

Université de Montréal

Simulation numérique des instabilités magnétohydrodynamiques
dans les cuves de production de l'aluminium

par
David Munger

Département de physique
Faculté des arts et sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures
en vue de l'obtention du grade de Maître ès sciences (M.Sc.)
en physique

Août 2004

© David Munger, 2004



QC

3

U54

2004

v.005

Direction des bibliothèques

AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé :

Simulation numérique des instabilités magnétohydrodynamiques
dans les cuves de production de l'aluminium

présenté par :

David Munger

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

Georges Michaud, président-rapporteur

Alain Vincent, directeur de recherche

Paul Charbonneau, membre du jury

Mémoire accepté le 9 septembre 2004

Sommaire

Ce travail a pour objet l'étude, au moyen de la simulation numérique, des instabilités magnétohydrodynamiques se produisant dans les cuves de production de l'aluminium, et plus spécifiquement de celles qui se manifestent sous la forme d'une onde rotative à la surface de l'aluminium liquide : le roulis.

Nous élaborons une méthode numérique, combinant la technique des contours à une discrétisation en volumes finis, pour résoudre les équations non stationnaires de la magnétohydrodynamique dans un système tridimensionnel à deux fluides. Nous employons une formulation en terme du potentiel magnétique vectoriel pour obtenir exactement un champ magnétique à divergence nulle.

Nos expériences numériques confirment des résultats obtenus par d'autres auteurs et nous identifions les mécanismes physiques à l'origine du roulis. Nous étudions l'influence du rapport d'aspect du système et du champ magnétique vertical, puis nous démontrons que les courants induits sont stabilisateurs. Enfin, nous découvrons une nouvelle instabilité et en donnons l'explication physique.

Mots clés : magnétohydrodynamique, instabilités, roulis du métal liquide, potentiel magnétique vectoriel, production de l'aluminium, simulation numérique, méthode des contours.

Summary

This work aims to investigate, by means of numerical simulation, the magnetohydrodynamic instabilities occurring in aluminum production cells, and especially the kind that takes place as a rotating wave at the aluminum's surface : the metal pad roll.

We design a numerical method combining a level set technique together with a finite volumes discretization, in order to solve the non stationary magnetohydrodynamic equations in a three-dimensional two-fluid system. We take a formulation in terms of the magnetic vector potential to overcome the difficulty of keeping a divergence-free magnetic field.

Our numerical experiments confirm results obtained by other authors and we identify the physical mechanism driving the metal pad roll. We investigate the effects of varying the aspect ratio of the system and the vertical magnetic field, then we show that the induced currents are stabilizing. Finally, we discover a new instability and give it a physical explanation.

Key words : magnetohydrodynamics, instabilities, metal pad roll, magnetic vector potential, aluminum production, numerical simulation, level set method.

Table des matières

1	Introduction : la physique de la production de l'aluminium	1
1.1	Production de l'aluminium par électrolyse	1
1.1.1	Procédé de Hall-Héroult	1
1.1.2	Cuve d'électrolyse	2
1.1.3	Salle de cuves	3
1.1.4	Le problème	4
1.2	Revue de littérature	5
1.2.1	Types d'ondes	6
1.2.2	Analyse par linéarisation	7
1.2.2.1	Relations de dispersion	10
1.2.3	Simulations numériques et roulis de l'interface	16
1.2.3.1	Le modèle de Sele	17
1.2.3.2	Simulations dynamiques	18
2	Modèle physique	21
2.1	La cuve de Hall-Héroult	21
2.1.1	Description statique de la cuve	21
2.2	Les équations de transport	26
2.2.1	Forme générale d'une équation de transport	27
2.2.2	Transport de la masse	28
2.2.3	Transport de la quantité de mouvement	29
2.2.3.1	Séparation des variables	30
2.2.3.2	Temps caractéristiques	32
2.2.4	Transport de l'énergie interne	35
2.2.4.1	Temps caractéristiques	35
2.2.5	Transport de l'induction magnétique	37
2.2.5.1	Équations de Maxwell	37

2.2.5.2	Approximation magnétohydrodynamique	38
2.2.5.3	Approximation de la force électrique négligeable	40
2.2.5.4	Loi d'Ohm	41
2.2.5.5	Évolution temporelle du champ d'induction magnétique	42
2.2.5.6	Conservation de la divergence	43
2.2.5.7	Temps caractéristiques	43
2.2.5.8	Force magnétique	44
2.2.6	Potentiel magnétique vectoriel	44
2.2.6.1	Le problème de la divergence de \mathbf{B}	44
2.2.6.2	Nouvelle formulation	45
2.2.6.3	Conservation de la divergence	47
2.2.6.4	Retour à l'équation pour \mathbf{B}	48
2.2.7	Sommaire des temps caractéristiques	49
2.3	Choix d'échelle	51
2.4	Bilan d'énergie	52
2.4.1	Énergie cinétique	52
2.4.2	Énergie magnétique	54
2.4.3	Énergie potentielle	55
2.4.4	Bilan	56
2.5	Idéalisation de la cuve	56
2.6	Conditions aux frontières	58
2.6.1	Champ de vitesse	59
2.6.2	Pression	59
2.6.3	Champ d'induction magnétique	59
3	Modèle numérique	61
3.1	La méthode des contours	61
3.1.1	Transport de l'interface	61
3.1.2	Propriétés physiques des fluides	62
3.1.3	Approximation lisse de la fonction de Heavyside	63

3.1.4	Redistancement	63
3.2	Projection	66
3.2.1	Décomposition de Hodge–Helmholtz	67
3.2.2	Projection exacte et découplage	68
3.2.3	Projection approchée	69
3.2.4	Projection exacte et grilles décalées	69
3.3	Discrétisation spatiale	70
3.3.1	Grilles décalées	70
3.3.2	Volumes finis	70
3.3.2.1	Moyenne et reconstruction	72
3.3.2.2	Éviter le calcul de la moyenne	75
3.3.2.3	Grilles décalées	76
3.3.2.4	Traitement des bords	77
3.3.3	Différences finies	79
3.3.3.1	Traitement des bords	79
3.3.4	Interpolation	79
3.3.5	Exemple : discrétisation du terme d’inertie	81
3.4	Discrétisation temporelle	82
3.4.1	Schémas implicites et opérateurs matriciels	84
3.4.1.1	Une seule dimension	84
3.4.1.2	Plusieurs dimensions	85
3.4.1.3	Termes implicites	86
3.5	Algorithme	86
3.5.1	GMRES et SSOR	89
4	Expériences numériques	91
4.1	Ondes gravitationnelles pures	91
4.2	Roulis du métal liquide	94
4.2.1	Mécanisme du roulis	95
4.2.2	Rapport d’aspect	103

4.2.3	Influence des courants induits	104
4.2.4	Influence du champ magnétique ambiant	107
4.3	L'aspirateur MHD	111
5	Conclusion	121
A	Acte de conférence à CFD 2004	vi

Liste des tableaux

2.1	Paramètres physiques du système	23
2.2	Paramètres physiques des fluides	24
2.3	Temps caractéristiques	50
2.4	Nombres sans dimension	53
2.5	Coefficients sans dimension	53
3.1	Stencils de reconstruction près de la frontière	78
3.2	Stencils des dérivées près de la frontière	80
4.1	Expériences de roulis	94
4.2	Roulis et rapport d'aspect	103

Liste des figures

1.1	Cuve d'électrolyse de Hall-Héroult (modèle AP30)	2
1.2	Coupe transversale de la cuve d'électrolyse (modèle AP30)	3
1.3	Salle de cuves.	4
1.4	Modèle de Sele (1977)	18
2.1	Bilan d'énergie	56
2.2	Coupe de la cuve idéalisée	58
3.1	Méthode des contours	62
3.2	Fonction de Heavyside lisse	63
3.3	Découplage du système discret par la projection exacte.	69
3.4	Volume contrôle	71
3.5	Méthode des volumes finis	72
3.6	Volume de contrôle de v_x	76
3.7	Reconstruction aux bords	77
3.8	Algorithme de résolution numérique	88
4.1	Période d'oscillation gravitationnelle	93
4.2	Interface et fluctuation du courant électrique initiaux (B3-6×6)	96
4.3	Hauteur de l'interface (B3-6×6)	99
4.4	Hauteur, énergie et forces (B3-6×6)	100
4.5	Hauteur, énergie et forces (B3-4×4)	101
4.6	Valeur absolue d'un sinus déplacé	102
4.7	Hauteur et force magnétique en x (B3-6×6 et B3-6×6')	104
4.8	Hauteur et force magnétique en x (B3-4×4 et B3-4×4')	105
4.9	Force magnétique en x en fonction du déplacement (B3-6×6 et B3-6×6')	106
4.10	Influence du champ magnétique ambiant vertical	108
4.11	Énergie et vorticité du roulis près du seuil de stabilité	110
4.12	Énergie et vorticité de l'aspirateur MHD	111

4.13	Coupe verticale du courant électrique pour l'aspirateur MHD ($t = 259,4$ s)	112
4.14	Coupe horizontale du champ de vitesse pour l'aspirateur MHD ($t = 259,4$ s)	114
4.15	Fréquence et accélération angulaires (aspirateur MHD)	115
4.16	Position de l'interface pour l'aspirateur MHD ($t = 259,4$ s)	117
4.17	Coupe verticale du courant électrique pour l'aspirateur MHD ($t = 271,2$ s)	118
4.18	Influence déstabilisatrice des courants horizontaux.	119
4.19	Aspiration de l'aluminium vers le haut	120

Liste des symboles

Voici une liste des symboles apparaissant le plus souvent au cours des prochains chapitres :

Symbole	Signification
\mathbf{A}	potentiel magnétique vectoriel total
\mathbf{A}_0	partie constante du potentiel magnétique vectoriel
$\mathbf{a} = \mathbf{A} - \mathbf{A}_0$	fluctuation du potentiel magnétique vectoriel
\mathbf{B}	champ d'induction magnétique total
\mathbf{B}_a	champ d'induction magnétique ambiant
\mathbf{B}_0	champ d'induction magnétique induit par le courant vertical imposé \mathbf{J}_0
$\mathbf{b} = \mathbf{B} - \mathbf{B}_a - \mathbf{B}_0$	fluctuation du champ d'induction magnétique
$\beta = B_a / \mu_0 J_0 L_z$	intensité relative du champ magnétique ambiant vertical
\mathbf{D}	tenseur des taux de déformation
\mathbf{E}	champ électrique total
\mathbf{E}_0	champ électrique induisant \mathbf{J}_0
$\mathbf{g} = -g\hat{\mathbf{z}}$	accélération gravitationnelle
h	épaisseur d'une couche de fluide
\mathbf{J}	densité de courant électrique totale
$\mathbf{J}_0 = -J_0\hat{\mathbf{z}}$	densité de courant électrique imposée
$\mathbf{j} = \mathbf{J} - \mathbf{J}_0$	fluctuation du courant électrique

Symbole	Signification
L_x, L_y, L_z	dimensions de la cuve
μ	viscosité dynamique
μ_0	perméabilité magnétique du vide
$\hat{\mathbf{n}}$	vecteur unitaire normal à une surface
$\nu = \mu/\rho$	viscosité cinématique
p	pression
$\mathbf{r} = (x, y, z)$	vecteur position
ρ	densité de masse
σ	conductivité électrique
t	temps
\mathbf{v}	champ de vitesse
$\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$	vecteurs unitaires en direction des axes x, y, z

Les symboles en caractères gras désignent des quantités vectorielles.

Les indices a et e affectés aux symboles du tableau précédent réfèrent aux valeurs de ceux-ci dans l'aluminium et dans le bain électrolytique respectivement.

On abrégera parfois l'expression *bain électrolytique* par *électrolyte*.

On désignera parfois par l'abus de langage *champ magnétique* le champ d'induction magnétique ou densité de flux magnétique \mathbf{B} .

*À la mémoire de mon grand-père
qui, au cours de sa carrière,
a côtoyé de près les instabilités MHD.*

Remerciements

Cette recherche a été financée par *Alcan International Limitée*, avec le soutien du *Centre de recherche et développement d'Alcan à Arvida (CRDA)*.

La plupart des simulations numériques ont été effectuées sur les ordinateurs du *Réseau québécois de calcul haute performance (RQCHP)*. Je remercie en particulier Michel Béland pour les conversations éclairantes que nous avons eues, qui ont entre autres permis l'adaptation et l'optimisation du code de simulation `nsmhd` pour les supercalculateurs du RQCHP.

Merci à Rony Touma pour avoir souligné le fait que mon ancien schéma numérique permettait difficilement d'obtenir un champ magnétique solénoïdal.

Merci à mon épouse Binh An pour toutes ses petites attentions qui m'ont rendu la tâche plus facile en période de pression, et pour la patience dont elle a dû faire preuve devant tous mes « J'ai compris ! » nocturnes et les « Non, j'ai pas le temps, il faut que je rédige. » qu'elle a essuyés.

Merci à ma mère pour son indispensable soutien moral, pour son stoïcisme durant les périodes où les équations de la MHD tapissaient les murs de sa maison, et pour son réfrigérateur.

Enfin, je suis tout particulièrement reconnaissant envers mon directeur de recherche, le professeur Alain Vincent, d'avoir été plus que disponible, toujours disposé à m'orienter ou à corriger mon travail, tout en me laissant la liberté de travailler à ma façon et d'explorer les terrains qui m'attiraient le plus. Les encouragements constants qu'il m'a adressés ont également compté pour beaucoup, et je lui suis redevable des innombrables heures de passionnantes discussions qu'il m'a accordées.

Avant-propos

Le présent travail a pour objet l'étude, au moyen de la simulation numérique, des instabilités magnétohydrodynamiques (MHD) survenant dans les cuves de production de l'aluminium¹, dans lesquelles un bain électrolytique repose sur une couche d'aluminium liquide. Ces instabilités, prenant la forme de vagues d'amplitude croissante à l'interface entre les deux fluides, sont attribuables aux importantes forces magnétiques impliquées dans l'écoulement.

Nous nous intéressons plus spécifiquement à un type d'onde rotative, qu'on nomme *roulis* de l'aluminium liquide. Nous souhaitons expliquer le mécanisme qui entretient une telle onde et la conduit à l'instabilité. Nous proposons donc d'analyser séparément les forces agissant sur le système, puis d'étudier l'influence sur l'écoulement de la composante verticale du champ magnétique. Celle-ci a en effet déjà été identifiée comme étant un facteur déterminant dans le développement des instabilités, mais nous souhaitons pousser l'analyse au voisinage du seuil de stabilité.

Il nous faudra pour cela concevoir un modèle numérique tridimensionnel, entièrement dynamique, avec une technique spéciale pour suivre les mouvements de la surface de l'aluminium.

Présentation du travail

Nous débuterons au chapitre 1 en exposant les rudiments de la production de l'aluminium, afin de situer dans son contexte le problème des instabilités MHD et d'en saisir les enjeux. Nous ferons par la suite un survol des recherches déjà conduites

¹Cette étude fait l'objet d'une bourse d'*Alcan International Limitée*.

sur le sujet, tant du point de vue de l'analyse par linéarisation que de la simulation numérique. Puis, nous présenterons au chapitre 2 la modélisation de la physique du système qu'est la cuve de production de l'aluminium : nous en décrirons les équations, les mécanismes et les échelles de temps sur lesquelles ces derniers agissent, après quoi nous procéderons à une analyse dimensionnelle. Nous tracerons ensuite le bilan d'énergie avant de faire un premier pas vers l'élaboration du modèle numérique en définissant une version idéalisée du système et en spécifiant les conditions aux frontières. Nous enchaînerons, au chapitre 3, en présentant la technique des contours, qui nous permet d'assurer le suivi de la position de la surface de l'aluminium. Nous discrétiserons alors les équations pour élaborer l'algorithme de simulation. Enfin, nous présenterons au chapitre 4 les résultats des expériences numériques effectuées sur le roulis, après avoir validé le code de simulation sur des ondes gravitationnelles pures. Nous comparerons le comportement et l'influence des différentes forces dans le système et en tirerons des conclusions au sujet de leur effet stabilisateur ou déstabilisateur. Nous confirmerons également les résultats d'autres auteurs en ce qui a trait à l'influence du champ magnétique vertical. Pour terminer, nous décrirons une nouvelle instabilité MHD et en expliquerons le mécanisme, avant de conclure.

Contributions originales

Les aspects originaux de l'étude physique sont :

1. la décomposition terme à terme des équations pour isoler l'influence de chacune des forces impliquées ;
2. la mise en relief de l'effet stabilisateur des courants électriques induits par l'écoulement ;
3. la découverte d'une nouvelle instabilité MHD.

Les aspects originaux de la méthode numérique sont :

1. le modèle entièrement dynamique (hormis Gerbeau et al. (2001), la plupart des auteurs utilisaient un modèle partiellement stationnaire) ;
2. la combinaison de la méthode des contours, qui permet de traiter implicitement les conditions à l'interface, avec une discrétisation tridimensionnelle en volumes finis pour résoudre les équations de la MHD ;
3. la méthode des volumes finis assure un schéma parfaitement conservatif, donc plus près des mécanismes physiques de base ; de plus, nous avons développé une méthode qui permet d'éviter le calcul des moyennes, ce qui résulte en un schéma moins diffusif ;
4. la prise en compte d'un champ magnétique exactement sans divergence grâce à une formulation en terme du potentiel magnétique vectoriel ;
5. les conditions aux frontières, plus physiques, à dérivée normale nulle pour le champ magnétique.

Publications et communications

La communication suivante a fait l'objet d'un acte de conférence inclus en annexe :

- D. Munger et A. Vincent, 2004, *Numerical Simulation of the Magnetohydrodynamic Instabilities in Aluminium Reduction Cells*, 12th Annual Conference of the CFD Society of Canada, « CFD 2004 », Ottawa, Canada, 9–11 mai 2004, présentation le 11 mai 2004.

Les communications suivantes ont aussi été faites :

- D. Munger et A. Vincent, 2004, *The Metal Pad Roll in Two-Fluid Magnetohydrodynamic Flows*, The 59th Canadian Association of Physicists Annual Congress, Winnipeg, Canada, 13–16 juin 2004.
- D. Munger et A. Vincent, 2004, *Numerical Simulation of Two-Fluid MHD Instabilities*, The Montreal Scientific Computing Days, Centre de recherches mathématiques, Université de Montréal, Montréal, Canada, 28–29 février 2004.

Un autre article est prochainement prévu :

- D. Munger et A. Vincent, 2004, *A new numerical technique to simulate two-fluid magnetohydrodynamics*, à soumettre au J. Comp. Phys.

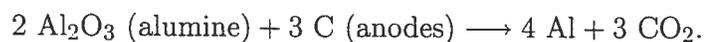
Chapitre 1

Introduction : la physique de la production de l'aluminium

1.1 Production de l'aluminium par électrolyse

1.1.1 Procédé de Hall–Héroult

La méthode moderne de production de l'aluminium, dite procédé de Hall–Héroult, consiste essentiellement à l'extraire par électrolyse de l'alumine (Al_2O_3). Il faut donc d'abord dissoudre celle-ci dans un bain électrolytique. Autrefois constitué de cryolithe pure, il s'agit aujourd'hui d'une solution artificielle de cryolithe et de fluorures d'aluminium et de calcium. Ensuite, on plonge légèrement sous la surface du bain des anodes de carbones desquelles émane un courant électrique continu de l'ordre de quelques centaines de milliers d'ampères (400 kA typiquement de nos jours). L'électrolyse, dont résulte l'aluminium ainsi que du gaz carbonique, se produit selon l'équation chimique (Grjotheim et al., 1982) :



1.1.2 Cuve d'électrolyse

La réaction a lieu dans une cuve d'électrolyse telle que représentée par la figure 1.1, au fond de laquelle se dépose l'aluminium liquide produit, qui y est régulièrement recueilli.

