que l'on rappelle ici

$$\vec{j} = \sigma \left(-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} V + \vec{u} \wedge \vec{B} \right), \quad (2.52)$$

où σ est la conductivité électrique supposée constante par matériaux. Au temps t_n on introduit un maillage en tétraèdres de la cuve Σ que l'on note \mathcal{S}_h^n et tel que :

2.3. ÉLECTROMAGNÉTISME

- Le maillage \mathcal{S}_h^n est composé de M_h^Σ éléments avec $M_h^\Sigma > M_h^\Omega$ et $h_{K_i} = \text{diam}(K_i) < h$, pour tout $i = 1, \dots, M_h^\Sigma$;
- Le maillage \mathcal{S}_h^n est conforme au sens où deux éléments adjacents partagent exactement une face commune ;
- L'ensemble composé des sommets du maillage \mathcal{S}_h^n est noté $S(\mathcal{S}_h^n)$ et est de cardinalité N_h^Σ ;
- Le maillage \mathcal{S}_h^n est un prolongement du maillage \mathcal{T}_h^n dans le sens où $\mathcal{T}_h^n \subset \mathcal{S}_h^n$ et $S(\mathcal{T}_h^n) \subset S(\mathcal{S}_h^n)$;
- Contrairement aux noeuds des fluides, les noeuds dans $S(\mathcal{S}_h^n) \setminus S(\mathcal{T}_h^n)$ ne se déplacent pas au cours du temps.

Pour ce maillage, on définit l'espace de dimension finie

$$\mathcal{J}_h^n = \left\{ \xi \in C^0(\bar{\Sigma}) \mid \xi|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \mathcal{S}_h^n \right\}. \quad (2.53)$$

Si on connaît au temps t_n en tout noeud de \mathcal{S}_h^n une approximation de la vitesse des fluides \vec{u}_h^n , du champ d'induction magnétique \vec{B}_h^n et des potentiels magnétiques vectoriels \vec{A}_h^{n-1} et \vec{A}_h^n , on peut écrire la forme faible discrétisée en espace de l'équation (1.34) comme : chercher $V_h^n \in \mathcal{J}_h^n \cap L_0^2(\Sigma)$ tel que

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} \sigma \vec{\nabla} V_h^n \cdot \vec{\nabla} \xi_h &= - \int_{\Sigma} \sigma \frac{\vec{A}_h^n - \vec{A}_h^{n-1}}{\Delta t} \cdot \vec{\nabla} \xi_h + \int_{\Omega} \sigma \left(\vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h^n \right) \cdot \vec{\nabla} \xi_h \\ &+ \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{in}|} \int_{\Gamma_{in}} \xi_h - \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{out}|} \int_{\Gamma_{out}} \xi_h, \quad \forall \xi_h \in \mathcal{J}_h^n \cap L_0^2(\Sigma). \end{aligned} \quad (2.54)$$

Introduisant une base de Lagrange pour l'espace $\mathcal{J}_h^n \cap L_0^2(\Sigma)$, on peut réécrire et résoudre le problème stationnaire (2.54) sous forme algébrique. L'approximation de la densité de courant au temps t_n est alors obtenue explicitement par

$$\vec{j}_h^n = \sigma \left(- \frac{\vec{A}_h^n - \vec{A}_h^{n-1}}{\Delta t} - \vec{\nabla} V_h^n + \vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h^n \right). \quad (2.55)$$

2.3.2 Induction magnétique

La principale difficulté pour le calcul du champ d'induction magnétique \vec{B} est le fait qu'il est défini dans tout l'espace \mathbb{R}^3 . Sans conditions aux limites mais avec des conditions de décroissance à l'infini, il est difficile d'appliquer une méthode éléments finis de Galerkin. Une solution classique pour contourner ce problème est de restreindre artificiellement les équations de Maxwell à un domaine borné de l'espace contenant la cuve Σ et d'imposer des conditions aux bords de ce domaine du type (voir par exemple [16])

$$\vec{B} \cdot \vec{n} = q \quad \text{ou} \quad \vec{B} \wedge \vec{n} = \vec{k}. \quad (2.56)$$

Cette technique nécessite de pouvoir estimer efficacement les grandeurs q ou \vec{k} . Malheureusement, il faut noter qu'obtenir ces quantités en effectuant des mesures est délicat, en particulier dans un environnement industriel.

Une autre idée largement répandue pour la résolution de problèmes non-bornés (voir par exemple [32]) consiste en un couplage entre FEM ("*Finite element method*") dans un domaine borné et BFEM ("*Boundary finite element method*") sur le bord. Un défaut classique de ces méthodes est le fait que les intégrales de bord peuvent engendrer des matrices non-creuses qui occupent une grande place en mémoire et contribuent à augmenter le temps de calcul.

Dans cette section on montre comment combiner un algorithme de décomposition de domaine de type Schwarz et une représentation intégrale de champs harmoniques pour calculer efficacement les perturbations de l'induction magnétique au cours du temps (voir aussi [33]).

La méthode est basée sur l'hypothèse qu'en tout temps t on peut décomposer la densité de courant et le champ d'induction magnétique associé en

$$\vec{j}(t) = \vec{j}^{hor} + \delta\vec{j}(t) \quad \text{et} \quad \vec{B}(t) = \vec{B}^{hor} + \delta\vec{B}(t), \quad (2.57)$$

où \vec{j}^{hor} et \vec{B}^{hor} sont respectivement la densité de courant et l'induction magnétique dans la cuve Σ lorsque l'interface est un plan horizontal et $\delta\vec{j}(t)$ possède les propriétés suivantes pour tout temps t

$$\begin{aligned} \delta\vec{j} &= 0, & \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Sigma}, \\ \delta\vec{j} \cdot \vec{n} &= 0, & \text{sur } \partial\Sigma. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Étape préliminaire

La première étape est le calcul de \vec{j}^{hor} et \vec{B}^{hor} . Du point de vue numérique on verra que cette partie peut être vue comme une étape de *preprocessing* puisque \vec{j}^{hor} et \vec{B}^{hor} sont indépendants du temps et ne correspondent pas à une condition initiale mais sont indispensables pour calculer $\vec{B}(t)$.

Si on note $\hat{\mathcal{S}}_h$ le maillage original de la cuve dans lequel l'interface est un plan horizontal ($\hat{\mathcal{S}}_h$ est le prolongement de $\hat{\mathcal{T}}_h$ à Σ), il est possible d'appliquer le schéma numérique de la section 2.3.1 pour obtenir une approximation de la densité de courant \vec{j}_h^{hor} sur le maillage $\hat{\mathcal{S}}_h$.

Remarque 12 Pour le calcul de \vec{j}_h^{hor} , on suppose que la cuve est dans une situation statique ($\vec{u} = 0$) et on néglige la dérivée temporelle de \vec{A} . La loi d'Ohm prend alors la forme simplifiée suivante :

$$\vec{j}_h^{hor} = -\sigma \vec{\nabla} V_h, \quad (2.59)$$

et le problème de Galerkin (2.54) pour le calcul du potentiel électrique V_h devient simplement : chercher $V_h \in \hat{\mathcal{J}}_h \cap L_0^2(\Sigma)$ tel que

$$\int_{\Sigma} \sigma \vec{\nabla} V_h \vec{\nabla} \xi_h = \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{in}|} \int_{\Gamma_{in}} \xi_h - \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{out}|} \int_{\Gamma_{out}} \xi_h, \quad \forall \xi_h \in \hat{\mathcal{J}}_h \cap L_0^2(\Sigma), \quad (2.60)$$

où $\hat{\mathcal{J}}_h = \left\{ \xi \in C^0(\Sigma) \mid \xi|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \hat{\mathcal{S}}_h \right\}$.

Le champ d'induction magnétique \vec{B}^{hor} étant indépendant du temps, il est raisonnable, du point de vue du temps de calcul, de l'évaluer directement par la formule de Biot-Savart

$$\vec{B}^{hor}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Sigma} \vec{j}^{hor}(\vec{y}) \wedge \frac{\vec{x} - \vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} d\vec{y}, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (2.61)$$

Numériquement, en supposant que le champ \vec{j}_h^{hor} est constant par élément sur le maillage $\hat{\mathcal{S}}_h$, une approximation de \vec{B}^{hor} est donnée par

$$\vec{B}_h^{hor}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{K \in \hat{\mathcal{S}}_h} \left[\vec{j}_h^{hor}|_K \wedge \vec{I}_K(\vec{G}_{\vec{x}}) \right], \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (2.62)$$

Ici l'application $\vec{f} \mapsto \vec{I}_K(\vec{f})$ est une formule de quadrature de type Gauss sur l'élément $K \in \hat{\mathcal{S}}_h$ qui à une fonction $\vec{f} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ fait correspondre une approximation de son intégrale sur l'élément K et $\vec{G}_{\vec{x}} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ est le noyau de Green définit pour tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ par

$$\vec{G}_{\vec{x}}(\vec{y}) = \frac{\vec{x} - \vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|^3}, \quad \vec{y} \neq \vec{x}. \quad (2.63)$$

Remarque 13 Lorsque \vec{x} est un point contenu dans l'élément K , les points d'intégration associés à la formule de quadrature \vec{I}_K doivent être différents de \vec{x} . En fait, étant donné la singularité du noyau de Green dans cette situation, l'erreur de quadrature sur l'élément K peut être importante. Pour éviter ce problème on peut utiliser les formules d'intégration exacte du noyau de Green décrites dans [34].

Remarque 14 Sur un maillage fin, le calcul de \vec{B}_h^{hor} peut s'avérer très coûteux en temps CPU, mais possède la propriété remarquable d'être indépendant pour chaque point \vec{x} considéré. Un algorithme "embarrassingly parallel" permettant de distribuer le calcul sur plusieurs processeurs peut donc être facilement mis en oeuvre informatiquement (cf. section 5.3.2).

Remarque 15 Le champ \vec{B}^{hor} est en général modifié par la présence d'un caisson ferromagnétique qui entoure la cuve d'électrolyse. L'intensité de l'induction magnétique peut ainsi être réduite dans les fluides. Dans la section 1.2.4, on a vu que cet effet d'écran peut être calculé en résolvant le problème non-linéaire (1.58). Diverses techniques pour approcher numériquement l'écrantage ferromagnétique sont décrites et comparées dans [12] mais ne sont pas reprises ici.

Algorithme de Schwarz

Au chapitre précédent, on a vu que le calcul du champ perturbé $\delta\vec{B}(t)$ peut se ramener à la recherche d'un potentiel magnétique vectoriel $\delta\vec{A}(t) \in \mathbb{R}^3$ qui vérifie pour t fixé et $\delta\vec{j}(t)$ connu

$$\begin{cases} -\Delta\delta\vec{A}(t) = \mu_0\delta\vec{j}(t), & \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ |\delta\vec{A}(\vec{x}, t)| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.64)$$

et

$$\delta\vec{B}(t) = \vec{\nabla} \wedge \delta\vec{A}(t). \quad (2.65)$$

Pour simplifier l'écriture, l'argument t est omis par la suite.

Remarque 16 Puisque $\delta\vec{j} = 0$ dans \mathbb{R}^3 on a

$$\vec{\nabla} \cdot (\Delta\delta\vec{A}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta(\vec{\nabla} \cdot \delta\vec{A}) = 0. \quad (2.66)$$

Comme $\delta\vec{A}$ est harmonique à l'extérieur de $\bar{\Sigma}$ et que

$$|\delta\vec{A}(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), \quad \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty, \quad (2.67)$$

on peut prouver que

$$|\vec{\nabla} \cdot \delta\vec{A}(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-2}), \quad \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \quad (2.68)$$

2.3. ÉLECTROMAGNÉTISME

Ainsi, en posant $\omega = \vec{\nabla} \cdot \delta \vec{A}$, on a

$$\begin{cases} -\Delta \omega = 0, & \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ |\omega(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-2}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.69)$$

$$\Rightarrow \omega \equiv 0 \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \delta \vec{A} = 0.$$

Si on définit $\Psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ comme une des trois composantes de $\delta \vec{A}$ et $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ la composante correspondante de $\mu_0 \delta \vec{j}$, le système (2.64) est équivalent à résoudre trois fois le problème de Poisson suivant

$$\begin{cases} -\Delta \Psi = f, & \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ |\Psi(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.70)$$

où $\text{supp}(f) \subset \bar{\Sigma}$ est un compact de \mathbb{R}^3 . Soit l'espace suivant, dit de Beppo-Levi :

$$W^1(\mathbb{R}^3) = \left\{ g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \mid \frac{g(\vec{x})}{1+|\vec{x}|} \in L^2(\mathbb{R}^3) \text{ et } \vec{\nabla} g \in (L^2(\mathbb{R}^3))^3 \right\}. \quad (2.71)$$

La formulation faible de (2.70) s'écrit alors : trouver $\Psi \in W^1(\mathbb{R}^3)$ tel que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \vec{\nabla} \Psi \vec{\nabla} \phi = \int_{\mathbb{R}^3} f \phi, \quad \forall \phi \in W^1(\mathbb{R}^3). \quad (2.72)$$

Il est bien connu (voir [35]) que ce problème admet une solution unique qui est aussi solution du problème (2.70).

Soit à présent $r > 0$ tel que la boule de rayon r centrée à l'origine

$$\mathcal{B}_r = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \mid |\vec{x}| < r \}, \quad (2.73)$$

contienne le domaine compact $\bar{\Sigma}$. D'après (2.70), Ψ est harmonique à l'extérieur de \mathcal{B}_r et la formule de représentation intégrale de Poisson suivante s'applique :

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi r} \left(|\vec{x}|^2 - r^2 \right) \int_{\partial \mathcal{B}_r} \frac{\Psi(\vec{y})}{|\vec{y} - \vec{x}|^3} ds(\vec{y}), \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\mathcal{B}}_r, \quad (2.74)$$

où $\partial \mathcal{B}_r$ est la sphère centrée à l'origine de rayon r . Ce résultat permet de calculer la valeur de Ψ en tout point de $\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\mathcal{B}}_r$ en ne connaissant Ψ que sur $\partial \mathcal{B}_r$.

Soit $R > r$ et \mathcal{B}_R la boule de rayon R centrée à l'origine. En exploitant (2.74) un algorithme de type décomposition de domaine avec recouvrement $\mathcal{B}_R \setminus \mathcal{B}_r$ (Schwarz) permet de résoudre (2.72) :

(i) *Initialisation* : Soit $\Psi^0 : \mathcal{B}_R \rightarrow \mathbb{R}$ tel que

$$\begin{cases} -\Delta\Psi^0 = f, & \text{dans } \mathcal{B}_R, \\ \Psi^0 = 0, & \text{sur } \partial\mathcal{B}_R, \end{cases} \quad (2.75)$$

i.e. $\Psi^0 \in H_0^1(\mathcal{B}_R)$ tel que

$$\int_{\mathcal{B}_R} \vec{\nabla}\Psi^0 \vec{\nabla}\phi = \int_{\text{supp}(f)} f\phi, \quad \forall \phi \in H_0^1(\mathcal{B}_R), \quad (2.76)$$

où $H_0^1(\mathcal{B}_R)$ est l'espace des fonctions dans $H^1(\mathcal{B}_R)$ qui s'annulent sur la frontière $\partial\mathcal{B}_R$.

(ii) *Itérations* pour $i = 0, 1, 2, \dots$, calculer successivement

a) *Problème harmonique* : trouver $\Psi^{i+\frac{1}{2}} \in W^1(\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\mathcal{B}}_r)$ qui satisfait

$$\begin{cases} \Delta\Psi^{i+\frac{1}{2}} = 0, & \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\mathcal{B}}_r, \\ \Psi^{i+\frac{1}{2}} = \Psi^i, & \text{sur } \partial\mathcal{B}_r, \\ \Psi^{i+\frac{1}{2}}(\vec{x}) = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.77)$$

b) *Problème elliptique* : trouver $\Psi^{i+1} \in H^1(\mathcal{B}_R)$ qui satisfait

$$\begin{cases} -\Delta\Psi^{i+1} = f, & \text{dans } \mathcal{B}_R, \\ \Psi^{i+1} = \Psi^{i+\frac{1}{2}}, & \text{sur } \partial\mathcal{B}_R. \end{cases} \quad (2.78)$$

Le résultat qui suit illustre la convergence de l'algorithme.

Théorème 2 (Estimation a priori [36]) ² Si Ψ est la solution exacte du problème de Poisson (2.70) et que Ψ^0 est tel que $-\Delta\Psi^0 = f$ dans \mathcal{B}_R et $\Psi^0 = 0$ sur $\partial\mathcal{B}_R$, alors, pour tout Ψ^i issu de l'algorithme (2.77)-(2.78), on a l'estimation a priori suivante :

$$\|\Psi - \Psi^i\|_{L^\infty(\mathcal{B}_R)} \leq \left(\frac{r}{R}\right)^i \|\Psi\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_R)}. \quad (2.79)$$

En particulier, on obtient

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \|\Psi - \Psi^i\|_{L^\infty(\mathcal{B}_R)} = 0. \quad (2.80)$$

²Ce théorème et sa preuve ont été publiés dans [36] mais sont repris ici pour la commodité du lecteur.

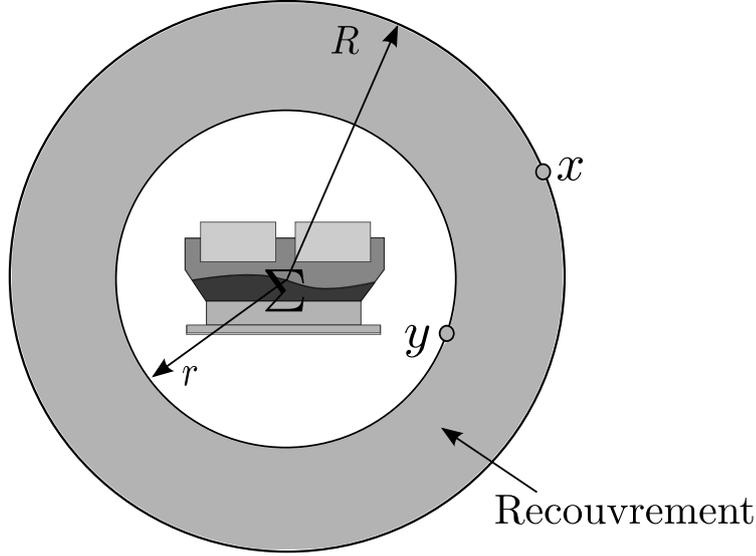


FIG. 2.6 – Illustration de la méthode de Schwarz.

Preuve.

Soit l'erreur $e^i = \Psi - \Psi^i$ définie sur $\overline{\mathcal{B}}_R$ et $e^{i+1/2} = \Psi - \Psi^{i+1/2}$ définie sur $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\mathcal{B}}_r$, on a :

a) $e^{i+\frac{1}{2}} \in W^1(\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\mathcal{B}}_r)$ satisfait

$$\begin{cases} \Delta e^{i+\frac{1}{2}} = 0, & \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\mathcal{B}}_r, \\ e^{i+\frac{1}{2}} = e^i, & \text{sur } \partial\mathcal{B}_r, \\ e^{i+\frac{1}{2}}(\vec{x}) = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-1}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.81)$$

b) $e^{i+1} \in H^1(\mathcal{B}_R)$ vérifie

$$\begin{cases} \Delta e^{i+1} = 0, & \text{dans } \mathcal{B}_R, \\ e^{i+1} = e^{i+\frac{1}{2}}, & \text{sur } \partial\mathcal{B}_R. \end{cases} \quad (2.82)$$

Par la formule de représentation de Poisson (2.74), on a

$$e^{i+\frac{1}{2}}(\vec{x}) = \frac{(|\vec{x}|^2 - r^2)}{4\pi r} \int_{\partial\mathcal{B}_r} \frac{e^i(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} ds(\vec{y}), \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\mathcal{B}}_r. \quad (2.83)$$

Le pas d'initialisation implique que $\Delta e^0 = 0$ dans \mathcal{B}_R et $e^0 = \Psi$ sur $\partial\mathcal{B}_R$. En appliquant le principe du maximum, on a alors

$$\|e^0\|_{L^\infty(\mathcal{B}_R)} \leq \|\Psi\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_R)}. \quad (2.84)$$

Maintenant, en utilisant (2.83) on peut écrire une estimation pour $e^{i+\frac{1}{2}}$ sur $\partial\mathcal{B}_R$:

$$\|e^{i+\frac{1}{2}}\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_R)} \leq \|e^i\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_r)} \frac{R^2 - r^2}{4\pi r} \max_{\vec{x} \in \partial\mathcal{B}_R} \int_{\partial\mathcal{B}_r} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} ds(\vec{y}). \quad (2.85)$$

Considérant \vec{x} au pôle nord de la sphère $\partial\mathcal{B}_R$ et en utilisant les coordonnées sphériques, on obtient en posant $\alpha = r/R$,

$$\begin{aligned} \int_{\partial\mathcal{B}_r} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} ds(\vec{y}) &= \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{r^2 \sin(\theta)}{\left(r^2 \sin^2(\theta) + (R - r \cos(\theta))^2\right)^{\frac{3}{2}}} \\ &= \frac{2\pi}{r} \int_0^\pi d\theta \frac{\sin(\theta)}{\left(1 + \frac{1}{\alpha^2} - \frac{2}{\alpha} \cos(\theta)\right)^{\frac{3}{2}}} = \frac{4\pi\alpha^2}{R^2 - r^2} R. \end{aligned}$$

Cela implique que

$$\|e^{i+\frac{1}{2}}\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_R)} \leq \alpha \|e^i\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_r)}. \quad (2.86)$$

Enfin, en utilisant ensemble l'équation (2.82) et le principe du maximum, on obtient

$$\|e^{i+1}\|_{L^\infty(\mathcal{B}_R)} \leq \|e^{i+\frac{1}{2}}\|_{L^\infty(\partial\mathcal{B}_R)} \leq \alpha \|e^i\|_{L^\infty(\mathcal{B}_R)}. \quad (2.87)$$

Finalement les relations (2.84) et (2.87) amènent la conclusion. □

Discrétisation

Étant donné $h > 0$, on introduit au temps t_n un maillage de \mathcal{B}_r (respectivement \mathcal{B}_R) notés B_{rh}^n (resp. B_{Rh}^n) et qui approche la boule dans le sens où les tétraèdres qui composent B_{rh}^n forment un polyèdre avec $\partial\mathcal{B}_r$ comme sphère circonscrite (idem pour B_{Rh}^n). Les maillages B_{rh}^n et B_{Rh}^n possèdent en outre les propriétés suivantes :

- Le maillage B_{rh}^n est composé de M_h^r éléments tétraédriques avec $M_h^r > M_h^\Sigma$ et $h_{K_i} < h$ pour tout $i = 1, \dots, M_h^r$;

2.3. ÉLECTROMAGNÉTISME

- Le maillage B_{Rh}^n est composé de M_h^R éléments tétraédriques avec $M_h^R > M_h^r$ et $h_{K_i} < h$ pour tout $i = 1, \dots, M_h^R$;
- Les maillages B_{rh}^n et B_{Rh}^n sont conformes dans le sens où deux éléments adjacents partagent exactement une face commune ;
- Les ensembles des sommets de B_{rh}^n et B_{Rh}^n sont notés $S(B_{rh}^n)$ et $S(B_{Rh}^n)$ et sont de cardinalité N_h^r et N_h^R respectivement ;
- Le maillage B_{Rh}^n est un prolongement du maillage B_{rh}^n qui est lui-même un prolongement du maillage \mathcal{S}_h^n (voir FIG. 2.7) ;
- L'ensemble des faces triangulaires composant le bord de B_{rh}^n (resp. B_{Rh}^n) forme un maillage d'approximation polyédrique de la surface $\partial\mathcal{B}_r$ (resp. $\partial\mathcal{B}_R$) et est noté Υ_{rh} (resp. Υ_{Rh}).

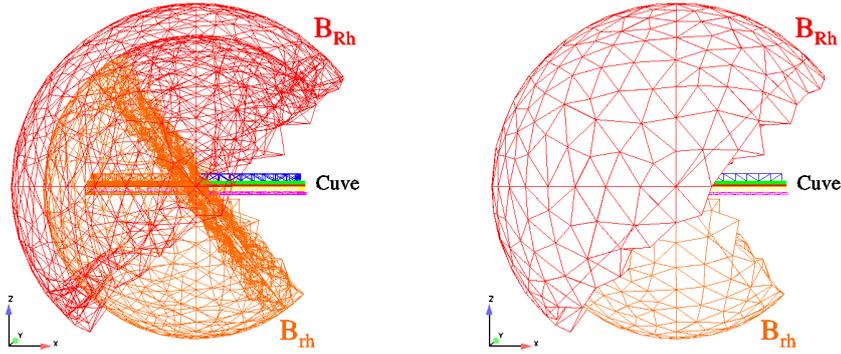


FIG. 2.7 – Illustration de la structure des différents maillages.

Remarque 17 *Pour conserver des maillages de bonne qualité au cours du temps, il est nécessaire de déformer le maillage B_{rh}^n en fonction du mouvement de l'interface. Ce point est discuté à la section 2.3.3.*

Soit l'espace de dimension finie suivant :

$$P_h^n = \left\{ \phi \in C^0(B_{Rh}^n) \mid \phi|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in B_{Rh}^n \right\}. \quad (2.88)$$

La forme discrétisée de l'algorithme de Schwarz avec recouvrement (2.75) - (2.78) s'écrit alors :

(i) *Initialisation* avec $\Psi_h^0 \in P_h^n \cap H_0^1(B_{Rh}^n)$ tel que

$$\int_{\mathcal{B}_R} \vec{\nabla} \Psi_h^0 \vec{\nabla} \phi_h = \int_{\text{supp}(f)} f \phi_h, \quad \forall \phi_h \in P_h^n \cap H_0^1(B_{Rh}^n). \quad (2.89)$$

(ii) *Itérations* pour $i = 0, 1, 2, \dots$, calculer successivement

a) *Problème harmonique* : Pour tout noeud \vec{x} de Υ_{Rh}

$$\Psi_h^{i+\frac{1}{2}}(\vec{x}) = \frac{R^2 - r^2}{4\pi r} \sum_{T \in \Upsilon_{rh}} I_T \left(\frac{\Psi_h^i(\cdot)}{|\vec{x} - \cdot|^3} \right), \quad (2.90)$$

où $\vec{f} \mapsto I_T(\vec{f})$ est une formule de quadrature de type Gauss sur le triangle T du maillage Υ_{rh} qui, à une fonction $\vec{f} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, associe une approximation de son intégrale sur le triangle T .

b) *Problème elliptique* : $\Psi_h^{i+1} \in P_h^n$ qui satisfait $\Psi_h^{i+1}(\vec{x}) = \Psi_h^{i+\frac{1}{2}}(\vec{x})$ pour tout noeud \vec{x} de Υ_{Rh} et :

$$\int_{\mathcal{B}_R} \vec{\nabla} \Psi_h^{i+1} \vec{\nabla} \phi_h = \int_{\text{supp}(f)} f \phi_h, \quad \forall \phi_h \in P_h^n \cap H_0^1(B_{Rh}^n). \quad (2.91)$$

2.3.3 Déformation du maillage extérieur

A la section 2.2 on a vu comment utiliser la technique Level-Set pour déterminer l'évolution de l'interface $\Gamma(t)$ au cours du temps et ensuite déformer le maillage des fluides \mathcal{T}_h^n pour suivre le mouvement de Γ .

Pour utiliser l'algorithme de Schwarz pour le calcul de l'induction magnétique efficacement, il est nécessaire de pouvoir étendre la déformation subie au cours du temps par \mathcal{T}_h^n au maillage B_{rh}^n . Si cette opération n'est pas effectuée convenablement, on verra apparaître des mailles très aplaties ou même, parfois, des interpénétrations entre éléments (cf. FIG. 2.8).

Notons \hat{B}_{rh} (respectivement \hat{B}_{Rh}) le maillage de référence de la petite boule \mathcal{B}_r (resp. de la grande boule \mathcal{B}_R) dans lequel l'interface Γ est un plan horizontal et introduisons un algorithme de déformation permettant d'adapter le maillage \hat{B}_{rh} en fonction de la position de Γ au temps t_n . Le but est de déformer de manière *élastique* le maillage de \hat{B}_{rh} situé entre le bord de la cuve $\partial\Sigma$ et le bord $\partial\mathcal{B}_r$ en laissant inchangé le reste de \hat{B}_{Rh} . De plus, l'algorithme de déformation doit être indépendant de la géométrie de la cuve pour permettre de traiter plusieurs types de technologie sans avoir à changer d'algorithme.

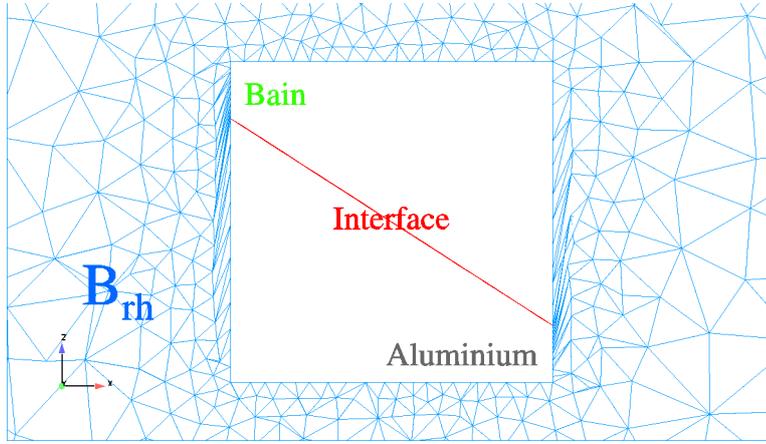


FIG. 2.8 – Mauvaise qualité de maillage si la déformation de \mathcal{T}_h^n n'est pas étendue à B_{rh}^n au cours du temps.

En supposant connu, au temps t_n , le maillage de la cuve \mathcal{S}_h^n on construit B_{rh}^n et B_{Rh}^n en déformant les maillages originaux \hat{B}_{rh} et \hat{B}_{Rh} de la façon suivante :

- Pour tout noeud $\vec{x}_h \in S(\hat{B}_{rh}) \cap \bar{\Sigma}$, déplacer le noeud vers sa nouvelle position \vec{x}_h^n dans \mathcal{S}_h^n en suivant l'algorithme de la section 2.2 ;
- Pour tout noeud $\vec{x}_h \in S(\hat{B}_{Rh}) \setminus S(\hat{B}_{rh})$, laisser le noeud dans sa position d'origine ;
- Pour les noeuds $\vec{x}_h \in S(\hat{B}_{rh}) \setminus \bar{\Sigma}$, calculer une nouvelle position \vec{p}_h qui vérifie le problème de Dirichlet suivant (cf. FIG. 2.9) :

$$\begin{cases} \Delta \vec{p}_h = 0, & \text{dans } \hat{B}_{rh} \setminus \bar{\Sigma}, \\ \vec{p}_h = \vec{x}_h, & \text{sur } \partial \hat{B}_{rh}, \\ \vec{p}_h = \vec{x}_h^n, & \text{sur } \partial \Sigma \cap \hat{B}_{rh}, \end{cases} \quad (2.92)$$

où \vec{x}_h^n est la position des noeuds de $\hat{\mathcal{S}}_h \cap \partial \Sigma$ au temps t_n .

Le problème (2.92) équivaut à imposer une déformation sur le bord de la cuve, de fixer les noeuds sur le bord de la petite sphère et de laisser se *détendre* le maillage intermédiaire comme si les arêtes du maillage étaient des ressorts. La figure 2.10 illustre cet algorithme dans le cas où la cuve est un simple cube et où on impose une forte déformation de l'interface.