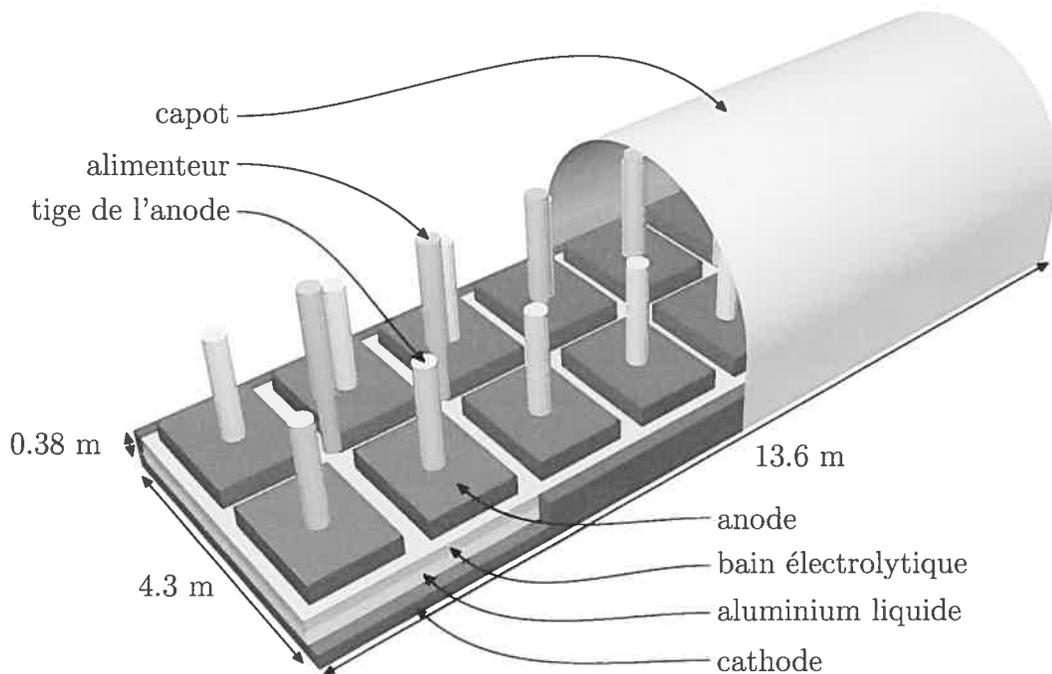


Figure 1.1 Cuve d'électrolyse de Hall-Héroult (modèle AP30)

Vu la superficie de la cuve, même si l'intensité du courant imposé est considérable, sa densité demeure relativement faible, soit environ 100 fois moindre que celle d'un courant de 12 A dans un fil de cuivre conventionnel. Néanmoins, le bain étant de l'ordre de 10^4 fois plus résistif que l'aluminium liquide, dont la conductivité est voisine de celle du cuivre, un important chauffage du système se produit par effet Joule. Et, afin de garder cette chaleur dans le système, il est d'usage (Grjotheim et al., 1982) de répandre sur la surface du bain électrolytique, entre les anodes, une couche d'alumine en poudre qui finira par former une croûte partiellement solide avec le temps (figure 1.2).

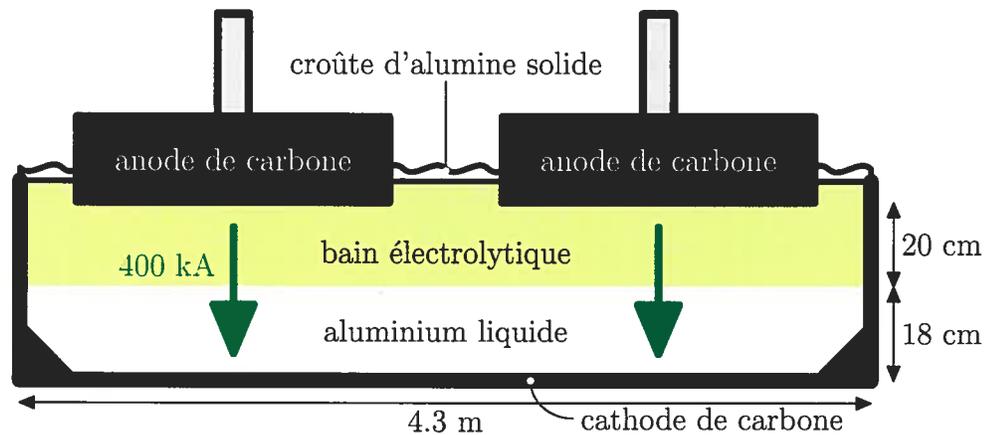


Figure 1.2 Coupe transversale de la cuve d'électrolyse (modèle AP30)

Des alimenteurs, de long tubes métalliques, percent périodiquement cette croûte pour injecter de l'alumine dans le bain, afin d'en maintenir la concentration.

1.1.3 Salle de cuves

Dans les usines de production d'aluminium, les cuves sont disposées dans une *salle de cuves* comme sur la figure 1.3, et branchées en série à l'alimentation électrique par des conducteurs métalliques (usine Alcan Grande-Baie, 2002). Or, le passage d'un courant de 400 kA dans ce système induit dans la salle un champ magnétique ambiant dont l'intensité moyenne se situe autour de 10 mT mais peut varier significativement localement. En effet, en approchant le conducteur par un cylindre, on peut obtenir un ordre de grandeur de l'intensité B du champ magnétique induit à l'extérieur du cylindre, à une distance d du centre de celui-ci, au moyen de la formule suivante (Wangsness, 1986) :

$$B = \frac{\mu_0 I}{2\pi d}.$$

Ainsi, un courant $I = 400$ kA induit un champ magnétique de 10 mT à 8 m du centre du conducteur.

Ce champ magnétique, à son tour, engendre une importante force magnétique sur les fluides dans la cuve, de laquelle résulte un brassage continu. Ce dernier est en fait

nécessaire à la redistribution uniforme de l'alumine périodiquement injectée dans la cuve (Ai, 1985).

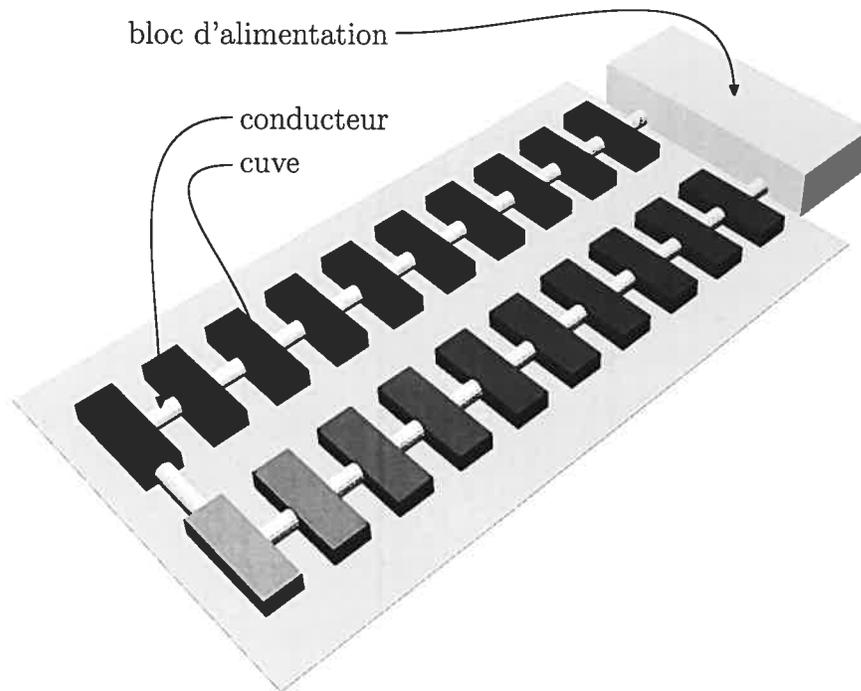


Figure 1.3 Salle de cuves.

1.1.4 Le problème

Il arrive à l'occasion que des vagues soient observées dans la cuve ; la plupart disparaissent spontanément (Mori et al., 1976). Il s'agit d'ondes de différents types, donnant lieu à des mouvements de l'interface entre le bain et l'aluminium liquide. Ils perturbent la distribution du courant dans la cuve. Des paramètres telles la configuration et l'intensité du champ magnétique ambiant détermineront si l'amplitude de ces vagues croîtra. Il est alors question d'instabilités magnétohydrodynamiques. Enfin, si les vagues sont assez grandes pour que la surface de l'aluminium liquide entre en contact avec les anodes, il y a risque de court-circuit. Il faut donc éviter qu'elles croissent.

En pratique, ce problème d'*effets de vague*, comme on le désigne dans les usines, est contourné en maintenant le bain électrolytique à une épaisseur suffisante. Toutefois, la forte résistance de celui-ci engendre d'énormes pertes d'énergie par effet Joule. Cette solution s'avère donc coûteuse. On recourt également à un contrôle en temps réel du courant dans les anodes individuelles (usine Alcan Grande-Baie, 2002), de sorte qu'il demeure pratiquement uniforme dans la cuve. Lorsqu'on perd le contrôle de la cuve, on interrompt complètement son fonctionnement pour éviter le court-circuit, jusqu'à ce que la situation se résorbe. Enfin, certains producteurs, comme Péchiney (Givry, 1967), ont choisi de disposer les conducteurs dans les salles de cuves de sorte à équilibrer les forces magnétiques au centre de la cuve, et ainsi réduire les risques de déclenchement de ces vagues.

Il est donc impératif de comprendre le phénomène des instabilités magnétohydrodynamiques pour pouvoir apporter une solution au problème des effets de vague. En raison de la température élevée du milieu, des données expérimentales sont difficiles à obtenir : elles se limitent aux mesures de l'érosion anisotrope de tiges de fer plongées dans le bain (Grjotheim et al., 1982), au suivi d'un traceur radioactif ou à la mesure de l'intensité du courant dans les anodes (Mori et al., 1976). L'observation directe de la position de l'interface est par ailleurs impossible. Il est donc nécessaire de recourir à la simulation numérique, ce qui fera l'objet du présent travail.

1.2 Revue de littérature

Nous allons présenter dans cette section un survol des travaux déjà effectués sur le sujet des instabilités MHD dans les cuves de Hall-Héroult. Nous les regrouperons selon deux rubriques : les études analytiques et les simulations numériques. Mais, décrivons d'abord brièvement les différents types d'ondes qu'on y observe.

1.2.1 Types d'ondes

Comme on l'a mentionné à la section 1.1.4, il arrive que l'interface entre l'aluminium et le bain électrolytique se mette en mouvement. L'amincissement de la couche supérieure, déjà peu épaisse, affecte la résistance de la colonne locale de fluide et perturbe la distribution uniforme du courant électrique, ce qui a pour effet de rompre l'équilibre global de l'écoulement dans la cuve. Ces mouvements de l'interface sont dus à des *instabilités magnétohydrodynamiques*. Urata (1985) les a classifiées selon trois catégories :

1. Ondes capillaires :

Dues à la tension de surface, elles peuvent causer des rides d'amplitude négligeable et sont rapidement dissipées.

2. Ondes courtes :

Elles présentent des périodes de l'ordre de 1 – 20 s et sont attribuables à l'échappement des bulles de gaz carbonique par le haut de la cuve (Ai, 1985) et aux fluctuations des courants anodiques qui résultent de la déformation de l'interface. Les variations locales de la force entre les courants voisins induisent à leur tour une force de pincement sur l'interface, qui a pour effet d'amplifier sa déformation. Notons que Moreau and Ziegler (1986) répertorient également parmi les ondes courtes une variante MHD des instabilités de cisaillement à l'interface, dites de Kelvin–Helmholtz (Drazin and Reid, 1982).

3. Ondes longues :

Il s'agit d'ondes gravitationnelles internes, avec des périodes de l'ordre de 36 – 57 s, perturbées par la force magnétique. Selon la configuration des conducteurs dans la salle de cuves (Mori et al., 1976), elles se présentent sous deux formes différentes : ondes stationnaires et ondes faisant le tour de la cuve en sens antihoraire, qu'on

désignera par le terme *roulis*. Segatz and Droste (1994) soulignent qu'il est possible que les ondes stationnaires résultent en fait de la rencontre de deux ondes longues voyageant en sens inverses. C'est à ce type d'ondes qu'on s'intéresse dans le présent ouvrage.

1.2.2 Analyse par linéarisation

Nombre d'auteurs se sont penchés sur le phénomène des ondes d'interface, et ont tenté de dériver des critères de stabilité analytiques au moyen d'études par linéarisation. Les hypothèses de travail les plus fréquentes sont :

1. Approximation magnétostatique :

D'après une analyse dimensionnelle, LaCamera et al. (1991) établissent que la part de courant induit par le mouvement des fluides dans la cuve n'est que de l'ordre de 40 %, aussi peut-on négliger, du moins en première approximation, le terme $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ dans la loi d'Ohm :

$$\mathbf{J} = \sigma (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

où \mathbf{J} est la densité de courant électrique, σ est la conductivité électrique, puis \mathbf{E} , \mathbf{B} et \mathbf{v} sont respectivement les champs électrique, d'induction magnétique et de vitesse. Seuls de rares auteurs (Ziegler, 1993) n'ont pas négligé ce terme.

De plus, comme on le verra à la section 2.2.7, le temps de propagation d'une fluctuation du champ magnétique causée par une variation du courant est typiquement très court par rapport aux autres phénomènes de transport dans la cuve, hormis peut-être les mouvements associés aux bulles de gaz carbonique qui s'échappent de la cuve. Aussi est-il justifié de considérer la forme stationnaire des équations de Maxwell, comme $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}$ ou $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$, et ainsi calculer les distributions du courant électrique et du champ magnétique avec des méthodes statiques.

2. Rapport de conductivité infini :

On considère le rapport de conductivité entre l'aluminium et le bain électrolytique, qui est en fait de l'ordre de 10^4 , comme étant infini. Cela permet de supposer l'absence de courants horizontaux dans le bain.

3. Anode continue :

Les canaux interanodiques¹ sont en général négligés, histoire de simplifier la géométrie en remplaçant toutes les anodes par une seule s'étendant sur toute la superficie de la cuve. Cette approximation permet de considérer qu'une densité de courant uniforme émane de la frontière supérieure de la cuve à l'état stationnaire.

Mentionnons seulement au passage que certains auteurs ont étudié les effets de ces canaux. Supposons ainsi que le volume de la couche de gaz sous la croûte d'alumine soit significatif. Cela impliquerait que la pression pourrait être relâchée par les canaux. Alors, la force magnétique ne pourrait pas être équilibrée par un gradient de pression partout, ce qui induirait un écoulement dans le bain. C'est à partir de cette hypothèse que Moreau and Evans (1984) et Moreau and Ziegler (1988) ont élaboré un modèle de prédiction du patron de l'écoulement dans la cuve.

4. Existence d'un état stationnaire :

C'est l'état qui sera perturbé. Rarement explicité, sauf par Sneyd (1985), on suppose généralement qu'il existe et qu'il est caractérisé par une interface aluminium-électrolyte plane et horizontale. Mentionnons au passage que, d'après La-Camera et al. (1991), des expériences en usine chez Alcoa ont montré, à l'encontre

¹zones situées entre les anodes dans le haut de la cuve

des résultats intuitivement attendus, qu'une telle forme de l'interface n'augmente pas la stabilité des cuves.

5. Variations faibles :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p' + \mathbf{F},$$

où ρ est la densité de masse, \mathbf{F} , la force magnétique, puis \mathbf{v} et p' sont respectivement les fluctuations de vitesse et de pression par rapport à l'état stationnaire. Lorsqu'il n'y a pas d'écoulement moyen \mathbf{U} , le terme d'inertie disparaît.

On suppose la plupart du temps que l'écoulement est uniforme dans chaque couche de fluide pour simplifier le modèle. La détermination du patron d'écoulement est en soi un problème complexe, qu'Antille et al. (1994), par exemple, résolvent à partir des données sur les variations du courant anodique.

Les perturbations introduites sont des ondes planes de faible amplitude, de sorte que la courbure de l'interface soit négligeable.

6. Dimensions horizontales infinies et faibles dimensions verticales :

Sauf dans quelques travaux (Sneyd and Wang, 1994 et Segatz and Droste, 1994), il est nécessaire de considérer que les dimensions horizontales de la cuve sont infinies pour dériver une relation de dispersion. L'écoulement est généralement considéré comme étant purement horizontal, donc bidimensionnel.

7. Dissipation mécanique linéaire ou absente :

Evans et al. (1981) avaient utilisé un modèle de turbulence $k - \epsilon$ (Launder and Spalding, 1974) pour des simulations numériques, mais Moreau and Evans (1984)

ont critiqué cette approche en donnant comme argument qu'un tel modèle de turbulence dans un écoulement bidimensionnel implique de négliger le transport turbulent vertical de la quantité de mouvement, alors qu'il est en fait plus important dans la cuve que le transport horizontal. Ceux-ci proposent alors de substituer les termes de dissipation mécanique par un terme de traînée turbulente de la forme $\kappa \mathbf{v}$, où κ est un coefficient de traînée visqueuse turbulente. La plupart des auteurs des travaux analytiques ultérieurs ont adopté cette approche.

1.2.2.1 Relations de dispersion

Nous présentons ici les relations de dispersion² établies par les différents auteurs : $\omega = \omega(\mathbf{k})$, où ω est la fréquence angulaire complexe et $\mathbf{k} = (l, m)$ est le nombre d'onde. La perturbation de la forme d'une onde plane $e^{i(lx+my-\omega t)}$ devient instable lorsque la partie complexe de ω prend une valeur positive. Il s'agit alors d'un coefficient d'amplification. On désigne par h_a et h_e les épaisseurs de l'aluminium liquide et du bain électrolytique respectivement, et par ρ_a et ρ_e leurs densités.

- Urata et al. (1976) :

Au moyen de l'équation de Bernoulli généralisée, les auteurs dérivent une équation de dispersion pour l'écoulement sans dissipation mécanique ni effets magnétiques :

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{\Delta \rho g k}{\rho_a \coth kh_a + \rho_e \coth kh_e}}, \quad (1.1)$$

où $k = \|\mathbf{k}\|$. Puis, ils posent l'équation d'onde perturbée par les forces magnétiques, sans la résoudre analytiquement. Plus tard, le calcul numérique des modes normaux par Urata (1985) a permis de conclure que seuls les modes de

²Afin de faciliter la comparaison des différentes relations de dispersion, nous les avons réécrites sous des formes semblables, possiblement différentes de celles qu'elles prennent dans les articles originaux.

plus grande longueur d'onde conduisent à l'instabilité, principalement alimentée par les gradients horizontaux du champ magnétique vertical.

- Sneyd (1985) :

Ici, l'auteur considère une couche d'aluminium infiniment profonde et calcule explicitement un état stationnaire, pour lequel la force magnétique est complètement équilibrée par un gradient de pression. Avec un champ d'induction magnétique ambiant tel que $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 J_0 \hat{\mathbf{z}}$, avec seulement des variations linéaires :

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mu_0 J_0 \begin{pmatrix} Qx + (R - 1/2)y \\ (R + 1/2)x - Qy \\ 0 \end{pmatrix},$$

où \mathbf{B}_0 est un champ uniforme, et Q et R sont des constantes arbitraires sans dimension, l'auteur obtient la relation de dispersion :

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{\Delta\rho gk + \mu_0 J_0^2 h_e \frac{\coth kh_e}{\sinh kh_e} \left[\frac{1}{2}k - R(l^2 - m^2)/k + 2Qlm/k \right]}{\rho_a + \rho_e \coth kh_e}}. \quad (1.2)$$

On retrouve le même dénominateur en tirant la limite de celui de (1.1) lorsque $h_a \rightarrow \infty$, selon l'hypothèse de l'auteur.

En l'absence d'un champ magnétique ambiant ($Q = R = 0$), on obtient :

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{\left(\Delta\rho g + \frac{1}{2} \mu_0 J_0^2 h_e \frac{\coth kh_e}{\sinh kh_e} \right) k}{\rho_a + \rho_e \coth kh_e}}.$$

L'auteur en déduit que le champ localement induit par le courant vertical dans la cuve est stabilisateur, puisqu'il génère une force restauratrice, travaillant dans le même sens que la gravité.

Par contre, l'effet du champ ambiant peut être déstabilisateur. Prenons pour exemple³ une onde en direction x , donc avec $m = 0$. La relation (1.2) devient alors :

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{\Delta\rho gk + \mu_0 J_0^2 kh_e \frac{\coth kh_e}{\sinh kh_e} \left(\frac{1}{2} - R\right)}{\rho_a + \rho_e \coth kh_e}},$$

dont on déduit que l'amplitude de l'onde croîtra si

$$R > \frac{1}{2} + \frac{\Delta\rho g}{\mu_0 J_0^2 h_e} \frac{\sinh kh_e}{\coth kh_e}.$$

La fonction $\sinh kh_e / \coth kh_e$ est monotone et croissante pour $kh_e > 0$, donc le seuil d'instabilité sera plus bas pour les grandes longueurs d'onde et pour une mince profondeur de bain.

- Sneyd (1992) :

Dans ce modèle, l'auteur considère cette fois une profondeur finie d'aluminium et la présence d'un courant stationnaire horizontal J_H , seulement dans la couche d'aluminium. Cette hypothèse repose sur le très grand ($\sim 10^4$) rapport de conductivité entre les deux fluides. Puis, un champ d'induction magnétique linéaire général, de la forme suivante est posé :

$$\mathbf{B} = \mu_0(J_0x + J_Hz)\hat{\mathbf{y}} + \mu_0 J_0 \begin{pmatrix} \beta_{xx}x + \beta_{xy}y + \beta_{xz}z \\ \beta_{xy}x + \beta_{yy}y + \beta_{yz}z \\ \beta_{xz}x + \beta_{yz}y + \beta_{zz}z \end{pmatrix}.$$

Le champ uniforme déplaçant seulement l'équilibre sans affecter la relation de dispersion, il est ignoré dans le modèle. L'auteur inclut par ailleurs les effets du cisaillement à l'interface, ce qui fait apparaître un terme d'instabilité de Kelvin-Helmholtz dans la relation de dispersion. Il tient également compte des forces

³Nous adoptons ici une démarche beaucoup plus simple que celle de l'auteur.

capillaires, qui, finalement, s'avèrent être stabilisatrices. Nous ne nous intéressons pas à ces effets ici ; la version simplifiée de l'équation de dispersion obtenue est alors :

$$\omega = -i\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{(\Delta\rho g + J_H B_y)k + M_1 + M_2 - M_3}{\rho_a \coth kh_a + \rho_e \coth kh_e} - \frac{\gamma^2}{4}}, \quad (1.3)$$

où on a défini

$$\gamma = \frac{\kappa_a \coth kh_a + \kappa_e \coth kh_e}{\rho_a \coth kh_a + \rho_e \coth kh_e}, \quad (1.4)$$

et

$$\begin{aligned} M_1 &= \frac{\mu_0 J_0^2}{k} \left[\frac{h_e \beta_H}{\sinh^2 kh_e} - i \frac{h_a \beta_V \coth kh_e}{\sinh^2 kh_a} \right] \\ M_2 &= \frac{\mu_0 J_0 J_H l}{k^2} \left[\frac{h_a \beta_V}{\sinh^2 kh_a} - i \frac{\beta_H}{k} \right] \\ M_3 &= \frac{\mu_0 J_H^2 m^2}{2k^2}, \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \beta_H &= m^2 + lm(\beta_{xx} - \beta_{yy}) + \beta_{xy}(m^2 - l^2) \\ \beta_V &= k(m\beta_{xz} - l\beta_{yz}). \end{aligned}$$

Le facteur d'amortissement γ joue un rôle analogue à celui d'un oscillateur harmonique⁴. Les termes M_1 et M_2 , représentant l'interaction entre les gradients du champ ambiant et les courants vertical et horizontal respectivement, sont déstabilisateurs lorsqu'ils sont négatifs ou complexes, comme le dit l'auteur. La partie réelle de M_1 correspond au mécanisme décrit par Sneyd (1985). Le terme

⁴Rappelons que, dans le cas d'une masse m au bout d'un ressort avec facteur d'amortissement b , on a $\gamma = b/m$. Dans l'équation (1.4), le numérateur et le dénominateur jouent des rôles analogues à b et à m .

M_3 , correspondant à la force de pincement, auparavant décrite par Urata (1985), est toujours déstabilisateur.

Au moyen d'une analyse dimensionnelle, l'auteur constate que la partie imaginaire de M_1 , donc les gradients horizontaux du champ horizontal et les gradients verticaux du champ horizontal, représentés par β_V , engendre les effets les plus déstabilisateurs.

De (1.4) se dégage enfin que les ondes les plus longues sont plus facilement déstabilisées et que l'augmentation de l'épaisseur des couches de liquide est stabilisatrice. L'auteur explique cette dernière conclusion par le fait qu'il faut fournir plus d'énergie pour mettre en mouvement une couche de fluide plus épaisse.

- Moreau and Ziegler (1986) :

Les auteurs procèdent un peu comme Sneyd (1992). Cependant, ils négligent les gradients du champ magnétique ambiant et considèrent que la distribution du courant stationnaire, comme l'avaient auparavant suggéré Moreau and Evans (1984), n'est pas uniforme dans l'aluminium :

$$J_z = -J_0 - J_1 \frac{z}{h_a}$$

$$\mathbf{J}_H = J_1 \frac{y}{h_a} \hat{\mathbf{y}},$$

où $y = 0$ est au centre horizontal de la cuve et $z = 0$ est le plan de l'interface non perturbée. Cette distribution non uniforme vient du fait que le courant est attiré vers les parois de la cuve sur lesquelles sont branchés les conducteurs, comme le suggéraient les calculs numériques de Lympny and Evans (1983).

La relation de dispersion résultante est :

$$\omega = -i \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\Delta \rho g k + M_1 + M_2}{\rho_a \coth kh_a + \rho_e \coth kh_e} - \frac{\gamma^2}{4}},$$

où γ a la même définition que dans Sneyd (1992), et les termes d'interaction magnétique ont un rôle analogue :

$$M_1 = \frac{\mu_0 J_0^2}{\tanh kh_e} \left[\frac{kh_e}{\sinh 2kh_e} - \frac{kh_a}{\sinh 2kh_a} \right]$$

$$M_2 = \frac{\mu_0 J_0 J_1}{4 \tanh kh_e} \left[\frac{2kh_a}{\sinh 2kh_a} + \frac{\tanh kh_a}{kh_a} (1 - 2ikh_a \cos \theta) \right],$$

où θ est l'angle entre le vecteur d'onde \mathbf{k} et le courant horizontal \mathbf{J}_H . Les auteurs soulignent que M_2 est le terme dominant aux plus grandes longueurs d'onde, et qu'il engendre un écoulement dans l'aluminium, conduisant à l'instabilité.

Plus tard, des calculs numériques, basés sur ce modèle et effectués par Moreau and Ziegler (1988), on montré une excellente concordance entre les résultats et les mesures expérimentales fournies par un producteur d'aluminium.

- Pigny and Moreau (1992) :

Ce travail généralise le modèle de Moreau and Ziegler (1986) pour tenir compte des variations spatiales du champ magnétique ambiant et des courants. La relation de dispersion résultante comporte ainsi une dépendance spatiale :

$$\omega = -i\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\Delta\rho gk + \mu_0 J_0^2 kh_a(n + im)}{\rho_a \coth kh_a + \rho_e \coth kh_e} - \frac{\gamma^2}{4}},$$

où n et m sont des nombres réels dépendant de x et de y . Leurs définitions et l'analyse associée sont trop complexes pour être présentées ici. Les auteurs en déduisent deux nouveaux mécanismes de déstabilisation par *pincement différentiel* et par *lévitation*, ainsi qu'un terme équivalent au M_3 de Sneyd (1992), puis concluent une fois de plus que les plus grandes longueurs d'ondes sont plus propices à l'instabilité.

De l'ensemble de ces travaux se dégagent principalement quelques conclusions communes :

-
- les modes les plus instables correspondent aux plus grandes longueurs d'onde ;
 - l'augmentation de l'épaisseur des couches de liquide est stabilisatrice ;
 - la configuration spatiale du champ magnétique ambiant et la présence de courants horizontaux dans l'aluminium sont déterminants dans le mécanisme de déstabilisation ;
 - la dissipation mécanique (visqueuse) est toujours stabilisatrice.

Cependant, on constate surtout que, malgré les hypothèses extrêmement simplificatrices sur lesquelles reposent ces modèles, ceux-ci se complexifient rapidement lorsqu'il s'agit d'inclure des dépendances spatiales. De plus, on ne traite que des effets de premier ordre, pour un mode de Fourier unique.

Mentionnons une exception à cet effet : Sneyd and Wang (1994) ont conduit une analyse du couplage entre modes gravitationnels par les forces magnétiques. Il en ressort que le seuil d'instabilité est significativement plus bas lorsque deux modes ont des fréquences voisines, puisque la force restauratrice de l'un peut alimenter l'autre par résonance.

Bref, étant donné les restrictions imposées par l'analyse par linéarisation et perturbation par modes de Fourier, il est pratiquement impossible d'approcher des problèmes complexes comme le roulis de l'interface mentionné à la section 1.2.1. Il faut pour cela faire appel à la simulation numérique.

1.2.3 Simulations numériques et roulis de l'interface

Nous allons ici décrire les modèles dynamiques de simulation des écoulements dans les cuves de Hall-Héroult, et plus particulièrement du phénomène de roulis de l'interface. Mais rapportons d'abord le travail d'un pionnier sur le sujet.

1.2.3.1 Le modèle de Sele

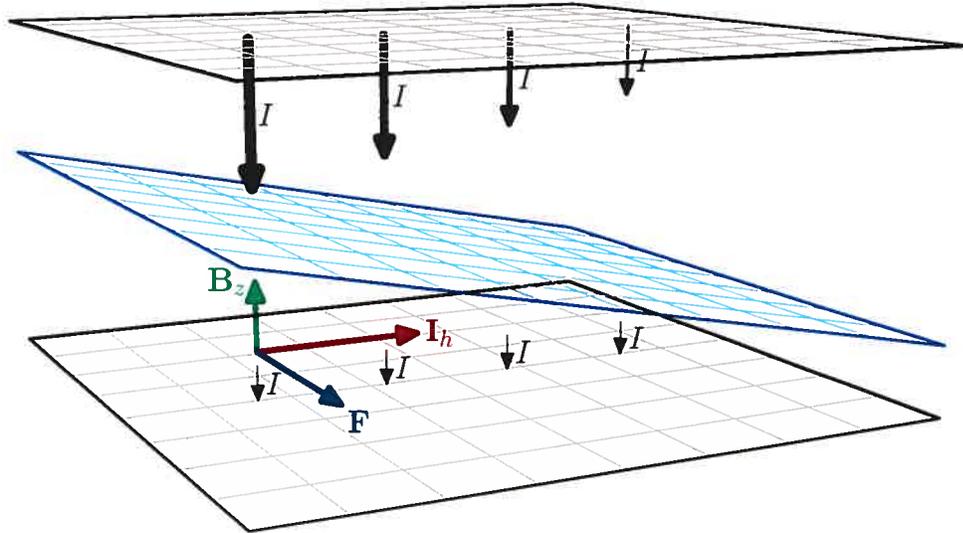
Sele (1977) a probablement été le premier à donner une explication physique au roulis et à le simuler numériquement, au moyen d'un modèle semi-dynamique dans lequel le temps n'est pas un paramètre. Il a également dérivé, pour des ondes de faible amplitude, un critère de stabilité basé sur les résultats de ses simulations, en terme de la hauteur d'aluminium liquide, de la distance interpolaire⁵, du champ magnétique vertical moyen, de l'intensité du courant, et d'une constante empirique.

Son modèle consistait à calculer l'écoulement et la forme de l'interface stationnaires, à introduire une perturbation, puis à effectuer une série de rajustements de la distribution de courant électrique et de calculs des états stationnaires correspondants. Le champ magnétique était gardé constant et le courant était ajusté selon l'hypothèse qu'il devrait se concentrer là où la distance interpolaire est la plus courte dans le bain⁶, comme l'illustre la figure 1.4. Puis, les variations du courant vertical dans le bain sont compensées par un courant horizontal \mathbf{I}_h dans l'aluminium, celui-ci étant un excellent conducteur. Il résulte de l'action de l'induction magnétique verticale \mathbf{B}_z une force magnétique \mathbf{F} , poussant l'interface à tourner dans le sens antihoraire.

À chaque itération avec ce modèle, l'interface tourne de 90 degrés, la force magnétique étant orientée à angle droit avec l'inclinaison de l'interface, comme on le voit sur la figure 1.4. Ainsi, un cycle du roulis nécessite quatre itérations. Procédant ainsi, Sele a effectué une série de simulations avec ce modèle, en variant les paramètres tels les hauteurs h_a et h_e des fluides, l'intensité du courant I_0 et l'intensité moyenne du champ d'induction magnétique vertical B_z , pour en arriver à établir le critère de stabilité empirique suivant :

⁵distance entre la surface de l'aluminium et les anodes ; à peu près la hauteur du bain électrolytique

⁶Cette hypothèse a été confirmée ultérieurement avec un modèle tridimensionnel par les calculs numériques de Gerbeau et al. (2001).



Les trois plans, de haut en bas, représentent : l'anode, l'interface aluminium-électrolyte et la cathode.

Figure 1.4 Modèle de Sele (1977)

$$(h_e + D_0) h_a > A |B_z| I_0, \quad (1.5)$$

où D_0 est une distance fictive inhérente au type d'anode utilisé (4 cm typiquement) et $A = 5 \times 10^{-2} \text{ m}^2/\text{T} \cdot \text{kA}$ est une constante empirique. La valeur de cette constante dépend des canaux entre les anodes et la paroi de la cuve. Toutefois, dans un cas idéal où une anode couvre la surface totale de la cuve, l'auteur démontre que cette constante est donnée par

$$A = \frac{1}{12\Delta\rho g}.$$

Notons que cette expression est sujette à l'hypothèse d'une faible inclinaison de l'interface.

1.2.3.2 Simulations dynamiques

Plusieurs chercheurs sont arrivés à reproduire numériquement le roulis de l'interface, mais peu ont poussé l'analyse. Nous ne ferons part ici que des travaux les plus notables :

- Potočnik (1989) :

Vinko Potočnik, un ingénieur d'Alcan, a effectué des simulations tridimensionnelles stationnaires avec *ESTER/PHOENICS*, un code industriel, incluant un modèle de turbulence $k - \epsilon$. Un point fort est la prise en compte des courants induits par l'écoulement et des mouvements causés par l'échappement des bulles de gaz.

Pour chaque expérience, une configuration spécifique du champ magnétique est imposée, selon la disposition des conducteurs, et le courant aux frontières est gardé fixe tout au long de la simulation. Une attention particulière est accordée au respect des détails de la cuve, minimisant ainsi le degré d'idéalisation.

Le roulis de l'interface est retrouvé et il est instable. Enfin, l'auteur tire des conclusions sur la disposition des conducteurs dans la salle, mais ne discute guère la physique du phénomène. Plus tard, il poursuit ce travail (Potočnik, 1991) pour conclure que l'épaisseur des couches de fluides et la distribution du champ magnétique, donc la disposition des conducteurs dans la salle de cuves, sont des facteurs importants pour la conception de cuve.

- Segatz et al. (1993) :

Ces auteurs, de chez VAW, en Allemagne, ont aussi effectué leurs simulations avec *ESTER/PHOENICS*, mais cette fois, le champ magnétique dû aux conducteurs et à l'aimantation de l'acier est calculé avec un autre module. Les auteurs tirent encore des conclusions surtout au sujet de la conception de cuve.

- Gerbeau et al. (2001) :

Probablement les premiers à effectuer leurs simulations avec un modèle complètement non stationnaire. Celui-ci est caractérisé par une discrétisation en éléments finis, dans une géométrie cylindrique avec dimensions horizontale et

verticale égales. Le schéma numérique, original et particulièrement poli du point de vue mathématique, permet de tenir compte des effets de la tension superficielle. Notons toutefois que les éléments finis sont très diffusifs du point de vue numérique.

Les auteurs ont effectué des simulations avec un champ magnétique vertical uniforme et on retrouvé le roulis de l'interface. Les résultats obtenus ont infirmé la conclusion de Davidson and Lindsay (1998), selon laquelle le moindre champ magnétique vertical rendrait instable une cuve cylindrique⁷. En effet, Gerbeau et al. (2001) ont observé un roulis stable, c'est-à-dire qui s'atténue avec le temps, pour une intensité du champ magnétique en deçà d'un certain seuil. Les auteurs utilisent un système d'unités arbitraires et des variables sans dimension, rendant ainsi obscure l'interprétation physique de ce seuil.

- Approche *eaux peu profondes* :

Cette approche repose sur l'hypothèse que $L_x, L_y \gg L_z$, que les variations verticales sont faibles et que la pression est la pression hydrostatique (Chaudry, 1993 et Saint-Venant, 1871). Leboucher et al. (1999) ont utilisé cette approche, combinée avec l'approximation magnétostatique pour l'équation de Poisson, pour simuler les vagues d'interface dans les cuves de Hall-Héroult. Les équations complètes de la MHD en approximation des eaux peu profondes ont été dérivées par Gilman (2000) dans un contexte astrophysique.

Jusqu'à maintenant, les simulations numériques des écoulements MHD dans les cuves et en particulier du roulis de l'interface ont été surtout effectuées par des ingénieurs dont le souci était de concevoir des cuves stables plutôt que d'en comprendre la physique.

⁷Ces auteurs avaient utilisé une approche par linéarisation et selon leur modèle également, l'instabilité du roulis est due à l'interaction entre modes gravitationnels, comme dans le cas de Sneyd and Wang (1994).

Chapitre 2

Modèle physique

Dans le présent chapitre, nous détaillerons d'abord les caractéristiques de la cuve d'électrolyse, puis nous présenterons les équations qui décrivent l'écoulement en commentant les différents mécanismes de transport en jeu.

2.1 La cuve de Hall–Héroult

Il existe une grande variété des modèles de cuves, dont les paramètres, tels la taille, le rapport d'aspect et l'intensité du courant d'électrolyse, diffèrent substantiellement. Nous prendrons ici pour exemple la cuve AP30, utilisée notamment dans l'usine Alcan d'Alma, au Lac-Saint-Jean, qui constitue un bonne représentante des cuves contemporaines.

2.1.1 Description statique de la cuve

Les tableaux 2.1 et 2.2 présentent respectivement les constantes physiques du système et celles propres à chaque fluide. Une partie des valeurs a été fournie par les chercheurs d'Alcan (Centre de recherche et développement d'Alcan à Arvida, 2002), les autres étant accessibles dans Urata et al. (1976), Grjotheim et al. (1982) et Ai

(1985), par exemple. Chaque paramètre est accompagné du symbole mathématique qui sera utilisé à partir d'ici pour y faire référence. Lorsqu'on voudra désigner la valeur spécifique d'un paramètre à l'intérieur de l'aluminium ou du bain électrolytique, on ajoutera les indices a et e respectivement¹.

Dégageons quelques observations sur les valeurs des paramètres du système (tableau 2.1) :

- Rapport d'aspect :

La cuve présente un rapport d'aspect vertical relativement grand de $L_x/L_z \simeq 36$ et un rapport d'aspect horizontal de $L_x/L_y \simeq 3,2$.

- Densité du courant électrique :

Malgré son importante intensité, le courant électrique, distribué sur une surface de $58,48 \text{ m}^2$, a une densité environ 140 fois plus petite que celle d'un courant de 12 A dans un fil de cuivre typique de 2 mm de diamètre.