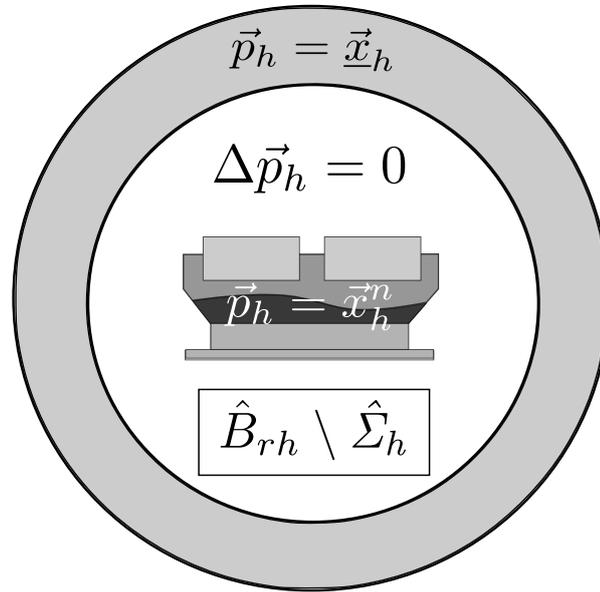


FIG. 2.9 – Illustration du problème (2.92).

Remarque 18 Dans la formulation (2.92), par abus de notation, le maillage \hat{B}_{rh} est vu comme un domaine polyédrique formés par ses éléments et $\partial\hat{B}_{rh}$ est le bord de ce domaine formé par les triangles de Υ_{rh} .

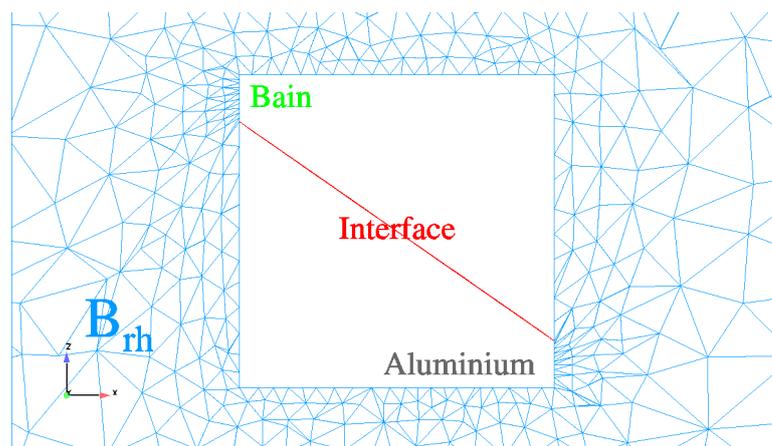


FIG. 2.10 – Coupe transversale du maillage 3D de $B_{rh}^n \setminus \Sigma$.

Remarque 19 *Le fait de modifier les maillages \mathcal{T}_h^n , \mathcal{S}_h^n et B_{rh}^n à chaque pas de temps exige d'ajouter après chaque déformation une étape d'interpolation entre les maillages $\mathcal{T}_h^{n-1} \rightarrow \mathcal{T}_h^n$, $\mathcal{S}_h^{n-1} \rightarrow \mathcal{S}_h^n$ et $\hat{\mathcal{S}}_h \rightarrow \mathcal{S}_h^n$. Du fait de l'utilisation de maillages non structurés, cette étape peut être très coûteuse en temps de calcul mais, comme la topologie des maillages est conservée au cours du temps, la construction préliminaire d'une table des éléments voisins de chaque noeud peut contribuer à accélérer cette étape.*

2.4 Algorithme général

En guise de synthèse on présente ici l'algorithme global de résolution du problème MHD.

- **Initialisation**

- (a) *Maillages* : On construit les maillages originaux des différents domaines de résolution en respectant la hiérarchie suivante : $\hat{\mathcal{T}}_h \subset \hat{\mathcal{S}}_h \subset \hat{B}_{rh} \subset \hat{B}_{Rh}$ et le maillage de l'interface $\hat{\Gamma}_h$ composé de faces de $\hat{\mathcal{T}}_h$.
- (b) *Conditions initiales* : Étant donné une condition initiale pour l'interface via la fonction φ_h^0 on déforme, en suivant la procédure décrite dans les sections 2.2 et 2.3.3, les maillages originaux pour construire $\Gamma_h^0, \mathcal{T}_h^0, \mathcal{S}_h^0, B_{rh}^0, B_{Rh}^0$, et on définit les valeurs initiales de \vec{u}_h^0 et \vec{A}_h^0 ³.
- (c) *Électromagnétisme* : Sur $\hat{\mathcal{S}}_h$, on calcule \vec{j}_h^{hor} et \vec{B}_h^{hor} et on les interpole sur \mathcal{S}_h^0 .

- **Itérations**

Pour $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, étant donnés $\vec{u}_h^n, \varphi_h^n, \vec{A}_h^{n-1}, \vec{A}_h^n, \vec{j}_h^{hor}$ et \vec{B}_h^{hor} sur les maillages $\mathcal{T}_h^n, \mathcal{S}_h^n, B_{rh}^n$ et B_{Rh}^n , calculer

- (a) *Courant* : L'équation (2.54) sur \mathcal{S}_h^n pour le potentiel électrique V_h^n et l'équation (2.55) pour la densité de courant \vec{j}_h^n .
- (b) *Induction* : L'induction magnétique $\vec{B}_h^n = \vec{B}_h^{hor} + \delta \vec{B}_h^n$, à partir de $\delta \vec{j}_h^n = \vec{j}_h^n - \vec{j}_h^{hor}$, où $\delta \vec{B}_h^n$ est donné, sur le maillage B_{Rh}^n , par l'algorithme de Schwarz présenté à la section 2.3.2.
- (c) *Forces* : La force exercée sur les fluides $f_h^{n+1/2} = \vec{j}_h^n \wedge \vec{B}_h^n - \rho \vec{g}$ et sa partie rotationnelle $\vec{f}_h^{n+1/2} - \vec{\nabla} \phi_h^{n+1/2}$, où $\phi_h^{n+1/2}$ est calculé sur le maillage \mathcal{T}_h^n en résolvant l'équation (2.29).

³Pour la cohérence de l'algorithme on définit également $\vec{A}_h^{-1} \equiv 0$.

- (d) *Stokes* : L'équation de Stokes (2.28) pour la vitesse $\vec{u}_h^{n+1/2}$ et la pseudo-pression $\tilde{p}_h^{n+1/2}$.
- (e) *Transport* : Les équations de transport (2.33) et (2.34) sur le maillage \mathcal{T}_h^n pour estimer la vitesse \vec{u}_h^{n+1} et la fonction $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$.
- (f) *Maillages* :
 - (f.1) *Interface* : La surface de niveau $\tilde{\varphi}_h^{n+1} = 0$, lissée par l'algorithme de moindres carrés (section 2.2.3), définit une nouvelle interface Γ_h^{n+1} . La position de Γ_h^{n+1} est encore ajustée pour garantir la conservation du volume.
 - (f.2) *Fluides+Cuve* : A partir de Γ_h^{n+1} on construit \mathcal{T}_h^{n+1} et \mathcal{S}_h^{n+1} (cf. section 2.2.2).
 - (f.3) *Boules* : De même, on construit B_{rh}^{n+1} et B_{Rh}^{n+1} en suivant l'algorithme décrit à la section 2.3.3.
- (g) *Interpolation* : Finalement, les champs \vec{u}_h^{n+1} , \vec{A}_h^n , \vec{j}_h^{hor} et \vec{B}_h^{hor} sont interpolés sur les maillages \mathcal{T}_h^{n+1} , \mathcal{S}_h^{n+1} , B_{rh}^{n+1} et B_{Rh}^{n+1} et la fonction Level-Set φ_h^{n+1} est reconstruite sur \mathcal{T}_h^{n+1} comme la distance à l'interface Γ_h^{n+1} .

Remarque 20 *La plupart des problèmes numériques introduits dans ce chapitre font bien sûr apparaître des systèmes linéaires qu'il faut résoudre efficacement en économisant au maximum l'espace mémoire. Dans la section 5.3.1 on discute cette question en présentant les solveurs itératifs utilisés.*

2.5 Validation numérique

Dans cette section deux tests académiques sont présentés pour valider le modèle du chapitre 1 et le traitement numérique du chapitre 2.

Dans un premier temps on s'intéresse à la méthode utilisée pour le calcul de l'induction magnétique. Dans le cas d'un problème de Poisson sur \mathbb{R}^3 pour lequel une solution exacte est connue, une analyse d'erreur est effectuée pour vérifier que l'estimation établie dans le théorème 2 est atteinte numériquement.

Dans un deuxième temps, une cuve académique de forme cylindrique est étudiée. Sur cette géométrie simplifiée, déjà présentée par d'autres auteurs

2.5. VALIDATION NUMÉRIQUE

(voir [16]), on teste la robustesse de l'algorithme de déformation de maillage et on présente quelques résultats intéressants, y compris une comparaison avec une expérience réelle.

2.5.1 Calcul de l'induction magnétique

Soit $\rho > 0$. Dans le but d'illustrer par un exemple les propriétés de convergence de l'algorithme de Schwarz discrétisé (2.89)-(2.91), on considère le problème de Poisson (2.70) où le membre de droite est donné par

$$f(\vec{x}) = \begin{cases} 0, & \text{si } |\vec{x}| \geq \rho, \\ -20a|\vec{x}|^2 - 6b, & \text{si } |\vec{x}| \leq \rho, \end{cases} \quad (2.93)$$

où a, b sont donnés par $a = 3/8\rho^5$ et $b = -5/4\rho^3$. Le support de f est donc la boule \mathcal{B}_ρ et la solution exacte de ce problème est la fonction $C^2(\mathbb{R}^3)$ suivante

$$u(\vec{x}) = \begin{cases} \frac{1}{|\vec{x}|}, & \text{si } |\vec{x}| \geq \rho, \\ a|\vec{x}|^4 + b|\vec{x}|^2 + c, & \text{si } |\vec{x}| \leq \rho, \end{cases} \quad (2.94)$$

où $c = 15/8\rho$ (voir FIG. 2.11).

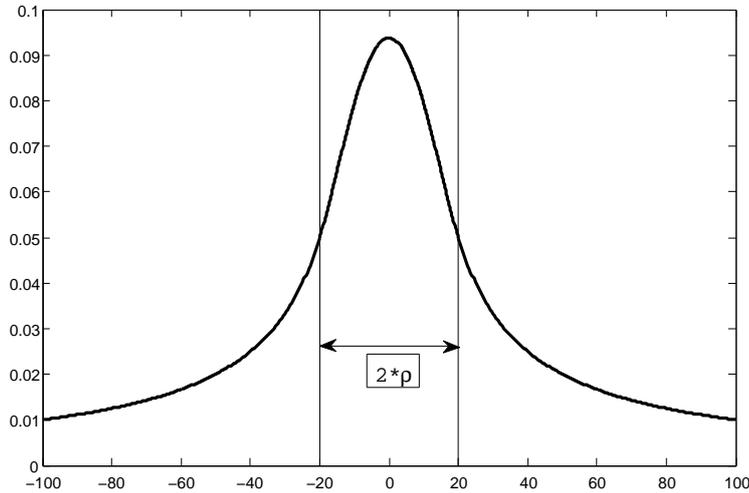


FIG. 2.11 – Solution exacte radiale u donnée par l'équation (2.94).

Soit $h, r, R > 0$ tels que $\rho < r < R$. La boule de rayon R centrée à l'origine \mathcal{B}_R est approchée par un maillage en tétraèdres B_{Rh} de sorte que le polyèdre formé par les éléments de B_{Rh} soit inscrit dans la sphère de rayon R . Si de plus la sphère de rayon r , notée $\partial\mathcal{B}_r$, peut être approchée par une surface formée de faces d'éléments de B_{Rh} alors l'algorithme de Schwarz discrétisé (2.89)-(2.91) peut être utilisé. Dans la suite, on estime l'erreur d'approximation commise entre la solution exacte u donnée par (2.94) et la solution numérique au n -ème pas de l'algorithme (2.89)-(2.91) u_h^n sur le maillage B_{Rh} .

Définissons encore, pour $N \gg 1$ l'approximation numérique convergée $u_h = u_h^N$, i.e. pour une tolérance $\varepsilon > 0$ petite donnée⁴, N est choisi suffisamment grand pour que

$$\|u_h^N - u_h^{N-1}\|_{L^\infty(B_{Rh})} < \varepsilon. \quad (2.95)$$

Par inégalité triangulaire, on a alors l'estimation d'erreur suivante pour $n < N$:

$$\|u - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})} \leq \|u - u_h\|_{L^\infty(B_{Rh})} + \|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}. \quad (2.96)$$

Cette inégalité illustre le fait que l'erreur entre la solution exacte et l'approximation obtenue au n -ème pas de l'algorithme de Schwarz est bornée par l'erreur de discrétisation qui dépend de la taille des mailles h et par l'erreur intrinsèque de l'algorithme de décomposition de domaine. Le but de cette décomposition est de déterminer numériquement l'ordre de convergence de l'algorithme de Schwarz indépendamment de l'erreur de discrétisation en espace.

Estimons donc la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz en calculant, pour $\rho = 1$, $r = 2$ et $R = 3$, l'erreur $\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ pour différentes tailles de mailles.

La figure 2.12 montre que l'erreur décroît exponentiellement et est indépendante de h . Dans ce cas, la pente vaut environ -0.4 , ce qui signifie que

$$\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})} \leq C e^{-0.4n}. \quad (2.97)$$

En fait, si s est donné par

$$s = \sup \left\{ p \in \mathbb{R} \mid \|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})} \leq C e^{-pn} \right\}, \quad (2.98)$$

on peut voir que s ne dépend pas de ρ mais uniquement de $\alpha = r/R$. En faisant varier α , on peut déterminer la dépendance suivante entre s et α (FIG. 2.13)

$$s(\alpha) \approx -\log \alpha. \quad (2.99)$$

⁴Typiquement $\varepsilon = 10^{-7}$.

2.5. VALIDATION NUMÉRIQUE

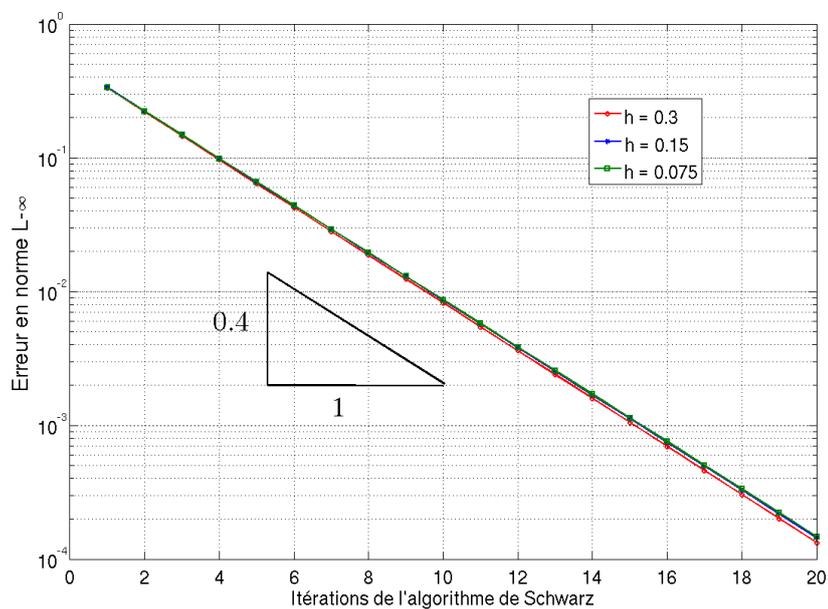


FIG. 2.12 – Erreur $\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ pour différents h .

En particulier pour $\alpha = 2/3$, on a $\log \alpha \approx -0.405$ ce qui correspond à la pente estimée sur la figure 2.12.

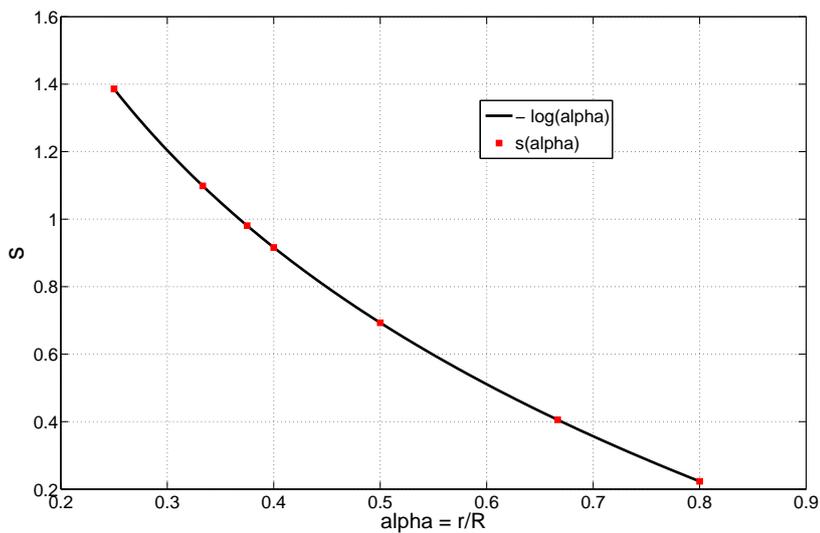


FIG. 2.13 – Dépendance entre s et $\alpha = \frac{r}{R}$.

Ce résultat est cohérent avec le théorème 2. Il signifie que la convergence atteinte numériquement est la même que celle attendue théoriquement car

$$\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})} \leq Ce^{-sn} \approx Ce^{n \log \alpha} = C\alpha^n = C \left(\frac{r}{R}\right)^n. \quad (2.100)$$

En guise d'analyse, on reporte dans la table 2.1 les mesures d'erreur $\|u - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ et $\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ en fonctions de n , α et h . Dans la dernière colonne, on indique encore le temps de calcul utilisé pour estimer ces quantités sur une machine Intel Core2(TM) fonctionnant à 2.40GHz et utilisant jusqu'à 4GB de mémoire vive gérée par le système d'exploitation GNU/Linux.

Iter	h	α	R	r	$\ u - u_h^n\ _\infty$	$\ u_h - u_h^n\ _\infty$	CPU[s]
$n = 5$	0.3	0.75	2	1.5	0.121e - 00	0.150e - 00	1
		0.5	3	1.5	0.715e - 01	0.197e - 01	2
		0.25	6	1.5	0.428e - 01	0.621e - 03	10
	0.15	0.75	2	1.5	0.189e - 00	0.155e - 00	11
		0.5	3	1.5	0.434e - 01	0.206e - 01	23
		0.25	6	1.5	0.238e - 01	0.647e - 03	126
	0.075	0.75	2	1.5	0.167e - 00	0.158e - 00	154
		0.5	3	1.5	0.294e - 01	0.208e - 01	352
		0.25	6	1.5	0.895e - 02	0.162e - 03	2014
$n = 10$	0.3	0.75	2	1.5	0.904e - 01	0.339e - 01	2
		0.5	3	1.5	0.524e - 01	0.586e - 03	4
		0.25	6	1.5	0.422e - 01	0.578e - 06	22
	0.15	0.75	2	1.5	0.699e - 01	0.364e - 01	23
		0.5	3	1.5	0.234e - 01	0.637e - 03	46
		0.25	6	1.5	0.244e - 01	0.624e - 06	280
	0.075	0.75	2	1.5	0.465e - 01	0.372e - 01	310
		0.5	3	1.5	0.926e - 02	0.647e - 03	704
		0.25	6	1.5	0.831e - 02	0.245e - 06	4032
$n = 20$	0.3	0.75	2	1.5	0.586e - 01	0.164e - 02	4
		0.5	3	1.5	0.518e - 01	0.524e - 06	9
		0.25	6	1.5	0.422e - 01	0.639e - 12	44
	0.15	0.75	2	1.5	0.356e - 01	0.189e - 02	46
		0.5	3	1.5	0.228e - 01	0.650e - 06	93
		0.25	6	1.5	0.244e - 01	0.302e - 10	538
	0.075	0.75	2	1.5	0.113e - 01	0.197e - 02	620
		0.5	3	1.5	0.861e - 02	0.706e - 06	1409
		0.25	6	1.5	0.830e - 02	0.637e - 07	8161

TAB. 2.1 – Estimation d'erreur et temps de calcul en fonction de n , h et α .

2.5. VALIDATION NUMÉRIQUE

On peut alors estimer le comportement suivant pour l'erreur entre la solution exacte u et la solution convergée u_h :

$$\|u - u_h\|_{L^\infty(B_{Rh})} \leq Ch^2 |\log(h)|, \quad (2.101)$$

ainsi que les conclusions suivantes :

- Lorsque r est proche de R (α proche de 1), puisque l'algorithme de Schwarz converge "lentement" dans ce cas, il est nécessaire d'itérer suffisamment entre les boules. Pour $\alpha = 0.75$ par exemple, après 10 itérations de l'algorithme de Schwarz les deux termes $\|u - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ et $\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ sont encore du même ordre de grandeur et ce quel que soit le h considéré.
- A l'opposé, si $R \gg r$ (α proche de 0), l'algorithme de Schwarz converge très rapidement. Dans ce cas il est donc inutile d'itérer de nombreuses fois puisque l'erreur d'approximation due à la discrétisation spatiale est dominante. Pour $\alpha = 0.25$ par exemple, après seulement 5 itérations de Schwarz l'erreur $\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ est négligeable par rapport à $\|u - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$. Noter que dans ce cas, chaque itération devient coûteuse en temps de calcul. Pour $h = 0.075$ par exemple, une itération de Schwarz dure environ 400 secondes pour $\alpha = 0.25$ contre seulement 30 secondes pour $\alpha = 0.75$.
- Dans une situation moyenne ($h = 0.15$ et $\alpha = 0.5$), après environ 7-8 itérations, le terme $\|u_h - u_h^n\|_{L^\infty(B_{Rh})}$ devient négligeable par rapport à l'erreur de discrétisation spatiale.

2.5.2 Creuset

Pour illustrer l'efficacité du modèle MHD évolutif présenté précédemment, considérons maintenant une cuve simplifiée dont la géométrie est un cylindre droit à base ronde de 3.5cm de rayon et de 15cm de hauteur. Ce *creuset* est traversé par un courant électrique entrant dans la cuve par une anode cylindrique de rayon 2.5cm partiellement immergée dans le bain et quittant l'aluminium par une cathode recouvrant entièrement le fond du domaine fluide (voir FIG. 2.14).

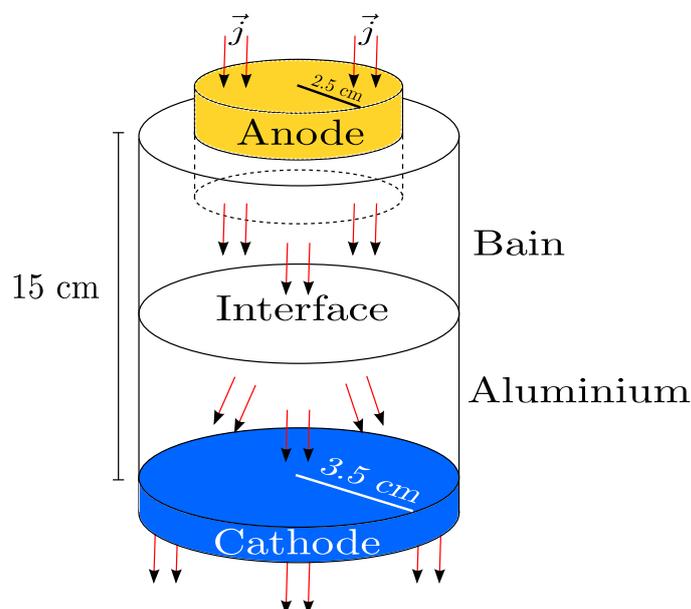


FIG. 2.14 – Creuset cylindrique pour l'étude de phénomènes MHD.

Cette géométrie est intéressante à considérer car elle fait l'objet d'études antérieures (voir [16]), qu'elle permet d'observer un phénomène typique des instabilités *MHD* (voir section suivante) et qu'elle a été étudiée expérimentalement au *laboratoire de recherche et fabrication* au sein de l'équipe de recherche de RioTinto-Alcan.

Phénomène de Rolling

Dans la géométrie du creuset, en négligeant dans un premier temps les effets de tension de surface, on s'intéresse à un type d'instabilités *MHD*⁵ introduit par Sele en 1970 (cf. [5]) et étudié du point de vue physique par Davidson et Al. (cf. [37]) : le “*rolling*” ou “roulis” de l'interface.

⁵La notion de stabilité est définie plus précisément au chapitre 4.

2.5. VALIDATION NUMÉRIQUE

En supposant la densité de courant \vec{j} uniforme et verticale sur la surface supérieure de l'anode et sur la surface inférieure de la cathode et le creuset soumis à un champ d'induction magnétique ambiant vertical \vec{B}_z , les situations suivantes se produisent : premièrement, si l'interface entre les fluides est parfaitement plane, par symétrie de la géométrie la densité de courant au voisinage de l'interface reste verticale et opposée à \vec{B}_z . La force de Lorentz résultante est donc nulle et les fluides sont en position d'équilibre statique.

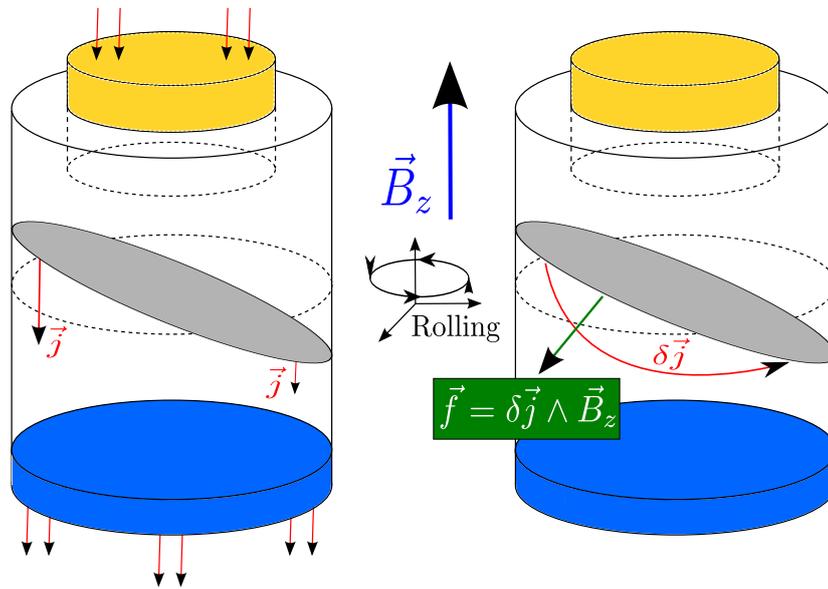


FIG. 2.15 – Phénomène de Rolling.

Deuxièmement si l'interface aluminium-bain est dans une position initiale non horizontale (par exemple un plan incliné) une redistribution du courant a lieu dans le creuset afin de minimiser l'effet Joule. Le bain étant nettement moins conducteur que l'aluminium, la densité de courant va être forte dans les zones où l'interface est proche des anodes et faible ailleurs. La composante non verticale du courant $\delta\vec{j} = \vec{j} - \vec{j}^{hor}$ et le champ d'induction magnétique \vec{B}_z produisent alors une force de Lorentz qui engendre un mouvement de rotation du métal dans “le sens inverse des aiguilles d’une montre” lorsque \vec{B}_z est orienté vers le haut (voir FIG. 2.15).

Suivant l'intensité du courant fourni ou du champ magnétique extérieur, le *rolling* de l'interface peut être atténué au cours du temps par les effets visqueux et tendre vers une position stationnaire statique avec interface plane. Sur la figure 2.16 le mouvement d'un noeud proche du bord de l'interface

est représenté dans une situation de ce type. Lorsque, comme ici, l'interface évolue en temps vers une position stationnaire, le "rolling" est qualifié de stable.

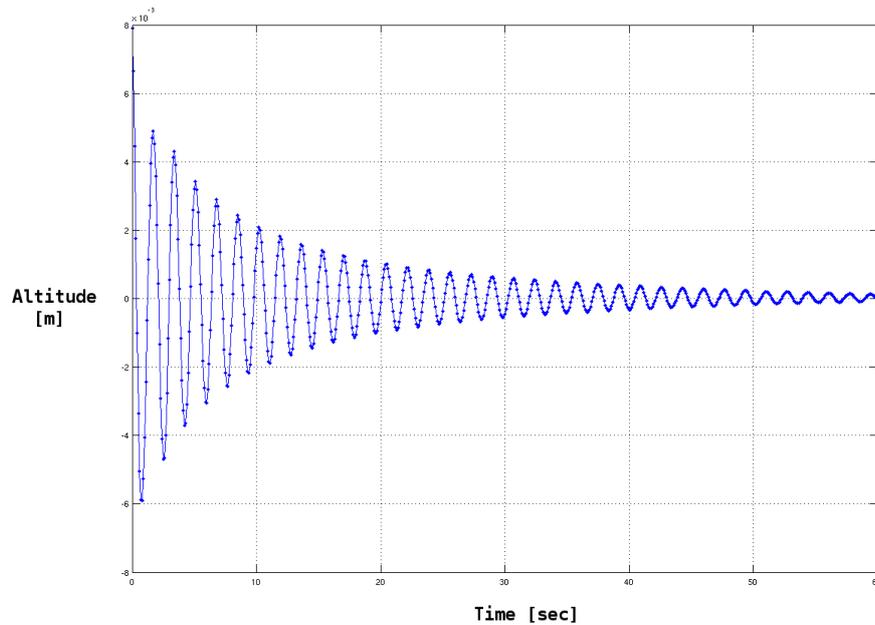


FIG. 2.16 – Oscillations de l'interface dans une configuration électromagnétique stable.

D'un autre côté, si les forces de Lorentz sont suffisamment importantes, l'interface entre les fluides peut osciller indéfiniment et dans certains cas le mouvement peut même s'amplifier au cours du temps. Dans ces conditions une petite perturbation de la position stationnaire peut induire un important mouvement de l'interface qui n'atteint jamais un état stationnaire. La figure 2.17, dans laquelle le mouvement d'un noeud de l'interface proche du bord du creuset est représenté, illustre l'amplification des oscillations au cours du temps dans un tel cas, qualifié d'instable.

Pour mieux appréhender le mouvement de l'interface, la figure 2.18 présente une vue en 3 dimensions du domaine $\Omega_{al}(t)$ pour différents temps dans la situation instable de la figure 2.17. L'effet de rolling de l'interface est visible et on peut observer que contrairement à la figure 2.16, le mouvement de l'interface ne s'atténue pas au cours du temps. En fait après 50 secondes l'altitude maximale de l'interface est même supérieure à l'altitude maximale initiale.