- Champ d'induction magnétique ambiant :

Le champ d'induction magnétique ambiant est dû aux sources externes, soit le passage du courant dans les conducteurs dans la salle de cuves. Il est environ 200 fois plus important que celui de la Terre. L'influence de ce dernier sur le système est donc négligeable.

¹Ainsi, la densité de masse $\rho = \rho(\mathbf{r})$ dans la cuve est variable, alors que celle de l'aluminium ρ_a est constante. Autrement dit :

$$\rho(\mathbf{r}) = \begin{cases} \rho_a & \text{si l'aluminium liquide occupe le point } \mathbf{r} \\ \rho_e & \text{si le bain électrolytique occupe le point } \mathbf{r} \end{cases}$$

Paramètre	Symbole	Valeur
Longueur de la cuve	L_x	13,6 m
Largeur de la cuve	L_y	4,3 m
Épaisseur totale de liquide sous les anodes	L_z	38 cm
Accélération gravitationnelle	g	9,8 m/s ²
Courant total	I_0	400 kA
Densité de courant moyenne	J_0	6,84 kA/m ²
Champ d'induction magnétique ambiant moyen	B_0	10 mT
Perméabilité magnétique ¹	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{s/m}$
Température	T_0	955°C

Sources : Centre de recherche et développement d'Alcan à Arvida (2002), Usine Alcan Grande-Baie (2002), Urata et al. (1976), Grjotheim et al. (1982) et Ai (1985).

¹égale à celle du vide

Tableau 2.1 Paramètres physiques du système

- Température :

La température dépasse largement le point de fusion à 660°C de l'aluminium, qui est, par le fait même, liquide dans la cuve.

Dégageons également quelques remarques quant aux propriétés des fluides (tableau 2.2) :

- Propriétés mécaniques :

Les propriétés mécaniques de l'aluminium liquide et du bain électrolytique sont semblables à celles de l'eau : leur densité est environ le double, et leur viscosité

Paramètre	Symbole	Aluminium	Bain électrolytique	Unités
Densité	ρ	2,27	2,09	g/cm^3
Épaisseur de la couche	h	18	20	cm
Viscosité dynamique	μ	23	12	mPo^1
Vitesse typique de brassage	U	3 – 20	5 – 30	cm/s
Conductivité électrique	σ	$3,3 \times 10^6$	$3,0 \times 10^2$	$\Omega^{-1}\text{m}^{-1}$
Chaleur spécifique	c_p	1	1,6	$\text{J/g}\cdot^\circ\text{C}$
Conductivité thermique	k	200	0,4	$\text{W/m}\cdot^\circ\text{C}$
Coefficient d'expansion thermique linéaire ²	α	10^{-4}	10^{-5}	$^\circ\text{C}^{-1}$
Écart de température maximal typique	$\Delta\Theta$	0	10	$^\circ\text{C}$

Sources : Centre de recherche et développement d'Alcan à Arvida (2002), Usine Alcan Grande-Baie (2002), Urata et al. (1976), Grjotheim et al. (1982) et Ai (1985).

¹ $\text{Po} = 0,1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$

²selon les mesures d'Alcan

Tableau 2.2 Paramètres physiques des fluides

est de cinq à dix fois moindre. L'écoulement dans la cuve présentera donc des similitudes avec celui de l'eau, notamment en ce qui concerne la présence de turbulence.

Urata et al. (1976) font état d'une mesure de la diffusivité turbulente à l'intérieur de la cuve de $5 \text{ cm}^2/\text{s}$. Comme nous le verrons à la section 2.2.3.2, la viscosité moléculaire agit sur une échelle complètement différente de celle du système macroscopique, aussi utiliserons-nous cette estimation de viscosité turbulente pour les simulations plutôt que les valeurs du tableau 2.2.

- Vitesse de brassage :

Comme on l'a mentionné à la section 1.1.3, un brassage continu, assurant une distribution uniforme de la concentration de l'alumine injectée périodiquement dans le bain électrolytique, est entretenu par les forces magnétiques (Ai, 1985).

- Propriétés électriques :

L'aluminium liquide est environ dix fois moins conducteur qu'à l'état solide, où il présente une conductivité électrique semblable à celle du cuivre. Le bain électrolytique est environ 10 000 fois moins conducteur que l'aluminium. Ainsi, la chute de potentiel causée par la résistance des fluides dépend directement de l'épaisseur du bain électrolytique ($R \cong h_e/\sigma_e L_x L_y$) et est d'environ 4,5 V. À cela s'ajoutent les chutes de potentiel dues à l'électrolyse et au passage du courant dans les anodes, pour obtenir un total de l'ordre de 4,7 V, tel qu'observé à l'usine Alcan Grande-Baie (2002).

- Propriétés thermiques :

À l'exception de la conductivité thermique très élevée de l'aluminium, les deux fluides possèdent des propriétés thermiques semblables à celles de l'eau. Ils ont une chaleur massique voisine, et l'aluminium à 955°C a le même coefficient de dilatation thermique que l'eau à 20°C , tandis que le bain électrolytique a la même conductivité thermique. Cependant, l'aluminium diffuse la chaleur 500 fois plus vite, ce qui explique qu'aucun écart de température ne soit observé dans ce milieu. Par ailleurs, le bain se dilate 10 fois moins vite. On déduit de ces

deux dernières constatations qu'il sera plus difficile de démarrer la convection thermique dans ce système que dans l'eau, aussi négligerons ses effets dans notre modèle.

La taille et l'intensité du courant électrique du tableau 2.1 de même que les propriétés du bain électrolytique du tableau 2.2, fournies par Alcan, sont spécifiques au modèle de cuve AP30. Elles représentent néanmoins des ordres de grandeur des valeurs typiques des cuves d'électrolyse modernes, qui permettront d'établir l'importance relative des phénomènes de transport agissant dans de tels systèmes.

2.2 Les équations de transport

Nous présenterons dans cette section les équations de transport qui décrivent l'évolution du système physique, soit un bain électrolytique reposant sur une couche d'aluminium liquide, borné par des parois solides. On choisit le référentiel tel que l'axe des z pointe vers le haut.

Notons dès le départ que, pour tenir compte de la discontinuité des propriétés physiques à l'interface entre les deux fluides, nous écrirons les équations de transport dans une forme où les paramètres sont traités comme des variables, plutôt que de les traiter comme des constantes et d'inclure un traitement spécial à la surface de discontinuité.

Les équations qui seront présentées ci-dessous supposent l'existence d'un volume élémentaire de fluide, qui n'est admissible que dans le contexte de certaines hypothèses et approximations (Valdettaro, 1992) :

- Approximation du continu¹ :

Le libre parcours moyen des molécules est très petit par rapport aux échelles macroscopiques et période de collision est très courte par rapport aux échelles de temps des phénomènes macroscopiques. On peut alors considérer le fluide comme un milieu continu.

- Effet Hall négligeable.

Il faut que le rayon r_L de giration des particules en mouvement sous l'effet du champ magnétique soit plus grand que le libre parcours moyen, de sorte qu'on puisse négliger l'effet Hall dans la loi d'Ohm. Il s'agit en fait du rayon Larmor $r_L = \sqrt{k_B T} m_e c / e B$, où k_B est la constante de Boltzmann, T est la température, m_e est la masse de l'électron, c est la vitesse de la lumière, e est la charge élémentaire et B , l'intensité de l'induction magnétique. Cela implique que le champ magnétique doit être raisonnablement faible.

Lorsqu'il s'agit d'un plasma, Valdettaro (1992) ajoute qu'il faut considérer que le fluide est électriquement neutre, c'est-à-dire que le champ électrique d'une particule est masqué par les particules voisines sur une très courte distance.

2.2.1 Forme générale d'une équation de transport

La forme générale d'une équation de transport ou de conservation d'une quantité de densité $u(\mathbf{r}, t)$, contenue dans un volume $\mathcal{V}(t)$ borné par la surface $\partial\mathcal{V}(t)$, est (Reichl, 1998) :

¹L'approximation MHD sera discutée à la section 2.2.5.2

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\mathcal{V}(t)} u(\mathbf{r}, t) d\tau = \iiint_{\mathcal{V}(t)} Q_u(\mathbf{r}, t) d\tau - \oint_{\partial\mathcal{V}(t)} \mathbf{J}_u(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{a}, \quad (2.1)$$

où Q_u est la densité du taux de production de u et \mathbf{J}_u , la densité de courant de u .

Si le volume $\mathcal{V}(t)$ est sujet à un écoulement $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, on peut considérer un volume fixe $\mathcal{V} = \mathcal{V}(0)$, et l'équation devient :

$$\iiint_{\mathcal{V}} \frac{\partial u}{\partial t} dV = \iiint_{\mathcal{V}} Q_u d\tau - \oint_{\partial\mathcal{V}} (u\mathbf{v} + \mathbf{J}_u) \cdot d\mathbf{a}, \quad (2.2)$$

où la dépendance des fonctions en \mathbf{r} et t est implicite. Le volume \mathcal{V} étant arbitraire, cette dernière expression est équivalente à :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Q_u - \nabla \cdot (u\mathbf{v} + \mathbf{J}_u). \quad (2.3)$$

Notons que \mathbf{J}_u désigne toujours la densité de courant par rapport au référentiel lagrangien, c'est-à-dire celui qui suit l'écoulement, alors que $u\mathbf{v} + \mathbf{J}_u$ est son homologue par rapport au référentiel eulérien, fixe.

2.2.2 Transport de la masse

Soit la densité de masse ρ et le champ de vitesse \mathbf{v} de l'écoulement. Dans le régime qui nous intéresse, les fluides sont non miscibles et l'écoulement, incompressible, donc l'équation de conservation de la masse,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}), \quad (2.4)$$

se réduit à la condition d'incompressibilité habituelle :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2.5)$$

Cette condition est équivalente à :

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0,$$

où

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$$

est la dérivée lagrangienne, soit la dérivée temporelle dans le référentiel de la particule de fluide. Cela signifie simplement qu'un élément de fluide suivant l'écoulement garde une densité constante.

2.2.3 Transport de la quantité de mouvement

Pour un écoulement incompressible, la conservation de la densité de quantité de mouvement $\rho\mathbf{v}$ est exprimée par l'équation de Navier–Stokes :

$$\frac{\partial\rho\mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_m - \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v} - 2\mu\mathbf{D}) - \nabla p, \quad (2.6)$$

où les composantes du tenseur des taux de déformation² \mathbf{D} sont données par

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right), \quad (2.7)$$

et \mathbf{f}_g et \mathbf{f}_m sont respectivement les densités de force gravitationnelle :

$$\mathbf{f}_g = -\rho g \hat{\mathbf{z}} \quad (2.8)$$

et de force magnétique :

$$\mathbf{f}_m = \mathbf{J} \times \mathbf{B}. \quad (2.9)$$

²Il s'agit d'un abus de langage car \mathbf{D} est en fait la partie symétrique du véritable tenseur des taux de déformation $\partial v_i / \partial x_j$.

La constante g est l'accélération gravitationnelle, \mathbf{J} est la densité de courant électrique qui traverse le fluide et \mathbf{B} est le champ d'induction magnétique. Nous différerons à la section 2.2.5.3 l'explication de la raison pour laquelle la force électrique ne figure pas ici.

Le premier terme entre les parenthèses de (2.6) correspond à la force d'inertie, le deuxième, aux forces visqueuses et le dernier, au gradient de pression.

2.2.3.1 Séparation des variables

Bien que ce ne soit pas évident à la vue de (2.6), le système est à l'équilibre lorsqu'il est au repos. Il serait donc pertinent de récrire l'équation de Navier–Stokes en séparant certaines variables en une partie constante dans le temps et une fluctuation par rapport à cette valeur.

Pour la densité de masse dans l'expression de f_g , on écrira donc :

$$\rho = \rho_0 + \rho',$$

où ρ' est la fluctuation par rapport à

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \begin{cases} \rho_a(\mathbf{r}) & \text{si } z < z_0 \\ \rho_e(\mathbf{r}) & \text{si } z \geq z_0 \end{cases},$$

z_0 étant la hauteur de l'interface aluminium–électrolyte à l'équilibre. On remplace alors (2.8) par :

$$\mathbf{f}_g = -(\rho_0 + \rho')g \hat{\mathbf{z}} = -\rho'g \hat{\mathbf{z}} - \nabla(\rho_0gz).$$

À l'équilibre, $\rho' = 0$ et alors la force gravitationnelle sera contrebalancée par un gradient de pression hydrostatique.

Puis, on sépare le courant électrique :

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_0 + \mathbf{j},$$

où \mathbf{j} est la fluctuation par rapport au courant vertical imposé $\mathbf{J}_0 = -J_0 \hat{\mathbf{z}}$. Et le champ d'induction magnétique se récrit comme :

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \mathbf{b},$$

où \mathbf{B}_a est le champ d'induction magnétique ambiant, \mathbf{B}_0 est celui induit par le passage du courant vertical imposé, et \mathbf{b} est la fluctuation du champ total. En procédant rigoureusement, on obtiendrait \mathbf{B}_0 de la loi de Biot-Savart :

$$\mathbf{B}_0(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 J_0}{4\pi} \int_0^{L_z} \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \times \hat{\mathbf{z}}}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|^3} dz dy dx. \quad (2.10)$$

La solution de cette intégrale est toutefois compliquée, aussi opterons-nous pour une expression plus simple pour \mathbf{B}_0 . En fait, nous procéderons comme Sneyd (1985, 1992) en choisissant la forme la plus simple possible pour \mathbf{B}_0 satisfaisant la loi d'Ampère $\nabla \times \mathbf{B}_0 = \mu_0 \mathbf{J}_0$, donc linéaire :

$$\mathbf{B}_0 = \frac{\mu_0 J_0}{2} \left[\left(y - \frac{L_y}{2} \right) \hat{\mathbf{x}} - \left(x - \frac{L_x}{2} \right) \hat{\mathbf{y}} \right]. \quad (2.11)$$

La différence entre cette expression et la solution de (2.10) est alors absorbée par une redéfinition de \mathbf{B}_a . Il faut cependant s'assurer qu'à l'équilibre, la force magnétique soit annulée par un gradient de pression (Sneyd, 1985), ce que (2.11) rend possible :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_0 \times \mathbf{B}_0 &= -\frac{1}{2} \mu_0 J_0^2 \left[\left(x - \frac{L_x}{2} \right) \hat{\mathbf{x}} + \left(y - \frac{L_y}{2} \right) \hat{\mathbf{y}} \right] \\ &= -\nabla \left\{ \frac{\mu_0 J_0^2}{4} \left[\left(x - \frac{L_x}{2} \right)^2 + \left(y - \frac{L_y}{2} \right)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Il faut, bien sûr, qu'il en aille de même pour $\mathbf{J}_0 \times \mathbf{B}_a$. Nous choisissons donc de nous intéresser, à la lumière de la revue de LaCamera et al. (1991) et comme l'a d'abord fait Sele (1977), au cas d'un champ magnétique ambiant uniforme et vertical :

$$\mathbf{B}_a = \beta \mu_0 J_0 L_z \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.13)$$

où le paramètre sans dimension β est une mesure de l'intensité relative du champ ambiant par rapport à celle du champ localement induit par le courant vertical. Ainsi, $\mathbf{J}_0 \times \mathbf{B}_a = 0$.

On peut alors récrire (2.6) :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -(\rho - \rho_0)g\hat{\mathbf{z}} + \mathbf{J}_0 \times \mathbf{b} + \mathbf{j} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \mathbf{b}) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - 2\mu \mathbf{D}) - \nabla p', \quad (2.14)$$

où $p' = p - p_0$ est la fluctuation de la pression par rapport à la pression d'équilibre

$$p_0 = p_{00} - \rho_0 g z - \frac{\mu_0 J_0^2}{4} \left[\left(x - \frac{L_x}{2} \right)^2 + \left(y - \frac{L_y}{2} \right)^2 \right], \quad (2.15)$$

p_{00} étant un déplacement arbitraire, le deuxième terme étant la pression hydrostatique et le dernier, la pression magnétostatique. Dans cette nouvelle expression pour l'équation de Navier–Stokes, la force gravitationnelle prend la forme de la poussée d'Archimède, due à la différence de densité entre les deux fluides. Enfin, il apparaît clairement que le système au repos, avec l'interface plane et horizontale, est à l'équilibre.

2.2.3.2 Temps caractéristiques

À chacun des mécanismes de transport intervenant dans l'équation de Navier–Stokes est associé une échelle caractéristique. Supposons que, pour un écoulement donné, on connaisse l'ordre de grandeur de la taille L , celui de la vitesse U ainsi que ceux des autres paramètres physiques. Alors, on peut déduire l'échelle de temps correspondant à un mécanisme de transport en résolvant à l'ordre zéro l'équation qui en décrit la dynamique. Nous allons appliquer cette démarche à chacun des termes de (2.6).

Choisissons d'abord pour densité et vitesse caractéristiques la densité du bain électrolytique ρ_e et la vitesse de brassage $U = 10$ cm/s d'après le tableau 2.2. Puis, prenons la longueur L_x et la hauteur L_z du système comme longueurs caractéristiques

horizontale et verticale respectivement. En effet, étant donné le grand rapport d'aspect du système, on s'attend à ce que les échelles de temps verticale et horizontale soient sensiblement différentes. On obtient donc :

- temps inertiel ou temps d'advection τ_U :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) \quad \longrightarrow \quad \frac{\rho_e U}{\tau_U} \sim \frac{\rho_e U^2}{L} \quad \longrightarrow \quad \tau_U = \frac{L}{U}$$

- horizontal : 136 s
- vertical : 3,80 s

- temps visqueux τ_μ :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = \nabla \cdot (2\mu D) \quad \longrightarrow \quad \frac{\rho_e U}{\tau_\mu} \sim \frac{\mu U}{L^2} \quad \longrightarrow \quad \tau_\mu = \frac{\rho_e L^2}{\mu}$$

- horizontal : $3,22 \times 10^8$ s
- vertical : $2,52 \times 10^5$ s

- temps turbulent τ_t :

Il est calculé comme le temps précédent, mais en utilisant l'estimation de la diffusivité turbulente $\nu_t = 5 \text{ cm}^2/\text{s}$ mentionnée à la section 2.1.1.

$$\tau_t = \frac{L^2}{\nu_t}$$

- horizontal : $3,70 \times 10^5$ s
- vertical : $2,89 \times 10^2$ s

- temps de poussée d'Archimède τ_g :

L'accélération gravitationnelle effective pour la poussée d'Archimède est

$$g_{\text{eff}} = \frac{\Delta \rho}{\rho} g,$$

alors :

$$\frac{L_z}{\tau_g^2} \sim g_{\text{eff}} \quad \longrightarrow \quad \tau_g = \sqrt{\frac{\rho_e L_z}{\Delta \rho g}}$$

– vertical : $6,71 \times 10^{-1}$ s

- temps de poussée d'Archimède thermique τ_α :

Dans (2.6), on n'a pas tenu compte de la poussée d'Archimède due à la dilatation thermique. La densité du fluide à un écart ΔT de la température de référence est en fait $(1 - \alpha \Delta T)\rho$, de sorte qu'on doit ajouter un terme de poussée d'Archimède thermique :

$$\alpha \Delta \rho g \hat{z}.$$

Le temps caractéristique associé est ainsi :

$$\tau_\alpha = \sqrt{\frac{L_z}{\alpha \Delta \Theta g}}$$

– vertical (bain) : 19,7 s.

Non seulement τ_α est-il de loin inférieur à τ_g , mais, comme on le verra à la section 2.2.4.1, tous les processus de transport thermique sont beaucoup trop lents pour être directement impliqués dans le développement des instabilités magnétohydrodynamiques. Ainsi, bien que les mouvements de convection thermique puissent servir de point de départ à leur déclenchement, on ne s'intéressera pas aux faibles perturbations de l'écoulement que pourraient induire ces mécanismes thermiques.

- temps de force magnétique τ_m :

En supposant que les fluctuations du courant soient de l'ordre du courant imposé et que le champ magnétique ambiant ($B_a \sim 10$ mT) domine, l'accélération par la force magnétique est de l'ordre de :

$$\frac{L}{\tau_m^2} \sim \frac{J_0 B_a}{\rho_e} \longrightarrow \tau_m = \sqrt{\frac{\rho_e L}{J_0 B_a}}$$

- horizontal : 20,4 s
- vertical : 3,41 s

2.2.4 Transport de l'énergie interne

La conservation de l'énergie interne ou chaleur est exprimée par :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = q_J + q_v - \nabla \cdot [\rho c_p (T \mathbf{v} - \kappa \nabla T)], \quad (2.16)$$

où T est la température et c_p , la chaleur spécifique, donc $\rho c_p T$ est la densité d'énergie interne. Le premier terme entre les parenthèses correspond au transport passif par le champ de vitesse, tandis que le second correspond à la diffusion thermique. Notons au passage que la conductivité thermique s'écrit : $k = \rho c_p \kappa$. Enfin, le terme source q_J est la densité du taux de chaleur produit par effet Joule :

$$q_J = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} = \frac{\mathbf{J}^2}{\sigma},$$

où \mathbf{E} est le champ électrique et σ , la conductivité électrique du milieu, et

$$q_v = 2\mu D^2$$

est celle produite par frottement visqueux.

2.2.4.1 Temps caractéristiques

On procède comme à la section 2.2.3.2 pour associer à chaque mécanisme de transport un temps caractéristique :

- temps d'advection τ_U : le même qu'à la section 2.2.3.2

- temps diffusif thermique τ_κ :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho c_p \kappa \nabla T) \quad \longrightarrow \quad \frac{\Delta \Theta}{\tau_\kappa} \sim \frac{\kappa \Delta \Theta}{L_z^2} \quad \longrightarrow \quad \tau_\kappa = \frac{L_z^2}{\kappa}$$

- horizontal (aluminium) : $2,10 \times 10^6$ s
- horizontal (bain) : $1,55 \times 10^9$ s
- vertical (aluminium) : $1,64 \times 10^3$ s
- vertical (bain) : $1,21 \times 10^6$ s

- temps de chauffage par effet Joule τ_J :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = \frac{J^2}{\sigma} \quad \longrightarrow \quad \frac{\rho c_p \Delta \Theta}{\tau_J} \sim \frac{J_0^2}{\sigma} \quad \longrightarrow \quad \tau_J = \frac{\rho c_p \Delta \Theta \sigma}{J_0^2}$$

- aluminium : $1,46 \times 10^6$ s
- bain : $2,14 \times 10^3$ s

- temps de chauffage visqueux τ'_μ :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = 2\mu D^2 \quad \longrightarrow \quad \frac{\rho c_p \Delta \Theta}{\tau'_\mu} \sim \frac{\mu U^2}{L^2} \quad \longrightarrow \quad \tau_J = \frac{\rho_e c_{p,e} \Delta \Theta L^2}{\mu_e U^2}$$

- horizontal : $5,14 \times 10^{15}$ s
- vertical : $4,02 \times 10^{12}$ s

Les valeurs calculées montrent que les mécanismes de transport thermiques sont beaucoup plus lents que ceux vus à la section 2.2.3.2, et ainsi sont peu propices à engendrer des anomalies locales de températures capables d'influencer significativement l'écoulement. L'équation (2.16) ne fera donc pas partie de notre modèle de l'écoulement.

2.2.5 Transport de l'induction magnétique

Nous allons dériver une équation de transport de l'induction magnétique à partir des équations de Maxwell et de la loi d'Ohm, comme l'a fait Cowling (1960), mais pour un milieu non homogène, puisqu'il faut tenir compte du saut de conductivité à l'interface aluminium-électrolyte. On considère toutefois un milieu dont les propriétés physiques ne sont pas affectées par la présence d'un champ électromagnétique, c'est-à-dire un milieu sans susceptibilité électrique ni magnétique.

2.2.5.1 Équations de Maxwell

Les équations de Maxwell (Wangsness, 1986) décrivent l'évolution temporelle du champ électrique \mathbf{E} , du champ d'induction magnétique \mathbf{B} , du déplacement électrique \mathbf{D} et du champ magnétique \mathbf{H} :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_c \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t},\end{aligned}$$

où $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ et $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0 - \mathbf{M}$. ρ_c est la densité de charge libre. La polarisation \mathbf{P} du milieu est généralement fonction de \mathbf{E} , tandis que l'aimantation \mathbf{M} est fonction de \mathbf{B} . Les constantes ϵ_0 et μ_0 sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du vide.

Les conditions à la frontière entre deux milieux pour ces équations sont données par

$$\begin{aligned}D_{2n} &= D_{1n} + \sigma_c \\ \mathbf{E}_{2t} &= \mathbf{E}_{1t} \\ B_{2n} &= B_{1n} \\ \mathbf{H}_{2t} &= \mathbf{H}_{1t} + \mathbf{K} \times \hat{\mathbf{n}}\end{aligned}$$

où σ_c est la densité superficielle de charges libres et \mathbf{K} est la densité superficielle de courants libres. Les indices n et t réfèrent respectivement aux composantes normales et tangentielles des champs. Le vecteur normal unitaire $\hat{\mathbf{n}}$ pointe du milieu 1 vers le milieu 2. On verra plus loin, à la section 3.1, qu'il n'est pas nécessaire de forcer ces conditions à l'interface, car avec la méthode des contours, contrairement à d'autres méthodes (Gerbeau et al., 2001), elles sont traitées implicitement au moyen d'une approximation de transition lisse.

Puisqu'on s'intéresse ici à des milieux sans polarisation ($\mathbf{P} = 0$) ni aimantation ($\mathbf{M} = 0$), soit une sous-classe des milieux linéaires et isotropes, sans susceptibilité électrique ni magnétique. Les équations de Maxwell deviennent alors :

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_c}{\epsilon_0} \quad (2.17)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.19)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mu_0 \mathbf{J}, \quad (2.20)$$

où on a utilisé $\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$.

La loi de Faraday (2.18) exprime l'induction d'un champ électrique \mathbf{E} par une densité de flux magnétique \mathbf{B} variable ; l'équation (2.19) implique l'inexistence de monopôles magnétiques ; et la loi d'Ampère (2.20) exprime l'induction d'un champ magnétique par le passage d'une densité de courant \mathbf{J} et par un champ électrique variable.

2.2.5.2 Approximation magnétohydrodynamique

En général, les auteurs (Cowling, 1960 et Fearn, 2000) passent assez rapidement sur cette approximation, disant simplement que le rapport entre la vitesse de la matière

et celle de la lumière v/c étant relativement faible, on peut ignorer les courants de déplacement, dus à l'accumulation locale de charges. Nous tenterons ici de donner les détails de cette approximation de sorte à mettre en évidence ses limites et de voir qu'elle est tout à fait appropriée pour notre problème.

Comparons donc les grandeurs des deux termes du membre gauche de (2.20). Admettons d'abord que les amplitudes des variations temporelles des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} pendant le temps caractéristique τ sont du même ordre que celles de leurs variations spatiales respectives, qu'on notera ΔE et ΔB , sur la distance caractéristique L . Cette hypothèse est tout à fait raisonnable, vu la nature ondulatoire des champs électromagnétiques. Ainsi, la loi de Faraday (2.18) relie ΔE à ΔB :

$$\Delta E \sim \frac{L \Delta B}{\tau}.$$

Examinons maintenant le rapport du module des deux termes en question :

$$\frac{\left| \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right|}{|\nabla \times \mathbf{B}|} \sim \frac{L \Delta E}{\tau c^2 \Delta B} \sim \frac{L^2}{\tau^2 c^2} = \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2 \ll 1.$$

En effet, le temps caractéristique $\tau_0 = L/c$ de propagation des variations des champs électromagnétiques dans le vide sur une distance L est typiquement très petit devant celui mesuré dans un milieu conducteur. Parmi les phénomènes qui propagent les fluctuations électromagnétiques dans la cuve de Hall-Hérault, c'est la diffusion magnétique qui agit le plus rapidement, comptant un temps caractéristique de propagation verticale de $\tau = L^2/\eta \simeq 5,44 \times 10^{-5}$ s dans le bain électrolytique, où $\eta = 1/\mu_0\sigma$ est la diffusivité magnétique. Nous y reviendrons en détail à la section 2.2.5.7. Dans les mêmes conditions, c'est-à-dire en prenant comme longueur caractéristique L la hauteur de la cuve de 38 cm, on obtient $\tau_0 \simeq 1,27 \times 10^{-9}$ s, qui est effectivement de loin inférieur à τ .

En utilisant cette approche, nous n'avons dû faire aucune hypothèse sur le module des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} , puisque seules leurs variations étaient à considérer.

L'approximation MHD reste donc valide même en présence d'un important champ électrique, comme celui qui induit le courant de 400 kA dans la cuve de Hall-Héroult, ainsi que d'un intense champ magnétique ambiant, comme dans une salle de cuves.

La loi d'Ampère dans notre système se réduit donc à

$$\nabla \times \mathbf{B} \cong \mu_0 \mathbf{J}. \quad (2.21)$$

Il s'agit là de l'approximation MHD. On en déduit que le champ magnétique est principalement induit par le passage des courants. Insistons sur le fait que cette approximation n'est pas du tout valide dans le vide, où $\tau = \tau_0$.

Remarquons également qu'en tirant la divergence de (2.21), on obtient $\nabla \cdot \mathbf{J} \cong 0$ ce qui, en vertu de la loi de conservation de la charge, est équivalent à dire que les effets d'accumulation locale de charge électrique $\partial \rho_c / \partial t$ sont négligeables quant à ceux du champ magnétique.

2.2.5.3 Approximation de la force électrique négligeable

Nous allons maintenant montrer que la force électrique

$$\mathbf{f}_e = \rho_c \mathbf{E}$$

est très faible par rapport à la force magnétique

$$\mathbf{f}_m = \mathbf{J} \times \mathbf{B},$$

et qu'il est ainsi justifié de la négliger. Nous procéderons comme Fearn (2000), mais avancerons plus prudemment, pour bien voir toutes les implications de cette approximation.

De l'équation (2.17), on déduit que l'ordre de grandeur R_c de la densité de charge ρ_c est au plus

$$R_c \sim \frac{\epsilon_0 \Delta E}{L},$$

et de la loi d'Ampère, version MHD (2.21), on déduit que l'ordre de grandeur J_0 de la densité de courant est relié à ΔB par

$$J_0 \sim \frac{\Delta B}{\mu_0 L}. \quad (2.22)$$

On obtient donc

$$\frac{|\mathbf{f}_e|}{|\mathbf{f}_m|} \sim \frac{\mu_0 \epsilon_0 E_0 \Delta E}{B_0 \Delta B} \sim \frac{\tau_0 E_0}{\tau c B_0}. \quad (2.23)$$

Cette fois-ci, le rapport dépend non seulement des variations de \mathbf{E} et de \mathbf{B} mais également de leurs intensités respectives. Dans une salle de cuves, le champ magnétique ambiant B_0 est de l'ordre de $3 \Delta B$. En effet, on sait (tableau 2.1) que le champ ambiant est de l'ordre de 10 mT, puis de (2.22), on tire que $\Delta B \sim 3,27$ mT. Le champ électrique étant de l'ordre de J_0/σ (loi d'Ohm), on obtient le rapport

$$\frac{E_0}{B_0} \sim \frac{J_0/\sigma}{3 \Delta B} \sim \frac{\eta}{3L},$$

qu'on substitue dans (2.23), pour trouver finalement que

$$\frac{|\mathbf{f}_e|}{|\mathbf{f}_m|} \sim \left(\frac{\tau_0}{\tau}\right)^2 \ll 1.$$

Il est donc tout à fait raisonnable de négliger la force électrique sur les fluides.

2.2.5.4 Loi d'Ohm

Le courant engendré dans un milieu de conductivité σ en mouvement à une vitesse \mathbf{v} dans un champ électrique \mathbf{E} et un champ d'induction magnétique \mathbf{B} est

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.24)$$

Notons que le terme entre parenthèses dans le membre de droite est simplement le champ électrique dans le référentiel du conducteur en mouvement.

2.2.5.5 Évolution temporelle du champ d'induction magnétique

On substitue (2.24) dans (2.21), on isole \mathbf{E} :

$$\mathbf{E} = \eta \nabla \times \mathbf{B} - \mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (2.25)$$

puis on calcule $\nabla \times \mathbf{E}$ et on substitue dans (2.18) :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B} - \eta \nabla \times \mathbf{B}).$$

Mais, puisque $\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, on peut aussi écrire :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{v}) - \nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B}). \quad (2.26)$$

C'est la forme que nous emploierons à partir d'ici. Le premier et le deuxième terme expriment respectivement le transport passif et l'étirement de l'induction magnétique par le champ de vitesse. Le dernier terme correspond à la diffusion magnétique, attribuable à l'effet Joule.

Dans le cas où η est constant, ce terme de diffusion peut se récrire :

$$-\nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B}) = \eta \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (2.27)$$

ce qui explique pourquoi on l'appelle *diffusivité magnétique*³. Mais, si η varie dans l'espace, on obtient plutôt

³Un véritable terme de diffusion prendrait la forme $\nabla \cdot (\eta \nabla \mathbf{B})$ plutôt que celle de (2.27), bien que cela n'enlève rien à son caractère diffusif.

$$-\nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B}) = \eta \nabla^2 \mathbf{B} - \nabla \eta \times (\nabla \times \mathbf{B})$$

qui contient deux termes supplémentaires faisant intervenir les gradients de η . Or, dans la cuve de Hall-Héroult, la diffusivité magnétique est constante partout sauf à l'interface, où le gradient est perpendiculaire à l'interface.

2.2.5.6 Conservation de la divergence

L'équation (2.26) décrit l'évolution temporelle de \mathbf{B} . Mais qu'en est-t-il de $\nabla \cdot \mathbf{B}$? En effet, (2.19) est une équation fondamentale de l'électromagnétisme et doit être satisfaite en tout temps. Observons donc ce qu'il advient de $\nabla \cdot \mathbf{B}$ en tirant la divergence de (2.26) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{B} = -\partial_i \partial_j (v_i B_j - B_i v_j) = 0,$$

où on a utilisé la convention de sommation implicite sur les indices répétés. Ainsi, la quantité $\nabla \cdot \mathbf{B}$ est conservée tout au long de l'écoulement. Il suffit donc que les conditions initiales satisfassent $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ pour que cette propriété soit préservée au cours de l'écoulement.

2.2.5.7 Temps caractéristiques

On procède comme à la section 2.2.3.2 pour associer à chaque mécanisme de transport un temps caractéristique.

- temps d'advection et d'étirement τ_U : le même qu'à la section 2.2.3.2
- temps diffusif magnétique τ_η :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B}) \longrightarrow \frac{\Delta B}{\tau_\eta} \sim \frac{\eta \Delta B}{L^2} \longrightarrow \tau_\eta = \frac{L^2}{\eta}$$

- horizontal (aluminium) : $6,97 \times 10^2$ s
- horizontal (bain) : $6,97 \times 10^{-2}$ s
- vertical (aluminium) : $5,44 \times 10^{-1}$ s
- vertical (bain) : $5,44 \times 10^{-5}$ s

Bien que la diffusion magnétique se produise pratiquement instantanément dans le bain électrolytique, elle agit dans l'aluminium sur un temps comparable à celui de la poussée d'Archimède. On ne peut donc pas se contenter de l'approximation magnétostatique mentionnée à la section 1.2.2.

2.2.5.8 Force magnétique

Observons au passage que, dans le cadre de l'approximation MHD, on peut récrire l'expression de la force magnétique (2.9) au moyen de (2.21) pour la séparer en un terme de flux et un gradient de pression magnétique :

$$\begin{aligned} \mathbf{J} \times \mathbf{B} &= -\frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{B}\mathbf{B}}{\mu_0} \right) - \nabla \left(\frac{\mathbf{B}^2}{2\mu_0} \right). \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.2.6 Potentiel magnétique vectoriel

2.2.6.1 Le problème de la divergence de \mathbf{B}

Bien qu'on ait démontré analytiquement à la section 2.2.5.6 que la propriété $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ était conservée, la résolution numérique de (2.26) ne la conserve pas exactement. En fait, les résultats produits par une ancienne version du code `nsmhd` qui résolvait cette équation présentaient des termes sources purement artificiels, analogues à de faux monopôles magnétiques, qui conduisaient à un régime d'écoulement non physique. Les détails en sont donnés en annexe A à l'intérieur d'un acte de conférence.

Il s'agit d'un problème bien connu et difficile à résoudre (Dedner et al., 2002, 2003). Nous avons tenté d'utiliser une méthode de projection semblable à celle utilisée pour assurer $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ (voir section 3.2), comme le proposent LeVeque et al. (1998), mais les résultats étaient peu convaincants avec notre schéma numérique. Ce dernier fera l'objet du chapitre 3.

Il a donc fallu penser à une autre approche. Nous avons opté pour une méthode permettant d'obtenir $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ exactement, même au moyen d'une résolution numérique. Il ne s'agit pas de supprimer l'erreur numérique, mais de la déplacer de sorte à éviter l'apparition de sources magnétiques, qui influencent fortement l'écoulement de façon non physique.

2.2.6.2 Nouvelle formulation

Nous allons ici reprendre la démarche de la section 2.2.5, mais en exprimant l'induction magnétique en terme de son potentiel vectoriel \mathbf{A} .

L'équation (2.19) suggère l'utilisation d'un potentiel vectoriel (Wangsness, 1986) :

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla\psi, \quad (2.29)$$

tel que

$$\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}. \quad (2.30)$$

Les définitions de la fonction ψ et du champ vectoriel \mathbf{A} dépendent du choix de jauge, que nous différons à la fin de la dérivation.

D'après la loi d'Ampère (2.21), la force magnétique s'écrit alors :

$$(\mathbf{J} \times \mathbf{B})_i = J_k \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \right),$$

où

$$\mu_0 \mathbf{J} = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}.$$

En ce qui a trait au champ électrique, la loi de Faraday :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} \right) = 0$$

suggère l'utilisation d'un potentiel scalaire ϕ (Wangsness, 1986) tel que

$$-\nabla \phi = \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t}. \quad (2.31)$$

On substitue ensuite \mathbf{B} et \mathbf{E} par \mathbf{A} et ϕ dans (2.25) au moyen de (2.30) et (2.31) respectivement :

$$\eta \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}') = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}'),$$

qu'on peut récrire, étant donné que $\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A}$ d'après (2.30), comme

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \eta \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \nabla \phi. \quad (2.32)$$

À l'état stationnaire ($\partial \mathbf{A} / \partial t = 0$), on impose la densité de courant uniforme $\mathbf{J}_0 = -J_0 \hat{\mathbf{z}}$, donc $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \mu_0 \mathbf{J}_0$. On pose également $\mathbf{v} = 0$, ce qui résulte en la condition suivante :

$$\nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \eta \mu_0 \mathbf{J}_0 + \nabla \phi. \quad (2.33)$$

Les fluides au repos, l'interface est complètement horizontale et ainsi, $\eta = \eta_0(z)$. Il suffit alors de définir la fonction ψ de sorte que

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \phi - \mu_0 J_0 \int \eta_0(z) dz$$

pour satisfaire (2.33). Puis, en substituant (2.33) dans (2.32), on obtient

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \eta \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \eta_0 \mu_0 \mathbf{J}_0.$$

On décompose ensuite le potentiel \mathbf{A} en une partie indépendante du temps \mathbf{A}_0 , telle que $\nabla \times \mathbf{A}_0 = \mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0$ où \mathbf{B}_a et \mathbf{B}_0 sont respectivement définis par (2.13) et (2.11), et une fluctuation $\mathbf{a} = \mathbf{A} - \mathbf{A}_0$. On obtient alors

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{v} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \nabla \times \mathbf{a}) - \eta \nabla \times (\nabla \times \mathbf{a}) - (\eta - \eta_0) \mu_0 \mathbf{J}_0 \quad (2.34)$$

qui, en utilisant l'identité vectorielle

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{a}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla^2 \mathbf{a}, \quad (2.35)$$

devient :

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{v} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \nabla \times \mathbf{a}) + \eta \nabla^2 \mathbf{a} - \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{a}) - (\eta - \eta_0) \mu_0 \mathbf{J}_0.$$

Or, d'après le théorème de Helmholtz (Wangsness, 1986), on est encore libre de choisir $\nabla \cdot \mathbf{a}$, puisque seulement $\nabla \times \mathbf{a}$ a été spécifié par (2.30). On prendra donc

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = 0, \quad (2.36)$$

qui simplifie les équations. On obtient alors l'équation d'évolution du potentiel vectoriel :

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{v} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \nabla \times \mathbf{a}) + \eta \nabla^2 \mathbf{a} - (\eta - \eta_0) \mu_0 \mathbf{J}_0. \quad (2.37)$$

L'implémentation numérique de cette équation est simple à réaliser, avec la simple restriction que le potentiel initial satisfasse la condition (2.36).