2.5. VALIDATION NUMÉRIQUE

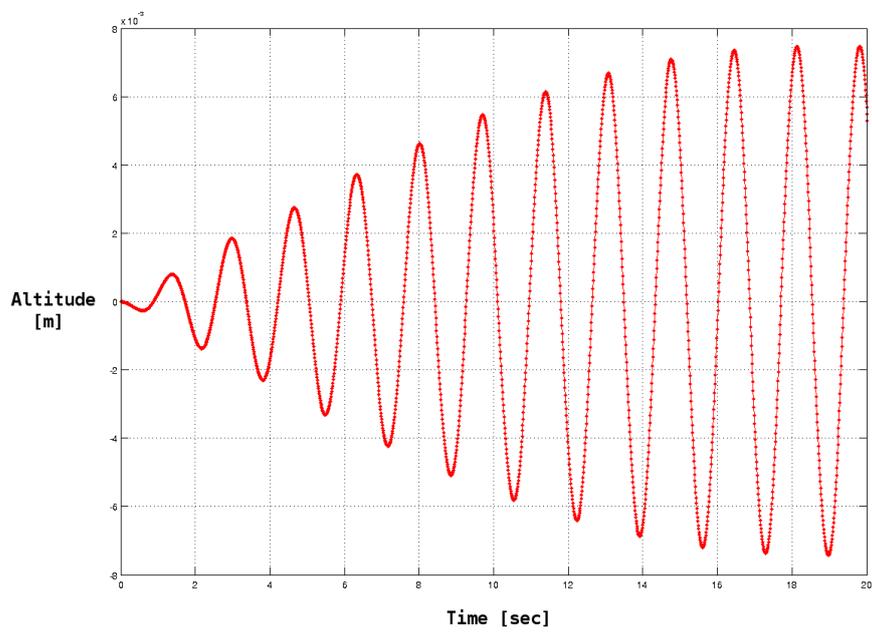


FIG. 2.17 – Oscillations de l'interface dans une configuration électromagnétique instable.

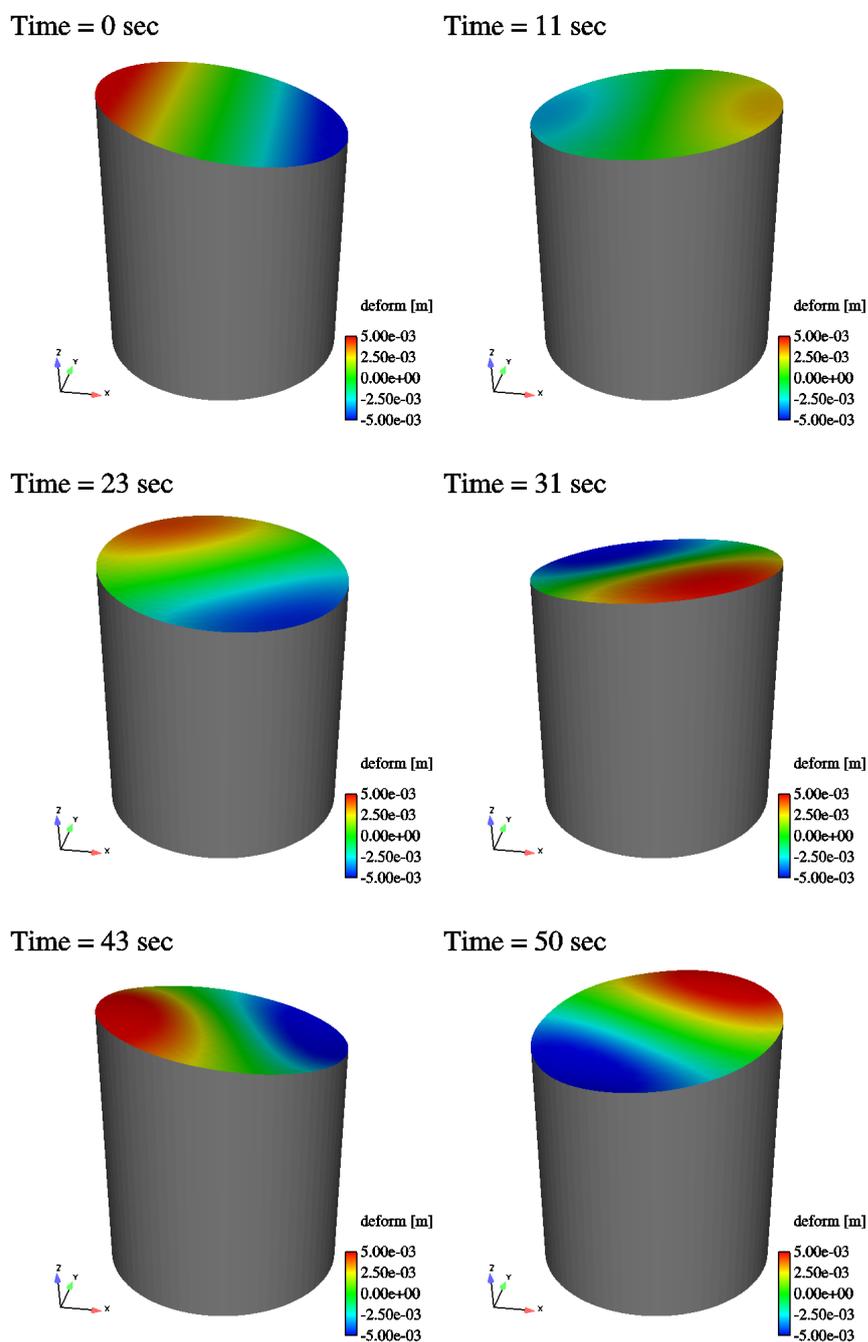


FIG. 2.18 – Rolling de l'interface dans une situation instable. Vue 3D du domaine $\Omega_{al}(t)$.

2.5. VALIDATION NUMÉRIQUE

Un des objectifs du modèle développé ici est de permettre une étude paramétrique du mouvement des fluides dans le creuset. Typiquement, on peut observer l'interface pour une gamme variable de paramètres (par exemple l'intensité du champ d'induction magnétique) et évaluer le seuil d'instabilité, i.e. la valeur limite qui sépare un mouvement amorti ou un mouvement amplifié. Une telle étude est effectuée dans le cas du creuset et présentée sur la figure 2.19. Dans ce cas on peut estimer que pour un courant donné (10A), le mouvement de l'interface a tendance à s'amortir au cours du temps pour autant que l'induction magnétique soit inférieure à 80G.

Néanmoins il convient de nuancer ces résultats dans la mesure où le modèle numérique ne décrit pas le phénomène physique complètement et que l'erreur commise sur le mouvement de l'interface est très difficile à estimer. Ainsi, plutôt que de chercher une estimation quantitative précise, il vaut mieux tenter d'étudier un comportement qualitatif, i.e. d'évaluer si un changement de paramètre tend à stabiliser ou déstabiliser le mouvement de l'interface.

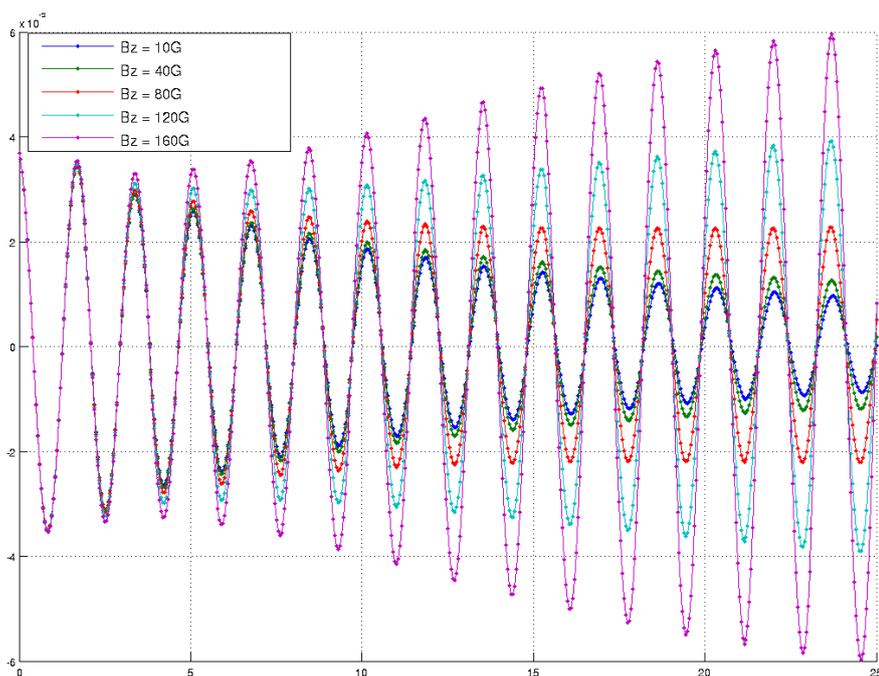


FIG. 2.19 – Estimation du seuil de stabilité en fonction de l'intensité du champ d'induction magnétique. Oscillations d'un noeud de l'interface au cours du temps.

Tension superficielle

Dans la section précédente, les effets de tension superficielle sur l'interface ont été négligés. Il est connu que ces effets peuvent avoir une importance lorsque la géométrie est réduite, typiquement lorsqu'on étudie un liquide dans un capillaire. En fait, la distance caractéristique pour laquelle les effets de tension de surface sont dominants est appelée *longueur capillaire* et est calculable par la formule

$$\lambda_c = \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta\rho g}}, \quad (2.102)$$

où γ est un coefficient de tension de surface qui dépend des fluides (ici $\gamma = 0.5$ N/m), $g = 9.81$ m/s² et $\Delta\rho$ est la différence des densités (ici $\Delta\rho = 140$ kg/m³). Pour l'interface aluminium-bain, la longueur capillaire vaut donc

$$\lambda_c = 1.91 \text{ cm}. \quad (2.103)$$

Les cuves industrielles mesurant typiquement plusieurs mètres, il semble naturel de ne pas prendre en compte les effets de tension de surface pour l'étude de cas réels (voir chapitre 3). Par contre, dans le cas du creuset, la longueur capillaire vaut plus de la moitié du rayon de l'interface et dans ce cas, on peut considérer que les effets de tension superficielle ont un effet non négligeable.

Comme précisé au chapitre précédent, la difficulté principale pour modéliser les effets capillaires est d'estimer l'angle de contact θ qui intervient dans l'équation (1.11) et est défini sur la figure 1.3.

Pour un angle $\theta = \pi/2$, en partant d'une interface inclinée comme condition initiale, on retrouve le phénomène de rolling comme on peut le voir sur la figure 2.20. Pour ce cas particulier le terme intégral sur le bord de l'interface dans la formulation faible (1.11) est nul puisque $\cos(\pi/2) = 0$. Le terme restant a un effet dissipatif important qui tend à stabiliser énormément le rolling de l'interface comme on peut le voir sur la figure 2.20 où, malgré une intensité d'induction magnétique 4 fois plus grande que dans le cas instable sans tension de surface de la FIG. 2.18, le mouvement de l'interface s'atténue ici très rapidement. Ainsi, après environ 30 secondes de simulation, la déformation maximale de l'interface est inférieure à 1 mm contre plus de 5 mm précédemment (FIG. 2.18).

En se basant sur l'expérience, on peut estimer pour un type de paroi donné dans le creuset un angle de contact $\theta \approx 2\pi/3$. Une simulation de rolling avec cet angle mène à une interface stationnaire concave comparable à une situation expérimentale donnée sur la figure 2.21. Cette solution stationnaire est de plus extrêmement stable dans le sens où malgré de forts

courants, une perturbation de cette position a tendance à disparaître très rapidement. Notons enfin que ce comportement a été également observé en laboratoire et reproduit numériquement.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, les équations de la *MHD* introduites au chapitre 1 ont été discrétisées en temps par des méthodes de différences finies de type Euler implicite et en espace par des éléments finis continus de degré 1. Les équations de Navier-Stokes sont traitées par une méthode de type splitting en temps et décomposées en un problème de Stokes et une équation de transport. Le mouvement de l'interface libre entre les fluides est modélisé par une technique Level-Set.

La partie électromagnétique est résolue à chaque pas de temps efficacement par une méthode de type décomposition de domaine sur une double boule entourant la cuve. Des résultats numériques montrent que peu d'itérations de l'algorithme de Schwarz sont nécessaires en pratique.

Les équations sont résolues sur un maillage mobile dont la déformation à chaque pas de temps est gérée par l'algorithme introduit à la section 2.2. Le mouvement des mailles est dicté par le mouvement de l'interface entre les fluides et propagé à l'extérieur de la cuve pour conserver un maillage conforme au cours du temps.

Le phénomène de roulis de l'interface est étudié sur une géométrie académique. Dans cette configuration, les effets de tension de surface jouent un rôle prépondérant.

Dans le chapitre qui suit, le modèle numérique introduit est appliqué à une géométrie plus complexe, proche d'une cuve industrielle.

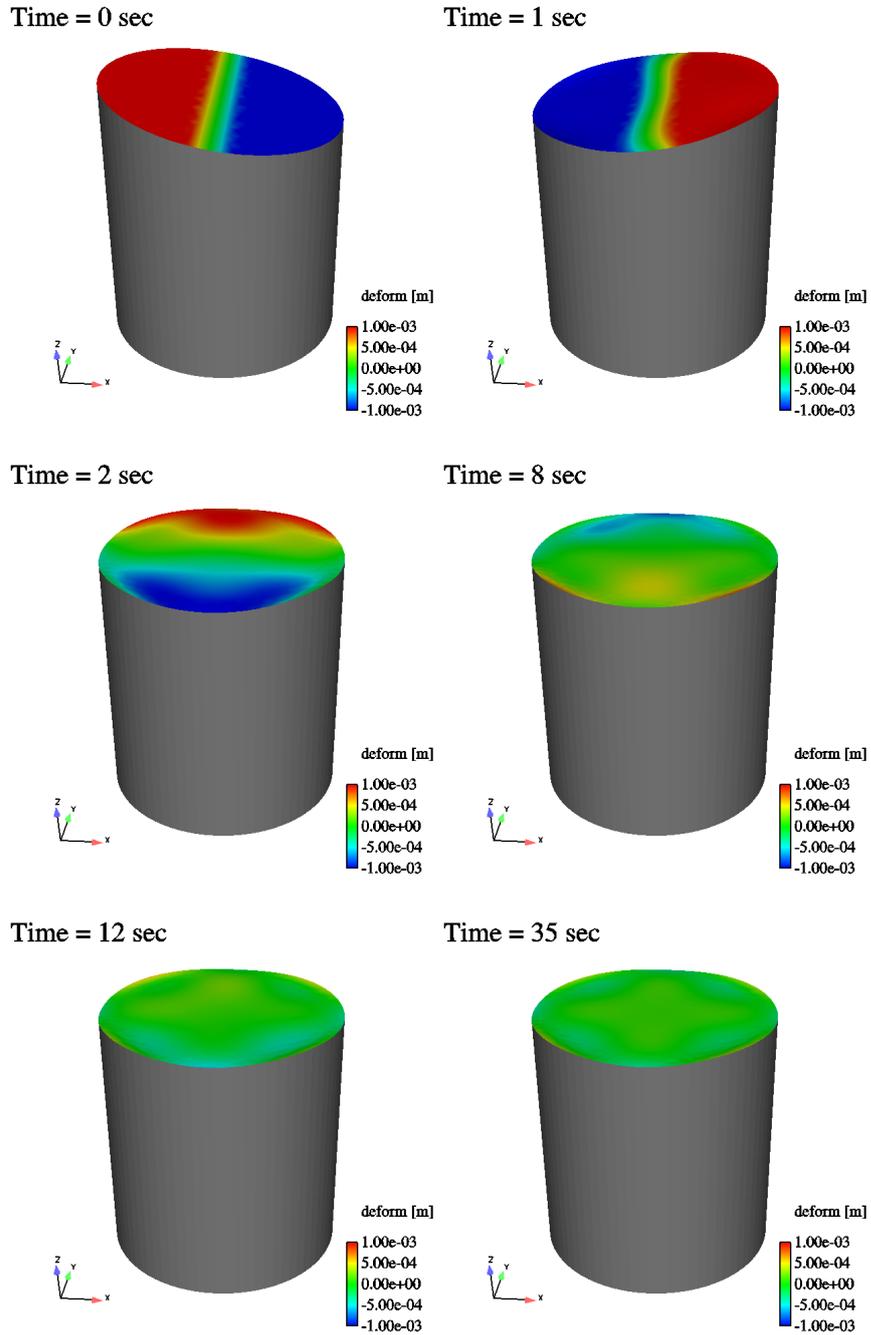


FIG. 2.20 – Rolling de l'interface avec tension superficielle et $\theta = \pi/2$. Vue 3D du domaine $\Omega_{al}(t)$.

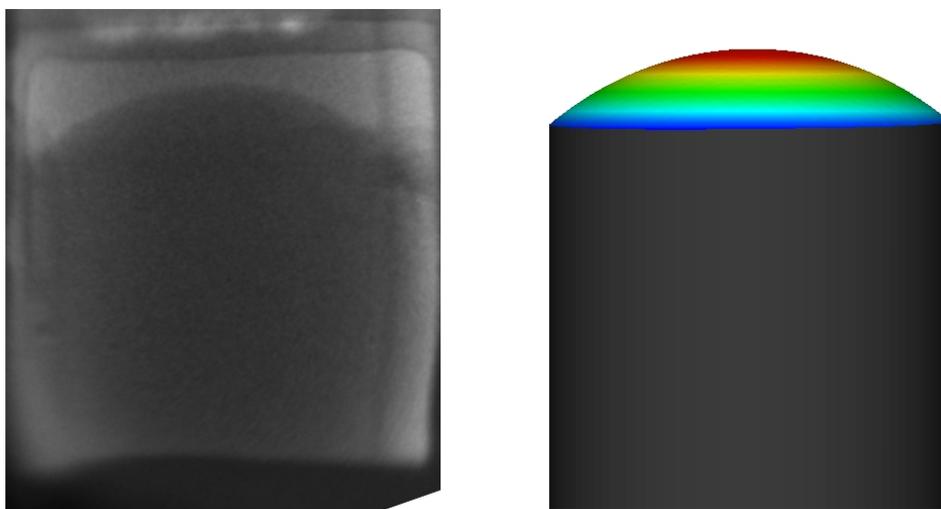


FIG. 2.21 – Position stationnaire de l’interface dans la géométrie du creuset avec angle de contact $\theta = 2\pi/3$. A droite : État stationnaire du domaine aluminium obtenu par une simulation numérique. A gauche : photo rayons X prise dans le cadre d’une expérience en laboratoire (source : RioTinto-Alcan, laboratoire de recherche et fabrication, St-Jean de Maurienne, France).

Chapitre 3

Application à la production d'aluminium

A la fin du chapitre précédent, un creuset cylindrique simplifié a été considéré pour tester le modèle MHD évolutif. Sur cette géométrie, également étudiée en laboratoire, le phénomène de roulis peut être observé. De plus il a été prouvé que dans ce cas les effets de tension superficielle jouent un rôle important.

Dans l'industrie, les dimensions des cuves utilisées sont évidemment très différentes de celles du creuset. Typiquement, la partie occupée par les fluides est une structure d'une quinzaine de mètres de long, de quelques mètres de large et de moins d'un mètre de haut.

Afin de tester le modèle évolutif sur une géométrie réaliste, on considère ici une “*cuve numérique*” qui n'est pas utilisée en pratique mais dont la forme et les dimensions dérivent directement d'un modèle de cuve existant, conçu par l'entreprise *RioTinto-Alcan*. Les caractéristiques physiques (conductivité électrique, ampérage, etc) sont choisies de sorte à ce que la répartition du courant dans les fluides soit conforme à celle d'une vraie cuve.

Les avantages de cette géométrie sont multiples : premièrement, de par sa simplicité, elle peut être maillée facilement avec des zones localement raffinées (comme les coins du domaine fluide) ou avec des éléments anisotropes (ajout de couches d'éléments en épaisseur dans les fluides). Deuxièmement le coût de calcul pour obtenir une simulation numérique est relativement réduit en comparaison à une cuve réelle. Ainsi la convergence des schémas et algorithmes numériques peut être testée en un temps raisonnable. Finalement, contrairement aux cuves réelles, cette cuve ne met pas en cause une confidentialité industrielle et permet donc de publier des résultats numériques.

Dans ce chapitre on présente quelques résultats obtenus lors de simulations sur la cuve numérique. En particulier, la vitesse stationnaire des fluides et la position de l'interface sont calculées dans plusieurs configurations de champ magnétique. L'influence de la tension superficielle sur le mouvement de l'interface est étudiée et des simplifications du modèle pour le calcul du champ d'induction magnétique sont envisagées, testées et comparées au modèle complet introduit précédemment.

3.1 Cuve numérique

Dans le chapitre 5, le logiciel de simulation numérique `Aluce11` dans lequel le modèle évolutif a été implanté est présenté. Ce programme, développé depuis plus de 20 ans, est dédié à l'électrolyse de l'aluminium et dispose d'une large gamme d'outils de simulation, d'algorithmes et de modèles permettant entre autre des calculs ferromagnétiques, thermiques, électriques ou même de dissolution et distribution d'alumine.

Dans l'optique de pouvoir tester et valider les modules existants au sein du logiciel et de disposer d'un cas test référence pour les développements à venir, une cuve simplifiée mais suffisamment réaliste a été créée. Cette cuve, appelée "*cuve numérique*", est basée sur une cuve réelle utilisée dans l'industrie. Le but est d'extraire les caractéristiques essentielles d'une cuve industrielle (dimensions, distribution du courant, configuration magnétique et thermique, etc) de sorte que le comportement physique soit conservé mais avec une géométrie simplifiée permettant une certaine liberté pour la gestion des maillages (tailles caractéristiques, raffinement locaux, etc) et un temps de calcul réduit.

La cuve numérique est formée de cinq parties hexaédriques distinctes, assemblées par couches successives (voir FIG. 3.1). Les éléments qui la composent, en partant du bas vers le haut, sont les suivants :

- *Barres cathodiques* : sur les cuves réelles, des barres en acier récupèrent le courant sous la cathode pour le diriger vers la cuve suivante. Une vraie cuve compte plusieurs dizaines de ces barres, de quelques centimètres de diamètre, traversant la cathode de part en part et réparties à intervalles réguliers. Pour la cuve numérique, le choix a été fait de simplifier ce système en considérant une unique structure parallélépipédique située sous la cathode.

3.1. CUVE NUMÉRIQUE

- *Cathode* : une cathode en carbone forme le fond du domaine fluide. Cet élément est moins large que les barres cathodiques (3.5m seulement contre 5m pour les barres) et assez peu conducteur. Ainsi, puisque les surfaces de sortie de courant se trouvent aux extrémités des barres et que l'aluminium liquide est plus conducteur que la cathode, les composantes horizontales de la densité de courant dans l'aluminium sont en principe non nulles (voir par exemple FIG. 3.2). Cet effet est légèrement accentué par le fait que la conductivité électrique de la cathode n'est pas isotrope, plus faible dans la direction Oy (cf FIG. 3.1).
- *Aluminium liquide* : une couche de 20cm de métal liquide recouvre la cathode. Notons encore que contrairement à une cuve industrielle les bords latéraux du domaine fluide sont ici verticaux.
- *Bain électrolytique* : le domaine occupé par le bain a les mêmes dimensions que celui occupé par l'aluminium liquide (cf. table 3.1). Cependant, comme les anodes plongent dans le bain, la couche de liquide entre l'interface initiale et les anodes mesure seulement 4 cm de haut. Comme on le verra par la suite, la résolution numérique du problème hydrodynamique dans une si faible épaisseur de bain est délicate et nécessite un maillage anisotrope.
- *Anodes* : deux blocs anodiques en carbone, séparés par un canal central de 20cm de large, plongent dans le bain. Dans les cuves réelles, le courant entre dans le bain en traversant un système plus complexe, composé de plusieurs anodes qui peuvent être remplacées en cours de production. Cependant comme ces anodes ne sont séparées que de quelques centimètres, l'approximation faite en considérant uniquement ces deux blocs anodiques semble raisonnable et devrait peu modifier la répartition du courant dans les fluides.

Les dimensions des différents éléments ainsi que les propriétés physiques des matériaux qui composent la cuve numérique sont résumées dans la table 3.1. Sur les bords des domaines, les conditions suivantes sont imposées :

- *Courant* : la surface supérieure des anodes forme le domaine Γ_{in} d'entrée du courant tandis que les surfaces latérales des barres cathodiques définies par les équations $y = \pm 2.5m$ composent le domaine Γ_{out} de sortie du courant. Rappelons que ces deux domaines interviennent dans la forme variationnelle pour le calcul du potentiel V (équation (1.34)), avec des conditions du type

$$\begin{aligned} -\vec{j} \cdot \vec{n} &= \mathcal{I}/|\Gamma_{in}|, & \text{sur } \Gamma_{in}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} &= \mathcal{I}/|\Gamma_{out}|, & \text{sur } \Gamma_{out}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

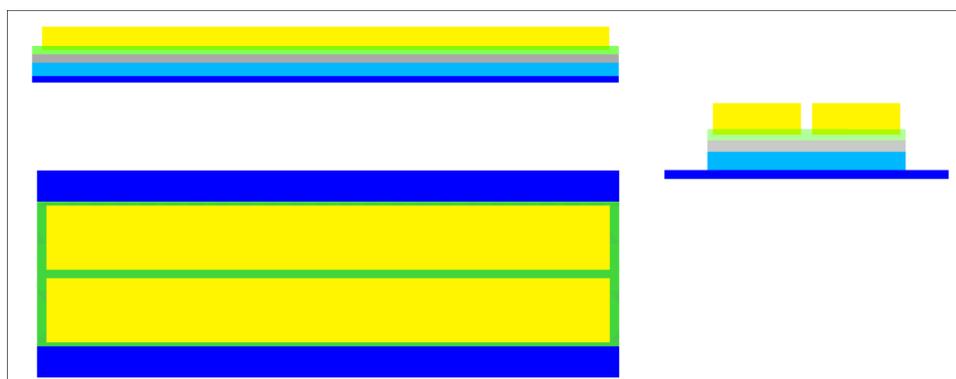


FIG. 3.1 – Plan de la cuve numérique : projections sur les plans Oxz (en haut à gauche), Oxy (en bas à gauche) et Oyz (à droite).

où $|\Gamma_{in}|$ et $|\Gamma_{out}|$ sont les aires des domaines et \mathcal{I} l'intensité de courant total fourni.

- *Vitesse* : les interfaces cathode/aluminium et bain/anodes ainsi que la surface horizontale supérieure du bain définie par l'équation $z = 40\text{cm}$ forment le domaine Γ_D où la vitesse est considérée nulle. Sur le reste du domaine fluide, i.e. la paroi latérale du domaine Ω , on impose des conditions de glissement parfait (cf. remarque 2). Notons que sur les 4 segments formant les coins de la paroi latérale du domaine fluide, comme la normale extérieure n'est pas bien définie en raison de la singularité géométrique, on peut, dans le schéma numérique uniquement, imposer $\vec{u} = (0, 0, u_z)^T$.

Cuve Numérique	Dimensions			Propriétés	
	L [m]	ℓ [m]	h [cm]	σ [S/m]	ρ [kg/m ³]
Barres cathodique	14	5	15.75	1e5	-
Cathode	14	3.5	32.25	1e4 (5e3 en Oy)	-
Aluminium	14	3.5	20	3.33e6	2270
Bain	14	3.5	20	210	2130
Anodes	13.5	1.55	56	1e4	-

TAB. 3.1 – Propriétés physiques des matériaux et dimensions des éléments dans la cuve numérique. L est la longueur dans la direction Ox , ℓ la largeur dans la direction Oy et h la hauteur dans la direction Oz .

3.1. CUVE NUMÉRIQUE

Sous ces conditions on peut observer que les trajectoires empruntées par le courant électrique à travers les fluides dans la cuve numérique sont proches de celles sur cuve réelle (voir FIG. 3.2).

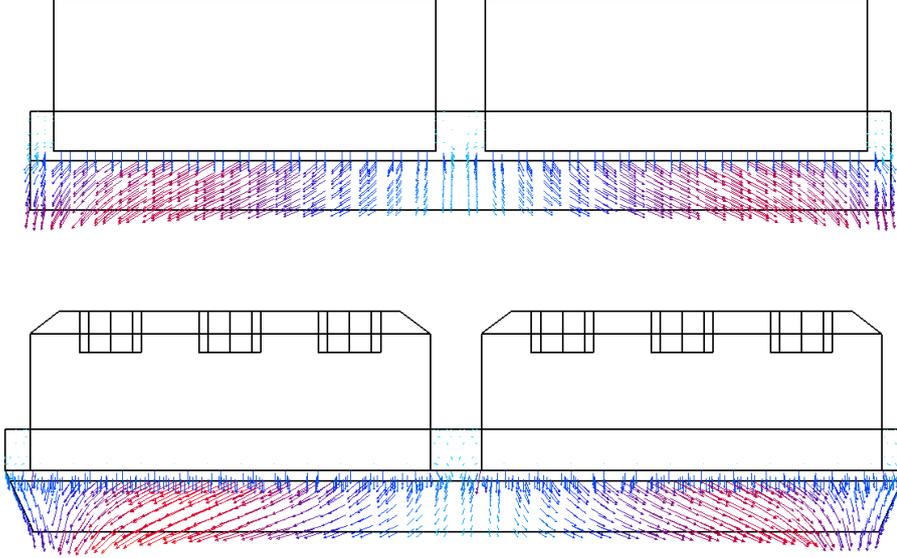


FIG. 3.2 – Trajectoires du courant dans les fluides à interface horizontale pour la cuve numérique (haut) et pour une cuve réelle (bas). Coupe verticale en $x = 0$.

Concernant l'induction magnétique, rappelons que l'on considère la décomposition suivante

$$\vec{B}(t, \vec{x}) = \vec{B}^{hor}(\vec{x}) + \delta\vec{B}(t, \vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in \Sigma, t > 0. \quad (3.2)$$

Le champ \vec{B}^{hor} est indépendant du temps et peut lui-même être partagé en deux parties comme suit

$$\vec{B}^{hor}(\vec{x}) = \vec{B}^{ext}(\vec{x}) + \vec{B}^{int}(\vec{x}), \quad (3.3)$$

où \vec{B}^{ext} est le champ d'induction magnétique induit par les éléments extérieurs à la cuve (cuves voisines principalement), tandis que \vec{B}^{int} est le champ induit par le système de conducteurs internes à la cuve qui entourent le domaine fluide et dont le positionnement peut être assez complexe. Cette séparation est utile dans le cas de la cuve numérique car elle permet de prendre en compte une configuration magnétique réaliste en récupérant et interpolant les champs $\vec{B}^{ext}(\vec{x})$ et $\vec{B}^{int}(\vec{x})$ calculés pour une cuve réelle. Une des composantes prépondérantes décrivant l'écoulement dans une cuve étant la

forme et la position des amenées et sorties de courant, un calcul magnétique sur la cuve numérique avec sa configuration électrique simplifiée ne saurait refléter la réalité, d'où l'intérêt de cette manipulation. Notons encore qu'en règle générale le calcul du champ \vec{B}^{hor} tient compte de l'effet d'écran ferromagnétique selon le modèle développé dans [12] et présenté dans la section 1.2.4.

Comme sur les cuves réelles, en raison du large rapport entre longueur et hauteur, des maillages isotropes ne peuvent pas être raisonnablement utilisés pour la cuve numérique. En fait, pour garantir une bonne approximation de l'écoulement, il convient de générer des maillages suffisamment fins dans la direction Oz . Or, si la distance entre l'interface aluminium-bain et la partie inférieure des anodes vaut seulement 4 cm, pour avoir une discrétisation d'environ 10 mailles en épaisseur dans cette zone, il faut choisir des tétraèdres d'environ 4 mm de haut. Cependant, un maillage isotrope de la cuve numérique de taille caractéristique $h = 4$ mm représenterait plusieurs milliards de tétraèdres ce qui surpasse largement les possibilités actuelles de la simulation numérique.