2.2.6.3 Conservation de la divergence

Étudions la conservation de $\nabla \cdot \mathbf{a}$ en récrivant (2.34) comme

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{v} \times \mathbf{B} - \mu_0 \eta \mathbf{J} + \mu_0 \eta_0 \mathbf{J}_0,$$

en substituant (2.24) :

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{E}_0 - \mathbf{E},$$

où \mathbf{E}_0 est le champ électrique à l'état stationnaire. Puis, on tirant la divergence :

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{a} \simeq 0,$$

car $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho_c/\epsilon_0$ et, pour les mêmes raisons que celles évoquées à la fin de la section 2.2.5.2, on néglige les effets d'accumulation locale de charge électrique.

Bien sûr, la résolution numérique de (2.37) ne préservera pas exactement $\nabla \cdot \mathbf{a}$. Cela permettra néanmoins d'éviter l'apparition de « monopôles magnétiques » parasites. Nous croyons raisonnable l'hypothèse que les conséquences physiques sont moindres pour une faible erreur sur $\nabla \cdot \mathbf{a}$ que sur $\nabla \cdot \mathbf{B}$. Notons enfin que \mathbf{B} ne dépend pas de la composante de \mathbf{a} à divergence non nulle.

2.2.6.4 Retour à l'équation pour \mathbf{B}

On vérifie qu'on retrouve l'équation d'évolution de l'induction magnétique \mathbf{B} en tirant le rotationnel de (2.37) :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B} + \nabla \eta \times \nabla^2 \mathbf{a} - \nabla \eta \times \mu_0 \mathbf{J}_0,$$

qui, en utilisant (2.35) et (2.36), se réécrit comme

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B} - \nabla \eta \times (\nabla \times \mathbf{B}),$$

ou encore

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B} - \eta \mu_0 \mathbf{J}).$$

C'est bien là l'équation d'évolution de \mathbf{B} qu'on peut dériver à partir des équations de Maxwell, ou en tirant le rotationnel de (2.32).

2.2.7 Sommaire des temps caractéristiques

Le tableau 2.3 regroupe, en ordre croissant, les temps caractéristiques des différents mécanismes de transport calculés dans les précédentes sections. Les quatre premiers sont les plus influents dans l'écoulement.

Mécanisme	Temps caractéristique	Ordre de grandeur	
		$L = L_x$	$L = L_z$
diffusion magnétique	$\tau_\eta = \frac{L^2}{\eta}$	2,7 h / 0,07 s	0,5 s / 5×10^{-5} s
poussée d'Archimède	$\tau_g = \sqrt{\frac{\rho_e L_z}{\Delta \rho g}}$	—	0,67 s
force magnétique	$\tau_m = \sqrt{\frac{\rho_e L}{J_0 B_a}}$	20 s	3,4 s
inertie / advection	$\tau_U = \frac{L}{U}$	2,3 min	3,8 s
poussée d'Archimède thermique	$\tau_\alpha = \sqrt{\frac{L_z}{\alpha \Delta \Theta g}}$	—	20 s
turbulence	$\tau_t = \frac{L^2}{\nu_t}$	103 h	4,8 min
effet Joule	$\tau_J = \frac{\rho C \Delta \Theta \sigma}{J_0^2}$	∞	3,9 h
viscosité	$\tau_\mu = \frac{\rho_e L^2}{\mu}$	∞	70 h
diffusion thermique	$\tau_\kappa = \frac{L_z^2}{\kappa}$	∞	27 min / ∞

Le symbole ∞ marque les temps supérieurs à 300 h. Lorsque les temps pour l'aluminium et le bain sont significativement différents, il sont donnés sous la forme *aluminium / bain*.

Tableau 2.3 Temps caractéristiques

2.3 Choix d'échelle

Nous allons choisir des unités pour les différentes variables du modèle. Prenons τ comme unité arbitraire de temps, et les valeurs connues L_z , J_0 et ρ_e comme unités de longueur, de courant électrique et de densité de masse respectivement. Pour avoir des unités cohérentes, il faut alors remplacer B_a dans la définition de τ_m du tableau 2.3 par la nouvelle unité d'induction magnétique : $\mu_0 J_0 L_z$. On peut alors définir les variables sans dimension \mathbf{r}^* , t^* , \mathbf{v}^* , \mathbf{B}^* , \mathbf{A}^* , ρ^* et ρ'^* ainsi :

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \mathbf{r} = L_z \mathbf{r}^* &\longrightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{1}{L_z} \frac{\partial}{\partial x_i^*} & \bullet \quad \mathbf{A} = \mu_0 J_0 L_z^2 \mathbf{A}^* \\
 \bullet \quad t = \tau t^* &\longrightarrow \frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial t^*} & \bullet \quad \rho = \rho_e \rho^* \\
 \bullet \quad \mathbf{v} = \frac{L_z}{\tau} \mathbf{v}^* & & \bullet \quad \rho' \equiv \rho - \rho_0 = (\rho_a - \rho_e) \rho'^*
 \end{aligned}$$

Le choix d'unités différentes de ρ pour ρ' peut sembler étrange, mais il s'agit ici de définir les quantités marquées d'une astérisque de sorte qu'elles soient de l'ordre de l'unité. La pertinence du choix des unités pour ρ' deviendra plus claire ci-dessous.

Puis, un minimum de manipulation algébrique permet de transformer les équations (2.14) et (2.37) en :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho^* \mathbf{v}^*}{\partial t^*} = & -\frac{\tau^2}{\tau_g^2} \rho'^* \hat{\mathbf{z}} + \frac{\tau^2}{\tau_m^2} [\mathbf{J}_0^* \times \mathbf{b}^* + \mathbf{j}^* \times (\mathbf{B}_a^* + \mathbf{B}_0^* + \nabla^* \times \mathbf{a}^*)] \\
 & - \nabla^* \cdot \left(\rho^* \mathbf{v}^* \mathbf{v}^* - \frac{\tau}{\tau_t} 2\mathbf{D}^* \right) - \nabla p',
 \end{aligned}$$

et

$$\frac{\partial \mathbf{a}^*}{\partial t^*} = \mathbf{v}^* \times (\mathbf{B}_a^* + \mathbf{B}_0^* + \nabla^* \times \mathbf{a}^*) + \frac{\tau}{\tau_\eta} \nabla^{*2} \mathbf{a}^* - \left(\frac{\tau}{\tau_\eta} - \frac{\tau}{\tau_{\eta_0}} \right) \mu_0 \mathbf{J}_0^*,$$

où

$$\mathbf{B}_a^* = \beta \hat{\mathbf{z}}$$

et

$$\mathbf{B}_0^* = \frac{1}{2} \left[\left(y^* - \frac{L_y}{2L_z} \right) \hat{\mathbf{x}} - \left(x^* - \frac{L_x}{2L_z} \right) \hat{\mathbf{y}} \right]$$

d'après (2.13) et (2.11). Puisqu'on s'intéresse principalement aux effets de la force magnétique, on choisit pour unité de temps celui du transport par la force magnétique $\tau = \tau_m$. Le tableau 2.3 montre d'ailleurs qu'il est voisin du temps d'advection. Des nombres sans dimension apparaissent alors dans les équations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = & -\frac{1}{\text{Fr}^2 \text{Al}^2} \rho' \hat{\mathbf{z}} + \mathbf{J}_0 \times \mathbf{b} + \mathbf{j} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \mathbf{b}) \\ & - \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \frac{1}{\text{Re}_t \text{Al}} 2\mathbf{D} \right) - \nabla p', \end{aligned} \quad (2.38)$$

et

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{v} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \nabla \times \mathbf{a}) + \frac{1}{\text{Lu}} \nabla^2 \mathbf{a} - \left(\frac{1}{\text{Lu}} - \frac{1}{\text{Lu}_0} \right) \mu_0 \mathbf{J}_0, \quad (2.39)$$

où on a laissé tomber les astérisques pour simplifier la notation. Les définitions des nombres sans dimension sont données dans le tableau 2.4. Les valeurs des coefficients apparaissant dans les équations (2.38) et (2.39) sont données dans le tableau 2.5. Insistons sur le fait qu'il ne s'agit pas de constantes, puisqu'ils dépendent des propriétés des fluides et qu'il y a deux fluides dans le système.

2.4 Bilan d'énergie

Nous ferons dans cette section le bilan des échanges et des pertes d'énergie du système. La figure 2.1 en résume la dynamique.

2.4.1 Énergie cinétique

L'équation d'évolution de la quantité de mouvement est donnée par (2.6) :

Nombres	Symbole	Définition	Valeur
Alfvén	Al	τ_U/τ_m	0,64
Froude	Fr	τ_g/τ_U	0,18
Lundqvist	Lu	τ_η/τ_m	$9,13 \times 10^{-2} / 9,13 \times 10^{-6}$
Reynolds turbulent	Re_t	τ_t/τ_U	76

Lorsque les valeurs sont différentes dans l'aluminium et dans le bain, elles sont données sous la forme *aluminium / bain*. Les temps caractéristiques sont définis dans le tableau 2.3. Mentionnons que le nombre de Froude est parfois défini comme le carré de la quantité spécifiée ci-haut.

Tableau 2.4 Nombres sans dimension

Coefficient	Valeur
$1/\text{Fr}^2 \text{Al}^2$	79,0
$1/\text{Re}_t \text{Al}$	$2,06 \times 10^{-2}$
$1/\text{Lu}$	$1,09 \times 10^1 / 1,09 \times 10^5$

Lorsque les valeurs sont différentes dans l'aluminium et dans le bain, il sont donnés sous la forme *aluminium / bain*.

Tableau 2.5 Coefficients sans dimension

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_m - \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - 2\mu \mathbf{D}) - \nabla p.$$

Soit $e_c = \rho v^2/2$, la densité d'énergie cinétique. En utilisant la condition d'incompressibilité $D\rho/Dt = 0$, on obtient

$$\frac{\partial e_c}{\partial t} = \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[\frac{\rho v^2}{2} \mathbf{v} + p \mathbf{v} - 2\mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{D} \right] - q_v + w_g + w_m, \quad (2.40)$$

où $q_v = 2\mu D^2$ est la densité du taux de chaleur produite par viscosité, $w_m = \mathbf{v} \cdot \mathbf{J} \times \mathbf{B}$ est la densité du taux de travail fait par la force magnétique et $w_g = \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{g}$ est la densité de travail fait par la force gravitationnelle.

Notons que l'expression pour w_j est obtenue avec le dernier terme à l'intérieur de la divergence dans le membre droit de (2.40) en remarquant que

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) = \nabla \cdot (2\mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{D}) - 2\mu D^2,$$

où

$$D^2 = D_{ij} D_{ij} = \frac{\partial v_j}{\partial x_i} D_{ij}.$$

L'intégration de (2.40) sur le domaine Ω donne l'équation d'évolution de l'énergie cinétique totale :

$$\frac{dE_c}{dt} = - \iint_{\partial\Omega} \left[\frac{\rho v^2}{2} \mathbf{v} + p \mathbf{v} - 2\mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{D} \right] \cdot \mathbf{d}\mathbf{a} - Q_v + W_g + W_m,$$

où E_c , Q_v , W_g et W_m sont respectivement les intégrales sur Ω de e_c , q_v , w_g et w_m . Puisque $\mathbf{v} = 0$ sur $\partial\Omega$, tous les termes de l'intégrale de surface sont nuls, et il reste :

$$\frac{dE_c}{dt} = W_g + W_m - Q_v. \quad (2.41)$$

2.4.2 Énergie magnétique

L'équation d'évolution du champ d'induction magnétique est :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B} - \eta \mu_0 \mathbf{J}), \quad (2.42)$$

où $\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{B}_0 / \mu_0$ est la densité de courant électrique.

L'équation d'évolution de la densité d'énergie magnétique $e_m = B^2/2\mu_0$ est obtenue en faisant le produit scalaire de (2.42) avec \mathbf{B}/μ_0 , puis en utilisant l'identité vectorielle $\mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{A} = \nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) + \mathbf{A} \cdot \nabla \times \mathbf{B}$:

$$\frac{\partial e_m}{\partial t} = \nabla \cdot \left[(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \eta \mathbf{J} \times \mathbf{B} \right] - w_m - q_J,$$

où $q_J = \eta\mu_0 J^2$, la densité du taux de chaleur produite par effet Joule.

L'intégration sur le domaine Ω donne l'équation d'évolution de l'énergie magnétique totale :

$$\frac{dE_m}{dt} = \oint_{\partial\Omega} \left[\left(\mathbf{v} \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} \right) \times \mathbf{B} - \eta \mathbf{J} \times \mathbf{B} \right] \cdot \mathbf{da} - W_m - Q_J, \quad (2.43)$$

où $\partial\Omega$ est la surface limitant le domaine Ω , et E_m , W_m et Q_J sont respectivement les intégrales sur Ω de e_m , w_m et q_J . Le premier terme de l'intégrale de surface est nul, puisque $\mathbf{v} = 0$ sur $\partial\Omega$. Le second peut se récrire :

$$\eta \mathbf{J} \times \mathbf{B} = \frac{\mathbf{J}}{\sigma} \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} = \mathbf{E} \times \mathbf{H},$$

qu'on reconnaît comme étant le vecteur de Poynting.

L'équation (2.43) devient alors

$$\frac{dE_m}{dt} = \Gamma_m - W_m - Q_J, \quad (2.44)$$

où

$$\Gamma_m = - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{E} \times \mathbf{H} \cdot \mathbf{da}$$

est le flux d'énergie magnétique entrant à travers les parois du système.

2.4.3 Énergie potentielle

L'énergie potentielle est simplement donnée par

$$E_p = \iiint_{\Omega} \rho g z d\tau = -W_g. \quad (2.45)$$

2.4.4 Bilan

La figure 2.1 présente un diagramme du bilan d'énergie, tracé à partir des équations (2.41), (2.44) et (2.45).

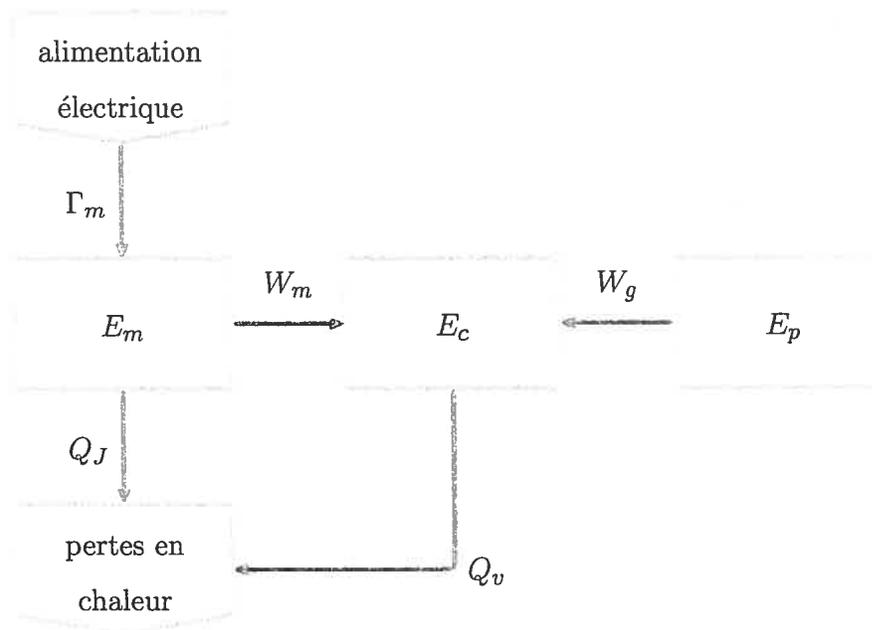


Figure 2.1 Bilan d'énergie

2.5 Idéalisisation de la cuve

Pour saisir la physique du problème, on n'a pas besoin de prendre en compte toutes les particularités des cuves de Hall-Héroult, aussi considérerons une version idéalisée du système. Nous effectuons les simplifications suivantes :

1. Géométrie rectangulaire :

Comme on l'avait vu dans la figure 1.2, le fond de la cuve n'est pas complètement plat : il présente une pente près des montants. Toutefois, nous travaillerons dans l'hypothèse que cet aspect de la géométrie de la cuve n'influence pas de manière significative la physique de l'écoulement.

2. Pas de canaux entre les anodes :

Nous allons également considérer qu'il y a une seule anode sur le dessus de la cuve, et qu'elle s'étend sur toute la surface de la cuve. Cela a deux conséquences principales. D'abord, la frontière supérieure de la cuve devient entièrement solide, c'est-à-dire qu'on néglige la couche de gaz qui peut se trouver entre les anodes, sous la croûte d'alumine. Ensuite, cela nous permet de considérer que le courant imposé est uniforme sur toute la surface. Cette hypothèse élimine la classe des instabilités étudiées par Moreau and Evans (1984) et Moreau and Ziegler (1988).

3. Courant stationnaire purement vertical :

On néglige les composantes horizontales du courant stationnaire. Cela ne signifie pas qu'on ne permet pas de fluctuations horizontales du courant, mais que la configuration stationnaire stable qu'on considère comprend un courant purement vertical.

4. Champ magnétique ambiant uniforme et vertical :

On exclut les composantes horizontales ainsi que les gradients du champ magnétique ambiant, dans le but d'isoler les effets dus seulement au champ vertical uniforme.

5. Rapport de conductivité réduit :

On réduit enfin le rapport de conductivité σ_a/σ_e de 10^4 à 10^2 pour éviter les instabilités numériques.

Bien sûr, ces simplifications ne permettent pas de reproduire les conditions réelles des écoulements dans les cuves de Hall-Héroult. On fait néanmoins l'hypothèse qu'elles rendront possible la compréhension du mécanisme sous-jacent au roulis, ce qui s'avérera tout à fait justifié au chapitre 4. La figure 2.2 illustre une coupe transversale de la cuve idéalisée résultant de ces simplifications.

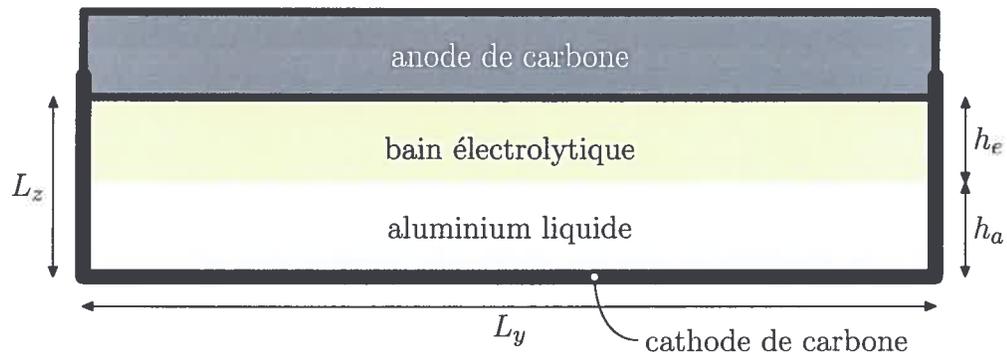


Figure 2.2 Coupe de la cuve idéalisée

On ne se restreindra toutefois pas, comme l'ont fait la plupart des auteurs des travaux analytiques (voir section 1.2.2), à un système bidimensionnel. Cette simplification limite la description de phénomènes de nature essentiellement tridimensionnelle, tels la turbulence¹ et les phénomènes électromagnétiques.

2.6 Conditions aux frontières

La géométrie simplifiée de la cuve idéalisée admet des conditions aux frontières simples. De plus, les équations (2.38) et (2.39) prennent en compte la variabilité des paramètres physiques des fluides, telles la densité et la conductivité électrique, alors on n'a pas besoin de condition supplémentaire pour l'interface entre l'aluminium et le bain. Il suffit ainsi de spécifier les conditions sur les bords $\partial\Omega$ du domaine Ω .

¹Notre modèle actuel n'inclut pas encore un modèle complet de turbulence, mais il a l'avantage de le permettre. Ceci fera l'objet d'un futur travail.

2.6.1 Champ de vitesse

Les murs sont tous solides, donc les fluides ne peuvent pas les traverser :

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v} = 0$$

et les fluides visqueux, donc ne glissent pas sur les murs :

$$\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v} = 0.$$

En somme :

$$\mathbf{v}|_{\partial\Omega} = 0.$$

2.6.2 Pression

Puisque (2.38) ne fait intervenir que le déplacement de pression p' , on peut spécifier les conditions aux frontières de notre choix pour p' . Cela affectera simplement la définition dans (2.15) de p_{00} qui, jusqu'ici, n'était pas précisément défini. Comme on le verra à la section 3.5, on applique le gradient de pression seulement après avoir appliqué les conditions aux frontières sur \mathbf{v} en résolvant implicitement le terme visqueux. Ainsi, il faut éviter que $\nabla p'$ affecte \mathbf{v} sur les frontières, donc on choisit :

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla p'|_{\partial\Omega} = 0.$$

2.6.3 Champ d'induction magnétique

Dans les travaux analytiques, on pose généralement $\mathbf{B} = 0$ à l'infini. Mais, puisqu'on ne peut pas simuler toute la salle de cuves, il faut faire une hypothèse sur le

comportement de \mathbf{B} aux bords. Plusieurs, comme Gerbeau et al. (2001), font l'approximation d'un conducteur parfait aux frontières. Or, la conductivité du carbone se situe à peu près à mi-chemin, sur une échelle logarithmique, entre celle de l'aluminium et celle du bain électrolytique. Il n'y a donc pas d'effet d'écran parfait aux frontières.

Et, de la même façon que le passage du courant dans les conducteurs induit un champ ambiant dans la salle de cuves, à l'extérieur des conducteurs, il est raisonnable de considérer que les courants à l'intérieur de la cuve peuvent affecter le champ à l'extérieur de la cuve. Ainsi, on choisit de spécifier une condition qui permet à \mathbf{b} de varier librement sur la frontière :

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{b}|_{\partial\Omega} = 0.$$

Cette condition se traduit sur le potentiel \mathbf{a} par :

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \nabla \times \mathbf{a}|_{\partial\Omega} = 0.$$

Sur la frontière $z = 0$, par exemple, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{pmatrix} \frac{\partial a_z}{\partial y} - \frac{\partial a_y}{\partial z} \\ \frac{\partial a_x}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial x} \\ \frac{\partial a_y}{\partial x} - \frac{\partial a_x}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial a_z}{\partial z} - \frac{\partial a_y}{\partial z^2} \\ \frac{\partial a_x}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial a_z}{\partial z} \\ \frac{\partial z^2}{\partial} \frac{\partial a_y}{\partial} - \frac{\partial x}{\partial} \frac{\partial z}{\partial a_x} \end{pmatrix} = 0.$$

Une option permettant d'assurer cette condition sans avoir à coupler les différentes composantes de \mathbf{a} , et surtout avec les dérivées tangentes à la frontière, est :

$$\frac{\partial a_x}{\partial z} = \frac{\partial a_y}{\partial z} = \frac{\partial a_z}{\partial z^2} = 0.$$

Or, l'application de conditions aux frontières couplées dans un modèle numérique est complexe (voir section 3.4.1.3). Pour les simulations, on utilisera donc :

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{a})|_{\partial\Omega} = 0$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla)^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{a})|_{\partial\Omega} = 0.$$

Chapitre 3

Modèle numérique

Les simulations numériques ont été effectuées avec le code `nsmhd` que nous avons développé spécialement pour simuler les écoulements MHD à deux fluides. Dans le présent chapitre, les méthodes numériques et les schémas de discrétisation employés dans ce code seront détaillés, puis l'algorithme de résolution sera résumé à la fin.

3.1 La méthode des contours

3.1.1 Transport de l'interface

Afin de suivre la trace de l'interface aluminium-électrolyte et de prendre en compte les propriétés physiques différentes des deux fluides, on utilise la *méthode des contours* (« level set method » en anglais), originalement développée par Osher and Sethian (1988). Comme le montre la coupe horizontale du domaine dans la figure 3.1, elle consiste essentiellement à définir une fonction $\phi(\mathbf{r}, t)$, dite *fonction de contour*, positive à l'intérieur du domaine contenant l'aluminium, et négative à l'extérieur. Ainsi, la position de l'interface est implicitement décrite par la surface de niveau $\phi = 0$.

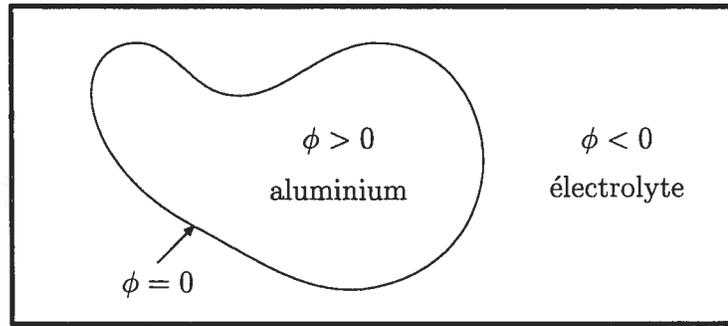


Figure 3.1 Méthode des contours

Pour assurer le transport passif de l'interface par le champ de vitesse, il suffit d'imposer

$$\frac{D\phi}{Dt} = 0,$$

où $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ est la dérivée lagrangienne, pour s'assurer que chaque niveau de la fonction de contour se déplace à vitesse \mathbf{v} . On introduit ainsi une équation d'advection pour ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}\phi). \quad (3.1)$$

3.1.2 Propriétés physiques des fluides

Les propriétés physiques dépendant de la nature du fluide en un point \mathbf{r} donné sont alors calculées par le biais de la fonction échelon de Heavyside $H(x)$. Par exemple, pour la densité de masse, on obtient :

$$\rho(\mathbf{r}) = H(\phi(\mathbf{r})) \rho_a + [1 - H(\phi(\mathbf{r}))] \rho_e,$$

où

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}. \quad (3.2)$$

3.1.3 Approximation lisse de la fonction de Heavyside

Pour éviter les instabilités numériques dues aux discontinuités, on approche la fonction (3.2) par une homologue lisse. Un choix qui conserve le volume, est donné par

$$H_\epsilon(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > \epsilon \\ 0 & \text{si } x < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right] & \text{sinon} \end{cases}, \quad (3.3)$$

où ϵ peut être considéré comme étant l'épaisseur de l'interface, comme on le voit à la figure 3.2.

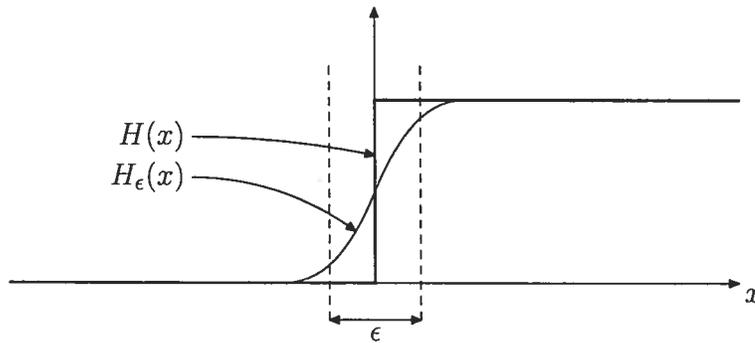


Figure 3.2 Fonction de Heavyside lisse

3.1.4 Redistancement

Sussman et al. (1994) sont parvenus à combiner l'approche des contours avec une méthode de projection en imposant que la fonction de contour demeure une *fonction de distance signée*, ce qui évite d'avoir à reconstruire l'interface et permet à celle-ci de conserver une épaisseur constante. De plus, cette technique améliore la conservation de la masse, du point de vue numérique. Elle permet aussi de calculer efficacement et précisément la tension de surface, bien qu'on fasse abstraction de cette dernière dans le présent ouvrage.

On dit que $\phi(\mathbf{r})$ est une fonction de distance si elle satisfait

$$\|\nabla\phi\| = 1, \quad (3.4)$$

c'est-à-dire si la valeur de $|\phi(\mathbf{r})|$ est la distance du point $\mathbf{r} = (x, y, z)$ au niveau zéro de ϕ (l'interface). De plus, on dit que ϕ est une fonction de distance signée si, en plus de satisfaire (3.4), elle est positive d'un côté de l'interface (dans l'aluminium) et négative de l'autre (dans le bain électrolytique).

Ainsi, après chaque intégration temporelle de (3.1), on effectue le *redistancement* de la fonction de contour en définissant d'abord ϕ_0 comme étant la valeur de ϕ fraîchement calculée, puis en résolvant, avec un schéma Euler avant,

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} = L(\phi_0, \phi), \quad (3.5)$$

où

$$L(\phi_0, \phi) \equiv (1 - \|\nabla\phi\|) \text{signe}_\epsilon(\phi_0).$$

L'état stationnaire de (3.5) est atteint lorsque (3.4) est satisfaite. La motivation de l'étape de redistancement étant purement d'ordre numérique, le paramètre τ n'est qu'un temps artificiel et n'a aucune signification physique. La fonction de signe, dont le rôle est de conserver le signe local de ϕ et de ne pas modifier son niveau zéro, est définie comme

$$\text{signe}_\epsilon(x) = 2H_\epsilon(x) - 1.$$

Le gradient est discrétisé avec un schéma de type ENO (« essentially non-oscillatory ») (Shu and Osher, 1989) en amont de premier ordre¹ :

¹Les autres dérivées spatiales dans notre schéma sont de second ordre. L'étape de redistancement n'implique aucun processus physique et vise simplement à garder la pente de ϕ de l'ordre de l'unité dans le voisinage de l'interface, tout en préservant la position de cette dernière.

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \simeq \begin{cases} 0 & \text{si } D_j^+ \phi \text{ et } \phi_0 \text{ sont de même signe et que } D_j^- \phi \text{ est de signe contraire} \\ D_j^+ \phi & \text{sinon et que } D_j^+ \phi \text{ et } \phi_0 \text{ sont de signes contraires} \\ D_j^- \phi & \text{sinon et que } D_j^- \phi \text{ et } \phi_0 \text{ sont de même signe} \end{cases},$$

où D_j^+ et D_j^- sont les opérateurs de dérivation aux différences finies décentrées de premier ordre selon l'axe x_j , avant et arrière respectivement. L'utilisation d'un tel schéma est nécessaire pour bien conserver la position de l'interface ainsi que pour atteindre l'état stationnaire de (3.5).

Toutefois, Sussman and Fatemi (1999) ont prouvé que ϕ sera correctement redistancée dans un rayon $\alpha \Delta x$ si on intègre (3.5) sur un temps $\alpha \Delta x$. Ils montrent également que $\Delta \tau$ est un pas de temps valide pour cette intégration. Il suffit donc de quelques pas pour que, au voisinage de l'interface, ϕ soit bien une fonction de distance signée. Et c'est seulement sur ce domaine qu'on a besoin de vérifier (3.4).

Dans le même article (Sussman and Fatemi, 1999), les auteurs soulèvent un problème de conservation du volume de fluide inhérent à la technique de redistancement, et y proposent comme solution d'ajouter un terme correcteur à (3.5) :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = L(\phi_0, \phi) + \lambda f(\phi), \quad (3.6)$$

et de définir λ et $f(\phi)$ de sorte à satisfaire la contrainte de conservation du volume englobé par l'interface à l'intérieur d'un volume de contrôle \mathcal{V} :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \iiint_{\mathcal{V}} H_\epsilon(\phi) dV = 0.$$

Il s'agit ainsi d'une correction applicable à ce volume de contrôle seulement. Et, du développement de cette dernière équation :

$$\iiint_{\mathcal{V}} H'_\epsilon(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial \tau} dV = \iiint_{\mathcal{V}} H'_\epsilon(\phi) [L(\phi_0, \phi) + \lambda f(\phi)] dV = 0,$$

on obtient une expression pour λ :

$$\lambda = \frac{- \iiint_{\mathcal{V}} H'_\epsilon(\phi_0) L(\phi_0, \phi) dV}{\iiint_{\mathcal{V}} H'_\epsilon(\phi_0) f(\phi) dV}.$$

Puis, les auteurs choisissent

$$f(\phi) \equiv H'_\epsilon(\phi) \|\phi\|, \quad (3.7)$$

qui permet d'apporter la correction seulement à l'interface et ainsi de préserver la propriété (3.4) ailleurs. En effet, la dérivée H'_ϵ de la fonction de Heavyside lisse H_ϵ est une version lisse de la distribution de Dirac δ . Donc, $f(\phi)$ et, par le fait même, la correction apportée à (3.5) dans (3.6) sont nulles ailleurs qu'à l'interface. Avec ce choix pour $f(\phi)$, on peut récrire (3.7) comme

$$\lambda = \frac{- \iint_{\mathcal{V}} H'_\epsilon(\phi_0) L(\phi_0, \phi) dV}{\iiint_{\mathcal{V}} [H'_\epsilon(\phi_0)]^2 \|\nabla \phi_0\| dV}.$$

Nous effectuerons la discrétisation de l'intégrale de la même façon que pour le calcul des moyennes, qui fera l'objet de la section 3.3.2.1.

3.2 Projection

Puisque l'écoulement est incompressible, on ferme l'équation de Navier–Stokes en ajoutant la condition $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ qui définit implicitement le champ de pression. Considérons l'équation de Navier–Stokes écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{F} = -\nabla \left(\frac{p}{\rho} \right) - \left(\frac{p \nabla \rho}{\rho^2} - \mathbf{F} \right), \quad (3.8)$$

où \mathbf{F} est fonction de \mathbf{v} , \mathbf{B} , etc. On utilise ici une méthode dite de *projection* (Ferziger and Perić, 2002), qui consiste à calculer \mathbf{F} , une approximation de $\partial \mathbf{v} / \partial t$ omettant le

gradient de pression, puis à projeter cette approximation dans l'espace des champs vectoriels solénoïdaux¹.

3.2.1 Décomposition de Hodge–Helmholtz

Montrons d'abord que la condition d'incompressibilité, accompagnée de conditions aux frontières appropriées, définit de façon unique le champ de vitesse et le champ de pression.

Le théorème de Helmholtz, dans sa forme la plus simple (Wangsness, 1986), stipule que, si les conditions aux frontières sur des potentiels φ et Ψ sont spécifiées, un champ vectoriel \mathbf{U} peut être décomposé de façon unique en la somme d'un gradient et d'un rotationnel :

$$\mathbf{U} = -\nabla\varphi + \nabla \times \Psi,$$

où $\nabla^2\varphi = -\nabla \cdot \mathbf{U}$ et $\nabla \times (\nabla \times \Psi) = \nabla \times \mathbf{U}$. Définissons le champ vectoriel \mathbf{v} de sorte que $\partial\mathbf{v}/\partial t = -\nabla \times \Psi$, ce qui implique $\nabla \cdot \partial\mathbf{v}/\partial t = 0$. Alors, on peut écrire

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla\varphi - \mathbf{U}.$$

On a encore la liberté de définir φ et \mathbf{U} en identifiant respectivement les termes du membre droit de cette équation à ceux de (3.8). Cela prouve que, étant donné des conditions aux frontières sur p et \mathbf{v} , on peut projeter \mathbf{F} de façon unique dans l'espace des champs vectoriels solénoïdaux pour trouver $\partial\mathbf{v}/\partial t$.

Pour y parvenir, on tire la divergence de (3.8) pour trouver

$$\mathcal{L}_\rho p = \nabla \cdot \mathbf{F}, \tag{3.9}$$

¹à divergence nulle

où on a défini l'opérateur

$$\mathcal{L}_\rho = \nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla,$$

donc

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \left(1 - \nabla \frac{1}{\rho} \mathcal{L}_\rho^{-1} \right) \mathbf{F}, \quad (3.10)$$

où \mathcal{L}_ρ^{-1} désigne l'inverse de l'opérateur \mathcal{L}_ρ , calculé en accord avec les conditions aux frontières. Ainsi, $p = \mathcal{L}_\rho^{-1} \mathbf{F}$. On nomme cette procédure *décomposition de Hodge-Helmholtz* (Rider, 1995).

3.2.2 Projection exacte et découplage

Soit les opérateurs discrets G , $D = G^T$ et L_ρ , correspondant respectivement au gradient, à la divergence et à \mathcal{L}_ρ . La classe des méthodes de *projection exacte* comprend celles pour lesquelles

$$L_\rho = D \frac{1}{\rho} G. \quad (3.11)$$

Lorsque cette condition est vérifiée, on obtient $D\mathbf{v} = 0$ en tirant la divergence discrète de (3.10).

Afin d'illustrer la discrétisation de (3.10), considérons un cas unidimensionnel simplifié en posant $\rho = 1$, de sorte que $\mathcal{L}_\rho = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2$. Utilisons des différences finies centrées pour définir G et D :

$$Df_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h},$$

où $f_i = f(ih)$, h étant le pas de grille. Si on respecte la condition (3.11), on obtient

$$L_\rho f_i = \frac{Df_{i+1} - Df_{i-1}}{2h} = \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4h^2}.$$

On voit alors (figure 3.3) que les points pairs et les points impairs du système seront découplés lors de l'inversion de L_ρ , ce qui est indésirable.



Figure 3.3 Découplage du système discret par la projection exacte.

3.2.3 Projection approchée

Afin de contourner cet obstacle, les méthodes dites de *projection approchée* consistent à utiliser une discrétisation de L_ρ qui ne respecte pas (3.11), mais qui ne découple pas le système.

On définit par exemple

$$L_\rho f_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}. \quad (3.12)$$

De la sorte, le système à inverser n'est plus découplé, mais au prix d'obtenir une divergence discrète non nulle de \mathbf{v} . Une étude exhaustive de ce type d'approche est fournie par Rider (1995).