De part sa géométrie simplifiée, des maillages anisotropes structurés ou non structurés de la cuve numérique peuvent être assez facilement générés. Deux exemples de tels maillages sont présentés dans la figure 3.3.

3.1. CUVE NUMÉRIQUE

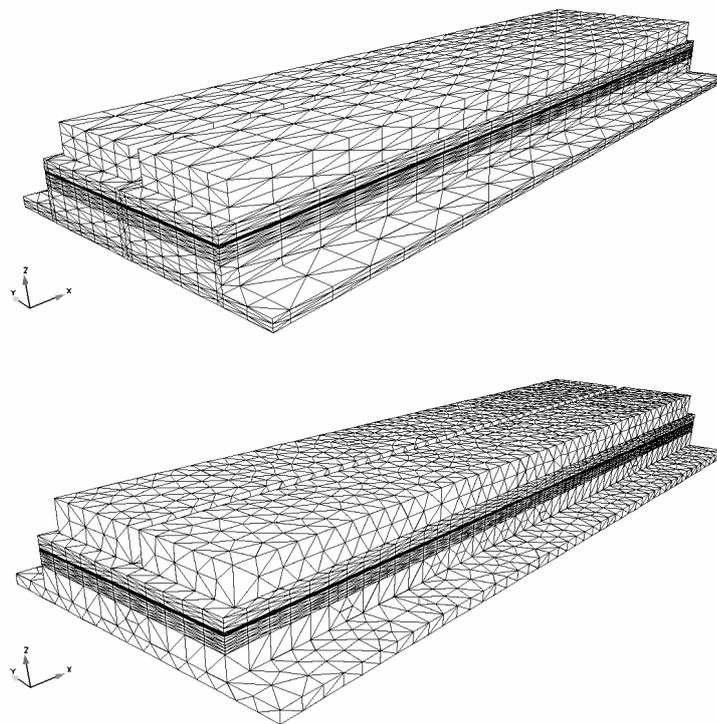


FIG. 3.3 – Maillage anisotrope structuré (en haut) et non structuré (en bas) de la cuve numérique.

3.2 Quelques résultats

Dans cette section, quelques résultats obtenus avec le code MHD évolutif¹ sur la cuve numérique sont présentés. Un des buts est de déterminer les points clés du modèle, en particulier d'évaluer l'importance de la tension de surface sur une géométrie de cuve ou d'estimer si le calcul du champ d'induction magnétique à chaque pas de temps est nécessaire ou non.

3.2.1 Solution stationnaire

Pour commencer, on s'intéresse à plusieurs types d'écoulements et aux situations stationnaires associées que l'on peut obtenir dans la cuve numérique suivant la configuration magnétique considérée. La cuve est donc soumise à un courant total $I = 100'000$ A et trois situations différentes pour le champ d'induction magnétique induit par les éléments extérieurs sont étudiées :

A_1 . *Champ uniforme* : le premier cas consiste en une situation idéalisée où l'induction magnétique extérieure est constante et verticale, i.e. où on fixe

$$\vec{B}^{ext}(\vec{x}) = (0, 0, B_z)^T, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (3.4)$$

avec $B_z = 100$ G. L'intérêt de ce cas réside dans le fait que les industriels estiment que la composante verticale du champ d'induction magnétique représente une des principales sources d'instabilité.

A_2 . *Cuves voisines* : la deuxième situation consiste à évaluer l'effet sur la stabilité des cuves voisines au domaine de calcul. Le champ extérieur \vec{B}^{ext} est donc précalculé pour un système composé de cinq cuves identiques reliées entre elles par des conducteurs filaires, et interpolé ensuite sur le maillage de la cuve numérique.

A_3 . *Configuration réaliste* : finalement le dernier cas consiste à ajouter à la situation A_2 l'effet dû au système de conducteurs internes d'une cuve réelle, en général conçu de manière à stabiliser le mouvement des fluides. Le champ d'induction \vec{B}^{hor} calculé sur une géométrie industrielle complète (montées de courant, anodes, bars, etc) est récupéré et interpolé sur la cuve numérique.

L'étude, sur le maillage structuré de la figure 3.3, des ces trois configurations par le modèle dynamique décrit au chapitre 1 mène à des solutions stationnaires dont les interfaces sont présentées dans la figure 3.4. Des images

¹Le code de calcul utilisé ici fait partie intégrante du logiciel de simulation `Aluce11` dédié à l'électrolyse de l'aluminium et présenté au chapitre 5.

3.2. QUELQUES RÉSULTATS

de l'interface vue de dessus avec une coloration en fonction de l'altitude et des courbes de niveau, en conservant la même échelle pour les 3 cas A_1 , A_2 et A_3 , montrent des différences importantes entre les interfaces stationnaires.

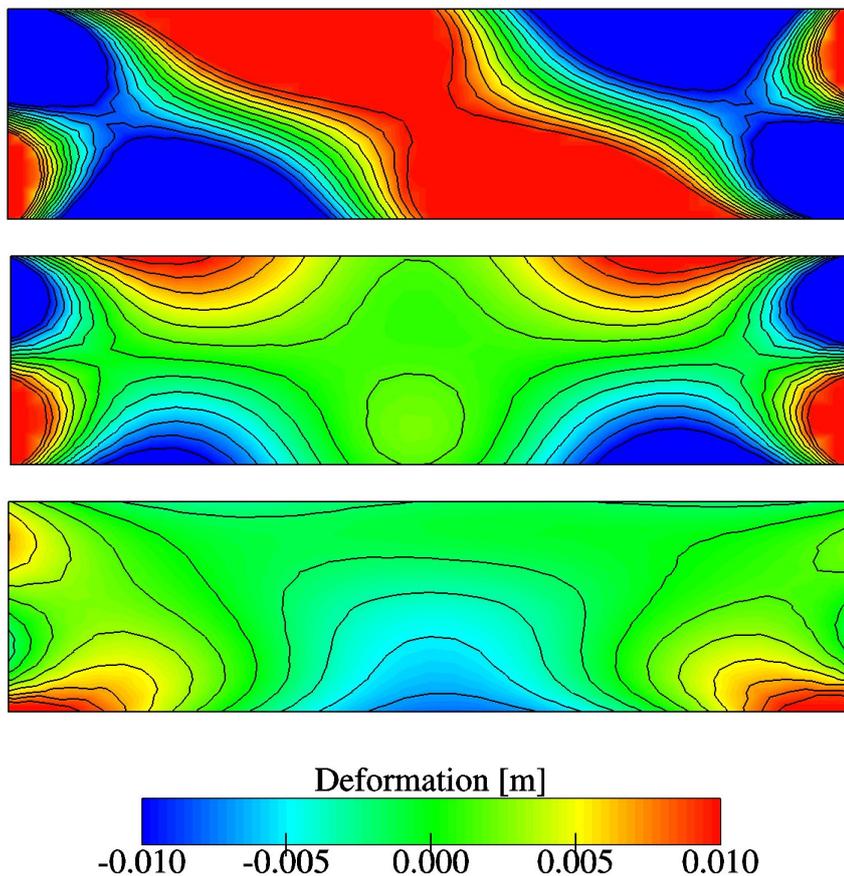


FIG. 3.4 – Interfaces stationnaires pour les situations A_1 (en haut), A_2 (au milieu) et A_3 (en bas). Vue de dessus et coloration en fonction de l'altitude, les zones bleues étant des creux et les rouges des bosses.

Les vitesses stationnaires associées aux situations A_1 à A_3 sont présentées dans la figure 3.5. Les flèches indiquent la direction et l'intensité² de la vitesse des fluides sur l'interface aluminium-bain en chaque point du maillage. Qualitativement, cette figure met en évidence les différences entre les trois types d'écoulement. Quantitativement on reporte dans la table 3.2 les intensités de vitesse maximales dans les trois situations, i.e. on mesure dans les

²la longueur des flèches est proportionnelle à la valeur de la vitesse.

trois situations A_1 , A_2 et A_3 :

$$v_{max} = \max_{\vec{x} \in \Omega} |\vec{u}_h(\vec{x})|, \quad (3.5)$$

ainsi qu'une estimation de la déformation des interfaces stationnaires, i.e. si $h(\vec{x})$ est l'altitude d'un point \vec{x} de Γ , on mesure

$$\Delta h_\Gamma = \max_{\vec{x} \in \Gamma} \vec{h}(\vec{x}) - \min_{\vec{x} \in \Gamma} \vec{h}(\vec{x}). \quad (3.6)$$

	A_1	A_2	A_3
v_{max} [cm/s]	30.38	28.82	22.72
Δh_Γ [cm]	7.52	6.33	3.00

TAB. 3.2 – Vitesses maximales et déformation de l'interface stationnaire pour les situations A_1 , A_2 et A_3 .

Précisons que numériquement un état peut être considéré comme stationnaire lorsque la vitesse moyenne de l'interface à un pas de temps est inférieure à une tolérance fixée, i.e. au temps t_n la cuve est dans un état stationnaire si

$$\frac{d\Gamma_h}{dt}(t_n) := \frac{1}{N_h^\Gamma} \sum_{i=1}^{N_h^\Gamma} \frac{|\vec{x}_i^n - \vec{x}_i^{n-1}|}{t_n - t_{n-1}} \leq \varepsilon, \quad (3.7)$$

où \vec{x}_i^n est la position du i ème noeud de l'interface au temps t_n , \vec{x}_i^{n-1} est la position du même noeud au temps t_{n-1} et ε est une constante positive fixée³. Cette quantité peut être vue comme une version discrète de la quantité

$$\frac{d\Gamma}{dt}(t) := \frac{\int_\Gamma \left| \frac{d\vec{x}}{dt} \right| d\Gamma}{\int_\Gamma d\Gamma}, \quad (3.8)$$

et son évolution est représentée graphiquement pour les trois cas étudiés sur la figure 3.6.

Ces résultats semblent démontrer que le réseau de conducteurs entourant la cuve produit bien un effet stabilisateur sur le mouvement des fluides puisque la situation A_3 est celle qui engendre les vitesses les plus faibles (environ 22 cm/s) et l'interface stationnaire la moins déformée (seulement 3 cm). D'autre part, ces observations tendent à prouver qu'un calcul précis

³Dans nos exemples $\varepsilon = 5e - 6$ soit environ 1% de $\max_t \frac{d\Gamma_h}{dt}(t)$.

3.2. QUELQUES RÉSULTATS

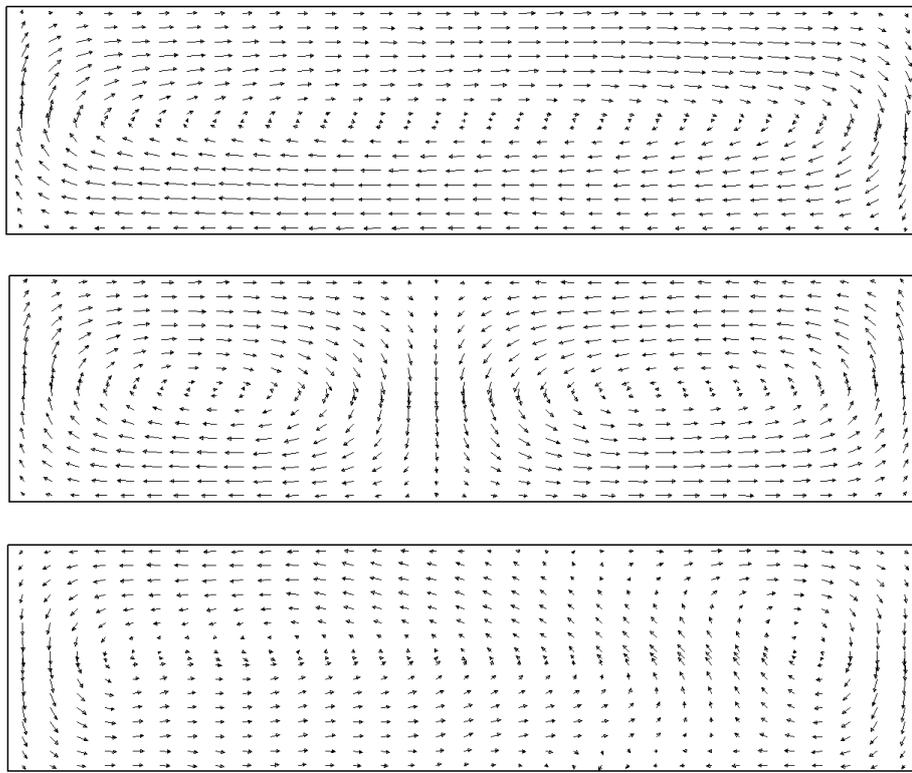


FIG. 3.5 – Vitesses stationnaires à l’interface pour les situations A_1 (en haut), A_2 (au milieu) et A_3 (en bas). Vue de dessus.

de \vec{B}^{hor} est d’une importance capitale pour obtenir une estimation réaliste du mouvement de l’interface dans une cuve d’électrolyse. A la section 5.3.2 un algorithme parallèle pour calculer efficacement ce champ au moyen de la formule de Biot-Savart (2.61) est décrit.

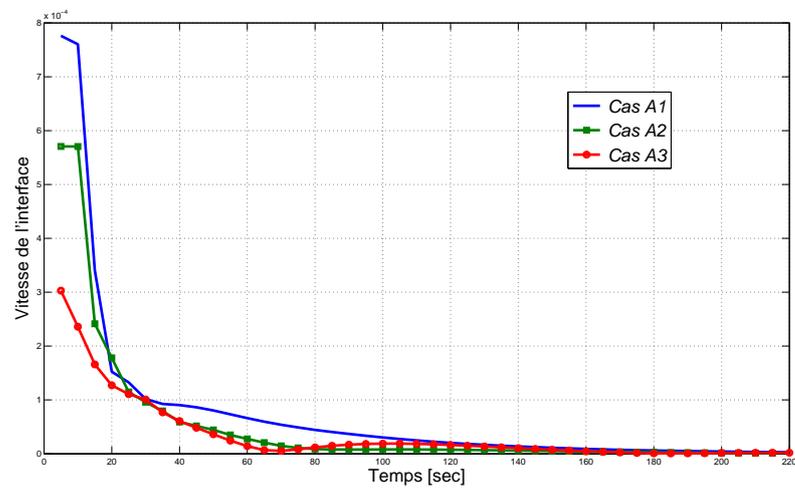


FIG. 3.6 – Vitesse moyenne de l'interface $\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)$ pour les situations A_1 , A_2 et A_3 . L'interface est considérée comme stationnaire lorsque $\frac{d\Gamma_h}{dt}(t) < 5e-6$, soit après environ 200 s.

3.2.2 Tension superficielle

Au chapitre précédent, à la section 2.5.2, l'étude du creuset cylindrique a démontré que dans le cas d'une interface dont le diamètre est de taille restreinte (de l'ordre de quelques centimètres) les effets de tension de surface jouent un rôle important. Dans la cuve numérique, étant donné que le diamètre de l'interface est 100 à 1000 fois plus grand que la longueur capillaire (1.91 cm calculé dans le chapitre précédent via la formule (2.102)), la tension superficielle ne devrait jouer aucun rôle.

Pour vérifier cette affirmation, la configuration A_1 est reprise, i.e. la cuve numérique est soumise à un courant total $\mathcal{I} = 100'000$ A et à une induction magnétique extérieure uniforme et verticale $\vec{B}^{ext} = (0, 0, 100 \text{ G})^T$, dans les situations suivantes :

B_1 . *Sans tension de surface* : les effets de tension superficielle sont négligés ;

B_2 . *Angle $\theta = \pi/2$* : le terme de bord de l'équation (1.11) est gardé nul en choisissant comme angle de contact $\theta = \pi/2$. Les effets de tension superficielle sont en partie pris en compte en considérant le coefficient de tension superficielle $\gamma = 0.5$;

B_3 . *Angle $\theta = 2\pi/3$* : une simulation est effectuée avec un coefficient $\gamma = 0.5$ et un angle de contact $\theta = 2\pi/3$, qui correspond à l'angle de contact mesuré lors de l'expérience réalisée sur le creuset (voir section 2.5.2). Dans ce cas les deux termes associés à la tension superficielle dans l'équation (1.11) devraient apporter une contribution non nulle.

Les trois configurations mènent à des interfaces stationnaires qui sont, qualitativement parlant, quasi identiques comme on peut le voir sur la figure 3.7. Pour évaluer plus précisément les différences entre les trois situations on mesure, pour plusieurs pas de temps, les quantités suivantes :

- Interface : posons $\delta h_i(t_n, \vec{x}_k)$, $i = 1, 2, 3$, $k = 1, \dots, N_h^\Gamma$ la distance signée au temps t_n entre le noeud \vec{x}_k de l'interface dans la situation B_i et l'interface initiale plane. Pour $i \neq j$ on peut alors évaluer au temps t_n l'écart relatif entre les simulations B_i et B_j comme :

$$H_{rel}^{i,j}(t_n) = \frac{\max_{k=1, \dots, N_h^\Gamma} |\delta h_i(t_n, \vec{x}_k) - \delta h_j(t_n, \vec{x}_k)|}{\max_{k=1, \dots, N_h^\Gamma} |\delta h_i(t_n, \vec{x}_k)|}. \quad (3.9)$$

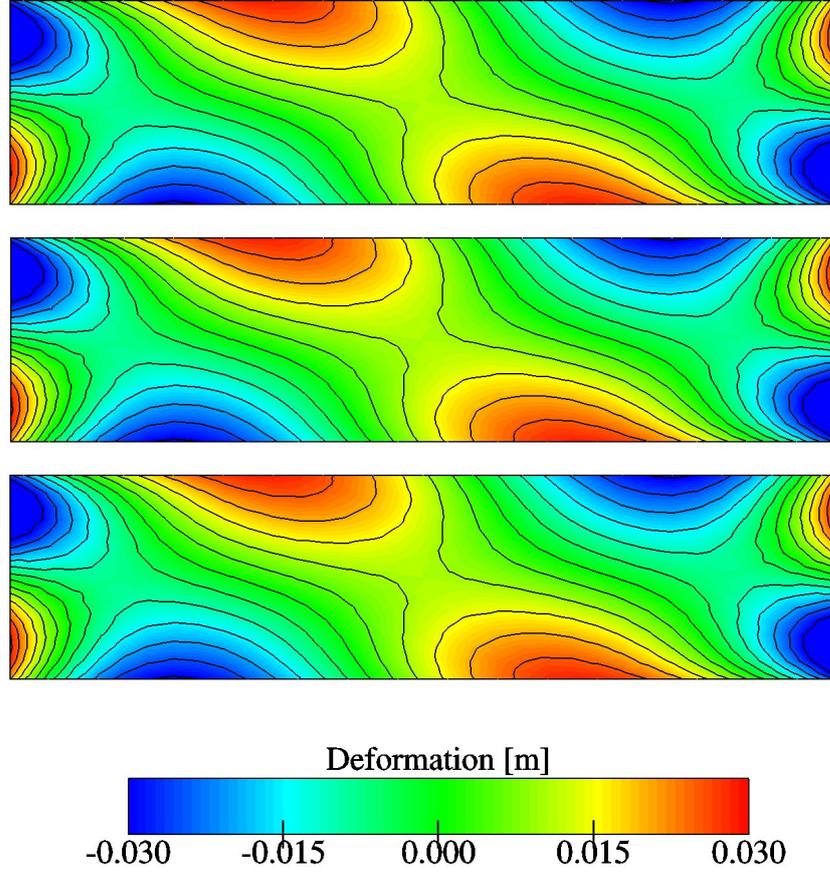


FIG. 3.7 – Interfaces stationnaires obtenues dans les situations B_1 (en haut), B_2 (au milieu) et B_3 (en bas).

- Vitesse : de façon similaire, au temps t_n pour $i \neq j$ on mesure l'écart relatif maximal dans le domaine fluide Ω entre les configurations B_i et B_j :

$$V_{rel}^{i,j}(t_n) = \frac{\max_{k=1,\dots,N_h^\Omega} |\vec{u}_i(t_n, \vec{x}_k) - \vec{u}_j(t_n, \vec{x}_k)|}{\max_{k=1,\dots,N_h^\Omega} |\vec{u}_i(t_n, \vec{x}_k)|}. \quad (3.10)$$

- Courant : idem pour le courant dans la cuve Σ , i.e.

$$J_{rel}^{i,j}(t_n) = \frac{\max_{k=1,\dots,N_h^\Sigma} |\vec{j}_i(t_n, \vec{x}_k) - \vec{j}_j(t_n, \vec{x}_k)|}{\max_{k=1,\dots,N_h^\Sigma} |\vec{j}_i(t_n, \vec{x}_k)|}. \quad (3.11)$$

3.2. QUELQUES RÉSULTATS

Les mesures de ces différentes quantités aux temps 10s, 50s, 100s, 150s et 200s sont reportées dans la table 3.3.

		10s	50s	100s	150s	200s
B1 vs B2	$H_{rel}^{1,2}$ [%]	0.141	0.317	0.383	0.393	0.390
	$V_{rel}^{1,2}$ [%]	0.1581	0.1023	0.1814	0.1703	0.1677
	$J_{rel}^{1,2}$ [%]	0.0103	0.0688	0.2098	0.3082	0.3562
B2 vs B3	$H_{rel}^{2,3}$ [%]	0	0	0	0	0
	$V_{rel}^{2,3}$ [%]	0	0	0	0	0
	$J_{rel}^{2,3}$ [%]	0	0	0	0	0

TAB. 3.3 – Comparaison entre les configurations B_1 , B_2 et B_3 .

A la vue de ces résultats il semble raisonnable de conclure que la tension de surface ne joue pas de rôle lorsque les dimensions de l'interface sont grandes par rapport à la longueur capillaire. En effet on mesure sur chaque variable des écarts relatifs entre B_1 et B_2 inférieurs à 1% durant toute l'évolution jusqu'à la solution stationnaire. Concernant l'effet de l'angle de mouillage la différence entre B_2 et B_3 est même nulle tout au long du temps. Ce résultat surprenant s'explique soit par le fait que le terme de bord de l'interface dans la forme variationnelle de l'équation de Stokes (2.17) est négligeable soit que l'effet de bord n'a pas été capté en raison d'un maillage trop grossier.

Pour avoir un aperçu complet des écarts entre les situations et vérifier qu'un état stationnaire est atteint, on mesure encore la vitesse moyenne de l'interface $\frac{d\Gamma_h}{dt}$ introduite dans l'équation (3.7) représentée en échelle semilog pour les trois situations B_1 , B_2 et B_3 sur la figure 3.8.

Les trois courbes étant quasiment confondues, on conclut donc que l'effet de tension superficielle peut être négligé dans la simulation de l'électrolyse sur des cuves aux dimensions réalistes.

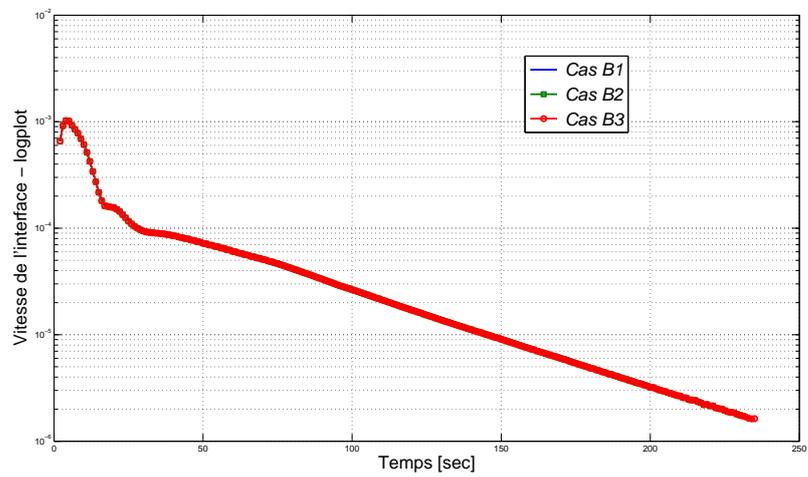


FIG. 3.8 – Vitesse moyenne de l'interface $\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)$ pour les situations B_1 , B_2 et B_3 .

3.2. QUELQUES RÉSULTATS

3.2.3 Modèles relaxés

Pour conclure ce chapitre étudions l'impact sur les résultats numériques de deux types de "relaxation" du modèle pour le calcul électromagnétique. Le but est d'estimer si des modèles simplifiés, qui exigent moins d'effort de calcul, décrivent le phénomène d'électrolyse aussi précisément que le modèle complet.

En reprenant la loi d'induction de Faraday et en introduisant un paramètre de relaxation $\xi = 0$ ou 1 , l'équation (1.19) est réécrite comme

$$\xi \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = 0. \quad (3.12)$$

Si $\xi = 0$, la dérivée temporelle du potentiel magnétique \vec{A} est ainsi éliminée dans l'équation (1.34) pour le calcul du potentiel électrique V . Cette première relaxation devrait nous permettre d'évaluer l'importance du terme $\partial \vec{B} / \partial t$ dans le cas de l'électrolyse.

La seconde "relaxation" est liée au champ d'induction magnétique $\delta \vec{B}$ engendré par la déformation de l'interface et calculé à chaque pas de temps par l'algorithme de Schwarz de la section 2.3.2. Comme avant, considérons un paramètre de relaxation $\eta = 0$ ou 1 et réécrivons l'équation (1.39) comme

$$\vec{B}(t, \vec{x}) = \vec{B}^{hor}(\vec{x}) + \eta \cdot \delta \vec{B}(t, \vec{x}), \quad \forall t > 0 \text{ et } \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (3.13)$$

Lorsque $\eta = 0$, le champ d'induction magnétique est constant en temps. L'extension naturelle de cette relaxation serait de considérer un paramètre $\eta = \eta(t)$ dépendant du temps et ainsi de recalculer l'induction magnétique $\delta \vec{B}$ chaque 10, 20 ou 100 pas de temps par exemple.

Reprenons la configuration magnétique A_1 et étudions donc les différences entre les situations suivantes :

C_1 . *Modèle complet* : on prend $(\xi, \eta) = (1, 1)$. Ce cas coïncide avec les simulations A_1 et B_1 ;

C_2 . *Terme $\partial B / \partial t$ négligé* : simulation de la cuve numérique en négligeant la dérivée temporelle de l'induction magnétique, i.e. $(\xi, \eta) = (0, 1)$;

C_3 . *Induction constante* : l'induction magnétique est choisie constante en temps, i.e. $(\xi, \eta) = (0, 0)$.

Le tableau 3.4 résume les écarts relatifs entre les trois modèles C_1 , C_2 et C_3 en reprenant les indicateurs introduits dans les équations (3.9), (3.10) et (3.11) et en ajoutant une mesure de l'écart sur l'induction magnétique dans le domaine Σ , i.e.

$$B_{rel}^{i,j}(t_n) = \frac{\max_{k=1,\dots,N_h^\Sigma} |\vec{B}_i(t_n, \vec{x}_k) - \vec{B}_j(t_n, \vec{x}_k)|}{\max_{k=1,\dots,N_h^\Sigma} |\vec{B}_i(t_n, \vec{x}_k)|}. \quad (3.14)$$

		10s	50s	100s	150s	200s
C_1 vs C_2	$H_{rel}^{1,2}$ [%]	0.1843	0.0259	0.0112	0.0068	0.0023
	$V_{rel}^{1,2}$ [%]	0.0976	0.0473	0.0194	0.0085	0.0038
	$J_{rel}^{1,2}$ [%]	0.0669	0.0044	0.0043	0.0043	0.0007
	$B_{rel}^{1,2}$ [%]	0.0133	0.0080	0.0080	0.0079	0.0079
C_1 vs C_3	$H_{rel}^{1,3}$ [%]	0.1787	1.2963	1.5786	1.7164	1.8229
	$V_{rel}^{1,3}$ [%]	0.1836	0.6461	0.7041	0.7654	0.8049
	$J_{rel}^{1,3}$ [%]	0.0719	0.2817	0.3030	0.3701	0.4552
	$B_{rel}^{1,3}$ [%]	0.7269	3.6172	3.4820	3.8338	3.9656
C_2 vs C_3	$H_{rel}^{2,3}$ [%]	0.1191	1.3195	1.5742	1.7119	1.8229
	$V_{rel}^{2,3}$ [%]	0.1672	0.6525	0.7034	0.7653	0.8049
	$J_{rel}^{2,3}$ [%]	0.0137	0.2811	0.3055	0.3709	0.4556
	$B_{rel}^{2,3}$ [%]	0.7308	3.6184	3.4825	3.8341	3.9659

TAB. 3.4 – Comparaison entre les configurations C_1 , C_2 et C_3 .

Les principales conclusions que l'on peut tirer de ce tableau sont les suivantes :

- Pour la configuration électromagnétique étudiée, les modèles relaxés donnent des résultats très proches du modèle complet ;
- La dérivée temporelle du champ d'induction magnétique semble être négligeable. En effet on observe que les écarts relatifs entre C_1 et C_2 sont toujours inférieurs à 0.2% et tendent vers 0 lorsque $t \rightarrow \infty$, i.e. lorsque la position de l'interface converge vers une situation stationnaire. Même si cette simplification apporte relativement peu de gain en temps de calcul (voir ci-dessous), le schéma numérique peut cependant gagner en stabilité puisqu'un terme "explicite" pour la dérivée

3.2. QUELQUES RÉSULTATS

temporelle du potentiel magnétique vectoriel \vec{A}_h est ainsi éliminé de la formulation (2.54) et de l'équation (2.55) ;

- Concernant le terme $\delta\vec{B}(t, \vec{x})$, même si l'écart entre les cas C_1 et C_3 est peu marqué (moins de 5%), il faut noter que l'influence de ce terme est proportionnelle à la déformation de l'interface au cours du temps par rapport à sa position horizontale initiale. Ainsi, il peut être important à considérer lors d'étude de cas instables ou si l'interface stationnaire est fortement déformée. Néanmoins, même dans ces situations, le calcul de ce terme à chaque pas de temps semble inutile.

Estimons à présent le gain réel en temps de calcul que peuvent apporter ces simplifications du modèle magnétique. On reporte dans le tableau 3.5 une moyenne de la charge de calcul par pas de temps calculée sur 230 itérations de l'algorithme évolutif. Notons que le même maillage est utilisé pour les trois situations C_1 , C_2 et C_3 , avec un paramètre de discrétisation en espace $h = 0.2$ m mais des éléments nettement plus fins dans la direction Oz . En particulier on compte 20 couches d'éléments dans l'aluminium liquide (soit une hauteur de maille de 0.01 m), 20 couches d'éléments entre l'interface et le bas des anodes (soit une hauteur de maille de 0.002 m) et 10 couches d'éléments entre le bas des anodes et l'interface air/bain (soit une hauteur de maille de 0.016 m). Globalement le maillage de Σ utilisé ici compte 38'891 noeuds et 173'800 tétraèdres.

Modèle magnétique	Temps CPU/pas de temps	Rapport avec C_1
C_1 (complet)	713 sec	100.00 %
C_2 (sans $\partial\vec{B}/\partial t$)	674 sec	94.53 %
C_3 (\vec{B} constant)	356 sec	49.92 %

TAB. 3.5 – Comparaison du temps de calcul par pas de temps entre les différents modèles magnétiques C_1 , C_2 et C_3 . Valeurs moyennes calculées sur 230 pas de temps.

Aux vues de ces résultats une conclusion s'impose : environ 50% du temps de calcul total peut être économisé en considérant le modèle simplifié C_3 pour une différence relative avec le modèle complet C_1 de moins de 5% sur les résultats numériques.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, une “cuve numérique” proche d’une cuve réelle a été introduite et utilisée pour tester et évaluer les points clés du modèle MHD évolutif.

Dans cette situation simplifiée, conçue du point de vue géométrique pour obtenir une répartition des courants et des écoulements similaires à ceux observables sur un modèle de cuve utilisée dans l’industrie, diverses simulations ont été effectuées et des solutions stationnaires ont été obtenues.

Numériquement parlant, il semble que si le diamètre de l’interface est 100 à 1000 fois plus grand que la longueur capillaire, la tension de surface ne joue plus de rôle important dans les calculs et peut être négligée.

D’autre part, des modèles simplifiés construits à partir du modèle introduit au chapitre 1 ont démontré que le calcul du champ d’induction magnétique $\delta\vec{B}$ à chaque pas de temps peut être effectué moins souvent et que la prise en compte de la dérivée temporelle $\partial\vec{B}/\partial t$ dans la loi de Faraday ne semble pas essentielle. Un gain d’environ 50% en temps de calcul est alors envisageable pour une différence relative de moins de 5% sur les résultats numériques.

Chapitre 4

Stabilité linéaire et dynamique

Dans ce chapitre on introduit la notion de stabilité dynamique liée à la simulation du mouvement de l'interface à partir du modèle évolutif présenté dans les chapitres précédents.

Dans l'industrie, pour déterminer si une cuve fonctionne dans un régime stable ou instable, des mesures de potentiel au niveau de chaque anode sont effectuées en temps réel. De fortes variations du potentiel anodique sont caractéristiques d'un dysfonctionnement qui peut être dû par exemple à une poche de gaz qui se forme sous l'anode, à une couche solide qui isole une partie de la cathode ou à un mouvement instable de l'interface aluminium-bain. Dans ce cas diverses actions peuvent être entreprises pour corriger le problème, typiquement en forçant le gaz à s'échapper ou en ajustant la distance entre anode et interface ¹.

Du point de vue numérique, Descloux, Flück et Romerio (voir [10, 11]) ont défini une notion de stabilité, dite "linéaire", qui consiste à calculer une solution stationnaire du problème MHD et les valeurs propres du problème linéarisé autour de cette solution stationnaire. La position des valeurs propres dans le plan complexe est caractéristique de la naissance d'instabilité. Plus précisément, le signe de la partie imaginaire des valeurs propres détermine si une petite perturbation de la position stationnaire aura tendance à s'amplifier ou à s'amortir. Une des principales limitations de ce modèle réside dans le fait que les aspects non-linéaires du problème sont négligés pour le calcul des valeurs propres.

¹Les anodes sont montées sur des vérins et peuvent être déplacées verticalement.

Notre but ici est d'introduire un critère de stabilité pertinent pour le modèle dynamique permettant une comparaison dans le cas de la cuve numérique avec le code de stabilité linéaire de Descloux, Flück et Romerio. Pour faciliter la lecture, les équations et algorithmes pour le calcul de la stabilité linéaire sont repris. Sans entrer dans les détails, le problème aux valeurs propres permettant d'évaluer la stabilité d'une solution stationnaire est rappelé et des pistes pour sa résolution numérique sont exposées.

4.1 Modèle stationnaire et stabilité linéaire

Pour mieux comprendre le principe de stabilité linéaire, considérons un exemple général. Soit $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ un opérateur régulier² et $\vec{u} : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^N$ une application inconnue qui dépend du temps. On considère le problème suivant :

$$\frac{d\vec{u}}{dt}(t) = \vec{F}(\vec{u}(t)), \quad \forall t \in (0, \infty). \quad (4.1)$$

Une solution stationnaire \vec{u} du problème (4.1) est indépendante du temps et vérifie

$$\vec{F}(\vec{u}) = 0. \quad (4.2)$$

L'idée à la base de la stabilité linéaire est alors de considérer de petites perturbations de la solution stationnaire de la forme

$$\vec{U}(t) = \vec{u} + e^{i\omega t} \delta\vec{U}, \quad (4.3)$$

avec $\omega \in \mathbb{C}$ et qui vérifient, pour des temps t petits, le problème linéarisé autour de la solution stationnaire suivant (dérivant de l'équation (4.1)) :

$$\frac{d\vec{U}}{dt}(t) = \vec{F}(\vec{u}) + e^{i\omega t} D\vec{F}(\vec{u})\delta\vec{U}, \quad (4.4)$$

où $D\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^N, \mathbb{R}^N)$ est la dérivée au sens de Fréchet de l'opérateur \vec{F} qui, à un vecteur de \mathbb{R}^N , fait correspondre un opérateur linéaire de \mathbb{R}^N vers \mathbb{R}^N qui peut être représenté par une matrice. Utilisant le fait que la solution stationnaire \vec{u} vérifie (4.2) et que la dérivée temporelle de \vec{U} est connue, on obtient finalement le problème aux valeurs propres suivant :

$$D\vec{F}(\vec{u})\delta\vec{U} = i\omega \delta\vec{U}. \quad (4.5)$$

En supposant que l'on puisse résoudre le problème (4.5), le signe de la partie imaginaire des valeurs propres ω détermine le comportement temporel de la perturbation $e^{i\omega t} \delta\vec{U}$. En effet, si les valeurs propres s'écrivent $\omega = \omega_R + i\omega_I$ avec ω_R et ω_I réels, on a alors

$$e^{i\omega t} = e^{i\omega_R t} \cdot e^{-\omega_I t}, \quad (4.6)$$

²Disons par exemple $C^1(\mathbb{R}^N)$.

4.1. MODÈLE STATIONNAIRE ET STABILITÉ LINÉAIRE

et donc si ω_I est *négligé* la perturbation va croître au cours du temps. Dans ce cas, la solution stationnaire \vec{u} est considérée instable au sens linéaire du terme.

4.1.1 Problème MHD stationnaire

Revenons à présent à l'électrolyse de l'aluminium. Au chapitre 1, les équations de la MHD évolutives ont été introduites ; pour faciliter la lecture, elles sont rappelées ici. On cherche la vitesse des fluides \vec{u} , la pression p , la fonction $\tilde{\varphi}$, le champ électrique \vec{E} , la densité de courant \vec{j} et le champ d'induction magnétique \vec{B} qui vérifient

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)) = \vec{f}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{dans } \Omega_{al}(t) \cup \Omega_{el}(t), \\ \text{dans } \Omega_{al}(t) \cup \Omega_{el}(t), \end{array} \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \tilde{\varphi} = 0, \quad \text{dans } \Omega, \\ \Omega_{al}(t) = \{\vec{x} \in \Omega \mid \tilde{\varphi}(t, \vec{x}) < 0\}, \quad \Omega_{el}(t) = \{\vec{x} \in \Omega \mid \tilde{\varphi}(t, \vec{x}) > 0\}, \\ \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = 0, \\ \vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \mu_0 \vec{j}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ \text{dans } \mathbb{R}^3, \end{array} \\ \vec{j} = \sigma (\vec{E} + \vec{u} \wedge \vec{B}), \quad \text{dans } \Sigma, \end{array} \right. \quad (4.7)$$

avec les conditions d'interface³ et de bord suivantes pour le problème hydrodynamique

$$\left\{ \begin{array}{l} [\vec{u}] = 0, \\ [\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) \vec{n}] = 0, \\ \vec{u} = 0, \\ \vec{u} \cdot \vec{n} = 0, \\ \boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) \cdot \vec{t}_i = 0, \quad i = 1, 2, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{sur } \Gamma(t), \\ \text{sur } \Gamma(t), \\ \text{sur } \Gamma_D, \\ \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_D, \\ \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_D, \end{array} \quad (4.8)$$

³En guise de simplification la tension de surface est négligée ici.

et les conditions limites suivantes pour le problème électromagnétique

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{j} \cdot \vec{n} = -\mathcal{I}/|\Gamma_{in}|, & \text{sur } \Gamma_{in}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} = \mathcal{I}/|\Gamma_{out}|, & \text{sur } \Gamma_{out}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} = 0, & \text{sur } \partial\Sigma \setminus \overline{\Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}}, \\ |\vec{B}(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-2}), & \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \end{array} \right. \quad (4.9)$$

Les systèmes (4.7), (4.8) et (4.9) réunis forment, après discrétisation, l'équivalent du problème évolutif (4.1). Pour écrire le problème stationnaire associé on remarque tout d'abord que, pour les équations de Maxwell statiques, le champ électrique dérive d'un potentiel électrique scalaire, i.e. $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$, et ainsi la loi d'Ohm dans (4.7) s'écrit

$$\vec{j} = \sigma \left(-\vec{\nabla}V + \vec{u} \wedge \vec{B} \right) \quad \text{dans } \Sigma. \quad (4.10)$$

De plus, si l'interface $\Gamma(t)$ est paramétrée par l'équation $z = h(t, x, y)$ où $h : [0, \infty) \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction régulière, alors la fonction $\tilde{\varphi}$ est donnée par l'équation

$$\tilde{\varphi}(t, x, y, z) = z - h(t, x, y), \quad \forall (x, y, z) \in \Omega \text{ et } t \geq 0, \quad (4.11)$$

et son équation de transport peut être réécrite en fonction de h comme

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(z - h) = 0. \quad (4.12)$$

Avec ces nouvelles notations, le problème stationnaire associé aux systèmes (4.7), (4.8) et (4.9) s'écrit : trouver la vitesse \vec{u} , la pression p , la fonction h , le potentiel électrique V , la densité de courant \vec{j} et le champ

4.1. MODÈLE STATIONNAIRE ET STABILITÉ LINÉAIRE

d'induction magnétique \vec{B} indépendants du temps et qui vérifient

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)) = \vec{j} \wedge \vec{B} + \rho\vec{g}, \quad \text{dans } \underline{\Omega}_{al} \cup \underline{\Omega}_{el}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \quad \text{dans } \underline{\Omega}_{al} \cup \underline{\Omega}_{el}, \\ \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(z - \underline{h}) = 0, \quad \text{dans } \Omega, \\ \underline{\Omega}_{al} = \{\vec{x} \in \Omega \mid z < \underline{h}(x, y)\}, \quad \underline{\Omega}_{el} = \{\vec{x} \in \Omega \mid z > \underline{h}(x, y)\}, \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \mu_0 \vec{j}, \quad \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ \vec{j} = \sigma(-\vec{\nabla}V + \vec{u} \wedge \vec{B}), \quad \text{dans } \Sigma, \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (4.13)$$

avec les conditions d'interface (sans tension de surface) et de bord suivantes pour le problème hydrodynamique

$$\left\{ \begin{array}{l} [\vec{u}] = 0, \quad \text{sur } \underline{\Gamma}, \\ [\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) \cdot \vec{n}] = 0, \quad \text{sur } \underline{\Gamma}, \\ \vec{u} = 0, \quad \text{sur } \Gamma_D, \\ \vec{u} \cdot \vec{n} = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_D, \\ \boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) \cdot t_i = 0, \quad i = 1, 2, \quad \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_D, \end{array} \right. \quad (4.14)$$

et les conditions limites et d'interface suivantes pour le problème électromagnétique

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{j} \cdot \vec{n} = -\mathcal{I}/|\Gamma_{in}|, \quad \text{sur } \Gamma_{in}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} = \mathcal{I}/|\Gamma_{out}|, \quad \text{sur } \Gamma_{out}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} = 0, \quad \text{sur } \partial\Sigma \setminus \overline{\Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}}, \\ [V] = 0, \quad \left[\sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} \right] = 0, \quad \text{sur } \underline{\Gamma}, \\ |\vec{B}(\vec{x})| = \mathcal{O}(|\vec{x}|^{-2}), \quad \text{lorsque } |\vec{x}| \rightarrow \infty. \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Remarque 21 Sous forme stationnaire, l'équation (4.12) s'écrit

$$\underline{\vec{u}} \cdot \vec{\nabla}(z - \underline{h}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \underline{\vec{u}} \cdot \left(\vec{e}_z - \frac{\partial h}{\partial x} \vec{e}_x - \frac{\partial h}{\partial y} \vec{e}_y \right) = 0, \quad (4.16)$$

avec $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ le système d'axe euclidien dans \mathbb{R}^3 . D'un autre côté puisque l'interface $\underline{\Gamma}$ est paramétrée par $z = \underline{h}(x, y)$, la normale (non unitaire) à la surface est donnée par

$$\vec{n} = \left(\vec{e}_x + \frac{\partial h}{\partial x} \vec{e}_z \right) \wedge \left(\vec{e}_y + \frac{\partial h}{\partial y} \vec{e}_z \right) = \vec{e}_z - \frac{\partial h}{\partial x} \vec{e}_x - \frac{\partial h}{\partial y} \vec{e}_y. \quad (4.17)$$

Ainsi les équations (4.16) et (4.17) garantissent la condition d'immiscibilité sur l'interface :

$$\underline{\vec{u}} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sur } \underline{\Gamma}. \quad (4.18)$$

Remarque 22 La loi d'Ampère statique assure que

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad \text{dans } \Sigma \quad \Rightarrow \quad \left[\vec{j} \cdot \vec{n} \right] = 0 \quad \text{sur } \underline{\Gamma} \quad \Rightarrow \quad \left[\sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} \right] = 0 \quad \text{sur } \underline{\Gamma}. \quad (4.19)$$

Remarque 23 Pour tenir compte des effets de turbulence anisotrope induits par la géométrie des cuves d'électrolyse, le tenseur de viscosité suivant est utilisé pour résoudre le problème stationnaire :

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} 10 & 10 & 0.5 \\ 10 & 10 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Les coefficients de cette matrice sont issus d'une étude théorique et utilisés dans le cadre des articles de Descloux, Flück et Romerio (cf. [10, 11]).

La solution stationnaire du problème (4.13) à (4.15) est calculée par un algorithme itératif qui consiste à résoudre le problème MHD pour une interface donnée en relaxant la condition d'interface relative au saut des contraintes dans la direction normale, i.e. on se donne Γ^0 paramétrée par $z = h^0(x, y)$, et pour $k = 0, 1, 2, \dots$ on applique l'algorithme suivant :

- On résout le problème MHD (4.13) à (4.15) sur les domaines

$$\Omega_{al}^k = \left\{ \vec{x} \in \Omega \mid z < h^k(x, y) \right\}, \quad \Omega_{el}^k = \left\{ \vec{x} \in \Omega \mid z > h^k(x, y) \right\}, \quad (4.21)$$

en imposant

$$[\underline{\vec{u}}] = 0 \quad \text{et} \quad \left[(\boldsymbol{\tau} \vec{n}) \cdot \vec{t}_j \right] = 0, \quad \text{sur } \Gamma^k, \quad j = 1, 2, \quad (4.22)$$

où \vec{t}_1, \vec{t}_2 sont des tangentes unitaire sur Γ^k orthogonales à la normale \vec{n} .

4.1. MODÈLE STATIONNAIRE ET STABILITÉ LINÉAIRE

- On corrige ensuite la position de l'interface en remplaçant sa paramétrisation par

$$h^{k+1} = h^k - \frac{[(\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}] + C}{[f_z]}, \quad (4.23)$$

où f_z est la composante verticale des forces $\vec{f} = \rho\vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$ et C est une constante qui garantit que

$$\iint h^{k+1}(x, y) \, dx dy = \iint h^k(x, y) \, dx dy. \quad (4.24)$$

Ces deux étapes sont répétées jusqu'à convergence.

Remarque 24 *A chaque itération du problème stationnaire la forme des anodes est modifiée en fonction de la déformation de l'interface de sorte que la distance entre anodes et métal reste constante.*

4.1.2 Linéarisation

Suivant le déroulement général introduit en début de chapitre, posons à présent les perturbations de la solution stationnaire suivantes :

$$\begin{cases} \vec{U}(x, t) = \underline{\vec{u}}(x) + e^{i\omega t} \delta\vec{U}(x), \\ P(x, t) = \underline{p}(x) + e^{i\omega t} \delta P(x), \\ H(x, t) = \underline{h}(x) + e^{i\omega t} \delta H(x), \\ V(x, t) = \underline{V}(x) + e^{i\omega t} \delta V(x), \\ \vec{J}(x, t) = \underline{\vec{j}}(x) + e^{i\omega t} \delta\vec{J}(x), \\ \vec{B}(x, t) = \underline{\vec{B}}(x) + e^{i\omega t} \delta\vec{B}(x), \end{cases} \quad (4.25)$$

où ω et les champs dont la notation commence par δ sont complexes. Négligent le terme de viscosité dans les équations de Navier-Stokes, Descloux, Flück et Romerio (voir [10, 11]) posent le problème linéarisé suivant :

$$\begin{cases} i\omega\rho\delta\vec{U} + \vec{\nabla}\delta P = \vec{F}(\delta\vec{U}, \delta H), & \text{dans } \underline{\Omega}_{al} \cup \underline{\Omega}_{el}, \\ \vec{\nabla} \cdot \delta\vec{U} = 0, & \text{dans } \underline{\Omega}_{al} \cup \underline{\Omega}_{el}, \\ i\omega\alpha\delta H - \delta\vec{U} \cdot \vec{n} = \alpha G(\delta\vec{U}, \delta H), & \text{sur } \underline{\Gamma}, \\ [\delta\vec{U} \cdot \vec{n}] = 0, & \text{sur } \underline{\Gamma}, \\ \beta[\delta P] = \alpha\delta H, & \text{sur } \underline{\Gamma}, \\ \delta\vec{U} \cdot \vec{n} = 0, & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (4.26)$$

avec

$$\begin{aligned}
 \vec{F}(\delta\vec{U}, \delta H) &= \delta\vec{J} \wedge \vec{B} + \vec{j} \wedge \delta\vec{B} - \rho (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \delta\vec{U} - \rho (\delta\vec{U} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}, \\
 G(\delta\vec{U}, \delta H) &= \left(\partial_z \vec{u} \cdot \vec{\nabla} (z - \underline{h}) \right) \delta H - \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \delta H, \\
 \alpha &= \left(1 + (\partial_x \underline{h})^2 + (\partial_y \underline{h})^2 \right)^{-1/2}, \\
 \beta &= -\alpha / [\partial_z p]_{\Gamma}.
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

En fait, sans entrer dans les détails, on peut montrer que pour $(\delta\vec{U}, \delta H)$ donnés, les variables électromagnétiques $(\delta V, \delta\vec{J}, \delta\vec{B})$ peuvent être calculées explicitement, c'est pourquoi le problème précédent s'écrit en fonction des variables hydrodynamiques uniquement.

Cette formulation n'est pas évidente à obtenir et n'est pas l'objet de ce document, c'est pourquoi les étapes de calcul ne sont pas précisées et on renvoie à [10, 11] pour une explication plus détaillée. Signalons juste que ce dernier problème peut être résolu par une méthode de puissance inverse avec shift, programmée dans le logiciel de simulation `Aluce11` décrit au chapitre 5.

Le problème (4.26) possède un spectre de cardinalité infinie. Cependant, pour une étude pratique de stabilité, on s'intéresse en général uniquement aux 12 modes de plus basse fréquence. Un résultat typique est donc un n -uplet ($n \approx 12$) de valeurs propres complexes dont le signe des parties imaginaires indique si une solution stationnaire est stable ou instable.

En principe on a vu que s'il existe une valeur propre avec partie imaginaire $\omega_I < 0$, l'état stationnaire est considéré comme instable. Cependant pour reprendre en compte les effets visqueux qui ont été négligés dans le problème linéarisé, on dira qu'une solution stationnaire est instable s'il existe une valeur propre avec partie imaginaire ω_I inférieure à un seuil dit de Moreau-Evans donné. Cette constante est en général déterminée par l'expérience et peut changer d'une cuve à l'autre. Cependant comme les dimensions de la cuve numérique dérivent d'un modèle de cuve existant, on peut estimer dans ce cas que le seuil de Moreau-Evans est : $-0.01 < \varepsilon_{ME} < -0.006$.

Notons finalement que pour améliorer la convergence de l'algorithme de résolution par puissance inverse, des étapes de *continuation* sont effectuées, c'est à dire que le problème (4.26) est résolu de manière itérative en augmentant successivement la valeur des termes sources \vec{F} et \vec{G} . Cette technique permet de construire une suite de *shifts* de plus en plus proche des valeurs propres à calculer et d'améliorer considérablement la vitesse de convergence de l'algorithme. Étant donné que, pour une cuve de forme parallélépipédique, les modes gravitationnels sont calculables explicitement, ils constituent un point de départ idéal pour l'algorithme de continuation.

4.2 Stabilité linéaire vs stabilité dynamique

Le modèle de stabilité linéaire ayant été introduit, nous allons à présent tenter de comparer les études de stabilité au sens linéaire et dynamique du terme.

4.2.1 Critère de stabilité dynamique

On a vu précédemment que du point de vue de la stabilité linéaire une cuve est définie comme instable lorsqu'une ou plusieurs valeurs propres du problème (4.26) dépassent un seuil donné. La qualité de ce critère dépend essentiellement de la capacité à fixer précisément le seuil de Moreau-Evans en se basant sur l'expérience.

Du point de vue dynamique une cuve peut être considérée instable si une petite perturbation de l'interface stationnaire engendre un mouvement qui ne s'atténue pas au cours du temps. En pratique, pour déterminer au moyen du modèle évolutif si une cuve est stable ou instable, on peut procéder de la manière suivante :

- On calcule une solution stationnaire du problème MHD évolutif en utilisant l'algorithme (4.21) à (4.24).
- On introduit cette solution (avec une petite perturbation⁴) comme condition initiale du problème évolutif.
- En principe, puisque l'interface n'est pas exactement en position stationnaire, un mouvement oscillatoire se crée. Si les oscillations s'atténuent au cours du temps, la solution stationnaire est *dynamiquement stable*, sinon elle est *dynamiquement instable*.

Pour quantifier l'évolution des oscillations de l'interface on peut reprendre la notion de *vitesse moyenne de l'interface* définie précédemment dans l'équation (3.7) et rappelée ici

$$\frac{d\Gamma_h}{dt}(t_n) := \frac{1}{N_h^\Gamma} \sum_{i=1}^{N_h^\Gamma} \frac{|\bar{x}_i^m - \bar{x}_i^{m-1}|}{t_n - t_{n-1}}. \quad (4.28)$$

Si une perturbation de l'interface stationnaire s'atténue au cours du temps alors cette quantité tend vers 0. Au contraire si les oscillations de l'interface autour de sa position stationnaire sont entretenues (voire amplifiées) alors la vitesse moyenne de l'interface reste non nulle.

⁴En général l'erreur d'approximation numérique commise sur la position stationnaire est une perturbation suffisante.

Étant donné ces considérations, un critère de stabilité dynamique peut consister à tracer la courbe $y(t) = \log\left(\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)\right)$ sur une longue période de temps et à calculer, par exemple par une régression linéaire, la pente moyenne p_m de $y(t)$, i.e. on calcule p_m et $C \in \mathbb{R}$ tels que

$$y(t) = p_m t + C \approx \log\left(\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)\right) \Leftrightarrow \frac{d\Gamma_h}{dt}(t) \approx e^C e^{p_m t}. \quad (4.29)$$

Si p_m est négatif alors l'énergie cinétique de l'interface diminue au cours du temps comme $e^{p_m t}$ et la solution stationnaire est *dynamiquement stable*. Dans le cas contraire, les perturbations de l'interface stationnaire ont tendance à croître au cours du temps et la solution stationnaire est donc *dynamiquement instable*.

4.2.2 Résultats numériques

Dans cette section, on présente une étude de stabilité effectuée sur la cuve numérique soumise aux conditions électromagnétiques suivantes :

- Courant électrique : 100 kA, 200 kA et 300 kA.
- Induction magnétique : comme dans le chapitre précédent, on impose une induction magnétique extérieure uniforme et verticale :

$$\vec{B}^{ext}(\vec{x}) = (0, 0, B_z)^T, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3,$$

avec $B_z = 10, 20, 30$ et 40 G.

Pour chaque configuration, une solution stationnaire est calculée en effectuant 10 itérations de l'algorithme (4.21) à (4.24). Les solutions stationnaires obtenues sont ensuite introduites dans un des deux codes suivants :

1. *Code de stabilité linéaire* : le problème aux valeurs propres linéarisé (4.26) est résolu en partant des 12 premiers modes gravitationnels et en effectuant 40 pas de continuation sur les termes sources \vec{F} et \vec{G} . Le tracé des valeurs propres à chaque itération de continuation forme des trajectoires dans le plan complexe, représentées sur les figures 4.1 (100 kA), 4.2 (200 kA) et 4.3 (300 kA). Visuellement la cuve est instable si une trajectoire dépasse les trois droites horizontales représentant trois seuils de Moreau-Evans possibles, soit $-6e-3$, $-8e-3$ et $-1e-2$;

4.2. STABILITÉ LINÉAIRE VS STABILITÉ DYNAMIQUE

2. *Code évolutif* : la solution stationnaire calculée est utilisée comme condition initiale de l'algorithme évolutif décrit dans les chapitres 1 et 2. Des oscillations de l'interface sont observées et la vitesse moyenne de l'interface au cours du temps est calculée. L'évolution temporelle de la fonction $\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)$ est représentée sur la figure 4.4 avec une échelle logarithmique sur l'axe des ordonnées. Une régression linéaire est également appliquée sur chaque courbe pour déterminer la pente moyenne de croissance p_m définie dans l'équation (4.29). La cuve est instable si p_m est positif, i.e. si la droite de régression est croissante.

Remarque 25 *La solution numérique calculée par le code stationnaire n'est pas complètement stationnaire dans le code évolutif. La principale raison à ce phénomène vient du fait que dans le modèle stationnaire, contrairement au modèle évolutif, la condition*

$$\left[(\boldsymbol{\tau} \vec{n}) \cdot \vec{n} \right] = 0, \quad \text{sur } \Gamma, \quad (4.30)$$

n'est pas imposée sous forme faible mais vérifiée de mieux en mieux au cours des itérations de l'algorithme (4.21) à (4.24). De plus, la convergence de cet algorithme n'étant pas monotone il est difficile de connaître a priori le nombre d'itérations à effectuer pour obtenir une forme optimale de l'interface qui minimise le saut des forces normales.

Remarque 26 *Comme mentionné dans la remarque 23, le code stationnaire dispose, en guise de modèle de turbulence, du tenseur de viscosité*

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} 10 & 10 & 0.5 \\ 10 & 10 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

L'utilisation de ces valeurs dans le code évolutif induit une diffusion très importante qui élimine toutes les oscillations du mouvement de l'interface. Pour l'étude de stabilité réalisée ici, on préfère donc utiliser la forme anisotrope du modèle de turbulence introduite à la section 2.1.3, i.e.

$$\mu_{ij} = \mu_L + \rho \alpha_t h^2 |\epsilon_{ij}(\vec{u}_h)|, \quad \forall i, j = 1, 2, 3. \quad (4.32)$$

Pour limiter au maximum la diffusion, la viscosité laminaire est choisie égale à la viscosité réelle de l'aluminium (2e-3 Pa.s) et, dans un premier temps, on prend comme coefficient de turbulence

$$\alpha_t = 0.002. \quad (4.33)$$

Notons que dans la pratique il convient de calibrer ce paramètre avec des mesures de vitesse par exemple pour s'assurer une bonne prise en compte de la turbulence.

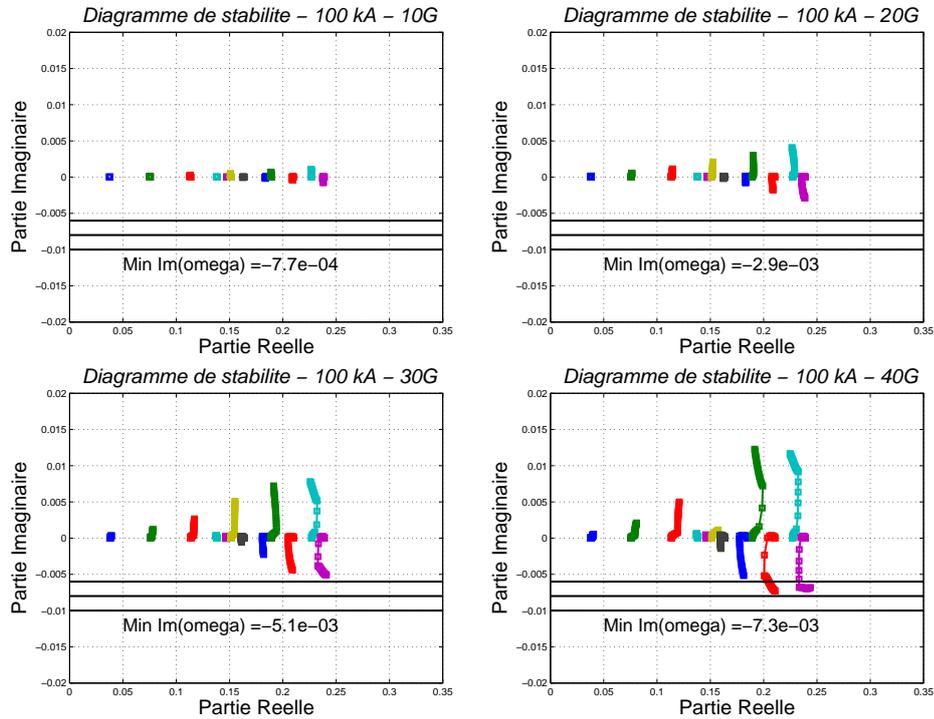


FIG. 4.1 – Estimation du seuil de stabilité linéaire. Diagrammes de stabilité pour un courant de 100 kA et des champs d’induction magnétique de 10 G, 20 G, 30 G et 40 G. Les droites représentent trois seuils de Moreau-Evans possibles $-6e-3$, $-8e-3$ et $-1e-2$.

Pour faciliter la compréhension et synthétiser les informations on reporte dans la table 4.1 la plus petite partie imaginaire des valeurs propres du problème de stabilité linéaire pour chaque valeur de courant et d’induction magnétique.

En considérant un seuil de Moreau-Evans $\varepsilon_{ME} = -0.01$ on conclut que 7 configurations électromagnétiques induisent des solutions stationnaires linéairement stables (100kA-10G, 100kA-20G, 100kA-30G, 100kA-40G, 200kA-10G, 200kA-20G et 300kA-10G) tandis que les 5 autres (200kA-30G, 200kA-40G, 300kA-20G, 300kA-30G et 300kA-40G) sont linéairement instables.

Du point de vue dynamique on procède de la même façon en reportant dans la table 4.2 les pentes moyennes des courbes de régression associées aux vitesses moyennes de l’interface. Dans ce cas on conclut que 3 situations sont instables (200kA-40G, 300kA-30G et 300kA-40G) tandis que les 9 autres sont stables.

4.2. STABILITÉ LINÉAIRE VS STABILITÉ DYNAMIQUE

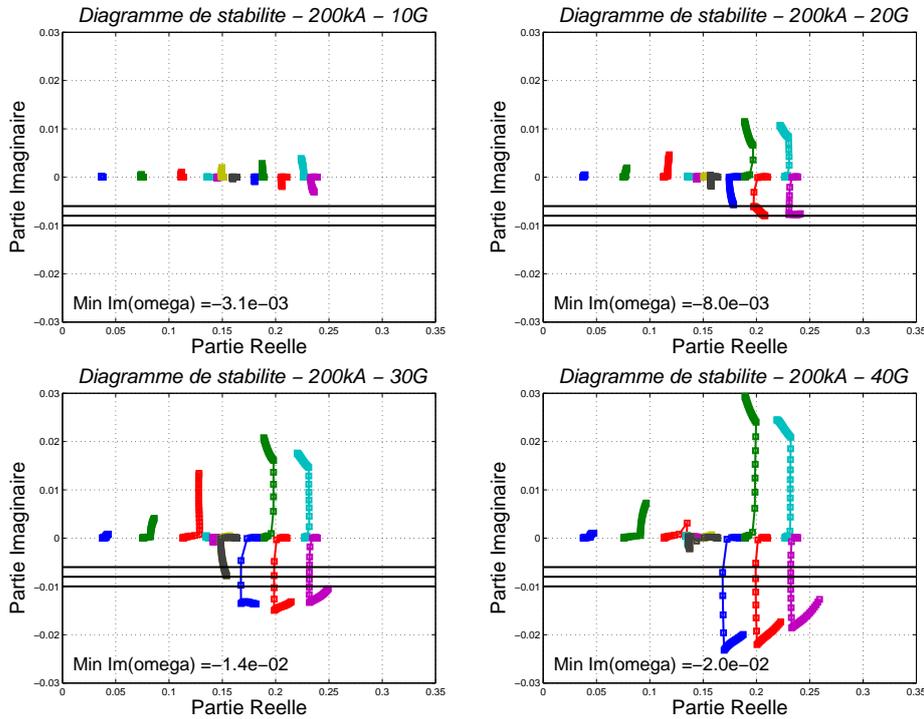


FIG. 4.2 – Estimation du seuil de stabilité linéaire. Diagrammes de stabilité pour un courant de 200 kA et des champs d’induction magnétique de 10 G, 20 G, 30 G et 40 G. Les droites représentent trois seuils de Moreau-Evans possibles -6×10^{-3} , -8×10^{-3} et -1×10^{-2} .

Sur les 12 configurations étudiées, les deux modèles de stabilité diffèrent uniquement dans deux situations. Étant donné les erreurs numériques commises au cours du calcul et les imperfections des différents critères de stabilité dues aux incertitudes sur le seuil de Moreau-Evans ou sur la précision de l’estimation de la pente p_m par régression linéaire, il est quasiment impossible d’affirmer pour ces situations limites quel modèle apporte la bonne conclusion. En fait, évaluer avec précision les valeurs de courant et d’induction magnétique exactement à la limite entre stabilité et instabilité est extrêmement difficile numériquement parlant.

Globalement on observe que le modèle de stabilité linéaire est plus pessimiste que le modèle de stabilité dynamique. Ceci peut s’expliquer par le fait que les effets non linéaires ne sont pas pris en compte dans le premier modèle et que ces derniers ont un impact plutôt stabilisant dans ce cas.

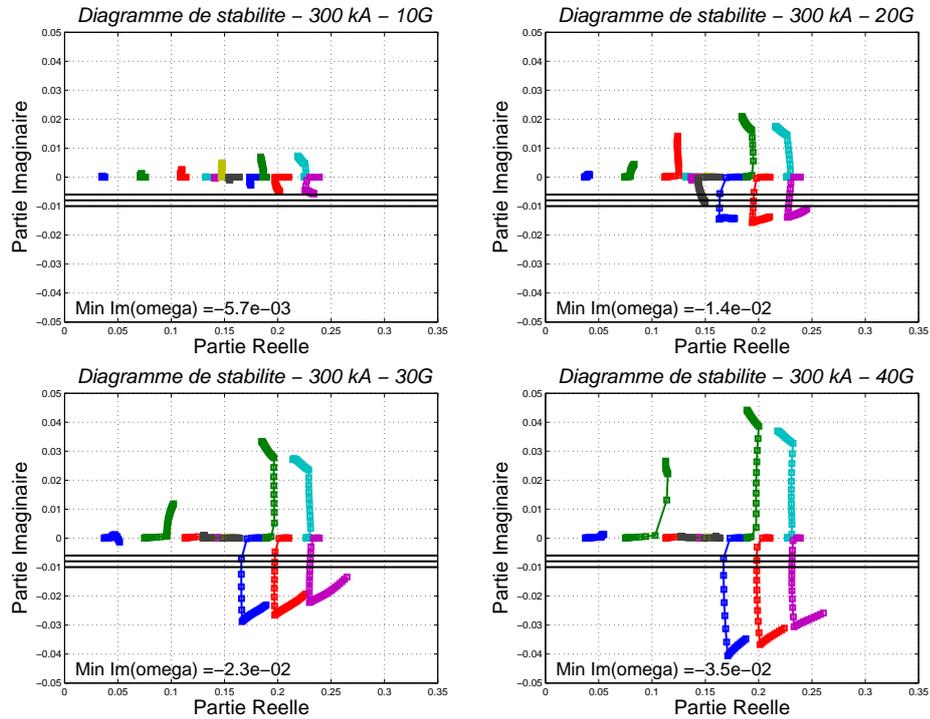


FIG. 4.3 – Estimation du seuil de stabilité linéaire. Diagrammes de stabilité pour un courant de 300 kA et des champs d’induction magnétique de 10 G, 20 G, 30 G et 40 G. Les droites représentent trois seuils de Moreau-Evans possibles $-6e-3$, $-8e-3$ et $-1e-2$.

Finalement notons que les résultats obtenus par le modèle de stabilité dynamique dépendent du paramètre de turbulence α_t utilisé. En effet, en augmentant ce paramètre on augmente la diffusion du modèle, diminuant ainsi l’amplitude des oscillations. Les configurations à la limite entre stabilité et instabilité peuvent ainsi passer de l’un à l’autre. Ce phénomène est relevé dans la table 4.3 où on observe qu’avec un paramètre α_t 10 fois plus grand que précédemment, une seule configuration induit une solution stationnaire instable (300kA-40G) contre trois précédemment.

4.2. STABILITÉ LINÉAIRE VS STABILITÉ DYNAMIQUE

<i>Stabilité linéaire</i>	10G	20G	30G	40G
100 kA	-7.7e-4	-2.9e-3	-5.1e-3	-7.3e-3
200 kA	-3.1e-3	-8.0e-3	-1.4e-2	-2.0e-2
300 kA	-5.7e-3	-1.4e-2	-2.3e-2	-3.5e-2

TAB. 4.1 – Seuil de stabilité linéaire : valeurs propres ω avec partie imaginaire minimum. Si $Im(\omega) < -0.01$, la solution stationnaire est *linéairement instable*.

<i>Stabilité dynamique</i>	10G	20G	30G	40G
100 kA	-7.9e-3	-9.6e-3	-1.0e-2	-6.5e-3
200 kA	-8.9e-3	-7.9e-3	-3.4e-3	1.0e-3
300 kA	-8.6e-3	-1.2e-3	3.1e-3	7.5e-3

TAB. 4.2 – Seuil de stabilité dynamique : pente moyenne p_m définissant le comportement de la vitesse moyenne de l'interface $\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)$. Si $p_m > 0$, la solution stationnaire est *dynamiquement instable*.

<i>Stabilité dynamique</i> $\alpha_t = 0.02$	10G	20G	30G	40G
100 kA	-8.8e-3	-9.2e-3	-8.6e-3	-8.3e-3
200 kA	-8.2e-3	-6.3e-3	-4.4e-3	-3.2e-3
300 kA	-7.7e-3	-4.6e-3	-1.5e-3	1.9e-3

TAB. 4.3 – Seuil de stabilité dynamique avec $\alpha_t = 0.02$: pente moyenne p_m définissant le comportement de la vitesse moyenne de l'interface $\frac{d\Gamma_h}{dt}(t)$. Si $p_m > 0$, la solution stationnaire est *dynamiquement instable*.

4.3 Conclusion

Dans ce chapitre un critère de *stabilité dynamique* a été introduit. Ce critère est basé sur l'analyse du comportement temporel du mouvement de l'interface à l'aide du code de calcul évolutif. Une étude de stabilité pour la cuve numérique a été réalisée et les résultats numériques confrontés à l'approche de Descloux, Flück et Romerio consistant à étudier l'évolution temporelle de perturbations de la solution stationnaire au moyen d'un problème linéarisé aux valeurs propres.

Dans une configuration électromagnétique simple, les deux modèles donnent des résultats assez proches. Le code de stabilité linéaire semble cependant plus pessimiste dans le sens où quelques situations dynamiquement stables se sont avérées linéairement instables.

Dans le dernier chapitre de ce document, le logiciel de simulation numérique dédié aux calculs d'électrolyse de l'aluminium est présenté.

4.3. CONCLUSION

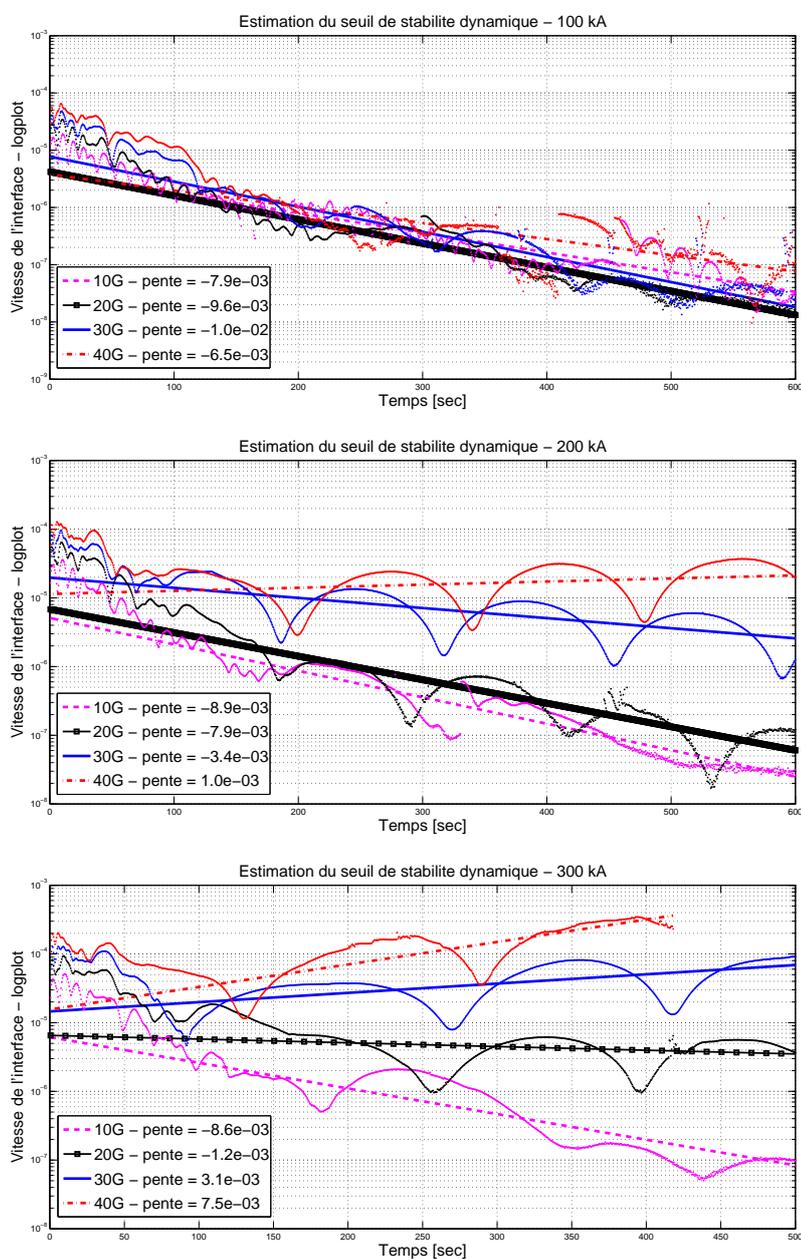


FIG. 4.4 – Estimation du seuil de stabilité dynamique. Représentation semi-log de la vitesse de l'interface $\frac{dI_h}{dt}(t)$ et pente moyenne p_m pour des courants de 100 kA (haut), 200 kA (milieu) et 300 kA (bas) et des champs d'induction magnétique de 10 G, 20 G, 30 G et 40 G.

Chapitre 5

Aspects informatiques

Dans ce chapitre nous présentons quelques aspects liés au logiciel `Alucell` dans lequel les algorithmes et schémas numériques du chapitre 2 ont été implantés et qui est à l'origine des résultats numériques présentés dans ce document.

5.1 Le logiciel `Alucell`

5.1.1 Historique

Au début des années 1980, Jean-Marc Blanc (société *AluSuisse*), Michel Romerio (consultant *AluSuisse*) et Jacques Rappaz (collaborateur EPFL) lancent un projet de simulation numérique de l'électrolyse de l'aluminium financé par *NEFF* (Nationaler Energie Forschungs Funds). Suite au départ de Jacques Rappaz pour l'université de Neuchâtel, le projet est repris à l'EPFL par Jean Descloux qui, avec la collaboration de Michel Romerio et Michel Flück, pose les premières pierres d'un logiciel dédié à l'électrolyse. En étroite collaboration avec Jacques Antille d'*AluSuisse*, Michel Flück développe ainsi, en Fortran77, un code élément finis en hexaèdres structurés pour calculer la solution stationnaire du problème MHD bifluide qui est à la base d'`Alucell`.

Dès 1999, le projet de recherche est repris par le professeur Jacques Rappaz. Outre le code de stabilité linéaire développé par Descloux, Flück et Romerio (voir [10, 11]), le logiciel `Alucell` s'étoffe de nouveaux modules de calcul dont un modèle thermique pour simuler les effets de solidification du métal sur le bord (voir [13]), une première étude de l'évolution des fluides par un code instationnaire (voir [14]) et plusieurs méthodes pour calculer l'effet d'écran ferromagnétique (voir [12]).

En 2009, le code source atteint ainsi environ 160'000 lignes dont deux tiers sont écrites en Fortran et environ un tiers en C++. Il permet de ré-

soudre de nombreux problèmes différentiels 1D, 2D et 3D par des méthodes d'éléments finis continus de degré 1 sur des maillages structurés ou non structurés.

L'objectif principal de cette thèse est d'intégrer le modèle décrit au chapitre 2 dans le logiciel `Alucell`. Le but est d'améliorer les performances du premier modèle MHD bifluide développé par Sonia Pain en utilisant des méthodes numériques plus efficaces (en particulier pour la partie électromagnétique) afin de pouvoir simuler des situations réalistes en un temps de calcul raisonnable et avec un code robuste.

5.1.2 Structure

Le programme `Alucell` est conçu à la frontière entre un logiciel de simulation dédié à l'électrolyse et une librairie mathématique de calcul éléments finis. Disposant d'un langage propre et d'un interpréteur, il permet de développer aussi bien des cas tests simples que de traiter des situations industrielles complexes. Sa structure est la suivante (cf. FIG. 5.1) :

- (i) *Sources* : Le code source, Fortran et C++, rassemble les outils numériques indispensables à la simulation. On y trouve par exemple des modules de gestion des maillages (lecture, écriture, création, transformation, etc), des modules éléments finis (assemblage de matrices élémentaires, etc) ou de résolution de systèmes linéaires (méthodes directes ou itératives, préconditionneurs, etc). Une partie est consacrée à l'interpréteur et à la définition des commandes du langage. Le code source est compilé de manière à ce que tous les modules soit accessibles, après interprétation, sous forme de mot-clé du langage `Alucell`.
- (ii) *Macros* : On appelle *macro*, un fichier contenant une liste d'instructions en langage `Alucell`. Ces macros sont interprétées et traduites en une série d'opérations relatives aux fichiers Fortran et C++ du code source. Les macros sont en général séparées en deux groupes : d'un côté les fichiers spécifiques à une application ou à une géométrie, par exemple au cas du creuset ou de la cuve numérique, et de l'autre un jeu de macros générales qui peuvent être utilisées dans des situations différentes (par exemple assemblage ou résolution d'un système type).

Une simulation numérique avec `Alucell` consiste donc à exécuter un fichier compilé à partir des *sources* dans un répertoire contenant des instructions interprétables (*macros*), spécifiques au problème que l'on veut résoudre. Cette approche donne énormément de liberté au programmeur mais demande une grande rigueur étant donné que les principales instructions sont interprétées et non compilées.

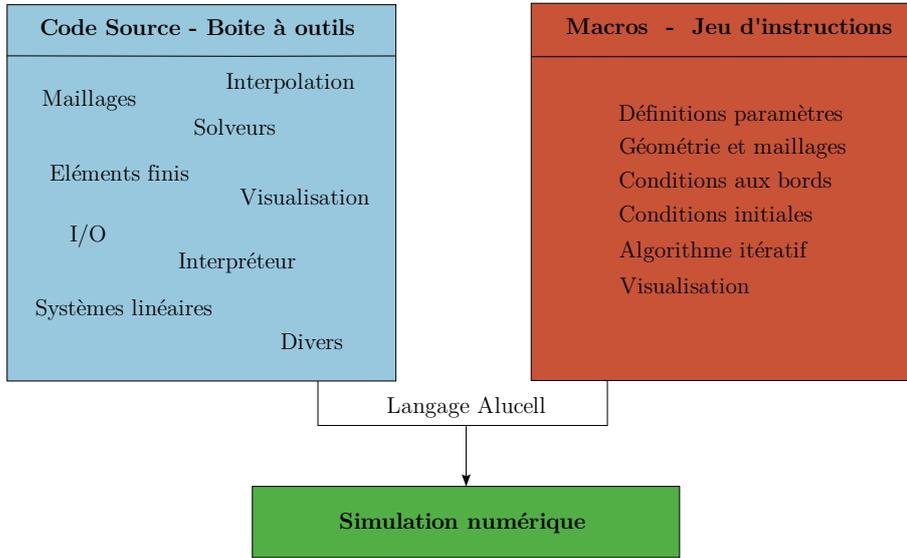


FIG. 5.1 – Structure du code Alucell

5.1.3 Exemple

En guise de présentation et pour illustrer les possibilités du logiciel, passons en revue un exemple d’une simulation numérique réalisable avec Alucell en se concentrant sur les étapes importantes.

Considérons un cas test académique de mécanique des fluides : la cavité entraînée. Soit Ω le cube unité $(0,1)^3$ et Γ la surface supérieure donnée par l’équation $z = 1$, on souhaite résoudre numériquement, le problème de Stokes stationnaire suivant : chercher $\vec{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ et $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tels que

$$\begin{cases} -\Delta \vec{u} + \vec{\nabla} p = 0, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \end{cases} \quad \text{dans } \Omega, \quad (5.1)$$

et qui vérifient les conditions au bord suivantes

$$\begin{cases} \vec{u} = (1, 0, 0)^T, & \text{sur } \Gamma, \\ \vec{u} = 0, & \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma. \end{cases} \quad (5.2)$$

Ce problème correspond à l’étude du mouvement d’un fluide visqueux incompressible (de viscosité $\mu = 1$) dans un cube, parfaitement entraîné

sur une face et adhérent aux autres. La vitesse, solution du problème (5.1-5.2), est un tourbillon présenté sur la figure 5.2. La résolution numérique du

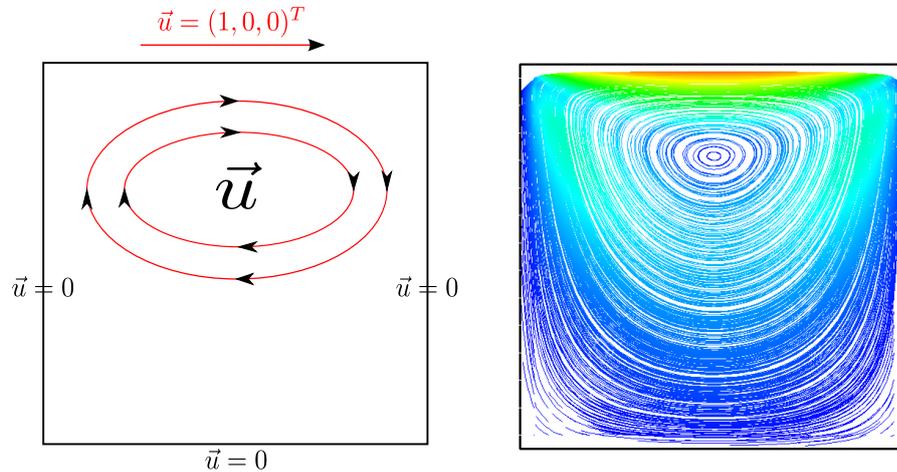


FIG. 5.2 – Vitesse \vec{u} solution du problème (5.1) : à gauche solution attendue, à droite lignes trajectoires calculées (coupe dans le plan $x = 1/2$).

problème (5.1) avec Alucell est décrite étape par étape ci-après.

Initialisation

La première étape consiste à créer une structure de base pour tout calcul avec Alucell, i.e. un répertoire contenant les éléments suivants :

- un fichier `case.dat`, essentiel au fonctionnement du logiciel, mais qui peut être vide, auquel cas l'interpréteur de commandes attend que l'exécutant entre des instructions au clavier. En règle générale, ce fichier contient les instructions du listing 5.1.

Listing 5.1 – Fichier `case.dat`

```

1 (CASE="Cavity") (DBFILE="dbfile")
  (MACRO="macros/") (MY_MACRO="data/") (TEMP="TMP/")
3
@ "data/input.dat"
5
quit
```

Le rôle de ce fichier est de définir quelques *variables d'environnement* fixant pour Alucell les chemins relatifs vers les répertoires où se trouvent les instructions à effectuer et de rediriger l'interpréteur vers le fichier principal de calcul (ici `data/input.dat`). Notons que ce fichier

5.1. LE LOGICIEL ALUCCELL

est le seul élément indispensable au logiciel mais, bien que toutes les instructions puissent y être placées, il est souvent préférable pour une question de lisibilité de morceler les instructions dans plusieurs fichiers plus simples, d'où la création des éléments décrits ci-dessous.

- un répertoire `data/` qui contient les instructions spécifiques au cas considéré dont : création de maillage, définition des conditions au bord, paramètres numériques, physiques et géométriques, visualisation, etc. Si la variable d'environnement `MY_MACRO` est définie à la valeur `data/` un fichier `_foo.mac` contenu dans ce répertoire peut être accédé simplement par la commande suivante (listing 5.2).

Listing 5.2 – Appel d'un fichier du répertoire `data/`

```
_foo.mac()
```

L'interpréteur identifie en fait tout fichier dont le nom commence par le caractère “_” au répertoire `data/`. Notons que des arguments peuvent être transmis entre les parenthèses, séparés par des points virgules et récupérés au niveau de `_foo.mac` via les mots clés `ARG_01`, `ARG_02`, etc.

- un répertoire `macros/` qui contient des instructions plus générales, réutilisables pour plusieurs situations différentes, par exemple : opérations mathématiques, assemblage et définition d'un problème type (Laplace, Stokes, Navier-Stokes, transport, etc), opérateurs de restriction ou de prolongement entre maillages, etc. Si la variable d'environnement `MACRO` est définie à la valeur `macros/`, pour accéder à un fichier `foo1.mac` de ce répertoire ou à un fichier `gen/foo2.mac` dans le sous-répertoire `macros/gen/`, il suffit d'entrer les commandes suivantes (voir listing 5.3).

Listing 5.3 – Appel d'un fichier du répertoire `macros/`

```
1 foo1.mac()  
gen/foo2.mac()
```

En règle général, il est raisonnable de dissocier ce dossier du cas considéré et ainsi d'éviter de dupliquer inutilement du code à chaque nouveau calcul. Actuellement, le logiciel est doté d'un répertoire central de `macros`, classées dans des sous-répertoires selon plusieurs catégories : les macros à usage général dans le répertoire `macros/gen/`, les macros de manipulation de maillage dans le répertoire `macros/mesh/`, celles relatives au code MHD évolutif dans le répertoire `macros/evol/` et ainsi de suite.

- un répertoire TMP/ utilisé par le logiciel pour stocker des informations temporaires au cours du calcul, principalement lors de l'utilisation de boucles itératives.

A ce stade, pour assurer une bonne lisibilité du code, il convient de déterminer les étapes de calculs et de créer un fichier `input.dat` contenant la structure générale de l'algorithme de résolution. Dans le cas de notre exemple, ce fichier peut s'écrire suivant le listing 5.4.

Listing 5.4 – Fichier `input.dat` pour le problème (5.1)

```

# -----
2 # File      : input.dat
# Description : Solve Stokes Problem in a cavity.
4 # -----
## Beginning of computation
6
## | Parameters
8 _params.mac()
# -----
10 ## | Mesh
    _mesh.mac()
12 # -----
## | Boundary conditions
14 _boundary_conditions.mac()
# -----
16 ## | Matrix Assembly
    _matrix.mac()
18 # -----
## | Problem Resolution
20 _solve.mac()
# -----
22 ## | Visualization
    _visualization.mac()
24
## End of computation

```

Les lignes qui commencent par le caractère “#” suivi d’un espace sont des commentaires pour Alucell et sont ignorées par l’interpréteur. Par contre les lignes qui commencent par “##” sont considérées comme une information à afficher et figurent dans l’*output* du programme.

Remarque 27 (Gestion mémoire) *La gestion de la mémoire dans Alucell a été conçue initialement en suivant les principes du langage Fortran77. Au démarrage du programme, l’exécutable alloue un “super tableau” de taille importante (typiquement plusieurs Gigabytes) dans lequel la plupart des variables, vecteurs et matrices sont stockés et adressés. Malgré les possibilités accrues des machines modernes qui peuvent posséder des mémoires vives gigantesques, les codes de simulation de l’électrolyse développés avec Alucell peuvent facilement atteindre les limites de stockage en mémoire vive,*

5.1. LE LOGICIEL ALUCCELL

en particulier les codes évolutifs. Une solution pour résoudre ce problème est de conserver en mémoire vive un minimum d'information et de stocker temporairement des variables dans un fichier base de données à accès rapide. Cette fonctionnalité est prévue dans `Alucell` via la variable d'environnement `DBFILE` qui définit le nom d'un fichier binaire fortran à accès direct dans lequel des variables peuvent être stockées et récupérées automatiquement.

Pour illustrer la gestion de la mémoire considérons le fichier `_params.mac` repris dans le listing 5.5.

Listing 5.5 – Fichier `_params.mac`

```
1 # -----
2 # File      : _params.mac
3 # Description : Define problems parameters.
4 # -----
5 # open database file
6   open
7 # -----
8 # Geometry of the cavity : [0,Lx]x[0,Ly]x[0,Lz]
9   (Lx = 1.0) (Ly = 1.0) (Lz = 1.0)
10
11 # System Solver
12   (cavity_up_sol_iter_algo="$gmres_ilu0")
13   (cavity_up_sol_iter_itmax=1000)
14   (cavity_up_sol_iter_dimens=2000)
15   (cavity_up_sol_iter_tol=1e-6)
16   (cavity_up_sol_iter_verbose=1)
17 # -----
18 # Save informations in the database
19   dbwrite
20
21 # close database file
22   close
23
24 endmacro
```

Les mots clés `open` et `close` signalent à l'interpréteur que des variables peuvent être lues ou écrites dans le fichier identifié par la variable `DBFILE` tandis que la commande `dbwrite` oblige le programme à enregistrer dans la base de données toutes les variables contenues dans la mémoire vive. Cette dernière étape peut prendre beaucoup de temps suivant l'état de la mémoire et générer un fichier de taille importante. Il est donc nécessaire de "nettoyer" la mémoire vive avant d'appeler `dbwrite` en supprimant les éléments qui ne sont pas utiles pour la suite du calcul. Pour effectuer cette opération, le langage `Alucell` est doté des commandes de base de GNU/Linux pour la gestion des fichiers (`rm`, `mv`, `cp`, `ln`, `ls`, etc) qui agissent directement sur les variables

stockées dans la mémoire vive. En particulier, la commande `rm` permet d’effacer des informations inutiles et peut même être appelée avec le caractère de complétion usuel “*” (voir listing 5.6).

Listing 5.6 – Utilisation de la commande `rm`

```
# Cleaning memory
2 rm foo
  rm mat*
4 rm *001
```

Maillage

A l’origine, les maillages de cuve étaient réalisés entièrement avec `Alucell` c’est pourquoi de nombreux outils de construction, découpage, union, extraction du bord, etc, existent dans le logiciel. Ces outils sont très utiles pour créer rapidement des maillages lorsque la géométrie du domaine est simple comme c’est le cas dans l’exemple présenté ici. Un maillage en tétraèdres du domaine Ω peut ainsi être réalisé en quelques lignes de code suivant le listing 5.7.

Listing 5.7 – Construction d’un maillage tétraédrique du domaine Ω .

```
# Reference number for the whole domain
2 (ref=1)

4 # Opening of the mesh toolbox
  mesh
6   # Cut the cube into Nx x Ny x Nz hexaedra --> hexamesh
  Mstruct3d.mac(0;Lx;Nx ; 0;Ly;Ny ; 0;Lz;Nz; ref ; hexamesh)
8
   # Cut each hexaedron into tetraedra --> cavity
10  Mtetra.mac( hexamesh ; cavity ; hexa_tetra)

12 # Closure of the mesh toolbox
  return
```

Pour traiter des géométries plus compliquées et exploiter les performances des maillages existants, `Alucell` a été couplé à plusieurs logiciels de génération et manipulation de maillages (`GMSH` [38] ou `GHS3D` [39] par exemple). Notons qu’un tel couplage est assez simple puisque, pour `Alucell`, un maillage consiste en trois tableaux :

- `cavity_nodes` est un tableau de nombres réels contenant les coordonnées des sommets des tétraèdres ;
- `cavity_elems` est un tableau de nombres entiers contenant pour chaque élément les indices des sommets associés dans le tableau `cavity_nodes` ;

5.1. LE LOGICIEL ALUCCELL

- `cavity_refs` est un tableau contenant un numéro de référence pour chaque élément et qui permet d'identifier des régions d'un maillage suivant des considérations physiques, géométriques ou numériques.

A ce stade, à partir du maillage volumique du domaine Ω il convient d'identifier les différentes régions du bord $\partial\Omega$ où l'on souhaite imposer des conditions limites. Cette étape est effectuée dans le listing 5.8.

Listing 5.8 – Identification et partage du bord du domaine Ω .

```
1 mesh
   # Extract Border
3   Mfront.mac(cavity ; cavity_border )

   # Split the boundary in top, base and side
   (keep_nodes=1)
7   (keep_top_f(x,y,z) = 1-eq(z,Lz))
   Mkeep.mac(cavity_border; cavity_border_top ; keep_top_f)
9
   (keep_base_f(x,y,z) = 1-eq(z,0.0))
11  Mkeep.mac(cavity_border; cavity_border_base; keep_base_f)

   (keep_sides_f(x,y,z) = 2-gt(z,0.0)-lt(z,Lz))
13  Mkeep.mac(cavity_border; cavity_border_side; keep_sides_f)
15
   # Identify one point of the mesh
17  # to impose condition for pressure
   Mpoint.mac( corner ; 0 ; 0 ; 0 )
19  return

21 # Find the id of the corner in cavity mesh
   mesh/submesh.mac(corner ; cavity)
```

L'instruction clé ici est la commande `Mkeep.mac` qui évalue une fonction $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ aux barycentres du maillage en triangles `cavity_border` et conserve les éléments qui vérifient $f(x, y, z) = 0$ dans un sous-maillage du bord.

Conditions au bord

Les conditions de bord données dans l'équation (5.2) étant de type Dirichlet elles peuvent être traitées algébriquement au moment de l'assemblage du système linéaire associé au problème (5.1) en éliminant les inconnues concernées. Pour pouvoir effectuer cette opération dans `Alucell`, deux tableaux sont créés :

- (1) une table de codes de conditions de bord `cavity_up_dbccod` associée aux noeuds et qui prend la valeur un pour un noeud libre et zéro pour un noeud imposé (cf. listing 5.9).

Listing 5.9 – Création du tableau de codes de conditions de bord

```

## | | Boundary code for u and p
2 # Number of dofs per node : (u_x, u_y, u_z, p)
  (fonct_nval=4)
4 data cavity_nodes cavity_up_dbccod
  # Set every node as free
  (fonct_v1=1) (fonct_v2=4)
  (fonct_elm="$ cavity_elems")
  (fonct_value=1)
  elm
10 # Non-Homogenous Dirichlet BC on top
  (fonct_v1=1) (fonct_v2=3)
  (fonct_elm="$ cavity_border_top_elems")
  (fonct_value=0)
  elm
14 # Homogenous Dirichlet on the base and side
  (fonct_v1=1) (fonct_v2=3)
  (fonct_elm="$ cavity_border_base_elems")
  (fonct_value=0)
  elm
  (fonct_v1=1) (fonct_v2=3)
  (fonct_elm="$ cavity_border_side_elems")
  (fonct_value=0)
  elm
24 # Homogenous Dirichlet for p on one point
  (fonct_v1=4) (fonct_v2=4)
  (fonct_elm="$ corner_cavity_elems")
  (fonct_value=0)
  elm
28 # Convert real values to integers
30 integ
  dbc
32 return
  # Total number of degrees of freedom
34 (cavity_up_rhs_size=fonct_neq)

```

- (2) une table `cavity_up_dbcval` contenant la valeur de la condition au bord et qui est typiquement créée par la fonction `arithm` du langage qui permet d'évaluer une expression aux éléments d'un tableau, ici les noeuds du maillage (cf. listing 5.10).

Listing 5.10 – Création du tableau de valeurs de conditions de bord

```

1 # Define the values for the boundary conditions
  # u_x = 1 on \Gamma and u_y = u_z = 0 = p everywhere
3
  (up_dbcval_f(x,y,z)=(eq(z,Lz), 0.0, 0.0, 0.0))
5 arithm cavity_nodes cavity_up_dbcval up_dbcval_f

```

Éléments finis

La forme variationnelle discrétisée du problème 5.1 dans un espace de polynômes de degré 1 avec stabilisation sur un maillage en tétraèdres \mathcal{T}_h du domaine Ω s'écrit : trouver $\vec{u}_h = \vec{u}_h + R$ avec le relèvement $R = (1, 0, 0)^T$ et

$$\vec{u}_h \in \mathcal{V}_h = \left\{ \vec{v} \in [C^0(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)]^3 \mid \vec{v}|_K \in [\mathbb{P}^1(K)]^3, \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (5.3)$$

et

$$p_h \in \mathcal{Q}_h = \left\{ q \in C^0(\Omega) \cap L_0^2(\Omega) \mid q|_K \in \mathbb{P}^1(K), \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (5.4)$$

tels que

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \vec{u}_h : \vec{\nabla} \vec{v}_h - \int_{\Omega} p_h \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_h + \int_{\Omega} q_h \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_h + \alpha_S h^2 \int_{\Omega} \vec{\nabla} p_h \cdot \vec{\nabla} q_h = 0, \quad (5.5)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h$ et $q_h \in \mathcal{Q}_h$ et où h est la taille moyenne des éléments du maillage et α_S est un paramètre de stabilisation constant.

Ce genre de formulation peut être introduit assez facilement dans `Alucell` via le module `fes_gen` (“*General finite element systems*”). En effet, si ∂_k ($k = 0, 1, 2$) sont les dérivées partielles dans les trois directions de l'espace \mathbb{R}^3 , que $\vec{u} = (u_0, u_1, \dots, u_P)$ est un vecteur de $P + 1$ inconnues par noeud et $\vec{v} = (v_0, v_1, \dots, v_P)$ est le vecteur de fonctions tests alors la forme bilinéaire définie par¹

$$A_h(\vec{u}, \vec{v}) = \sum_K \sum_{i,j=0}^P \sum_{k,l=0}^2 \int_K \left(a_{ijkl}^K \partial_k v_i \partial_l u_j + b_{ijk}^K \partial_k v_i u_j + c_{ijl}^K v_i \partial_l u_j + d_{ij}^K v_i u_j \right), \quad (5.6)$$

peut être identifiée pour chaque élément K par les coefficients

$$a_{ijkl}^K, b_{ijk}^K, c_{ijl}^K, d_{ij}^K, \quad \text{avec } i, j = 0, 1, \dots, P, \quad \text{et } k, l = 0, 1, 2, \quad (5.7)$$

et la forme linéaire

$$F_h(\vec{v}) = \sum_K \sum_{i=0}^P \sum_{k=0}^2 \int_K \left(g_{ik}^K \partial_k v_i + f_i^K v_i \right), \quad (5.8)$$

est identifiée simplement par les coefficients

$$g_{ik}^K, f_i^K, \quad \text{avec } i = 0, 1, \dots, P, \quad \text{et } k = 0, 1, 2. \quad (5.9)$$

Ainsi, pour construire et résoudre avec `Alucell` le problème variationnel

$$A_h(\vec{u}, \vec{v}) = F_h(\vec{v}), \quad \forall v \in \mathcal{V}, \quad (5.10)$$

¹Pour simplifier, on note \sum_K la sommation sur tous les éléments du maillage \mathcal{T}_h et \int_K l'intégrale sur l'élément K .

il suffit de définir, pour chaque élément K , les coefficients a_{ijkl}^k , b_{ijk}^K , c_{ijl}^K , d_{ij}^K , g_{ik}^K et f_i^K . Dans notre exemple la matrice associée à la forme bilinéaire de l'équation (5.5) peut ainsi être assemblée en quelques lignes de code en suivant le listing 5.11.

Listing 5.11 – Assemblage du système linéaire associé à l'équation de Stokes.

```

1 # -----
2 # File      : _matrix.mac
3 # Description : Matrix Assembly.
4 # -----
5 # unknowns      u = (u0,u1,u2,u3)
6 # test function v = (v0,v1,v2,v3)
7
8 # contribution: \int_Omega grad(u):grad(v)
9 (gradgrad_f(x,y,z)= 1.0)
10 arithn cavity_baryc cavity_coeff_grad gradgrad_f
11
12 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_0000
13 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_0011
14 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_0022
15 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_1100
16 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_1111
17 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_1122
18 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_2200
19 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_2211
20 cp cavity_coeff_grad cavity_fes_mat_gen_a_2222
21
22 # contribution: - \int_Omega p div(v)
23 (pdivv_f(x,y,z)= -1)
24 arithn cavity_baryc cavity_coeff_pdivv pdivv_f
25
26 cp cavity_coeff_pdivv cavity_fes_mat_gen_b_030
27 cp cavity_coeff_pdivv cavity_fes_mat_gen_b_131
28 cp cavity_coeff_pdivv cavity_fes_mat_gen_b_232
29
30 # contribution: \int_Omega q div(u)
31 (qdivu_f(x,y,z)= 1)
32 arithn cavity_baryc cavity_coeff_qdivu qdivu_f
33
34 cp cavity_coeff_qdivu cavity_fes_mat_gen_c_300
35 cp cavity_coeff_qdivu cavity_fes_mat_gen_c_311
36 cp cavity_coeff_qdivu cavity_fes_mat_gen_c_322
37
38 # contribution: \int_Omega alpha h^2 grad p.grad q
39 (stab_f(x,y,z)= alpha*h*h)
40 arithn cavity_baryc cavity_coeff_stab stab_f
41
42 cp cavity_coeff_stab cavity_fes_mat_gen_a_3300
43 cp cavity_coeff_stab cavity_fes_mat_gen_a_3311
44 cp cavity_coeff_stab cavity_fes_mat_gen_a_3322
45
46 # System assembly
47 fes

```

5.1. LE LOGICIEL ALUCCELL

```
49 # Construct the matrix profil for a sparse storage
    profil cavity_upStokes CRS cavity_up_dbccod
    cavity_up_dbccod cavity_elems cavity_elems
51 end
53 # Algebraic treatment of boundary conditions
    dbc cavity_upStokes
    cavity_up_rhs cavity_up_dbcval
55 end
57 # Matrix assembly
    (cavity_gen_dim=3) (cavity_gen_nval=4)
    matrix cavity_upStokes
59 cavity gen_abcd cavity_up_dbccod cavity_up_dbccod
    end
61 return
```

Il est clair que ce type de formulation ne permet pas de construire tous les systèmes associés à des équations variationnelles et peut s'avérer difficile à évaluer lorsque les paramètres physiques ou numériques changent d'un élément à un autre. C'est pourquoi avec Alucell il est également possible d'assembler "manuellement", élément par élément, des systèmes plus complexes en agissant dans les sources du logiciel; c'est ce qui est fait pour la plupart des équations introduites au chapitre 2. Notons que le relèvement est traité algébriquement à l'assemblage du système linéaire en éliminant les inconnues associées aux conditions au bord de type Dirichlet.

Ayant choisi le solveur *GMRES* (voir la section 5.3.1) pour le système linéaire dans le fichier `_params.mac` (cf. listing 5.5), la solution `cavity_up` est calculée en suivant le listing 5.12

Listing 5.12 – Résolution du système linéaire associé à l'équation de Stokes.

```
# -----
2 # File : _solve.mac
  # Description : Solve the problem.
4 # -----
  # Assemble zero right hand side
6 fes
  rhs cavity_up_rhs
8 cavity gen_fg cavity_up_dbccod
  end
10 return
# Stokes resolution
12 fes
  sol
14 XX cavity_upStokes cavity_up_rhs cavity_up_sol
  end
16
  fem cavity_up_sol cavity_up_dbccod
18 cavity_up_dbcval cavity_up
  end
20 return
endmacro
```

Visualisation

La dernière étape est la visualisation de la solution via les logiciels **En-sight** (voir [40]) ou **Paraview** (voir [41]). La figure 5.2 est ainsi obtenue dans **En-sight** après interprétation du listing 5.13.

Listing 5.13 – Exportation de la solution au format **ensight**.

```

1 # -----
2 # File      : _visualisation.mac
3 # Description : Visualize the solution.
4 # -----
5 # Separate velocity u and pressure p
6 # (u_f(u,v,w,p) = (u,v,w) )
7 arithn cavity_up cavity_u u_f
8
9 # (p_f(u,v,w,p) = p )
10 arithn cavity_up cavity_p p_f
11
12 # Export solution to ensight
13 (ensight_name="ensight_solution") # Filename
14 (cavity_eltype="tetra4")          # Meshtype
15 (ensight_type=0)                  # 0=ensight, 1=paraview
16 ensight
17     add cavity_u      # velocity (3D field)
18     add cavity_p      # pressure (scalar field)
19 return
endmacro

```

5.2 Simulation MHD instationnaire

Conceptuellement parlant, les macros pour le code MHD évolutif sont construites sur le même schéma que l'exemple de la section 5.1.3 mais sont bien plus complexes. Si le code de résolution pour le problème de Stokes stationnaire peut s'écrire en moins de 200 lignes de langage **AluCell**, ce n'est pas le cas pour un algorithme comme celui de la section 2.4. Notre version étant composée de plusieurs milliers de lignes nous n'allons pas reproduire ici le code dans son intégralité mais lister quelques fichiers clés pour bien comprendre la structure du calcul effectué.

5.2.1 Macros évolutives

Reprenant le principe évoqué précédemment, le squelette du calcul est construit dans un fichier `input.dat` donné dans le listing 5.14.

5.2. SIMULATION MHD INSTATIONNAIRE

Listing 5.14 – Structure générale du code pour le problème MHD.

```
1 # -----
2 # File      : input.dat
3 # Description : Main macros file for the computation
4 # of time-evolutive MHD equation in an electrolythic cell.
5 # -----
6 # Automatic generation of some general macros
7 # -----
8 gen/data_mac.mac()
9 gen/mesh_mac.mac()
10
11 ## =====
12 ## Dynamic MHD Computation
13 ## =====
14 ## | Parameters
15 (DAYFILE="Dayfile_Params")
16   _geometrical_params.mac()
17   _physical_params.mac()
18   _numerical_params.mac()
19
20 ## =====
21 ## | Mesh
22 (DAYFILE="Dayfile_Mesh")
23   _mesh.mac()
24
25 ## =====
26 ## | Computation
27 (DAYFILE="Dayfile_Evol")
28   _time_iterations.mac()
29
30 ## =====
31 ## | End of computation
32 ## =====
33 quit
```

La variable d'environnement DAYFILE permet de conserver une trace des opérations effectuées au cours du calcul dans différents fichiers (ici Dayfile_Params, Dayfile_Mesh et Dayfile_Evol) créés automatiquement par le logiciel. Ces fichiers sont très importants dans la phase de développement d'un nouveau calcul avec Alucell car ils permettent bien souvent de comprendre les causes d'un arrêt prématuré d'une simulation ou de mauvais résultats.

Si l'algorithme itératif de la section 2.4 n'apparaît pas encore dans ce fichier, les bases pour la simulation sont néanmoins posées ici. Tout d'abord les macros gen/data_mac.mac et gen/mesh_mac.mac génèrent une série d'outils qui sont stockés dans le répertoire TMP/ et utilisés par la suite. Ensuite les paramètres géométriques (dimensions et position des domaines Ω , Σ et Γ ,

numéros de référence, etc), physiques (viscosités, densités et conductivités des matériaux, constantes physiques) et numériques (solveurs, paramètres de discrétisation en espace et en temps, constantes de stabilisation, etc) sont définis et sauvés dans la base de données (voir par exemple le listing 5.15 du fichier `_physical_params.mac` pour le calcul évolutif dans le creuset présenté à la section 2.5.2). Enfin, dans le fichier `_mesh.mac`, le maillage est lu/construit et les frontières calculées et séparées en fonction des conditions au bord à imposer.

Listing 5.15 – Paramètres physiques pour le calcul évolutif sur le Creuset.

```

1 # -----
2 # File      : _physical_params.mac
3 # Description : Definition of the parameters related to
4 # the physics of the problem.
5 # -----
6
7 open
8 # -----
9 ## | | Physical Parameters
10 # Viscosity tensor
11 (bredit_tsk=1)
12 (mualu=0.002)
13 (fluid_mu_#1 = mualu) (fluid_mu_#2 = mualu)
14 (fluid_mu_#3 = mualu) (fluid_mu_#4 = mualu)
15 (fluid_mu_#5 = mualu) (fluid_mu_#6 = mualu)
16 (fluid_mu_#7 = mualu) (fluid_mu_#8 = mualu)
17 (fluid_mu_#9 = mualu)
18
19 bredit fluid_mu
20 # -----
21 # Densities
22 (veloc_rho1=2270) (fluid_rho1=veloc_rho1) # Alu
23 (veloc_rho2=2130) (fluid_rho2=veloc_rho2) # Bath
24 # -----
25 # Conductivities
26 # Alu
27 (k=ns3d_matalu)
28 (potsta_sigma_#k_#1 = 3.33e6)
29 (potsta_sigma_#k_#2 = 3.33e6)
30 (potsta_sigma_#k_#3 = 3.33e6)
31
32 # Bath
33 (k=ns3d_matele)
34 (potsta_sigma_#k_#1 = 210)
35 (potsta_sigma_#k_#2 = 210)
36 (potsta_sigma_#k_#3 = 210)
37
38 # Anode
39 (k=ns3d_matanode)
40 (potsta_sigma_#k_#1 = 10000)
41 (potsta_sigma_#k_#2 = 10000)
42 (potsta_sigma_#k_#3 = 10000)

```

5.2. SIMULATION MHD INSTATIONNAIRE

```
43 # Cathode
    (k=ns3d_matcathode)
45 (potsta_sigma_#k_#1 = 10000)
    (potsta_sigma_#k_#2 = 5000)
47 (potsta_sigma_#k_#3 = 10000)

49 # Cathodic bars
    (k=ns3d_matbars)
51 (potsta_sigma_#k_#1 = 1e6)
    (potsta_sigma_#k_#2 = 1e6)
53 (potsta_sigma_#k_#3 = 1e6)
# -----
55 # Some constants
# pi
57 (pi=4*atan(1.0))

59 # Gravity
    (gravite=9.81)
61
# Magnetic permeability of void
63 (mu0=4*pi*1e-7)

65 # -----
# Surface tension coefficient. 0 = no tension
67 (surface_tension=0.5)

69 # Contact angle in degrees taken from the interface to the
# top border of the cell.
71 (theta_vert=30.0) (theta_s=180-theta_vert)

73 # -----
# Total input current unit[Ampere]
75 (cell_current=10) # 10A

77 # Vertical induction unit[Gauss]
    (Bz=100)
79
# Vertical induction unit[Tesla]
81 (vertical_induction=Bz/10000)

83 # -----
# Initial position of the interface
85 # Inclined plane in the Oy dir.
    (alpha=tan(pi*10.0/180))
87 (phi_xyzt_f(x,y,z,z0)=z-z0+alpha*x)

89 # -----
## | | Save informations in the database
91 (ident="physical_params.mac")
    dbwrite
93 # -----
    close
95 endmacro
```

Puisque ces étapes ne sont pas spécifiques au calcul évolutif il est bon de les séparer de l'algorithme principal. Ainsi, il devient aisé de reprendre une partie du code pour simuler d'autres équations (stabilité linéaire par exemple) en conservant les informations liées à la géométrie des domaines et aux maillages. La boucle principale de l'algorithme se trouve donc dans le fichier `_time_iterations.mac` (listing 5.16).

Listing 5.16 – Fichier principal pour le calcul MHD évolutif.

```

1 # -----
2 # File      : _time_iterations.mac
3 # Description : Main macros file for the time dependant MHD
4 # simulation. It contain all the steps of the algorithm.
5 # -----
6
7 open
8
9 ## | | Boundary conditions
10 _boundary_conditions.mac()
11
12 ## | | Initial conditions
13 _initial_conditions.mac()
14
15 # =====
16 # Main Loop for the time evolution MHD numerical algorithm
17 # =====
18 FOR p=1 TO niterevol DO("cycle_evolution")
19 ## | | =====
20 ## | | Step INT_p_TNI
21 ## | | =====
22 # -----
23 ## | | Solve Maxwell Equations
24 evol/maxwell.mac()
25 # -----
26 ## | | Compute Forces on fluid
27 evol/forces.mac()
28 # -----
29 ## | | Solve Navier-Stokes Equations
30 evol/navier_stokes.mac()
31 # -----
32 ## | | Level set function and mesh deformation
33 evol/level_set.mac()
34 evol/deform.mac()
35 # -----
36 ## | | Visualisation
37 _visualisation.mac()
38 ENDDO("cycle_evolution")
39 # -----
40
41 close
42 endmacro

```

5.2. SIMULATION MHD INSTATIONNAIRE

Le maillage et les paramètres de calculs ayant été fixés précédemment, il reste ici à définir les conditions au bord correctement pour chaque problème éléments finis à résoudre et de poser les conditions initiales du problème évolutif. De plus, pour pouvoir utiliser l'algorithme de Schwarz pour le calcul de l'induction magnétique (voir section 2.3.2) il faut calculer la densité de courant \vec{j}^{hor} et l'induction magnétique \vec{B}^{hor} associés à une interface horizontale sur le maillage \hat{S}_h . Ces étapes sont effectuées dans les fichiers `_boundary_conditions.mac` et `_initial_conditions.mac`.

La partie des macros spécifique au cas considéré s'arrête à ce niveau². Les instructions concernant la construction des matrices, la résolution des problèmes linéaires et la déformation des maillages sont communes à toutes les géométries possibles et donc placées dans un répertoire indépendant `macros/evol/`. Cette standardisation des instructions n'est pas aisée et exige du développeur un effort d'abstraction important dans l'écriture de ses macros mais s'avère indispensable pour maintenir organisé le logiciel sur une longue période de temps ; moins le code est dupliqué, plus il est facile à préserver et à archiver.

Comme on peut le voir dans la listing 5.16 le système des macros dans `Aluce11` permet de construire l'algorithme informatique de résolution en copiant la structure de l'algorithme mathématique. Ce genre de construction rend d'autant plus lisible le code de calcul aux utilisateurs ayant peu ou pas de connaissances dans les langage de programmation courants (C++ ou Fortran77 par exemple). En fait, ce système permet de distinguer l'étape de développement d'un algorithme de simulation avec son application puisqu'à priori un utilisateur n'a besoin d'agir que dans quelques fichiers de macros `Aluce11` pour simuler de nombreux cas (en principe uniquement la gestion des paramètres de calculs) sans jamais modifier les sources du logiciel ou les macros générales.

5.2.2 Charge de calcul

Afin d'évaluer les performances du logiciel `Aluce11` et d'identifier les zones de l'algorithme qui nécessitent en priorité une optimisation, reconsidérons les cas du creuset présenté à la section 2.5.2 et de la cuve numérique de la section 3.1. En choisissant des maillages proches au niveau du nombre de noeuds et d'éléments pour les deux cas (voir FIG. 5.3, FIG. 5.4 et TAB. 5.1), une comparaison des temps de calculs obtenus semble raisonnable.

²A l'exception du fichier `_visualisation.mac`

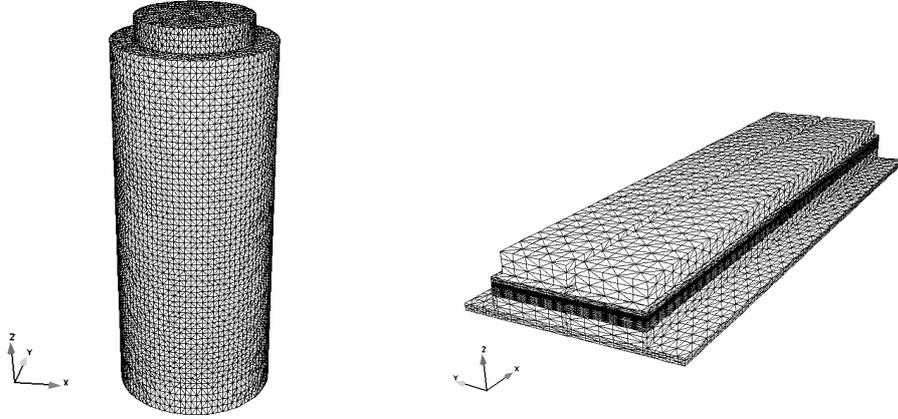


FIG. 5.3 – Maillages \mathcal{S}_h^n du creuset (à gauche) et de la cuve numérique (à droite).

Nombre Mailles	Maillage \mathcal{T}_h^n		Maillage \mathcal{S}_h^n		Maillage B_{Rh}^n	
	noeuds	éléments	noeuds	éléments	noeuds	éléments
Creuset	13'792	60'689	17'945	83'387	30'841	172'690
Cuve	14'064	59'050	23'016	99'340	34'172	184'555

TAB. 5.1 – Caractéristiques des maillages du creuset et de la cuve numérique.

Dans la table 5.2 sont reportées les mesures de temps de calculs effectuées pour les deux cas précédemment introduits. Les tests sont menés sur une machine avec deux processeurs *Intel* fonctionnant à une fréquence de 2.4 Ghz, utilisant jusqu'à 2 Go de mémoire vive et contrôlés par le système d'exploitation *GNU/Linux*. Pour chaque pas de temps les mesures des trois parts de l'algorithme qui occupent le plus de temps de calcul sont reprises, soit :

- *Maxwell* : résolution des équations de Maxwell comprenant le calcul de la densité de courant électrique \vec{j}_h^n (problème variationnel (2.54) et équation (2.55)) et de l'induction magnétique \vec{B}_h^n (2 itérations de l'algorithme de Schwarz de la section 2.3.2).
- *Navier-Stokes* : schéma de splitting en temps pour les équations de Navier-Stokes, i.e. résolution du problème de Stokes (2.21) et du problème de transport (2.33).

5.2. SIMULATION MHD INSTATIONNAIRE

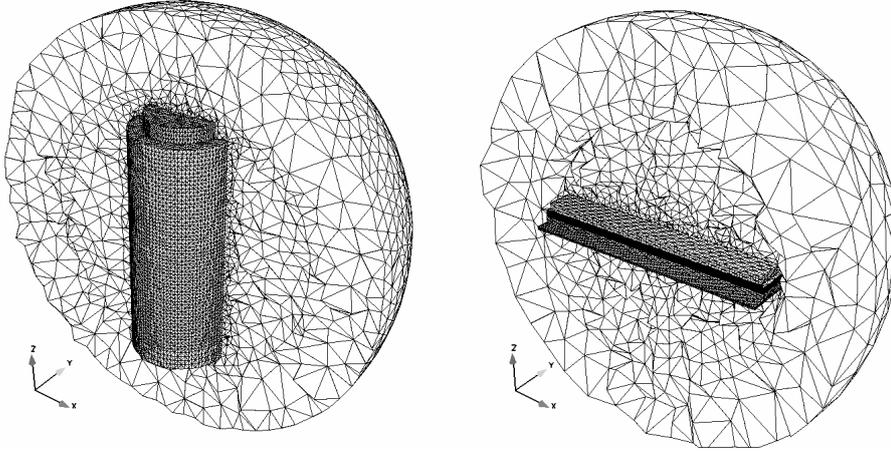


FIG. 5.4 – Maillages \mathcal{T}_h^n , \mathcal{S}_h^n et B_{Rh}^n du creuset (à gauche) et de la cuve numérique (à droite).

<i>Temps CPU</i>	Δt	Maxwell		Navier-Stokes		Déformation		Total	
		sec	%	sec	%	sec	%	sec	%
Creuset	0.01	39.43	33.61	52.01	44.33	25.23	21.50	117.33	100
Cuve	1.0	58.52	38.68	71.81	47.46	18.97	12.54	151.31	100

TAB. 5.2 – Charge de calcul pour les cas du creuset et de la cuve numérique.

- *Déformation* : transport de la fonction Level-Set en résolvant l'équation (2.34), identification de la surface de niveau $\tilde{\varphi} = 0$ par la technique introduite à la section 2.2.1, lissage de l'interface par moindres carrés, déformation des maillages \mathcal{T}_h^n , \mathcal{S}_h^n et B_{Rh}^n et interpolation de diverses quantités sur les nouveaux maillages.

Toutes les autres instructions réunies occupant moins de 1% du temps de calcul total, elles ne sont pas détaillées ici. Les valeurs publiées sont une moyenne sur 20 pas de temps de la charge de calcul.

Les principales observations que l'on peut tirer sont les suivantes :

- Les problèmes linéaires sont mieux conditionnés dans le cas du creuset que dans le cas de la cuve numérique, ceci est dû au fait que la géométrie d'une cuve présente, contrairement au creuset, un rapport entre hauteur et longueur important de l'ordre de

$$\frac{L_x}{L_z} \approx \frac{10}{0.04} = 250. \quad (5.11)$$

Ainsi pour discrétiser suffisamment les fluides dans la direction Oz en gardant un nombre total d'éléments raisonnable du point de vue de l'effort de calcul, les mailles de \mathcal{S}_h^n se doivent d'être anisotropes et donc les systèmes linéaires se retrouvent moins bien conditionnés. Avec un mauvais préconditionneur (préconditionneur diagonal par exemple), l'algorithme itératif utilisé pour résoudre le problème de Stokes converge extrêmement lentement.

- La partie prépondérante au niveau du temps de calcul est la résolution de l'équation de Stokes. Actuellement, le système linéaire est résolu par la méthode **GMRES** avec préconditionnement LU incomplet (voir section **5.3.1**). L'implantation de nouvelles méthodes de résolution ou l'utilisation de préconditionneurs plus performants est une voie à étudier pour l'optimisation de cette étape.
- Un point délicat de l'algorithme évolutif est la gestion informatique de l'interpolation, utilisée non seulement à chaque changement de maillage mais aussi dans l'algorithme de détection de l'interface par une méthode de point fixe (voir Section. **2.2.1**). Notons qu'une optimisation importante a été effectuée en exploitant le fait qu'en principe, d'un pas de temps à l'autre, le déplacement du maillage est en principe relativement faible. Ainsi, la nouvelle position d'un noeud donné se trouve avec une grande probabilité dans un élément de son voisinage proche. La construction d'une table des éléments voisins des noeuds dans le maillage initial permet donc de diminuer considérablement le temps de calcul dédié à l'interpolation. De plus, comme la topologie des maillages ne change pas au cours du temps, cette opération n'est effectuée qu'une seule fois.
- Comme on l'a vu au chapitre **3**, la résolution des équations de Maxwell à chaque pas de temps n'est pas forcément nécessaire. Pour gagner facilement en performance sans perdre trop de précision, il est donc préférable de résoudre moins souvent les équations dédiées au champ d'induction magnétique. Une économie en temps de calcul jusqu'à 50 % est alors envisageable (cf. Section. **3.2.3**).

5.3 Optimisations & Perspectives

Un des objectifs initiaux de cette thèse était de développer à partir du modèle de Sonia Pain [14] un code évolutif performant permettant la simulation de l'électrolyse sur cuve réelle. Une des principales difficultés rencontrée réside dans le fait que, sur des géométries complexes avec des maillages souvent anisotropes, les temps de calculs peuvent exploser. Pour améliorer cette

situation, un travail de modélisation a été opéré et de nouveaux algorithmes numériques ont été ajoutés au logiciel de simulation. Dans cette section, on présente quelques considérations purement informatique d’optimisation du code.

5.3.1 Solveurs

Du point de vue informatique, une des clés qui dictent les performances d’un code éléments finis est la gestion des opérations d’algèbre linéaire, en particulier la résolution de systèmes matriciels. Actuellement, `Aluce11` dispose de quelques solveurs classiques largement répandus, décrits ici et dont l’utilisation est présentée dans le listing 5.17 :

- Matrices pleines : pour gérer les systèmes en stockage plein, les outils de résolution de la librairie `Lapack` ([42, 43]) sont disponibles, en particulier la méthode de *factorisation LU*. L’utilisation de ce type de méthode est marginale et limitée à des systèmes de taille réduite mais peut être très utile, notamment pour effectuer le lissage de l’interface à chaque pas de temps (cf. section 2.2.3).
- Matrices creuses : les systèmes creux sont typiques des méthodes d’éléments finis. Il est connu que l’utilisation de méthodes itératives de résolution est particulièrement efficace dans ce cas. Principalement, on distingue deux types de systèmes et leurs méthodes dédiées :
 - Systèmes SDP : les systèmes symétriques et définis positifs peuvent être résolus rapidement et en utilisant un minimum de mémoire par la méthode du gradient-conjugué (CG). Une autre alternative, plus coûteuse en mémoire mais convergeant plus rapidement est la méthode “*Algebraic Multigrid*” (AMG) (voir [44]).
 - Systèmes généraux : pour la résolution des systèmes linéaires généraux, deux méthodes efficaces sont disponibles dans `Aluce11` : la plus utilisée est l’algorithme “*Global Minimal RESidual*” (GMRES) (voir [45]) qui possède l’avantage de converger de manière monotone vers la solution. L’alternative est une méthode dérivée de la méthode CG, *Stabilized Bi-Conjuguate Gradient* (BICGSTAB) (voir [46]). Pour les cas considérés ici, il semble que ces deux méthodes possèdent des performances similaires.

Les méthodes énoncées ci-dessus ne sont pas directement implantées dans `Aluce11` mais accessibles via les bibliothèques `SparseLib++` et `IML++` (voir [47]).

Listing 5.17 – Définition des solveurs éléments finis dans Alucell.

```

1 # -----
2 # System Solver choice
3 # -----
4 # Conjuguate gradient with digonal preconditioner
5 (system_iter_algo="cg_diag")
6 # Conjuguate gradient with incomplete LU preconditioner
7 (system_iter_algo="cg_ilu0")
8 # Algebraic multigrid method
9 (system_iter_algo="amg_")
10 # GMRES with diagonal preconditioner
11 (system_iter_algo="gmres_diag")
12 # GMRES with incomplete LU preconditioner
13 (system_iter_algo="gmres_ilu0")
14 # BiCGSTAB with diagonal preconditioner
15 (system_iter_algo="cpp_bicgstab_diag")
16 # BiCGSTAB with incomplete LU preconditioner
17 (system_iter_algo="cpp_bicgstab_ilu0")
18
19 # -----
20 # General parameters definitions
21 # -----
22 # Max number of iteration before stopping
23 (system_iter_itmax=1000)
24 # Tolarence on residual
25 (system_iter_tol=1e-6)
26 # Verbose 0 = no display, 1 = display convergence infos
27 (system_iter_verbose=1)
28 # System Size information for profil
29 (system_mat_mbrhs=250)
30 (system_mat_ij_size=50000000)
31
32 # -----
33 # GMRES additional parameter
34 # -----
35 # Max dimension of subspace (restart parameter)
36 (system_iter_dimens=2000)
37 # Specific parameter
38 (statk=0)
39
40 # -----
41 # AMG additional parameter
42 # -----
43 # Specific parameters defined in a macro file
44 gen/amg_params.mac()

```

Dans le futur, pour améliorer la résolution des systèmes linéaires, il semble important d'élargir non pas la gamme des solveurs mais plutôt celle des préconditionneurs utilisables. L'efficacité des méthodes itératives peut en effet dépendre fortement du préconditionneur utilisé, en particulier lorsque la taille des matrices devient grande. Actuellement, les bibliothèques couplées

avec `Alucell` disposent de trop peu de préconditionneurs (essentiellement deux) alors que des alternatives évoluées existent comme `Petsc` (voir [48]) ou `Trilinos` (voir [49]) qui proposent un plus grand nombre de méthodes et de préconditionneurs. Ces bibliothèques offrent en outre la possibilité de résoudre les systèmes en parallèle sur des machines multiprocesseurs.

5.3.2 Formule de Biot-Savart en parallèle

Pour conclure ce chapitre, on présente une optimisation importante apportée sur le code pour diminuer fortement le temps de calcul global d'une simulation. On a vu à la section 2.3.2 que l'algorithme de résolution du champ d'induction magnétique repose sur la décomposition

$$\vec{B}(t) = \vec{B}^{hor} + \delta\vec{B}(t), \quad (5.12)$$

où \vec{B}^{hor} est l'induction magnétique lorsque l'interface est un plan horizontal. Le calcul de $\delta\vec{B}(t)$ peut alors être ramené à la résolution d'un problème elliptique sur un domaine non-borné tandis que \vec{B}^{hor} est donné par la formule de Biot et Savart

$$\vec{B}^{hor}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Sigma} \vec{j}^{hor}(\vec{y}) \wedge \frac{\vec{x} - \vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|^3} d\vec{y}, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (5.13)$$

En supposant le courant constant par élément, l'intégrale de l'équation (5.13) est approchée numériquement par une formule de quadrature sur un maillage en tétraèdres du domaine considéré, i.e.

$$\vec{B}_h^{hor}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_K \left[\vec{j}_h^{hor}|_K \wedge \vec{I}_K(\vec{G}_{\vec{x}}) \right], \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (5.14)$$

Ici I_K est une formule de quadrature sur l'élément K et $G_x : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ est le noyau de Green défini pour tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ par

$$\vec{G}_x(\vec{y}) = \frac{\vec{x} - \vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|^3}, \quad \vec{y} \neq \vec{x}. \quad (5.15)$$

Numériquement, si l'induction magnétique doit être calculée en N_x points et que le maillage des supports de courant compte M_y éléments, la complexité de la formule (5.14) est de l'ordre de $\mathcal{O}(N_x M_y)$. Informatiquement parlant, ce calcul effectué sur un cube discrétisé en $M_y = 80'000$ tétraèdres ($20 \times 20 \times 40$ hexaèdres coupés en 5 tétraèdres) et possédant $N_x \approx 18'000$ noeuds où l'induction magnétique est évaluée, demande environ 25 heures de calcul sur une machine *Intel* 2.4 Ghz. Pour envisager ce calcul sur une cuve d'électrolyse dans toute sa complexité possédant jusqu'à un million d'éléments, l'algorithme doit être amélioré, sans quoi le temps CPU utilisé risque de se compter en semaines, voire en mois.

L'idée mise en oeuvre ici pour optimiser ce problème est d'utiliser le fait que l'équation (5.13) est indépendante pour chaque point \vec{x} considéré. Le calcul de \vec{B}^{hor} peut donc être effectué sur une machine multiprocesseurs à mémoire distribuée (*DMP cluster*) très efficacement en appliquant l'algorithme parallèle 1.

Algorithme 1 Calcul du champ d'induction magnétique en parallèle

Entrees : Points x_1, \dots, x_{N_x} et densité de courant $\vec{j}_1^{hor}, \dots, \vec{j}_{M_y}^{hor}$.

Sorties : Champ d'induction magnétique $\vec{B}^{hor}(x_i), \forall i = 1, \dots, N_x$.

Algorithme :

```

T :=  $N_x$  / Nprocs ;
R :=  $N_x$  mod Nprocs ;
for proc = 0, ..., Nprocs - 1 do
  if proc = 0 then
    1- Calculer  $B^{hor}(x_i)$ , pour  $0 \leq i < T + R$  ;
    2- Recevoir de chaque processeur une partie du calcul ;
  else
    1- Calculer  $B^{hor}(x_i)$ , pour
      
$$R + proc * T \leq i < R + (proc + 1) * T ;$$

    2- Envoyer le résultat vers le processeur 0 ;
  end if
end for

```

Retourne le champ \vec{B}^{hor} .

Cet algorithme a été implémenté en C++ dans *Alucell* en utilisant la librairie MPI (cf. [50]) pour la gestion des communications entre processeurs. Dans la table 5.3 on reporte les temps de calcul en fonction du nombre de processeur pour le cas du cube introduit précédemment. On peut voir que, jusqu'à 30 processeurs, le gain est optimal puisque le speedup³ est quasiment égal au nombre de processeurs. Ce résultat s'explique par le fait que quasiment aucune communication entre processeurs n'est nécessaire au cours du calcul. Notons finalement que l'étude porte ici sur une machine parallèle de petite taille (36 processeurs) mais qu'a priori, pour autant que le maillage puisse être entièrement dupliqué localement sur chaque noeud de calcul, les performances devraient rester identiques pour un nombre arbitrairement grand de processeurs.

³Le speedup est le rapport entre temps de calcul séquentiel et temps de calcul parallèle.

Nbre de procs	Temps CPU [sec]	Temps CPU [hmin]	Speedup
1	92478	~ 25h 42 min	-
2	46082	~ 12h 48 min	2.006
10	9275	~ 2h 35 min	9.97
20	4621	~ 1h 17 min	20.01
30	3095	~ 0h 52 min	29.88

TAB. 5.3 – Performances du code parallèle pour le calcul de \vec{B}^{hor} .

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre final le logiciel de simulation `Aluce11` a été présenté. Au travers d'un exemple, on a vu comment utiliser le langage de programmation intégré pour construire et résoudre un problème aux dérivées partielles avec une méthode d'éléments finis.

Dans un deuxième temps la structure des macros pour le calcul MHD évolutif a été décrite. L'algorithme informatique utilisé est proche du modèle mathématique du chapitre 1 ce qui permet une meilleure lecture du code et une plus grande compréhension.

Finalement, des questions d'optimisation du code ont été abordées. Un algorithme parallèle très efficace pour le calcul du champ d'induction magnétique par la loi de Biot-Savart est décrit. De plus, des mesures de la charge de calcul dans deux situations caractéristiques tendent à montrer que les futurs efforts d'optimisation devraient se porter sur une résolution plus efficace du problème de Stokes. Le couplage d'`Aluce11` avec d'autres bibliothèques de calculs algébriques est une voie à étudier comme l'utilisation de nouvelles méthodes numériques pour l'approximation du problème de Stokes.

Conclusion

Cette thèse a pour objet le développement d'un outil informatique de simulation numérique de phénomènes magnétohydrodynamiques liés à l'électrolyse de l'aluminium.

Un modèle évolutif couplant les équations de Navier-Stokes aux équations de Maxwell est présenté. Les vitesses et pressions d'un système composé de deux fluides soumis à des forces électromagnétiques sont calculées et le mouvement de l'interface libre entre les deux liquides est déterminé au cours du temps. En particulier, l'évolution du système jusqu'à un état stationnaire est étudiée. Les effets de tension superficielle sur l'interface semblent jouer un rôle prépondérant lorsque les dimensions du domaine fluide sont proches de la longueur capillaire mais peuvent être négligés pour l'étude de cuves réalistes.

L'approche présentée permet de déterminer la stabilité d'une cuve d'électrolyse d'aluminium, dans un sens dynamique du terme, en quantifiant l'évolution de la vitesse moyenne de l'interface au cours du temps. Cette définition de stabilité est confrontée à la stabilité linéaire décrite par Descloux, Flück et Romerio dans [10, 11] et des résultats comparables sont obtenus dans des régimes stables et instables. La discrétisation des équations sur un maillage mobile, déformé à chaque pas de temps pour suivre le mouvement de l'interface, est efficace et permet d'évaluer facilement les intégrales volumiques et de surface intervenant dans les diverses formes variationnelles. Cette approche engendre cependant des difficultés pour traiter des problèmes ayant un support extérieur à la cuve puisque la déformation doit alors être prolongée hors du domaine fluide et exige également une étape d'interpolation à chaque pas de temps qui peut s'avérer coûteuse. Dans le dernier chapitre, le code de calcul proprement dit est décrit. Ce logiciel, nommé `Alucell`, permet de simuler de nombreux problèmes liés à l'électrolyse de l'aluminium, mais il peut également jouer le rôle de librairie éléments finis et ainsi de résoudre la plupart des équations aux dérivées partielles jusqu'à l'ordre 2, sur des géométries 1D, 2D ou 3D.

Pour l'avenir, outre l'optimisation du code `Alucell`, une perspective intéressante est l'ajout des effets de solidification du bain électrolytique qui devraient modifier de manière importante l'écoulement, la distribution des courants et la forme de l'interface stationnaire. Le passage à un algorithme évolutif sur maillage fixe semble alors inévitable en raison de la difficulté à déformer le maillage des éléments isolants extérieurs aux fluides qui sont nécessaires pour résoudre le problème thermique. Une technique de découpage du maillage en fonction de la position de l'interface aluminium/bain est à l'étude pour permettre la résolution du problème MHD évolutif avec interface libre sur un maillage fixe.

Annexe A

Polynômes de Jacobi

Le but de cette annexe est de présenter certaines propriétés des *polynômes de Jacobi* utilisés ici par la méthode de lissage de l'interface introduite à la section 2.2.3. Les formules qui suivent sont tirées de [51, 52, 53] où plus de détails sont disponibles.

Les polynômes de Jacobi sont notés, pour un ordre $m \in \mathbb{N}$:

$$P_k^{(\alpha, \beta)} : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \quad \alpha, \beta > -1, k = 0, \dots, m. \quad (\text{A.1})$$

Cette famille de polynômes est orthogonale dans $[-1, 1]$ relativement au produit :

$$(u, v)_{(\alpha, \beta)} = \int_{-1}^1 u(x)v(x)(1-x)^\alpha(1+x)^\beta dx. \quad (\text{A.2})$$

Construction La construction des polynômes de Jacobi peut se faire récursivement selon la formule :

$$\begin{aligned} P_0^{(\alpha, \beta)}(x) &= 1, \\ P_1^{(\alpha, \beta)}(x) &= \frac{1}{2}(\alpha - \beta + (\alpha + \beta + 2)x), \\ a_{1,k}P_{k+1}^{(\alpha, \beta)}(x) &= (a_{2,k} + a_{3,k}x)P_k^{(\alpha, \beta)}(x) - a_{4,k}P_{k-1}^{(\alpha, \beta)}(x), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

avec les coefficients suivants

$$\begin{aligned} a_{1,k} &= 2(k+1)(k+\alpha+\beta+1)(2k+\alpha+\beta), \\ a_{2,k} &= (2k+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2), \\ a_{3,k} &= \Gamma(2k+\alpha+\beta+3)/\Gamma(2k+\alpha+\beta), \\ a_{4,k} &= 2(k+\alpha)(k+\beta)(2k+\alpha+\beta+2), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

où $\Gamma(\cdot)$ est la fonction gamma. On rappelle que si $z \in \mathbb{C}$, tel que $\text{Re}(z) > 0$ alors :

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t} dt. \quad (\text{A.5})$$

De plus si k est un entier alors

$$\Gamma(k) = (k-1)!$$

Cas particuliers

- Polynômes de Legendre ($\alpha = 0 = \beta$) (FIG. A.1) :

$$L_k(x) = P_k^{(0,0)}(x). \quad (\text{A.6})$$

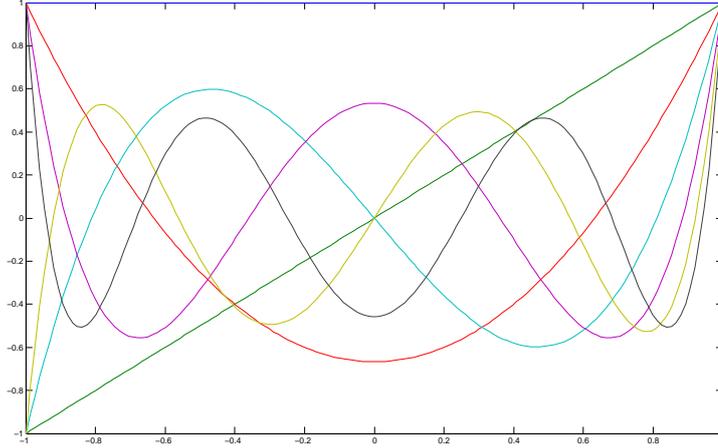


FIG. A.1 – Polynômes de Legendre à l'ordre 6.

- Polynômes de Chebyshev ($\alpha = -\frac{1}{2} = \beta$) :

$$T_k(x) = \frac{2^{2k}(k!)^2}{(2k)!} P_k^{(-1/2,-1/2)}(x). \quad (\text{A.7})$$

Orthogonalité La relation d'orthogonalité des polynômes de Jacobi par rapport au produit défini dans l'équation (A.2), s'écrit :

$$\left(P_p^{(\alpha,\beta)}, P_q^{(\alpha,\beta)} \right)_{(\alpha,\beta)} = \delta_{pq} \cdot \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2p + \alpha + \beta + 1} \cdot \frac{\Gamma(p + \alpha + 1)\Gamma(p + \beta + 1)}{p!\Gamma(p + \alpha + \beta + 1)}, \quad (\text{A.8})$$

avec δ_{pq} , le delta de Kronecker.

Tensorisation La famille $\{P_k^{(\alpha,\beta)} : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}\}_{k=0}^m$ est une base orthogonale de l'espace

$$\mathbb{P}_m([-1, 1]) = \text{span} \left\{ p(x) = x^i \mid x \in [-1, 1], i = 0, \dots, m \right\}. \quad (\text{A.9})$$

Le passage au 2D est facile, en tensorisant la base avec elle même, i.e. en formant la famille $\{P_{ij}^{(\alpha,\beta)} : [-1, 1]^2 \rightarrow \mathbb{R}\}_{i,j=0}^m$ définie par

$$P_{ij}^{(\alpha,\beta)}(x, y) = P_i^{(\alpha,\beta)}(x)P_j^{(\alpha,\beta)}(y), \quad \forall (x, y) \in [-1, 1]^2, \quad (\text{A.10})$$

et qui forme une base orthogonale de l'espace

$$\mathbb{P}_m([-1, 1]^2) = \text{span} \left\{ p(x) = x^i y^j \mid (x, y) \in [-1, 1] \times [-1, 1], i, j = 0, \dots, m \right\}. \quad (\text{A.11})$$

Pour tout $Lx, Ly > 0$, on peut généraliser la famille $\{P_{ij}^{(\alpha, \beta)}\}_{i, j=0}^m$ au domaine $\Lambda = [-Lx, Lx] \times [-Ly, Ly]$ par la formule

$$P_{ij}^{(\alpha, \beta)}(x, y) = P_i^{(\alpha, \beta)}(x/Lx)P_j^{(\alpha, \beta)}(y/Ly), \quad \forall (x, y) \in \Lambda, \quad (\text{A.12})$$

pour former une base de

$$\mathbb{P}_m(\Lambda) = \text{span} \left\{ p(x) = x^i y^j \mid (x, y) \in \Lambda, i, j = 0, \dots, m \right\}. \quad (\text{A.13})$$

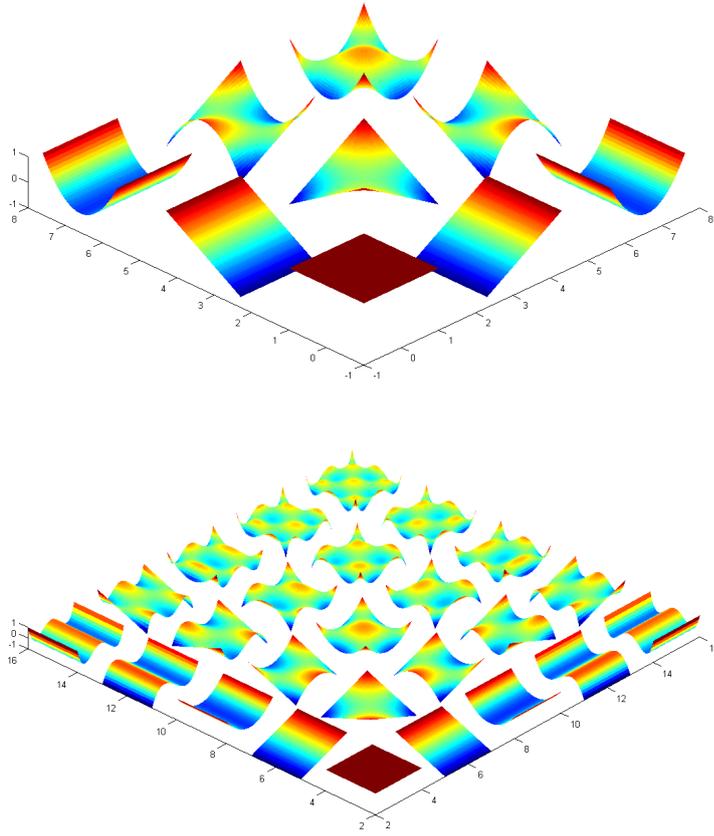


FIG. A.2 – Polynômes de Legendre en 2D à l'ordre 2 (haut) et à l'ordre 4 (bas).

Listing A.1 – Construction des polynômes de Jacobi 1D.

```

function P = jacobi_eval(N,a,b,x)
2  % FUNCTION P = JACOBI_EVAL(N,a,b,x)
  % Construct and plot the Jacobi Polynomial
4  % P^(a,b)(x) up to degree N.

6  doplot = 0;

8  if N <= 0
    disp('error > Order must be at least 1');
10 else
    if N == 1
12     P(1,:) = ones(size(x));
        P(2,:) = (a-b+(a+b+2)*x)/2;
14     else
        P(1,:) = ones(size(x));
16     P(2,:) = (a-b+(a+b+2)*x)/2;
        for i = 3:N+1
18         ak(1) = 2*i*(i+a+b)*(2*i-2+a+b);
            ak(2) = (a*a - b*b)*(2*i-2+a+b+1);
20         ak(3) = (2*i-2+a+b)*(2*i-2+a+b+1)*(2*i+a+b);
            ak(4) = 2*(i-1+a)*(i-1+b)*(2*i+a+b);
22         P(i,:) = ((ak(2)+ak(3)*x).*P(i-1,:)-ak(4)*P(i-2,:))/ak(1);
            end
24         end
        end
26     end
    if(doplot)
28         hold all;
            for i=1:size(P,1)
30                 plot(x,P(i,:));
                    end
32         end
34     return

```

Listing A.2 – Construction des polynômes de Jacobi 2D.

```
function ZJ = jacobi2D(N,a,b)
2 % FUNCTION ZJ = JACOBI2D(N,a,b)
% Construct and plot the 2D Jacobi Polynomial
4 % P_ij^(a,b) up to degree N.
x = linspace(-1,1,150); y = x;
6 doplot = 1;

8 [X,Y] = meshgrid(x,y);
if N <= 0
10 disp('error > Order must be at least 1');
else
12 Jx = jacobi_eval(N,a,b,x);
Jy = jacobi_eval(N,a,b,y);
14
k=0;
16 for p=1:N+1
for q=1:N+1
18 k=k+1;
[XJ,YJ] = meshgrid(Jx(p,:),Jy(q,:));
20 ZJ(k).mat = XJ.*YJ;
end
22 end

24 if(doplot)
k=0;
26 space = 1.5;
figure(1);hold on;
28 for p=1:N+1
for q=1:N+1
30 k=k+1;
xp = x + (p-1)*(2+space);
32 yq = y + (q-1)*(2+space);
[XP,YQ]=meshgrid(xp,yq);
34 surf(XP,YQ,ZJ(k).mat, 'LineStyle', 'none');
end
36 end
end
38 end
40 return
```


Bibliographie

- [1] N. Urata, K. Mori, and H. Ikeuchi. Behavior of bath and molten metal in aluminum electrolytic cell. *Light Metals*, 26 :573–583, 1976.
- [2] A.D. Sneyd. Stability of fluid layers carrying a normal electric current. *J. Fluid Mech.*, 156 :223–236, 1985.
- [3] A.D. Sneyd. Interfacial instabilities in aluminium reduction cells. *J. Fluid Mech.*, 236 :111–126, 1992.
- [4] R. Moreau and D. Ziegler. Stability of aluminum cells, a new approach. *Light Metals*, pages 359–364, 1986.
- [5] T. Sele. Instabilities of the metal surface in electrolytic alumina reduction cells. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 8(4) :613–618, 1977.
- [6] V. Potocnik. Modelling of metal-bath interface waves in hall-heroult cells. 1989.
- [7] M. Segatz, D. Vogelsang, C. Droste, and P. Baekler. Modelling of transient magneto-hydrodynamic phenomena in hall-heroult cells. *Light Metals*, pages 361–368, 1993.
- [8] D. Munger. *Simulation numérique des instabilités magnétohydrodynamiques dans les cuves de production de l'aluminium*. Msc. in physics, Université de Montréal, 2004.
- [9] J.-F. Gerbeau, T. Lelievre, C. Le Bris, N. Ligonesche, and C. Vanvoren. Metal pad roll instabilities. 2002.
- [10] J. Descloux, M. Flück, and M. V. Romerio. Spectral aspects of an industrial problem. In *Spectral analysis of complex structures (Paris, 1993)*, volume 49 of *Travaux en Cours*, pages 17–33. Hermann, Paris, 1995.
- [11] J. Descloux, M. Flück, and M. V. Romerio. A modelling of the stability of aluminium electrolysis cells. In *Nonlinear partial differential equations and their applications. Collège de France Seminar, Vol. XIII (Paris, 1994/1996)*, volume 391 of *Pitman Res. Notes Math. Ser.*, pages 117–133. Longman, Harlow, 1998.

-
- [12] M. Flück, T. Hofer, A. Janka, and J. Rappaz. Numerical methods for ferromagnetic plates. *Scientific Report in Analysis and Numerical Analysis*, 2008. EPFL.
- [13] Y. Safa. *Simulation numérique des phénomènes thermiques et magnétohydrodynamiques dans une cellule de Hall-Héroult*. PhD in applied mathematics, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2005. Thèse N° 3185.
- [14] S. Pain. *Simulation numérique du mouvement des fluides dans une cellule de Hall-Héroult*. PhD in applied mathematics, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2006. Thèse N° 3497.
- [15] A. Ledrian. *Etude de méthodes numériques efficaces pour le calcul de l'induction magnétique dans une cuve d'électrolyse de l'aluminium*. Msc. in physics, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2006.
- [16] J.-F. Gerbeau, C. Le Bris, and T. Lelièvre. *Mathematical methods for the magnetohydrodynamics of liquid metals*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, Oxford, 2006.
- [17] J. A. Sethian. *Level set methods*, volume 3 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1996. Evolving interfaces in geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science.
- [18] R. Glowinski. Finite element methods for incompressible viscous flow. In *Handbook of numerical analysis, Vol. IX*, Handb. Numer. Anal., IX, pages 3–1176. North-Holland, Amsterdam, 2003.
- [19] A. Ern and J.-L. Guermond. *Theory and practice of finite elements*, volume 159 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 2004.
- [20] A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical approximation of partial differential equations*, volume 23 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [21] P.-L. Lions. *Mathematical topics in fluid mechanics. Vol. 1*, volume 3 of *Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications*. The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 1996. Incompressible models, Oxford Science Publications.
- [22] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite element methods for Navier-Stokes equations*, volume 5 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1986. Theory and algorithms.
- [23] E.J. Dean, R. Glowinski, Y.M. Kuo, and G. Nasser. *Discretization of Some Second Order In-Time Differential Equations Applications to Nonlinear Wave Problems*. Ed. A. V. Balakrishnan. Los Angeles : Optimization Software, Inc., Los Angeles, 1990. Computational Techniques in Identification and Control of Flexible Flight Structures.

BIBLIOGRAPHIE

- [24] M. Picasso and J. Rappaz. Stability of time-splitting schemes for the Stokes problem with stabilized finite elements. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 17(6) :632–656, 2001.
- [25] T. J. R. Hughes, L. P. Franca, and M. Balestra. A new finite element formulation for computational fluid dynamics. V. Circumventing the Babuška-Brezzi condition : a stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 59(1) :85–99, 1986.
- [26] A. Caboussat, M. Picasso, and J. Rappaz. Numerical simulation of free surface incompressible liquid flows surrounded by compressible gas. *J. Comput. Phys.*, 203(2) :626–649, 2005.
- [27] C. G. Speziale. Analytical methods for the development of Reynolds-stress closures in turbulence. In *Annual review of fluid mechanics, Vol. 23*, pages 107–157. Annual Reviews, Palo Alto, CA, 1991.
- [28] T. Chacon and O. Pironneau. On the mathematical foundations of the k - ϵ turbulent model. In *Vistas in applied mathematics*, Transl. Ser. Math. Engrg., pages 44–56. Optimization Software, New York, 1986.
- [29] B. Mohammadi and O. Pironneau. *Analysis of the k -epsilon turbulence model*. RAM : Research in Applied Mathematics. Masson, Paris, 1994.
- [30] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 32(1-3) :199–259, 1982. FENOMECH '81, Part I (Stuttgart, 1981).
- [31] L. P. Franca, S. L. Frey, and T. J. R. Hughes. Stabilized finite element methods. I. Application to the advective-diffusive model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 95(2) :253–276, 1992.
- [32] C. Johnson and J.-C. Nédélec. On the coupling of boundary integral and finite element methods. *Math. Comp.*, 35(152) :1063–1079, 1980.
- [33] F. Ben Belgacem, M. Fournié, N. Gmati, and F. Jelassi. Sur le traitement des conditions aux limites à l'infini pour quelques problèmes extérieurs par la méthode de Schwarz alternée. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 336(3) :277–282, 2003.
- [34] A. Masserey, J. Rappaz, R. Rozsnyo, and M. Swierkosz. Numerical integration of the three-dimensional Green kernel for an electromagnetic problem. *J. Comput. Phys.*, 205(1) :48–71, 2005.
- [35] J.-C. Nédélec. *Acoustic and electromagnetic equations*, volume 144 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 2001. Integral representations for harmonic problems.
- [36] J. Rappaz and G. Steiner. On a domain decomposition method for numerically solving a magnetic induction problem. *Scientific Report in Analysis and Numerical Analysis*, 2008. EPFL.

-
- [37] P.A. Davidson and R.I. Lindsay. Stability of interfacial waves in aluminium reduction cells. *Journal of Fluid Mechanics*, 362 :273–295, 1998.
- [38] C. Geuzaine and J.-F. Remacle. *Gmsh Reference Manual*. <http://www.geuz.org/gmsh>, 1.12 edition, August 2003.
- [39] P. L. George, F. Hecht, and E. Saltel. Fully automatic mesh generator for 3d domains of any shape. *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, 2(3) :187–218, 1990.
- [40] Computational Engineering International. *Enight Reference Manual*. <http://www.ensight.com>, 1994.
- [41] A. Henderson Squillacote. *The ParaView Guide*. Kitware, Inc. ISBN 1-930934-21-4, <http://www.paraview.org/>, third edition, 2008.
- [42] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, J.W. Demmel, J.J. Dongarra, J. Du-Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D.C. Sorensen. Lapack : A portable linear algebra library for high-performance computers. Technical Report 20, LAPACK Working Note, may 1990.
- [43] E. Anderson and J. J. Dongarra. Performance of LAPACK : A portable library of numerical linear algebra routines. Technical Report 44, LAPACK Working Note, May 1992.
- [44] P. Vaněk, M. Brezina, and J. Mandel. Convergence of algebraic multigrid based on smoothed aggregation. *Numer. Math.*, 88(3) :559–579, 2001.
- [45] Y. Saad and M. H. Schultz. GMRES : a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7(3) :856–869, 1986.
- [46] H. A. van der Vorst. Bi-CGSTAB : a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 13(2) :631–644, 1992.
- [47] J. Dongarra, A. Lumsdaine, X. Niu, R. Pozo, and K. Remington. A sparse matrix library in C++ for high performance architectures. pages 214–218, 1994.
- [48] S. Balay, W. D. Gropp, L. Curfman McInnes, and B. F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In E. Arge, A. M. Bruaset, and H. P. Langtangen, editors, *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.
- [49] M. A. Heroux, R. A. Bartlett, V. E. Howle, R. J. Hoekstra, J. J. Hu, T. G. Kolda, R. B. Lehoucq, K. R. Long, R. P. Pawlowski, E. T. Phipps, A. G. Salinger, H. K. Thornquist, R. S. Tuminaro, J. M. Willenbring, A. Williams, and K. S. Stanley. An overview of the trilinos project. *ACM Trans. Math. Softw.*, 31(3) :397–423, 2005.

BIBLIOGRAPHIE

- [50] W. Gropp and E. Lusk. The MPI communication library : its design and a portable implementation. In *Proceedings of the Scalable Parallel Libraries Conference, October 6–8, 1993, Mississippi State, Mississippi*, pages 160–165, 1109 Spring Street, Suite 300, Silver Spring, MD 20910, USA, 1994. IEEE Computer Society Press.
- [51] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, volume 55 of *National Bureau of Standards Applied Mathematics Series*. For sale by the Superintendent of Documents, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1964.
- [52] G. E. Karniadakis and S. J. Sherwin. *Spectral/hp element methods for computational fluid dynamics*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, New York, second edition, 2005.
- [53] A. Ghizzetti and A. Ossicini. *Quadrature formulae*. Academic Press, New York, 1970.

Curriculum vitae

Né le 2 juillet 1981 à Sion en Valais, je commence mes études au Lycée Collège des Creusets de Sion (*LCC*) où j'obtiens, en 2001, une maturité scientifique. De 2001 à 2006 j'entreprends des études de mathématiques à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne. En avril 2006 un "Master of Science in applied mathematics" m'est décerné suite à un travail pratique de quatre mois effectué dans la chaire de modélisation et calcul scientifique (*CMCS*) du professeur Alfio Quarteroni sous la direction du Dr. Christophe Prud'homme. Depuis lors j'occupe un poste d'assistant doctorant dans la chaire d'analyse et simulation numériques (*ASN*). Mon travail de thèse, dirigé par le professeur Jacques Rappaz, consiste à la simulation numérique de cuves d'électrolyse de l'aluminium.