3.2.4 Projection exacte et grilles décalées

Observons d'abord que (3.12) peut se récrire comme

$$L_\rho f_i = \frac{Df_{i+1/2} - Df_{i-1/2}}{h},$$

avec

$$Df_i = \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{h}.$$

Puis, en appliquant ces deux définitions aux opérateurs dans (3.9) et (3.10), on déduit que le fait de définir \mathbf{v} et de calculer \mathbf{F} sur une grille décalée de $h/2$ par rapport à celle de p permettrait d'obtenir une projection exacte, et ce, sans découpler le système (Ferziger and Perić, 2002). Il s'agit de l'approche des *grilles décalées* (« staggered

grids »). C'est ainsi que nous procédons dans le présent ouvrage, mais en travaillant à trois dimensions et avec ρ variable :

$$\begin{aligned}
 L_{\rho} p_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\rho_{i+1/2,j,k}} - \frac{p_{i,j,k} - p_{i-1,j,k}}{\rho_{i-1/2,j,k}} \right) + \\
 &\quad \frac{1}{\Delta y^2} \left(\frac{p_{i,j+1,k} - p_{i,j,k}}{\rho_{i,j+1/2,k}} - \frac{p_{i,j,k} - p_{i,j-1,k}}{\rho_{i,j-1/2,k}} \right) + \\
 &\quad \frac{1}{\Delta z^2} \left(\frac{p_{i,j,k+1} - p_{i,j,k}}{\rho_{i,j,k+1/2}} - \frac{p_{i,j,k} - p_{i,j,k-1}}{\rho_{i,j,k-1/2}} \right) \\
 DF_{i,j,k} &= \frac{F_{x ; i+1/2,j,k} - F_{x ; i-1/2,j,k}}{\Delta x} + \\
 &\quad \frac{F_{y ; i,j+1/2,k} - F_{y ; i,j,k-1/2}}{\Delta y} + \\
 &\quad \frac{F_{z ; i,j,k+1/2} - F_{z ; i,j,k-1/2}}{\Delta z}
 \end{aligned}$$

3.3 Discrétisation spatiale

3.3.1 Grilles décalées

Les quantités physiques \mathbf{v} , \mathbf{A} , p et ϕ sont définies sur des points discrets, répartis en un maillage régulier et uniforme, dont le volume élémentaire, ou volume de contrôle, de taille $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$, est illustré par la figure 3.4. Ces points sont situés au centre du volume de contrôle, excepté pour le champ de vitesse, dont chaque composante est définie au centre de du côté correspondant : il s'agit de la méthode des grilles décalées (voir section 3.2.4).

3.3.2 Volumes finis

On utilise l'approche des *volumes finis* (Ferziger and Perić, 2002) pour la discrétisation des équations de conservation. Comme on l'a vu à la section 2.2.1, toute équation de conservation d'une quantité f peut s'exprimer sous la forme

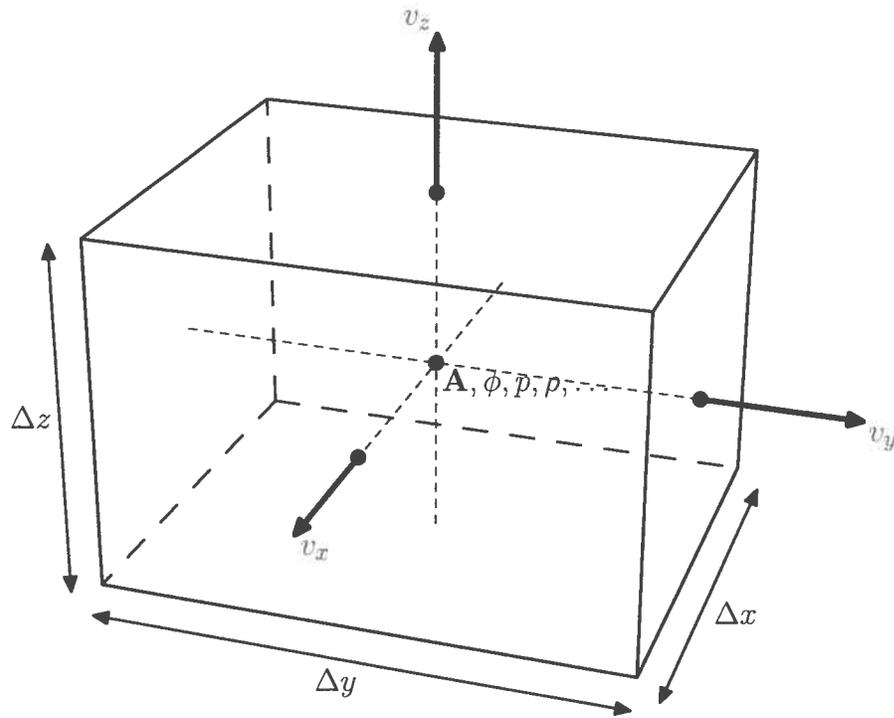


Figure 3.4 Volume contrôle

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q - \nabla \cdot \mathbf{J},$$

où Q est le terme source et \mathbf{J} est la densité de flux de f . En intégrant sur un volume de contrôle \mathcal{V} borné par la surface $\partial\mathcal{V}$, puis en divisant par le volume $V = \Delta x \Delta y \Delta z$, on obtient :

$$\frac{d\bar{f}}{dt} = \bar{Q} - \frac{1}{V} \oint_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{a}, \quad (3.13)$$

où

$$\bar{f} = \frac{1}{V} \iiint_{\mathcal{V}} f d\tau$$

est la moyenne de la quantité f dans le volume de contrôle \mathcal{V} (idem pour \bar{Q}).

La figure 3.5 illustre une coupe bidimensionnelle d'un volume de contrôle \mathcal{V} , avec le terme source Q et la densité de flux \mathbf{J} à travers chaque côté, les indices x , y et z

marquant les composantes correspondantes, et les exposants $+$ et $-$ indiquant le côté du volume dont il est question. Puisqu'il s'agit du flux sortant de \mathcal{V} , les composantes $+$ et $-$ sont définies dans des sens opposés.

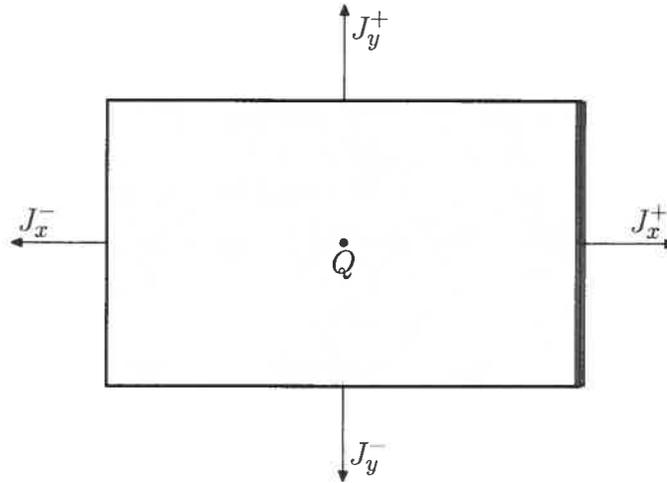


Figure 3.5 Méthode des volumes finis

Étant donné que le volume de contrôle est rectangulaire, l'intégrale de surface se sépare en une somme d'intégrales sur chacun des côtés de \mathcal{V} . Par exemple, l'intégrale sur la face marquée en gras dans la figure 3.5 vaut :

$$\frac{1}{V} \int_{\Delta y \Delta z} J_x^+ dy dz = \frac{\Delta y \Delta z}{V} \overline{J_x^+} = \frac{\overline{J_x^+}}{\Delta x},$$

où $\overline{J_x^+}$ est la moyenne de J_x^+ sur la surface en question. En procédant de façon similaire pour tous les côtés, on obtient :

$$\frac{1}{V} \oint_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{da} = \sum_{k=1}^3 \frac{\overline{J_k^+} - \overline{J_k^-}}{\Delta x_k}.$$

3.3.2.1 Moyenne et reconstruction

En général \mathbf{J} dépend de f . Donc, pour calculer les moyennes de surface des composantes de \mathbf{J} , il faut plus d'information que celle contenue par la moyenne de volume

de f . Il faut reconstruire les valeurs ponctuelles de f après avoir fait l'intégration temporelle de \bar{f} .

Il est donc d'usage de procéder selon le cycle suivant :

1. connaissance des valeurs ponctuelles ;
2. calcul de moyennes de volume et de surface ;
3. intégration temporelle des équations de conservation : résulte en de nouvelles moyennes de volume ;
4. reconstruction des valeurs ponctuelles à partir de ces nouvelles moyennes de volume.

Étudions un cas unidimensionnel pour illustrer le procédé. Supposons qu'on connaît les valeurs d'une fonction $f(x)$ en trois points dans le voisinage de x_0 : $f_{i-1} = f(x_0 - h)$, $f_i = f(x_0)$ et $f_{i+1} = f(x_0 + h)$. On peut alors approcher $f(x)$ autour de x_0 par un polynôme d'ordre deux :

$$f(x) = f_i + \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} (x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} (x - x_0)^2 + \mathcal{O}((x - x_0)^3).$$

Trouvons ensuite une expression pour la moyenne de $f(x)$ sur l'intervalle $[x_0 - h/2, x_0 + h/2]$:

$$\bar{f} = \frac{1}{h} \int_{x_0 - h/2}^{x_0 + h/2} f(x) dx,$$

en utilisant notre approximation polynomiale de $f(x)$:

$$\frac{1}{h} \int_{x_0 - h/2}^{x_0 + h/2} \left[f_i + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2h^2} (x - x_0)^2 + \mathcal{O}((x - x_0)^4) \right] dx.$$

Les termes de degré impair en $x - x_0$ s'annulent, l'intégrale portant sur un intervalle symétrique autour de x_0 . On substitue ensuite $x = x_0 + ph$, où $p \in \mathbb{R}$ reste de l'ordre de l'unité durant l'intégration, et on obtient :

$$\begin{aligned}\bar{f} &= \int_{-1/2}^{1/2} \left[f_i + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2} p^2 + \mathcal{O}(h^4) \right] dx \\ &= f_i + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2} \frac{p^3}{3} \Big|_{-1/2}^{1/2} + \mathcal{O}(h^4)\end{aligned}$$

pour trouver

$$\bar{f}_i = \frac{f_{i+1} + 22f_i + f_{i-1}}{24} \equiv M_x f_i \quad (3.14)$$

comme approximation d'ordre quatre de la moyenne \bar{f} , M_x désignant l'opérateur discret de la moyenne selon l'axe x .

À l'inverse, lorsqu'on dispose des valeurs moyennes \bar{f}_{i-1} , \bar{f}_i et \bar{f}_{i+1} de la fonction $f(x)$ sur les intervalles respectifs $[x_0 - 3h/2, x_0 - h/2]$, $[x_0 - h/2, x_0 + h/2]$ et $[x_0 + h/2, x_0 + 3h/2]$. Soit $F(x)$, la primitive de $f(x)$. Il suffit alors d'écrire le développement de Taylor de $F(x)$ autour de x_0 :

$$F(x) = (x - x_0)f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 f'(x_0) + \frac{1}{6}(x - x_0)^3 f''(x_0) + \mathcal{O}((x - x_0)^4) \quad (3.15)$$

dans le voisinage de x_0 , puis de résoudre le système

$$h \bar{f}_{i-1} = F(x_0 - h/2) - F(x_0 - 3h/2)$$

$$h \bar{f}_i = F(x_0 + h/2) - F(x_0 - h/2)$$

$$h \bar{f}_{i+1} = F(x_0 + 3h/2) - F(x_0 + h/2)$$

pour trouver la valeur de

$$f(x_0) = \frac{-\bar{f}_{i+1} + 26\bar{f}_i - \bar{f}_{i-1}}{24} + \mathcal{O}(h^4).$$

On peut donc prendre

$$f_i = \frac{-\bar{f}_{i+1} + 26\bar{f}_i - \bar{f}_{i-1}}{24} \equiv R_x \bar{f}_i \quad (3.16)$$

comme approximation d'ordre quatre de la valeur reconstruite de $f(x_0)$, R_x désignant l'opérateur discret de reconstruction selon l'axe x .

Cependant, ce cycle de moyenne–reconstruction s’avère plutôt diffusif (Roache, 1972). En effet,

$$R_x M_x f_i = \left(1 - \frac{h^4}{576} \frac{d^4}{dx^4}\right) f_i + \mathcal{O}(h^6),$$

où le terme en dérivée d’ordre quatre est un terme d’hyperdiffusion. Nous allons éviter d’introduire cette erreur dans notre schéma en contournant le problème.

3.3.2.2 Éviter le calcul de la moyenne

On définit les opérateurs de moyenne \mathcal{M}_x , \mathcal{M}_y et \mathcal{M}_z selon chacun des axes sur \mathcal{V} , de sorte que

$$\bar{f} = \mathcal{M}_x \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z f$$

et que

$$\overline{J_x^+} = \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z J_x^+,$$

par exemple. L’équation (3.13) peut ainsi se récrire :

$$\mathcal{M}_x \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z \frac{df}{dt} = \mathcal{M}_x \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z Q - \frac{\mathcal{M}_y \mathcal{M}_z (J_x^+ - J_x^-)}{\Delta x} - \frac{\mathcal{M}_z \mathcal{M}_x (J_y^+ - J_y^-)}{\Delta y} - \frac{\mathcal{M}_x \mathcal{M}_y (J_z^+ - J_z^-)}{\Delta z}$$

Puis, on définit les opérateurs inverses $\mathcal{R}_x = \mathcal{M}_x^{-1}$, $\mathcal{R}_y = \mathcal{M}_y^{-1}$ et $\mathcal{R}_z = \mathcal{M}_z^{-1}$, qu’on appellera opérateurs de reconstruction. Puisque les opérateurs agissant selon différents axes commutent, l’application de $\mathcal{R}_x \mathcal{R}_y \mathcal{R}_z$ à l’équation précédente donne :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q - \frac{\mathcal{R}_x (J_x^+ - J_x^-)}{\Delta x} - \frac{\mathcal{R}_y (J_y^+ - J_y^-)}{\Delta y} - \frac{\mathcal{R}_z (J_z^+ - J_z^-)}{\Delta z}. \quad (3.17)$$

Aucun opérateur de moyenne n’est présent dans cette équation. C’est la méthode que nous employons dans le code `nsmd`.

3.3.2.3 Grilles décalées

Puisque les composantes du champ de vitesse ne partagent pas la même grille que les autres quantités physiques, on n'utilise pas le volume de contrôle illustré à la figure 3.4 pour la formulation en volumes finis. En fait, on place chaque composante au centre de son propre volume de contrôle, comme le montre la figure 3.6 pour v_x .

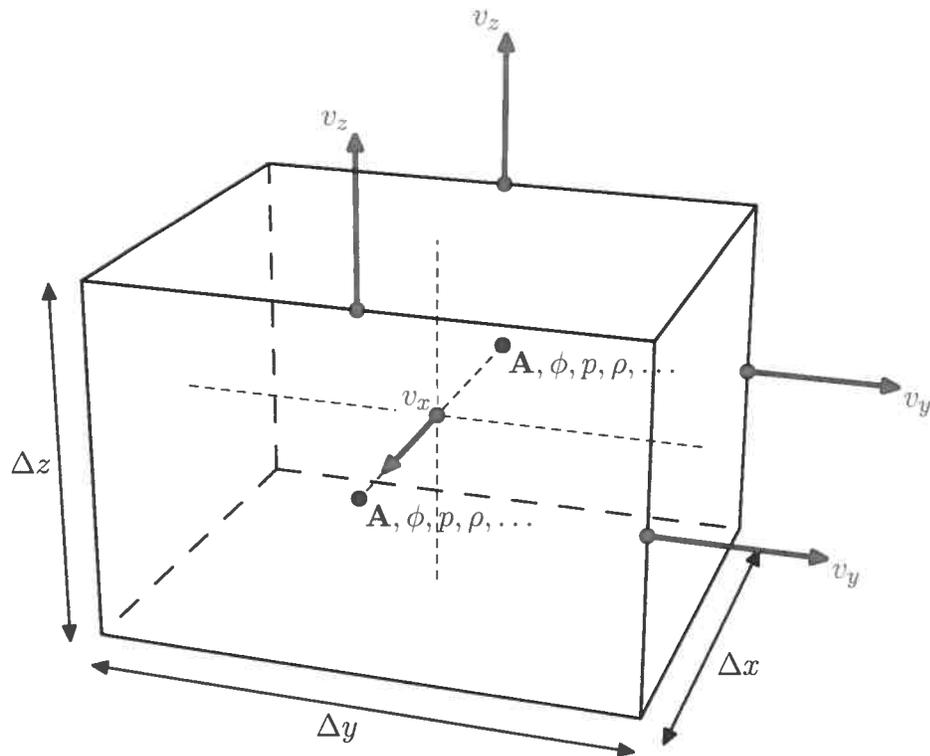


Figure 3.6 Volume de contrôle de v_x

Cette façon de procéder nécessite un traitement différent des conditions aux frontières, selon que le champ est décalé ou non.

3.3.2.4 Traitement des bords

La figure 3.7 illustre le processus de reconstruction près de la frontière $x = 0$ et, comme on le voit, il est impossible d'utiliser le stencil¹ centré (3.16) pour la reconstruction de certaines cellules. Ces dernières sont grisées sur la figure. Il faut donc dériver de nouveaux stencils, qui prennent en compte notre connaissance des conditions aux frontières. Le point blanc sur le bord marque l'endroit où l'on connaît une telle condition.

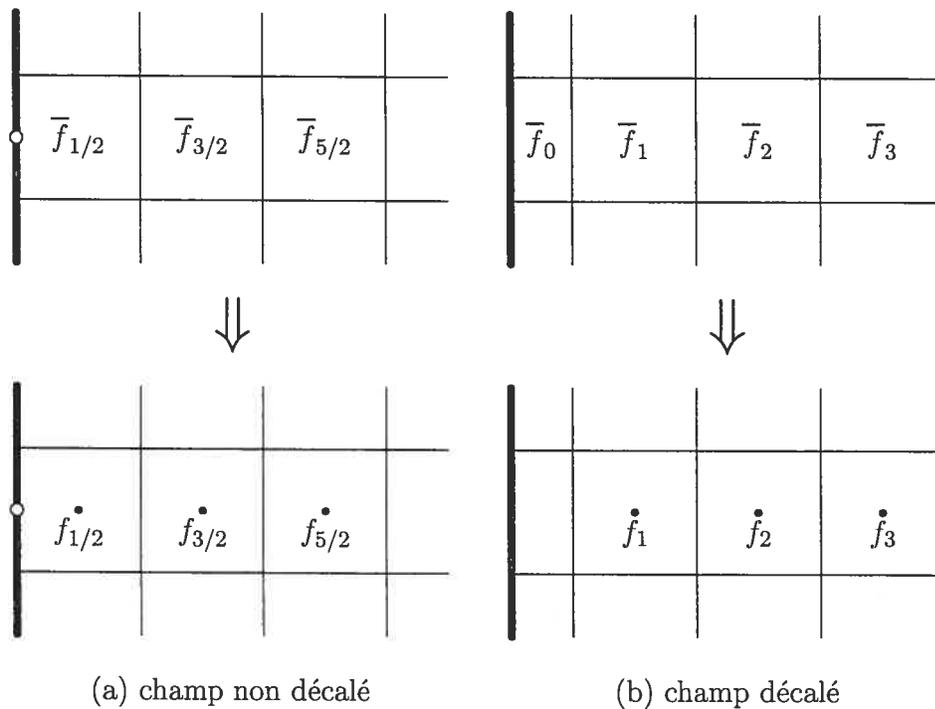


Figure 3.7 Reconstruction aux bords

Dans le cas d'un champ non décalé (figure 3.7a), comme chaque composante du potentiel magnétique vectoriel \mathbf{A} , on reprend le développement (3.15) autour de $x_0 = 1/2$, et on résout le système

¹On désigne par *stencil* l'ensemble des coefficients qui définissent un opérateur discret en multipliant les valeurs voisines d'un champ discret.

$$h \bar{f}_{1/2} = F(h) - F(0)$$

$$h \bar{f}_{3/2} = F(2h) - F(h)$$

augmenté, afin de fermer le système, d'une condition au bord sur $f(x)$: $f(0) = a$, $f'(0) = b$ ou $f''(0) = c$, par exemple. Ces conditions s'expriment respectivement par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} f(0) &= f(x_0) - x_0 f'(x_0) + \frac{1}{2} x_0^2 f''(x_0) + \mathcal{O}(x_0^3) = a \\ f'(0) &= f'(x_0) - x_0 f''(x_0) + \mathcal{O}(x_0^2) = b \\ f''(0) &= f''(x_0) + \mathcal{O}(x_0) = c \end{aligned} \quad (3.18)$$

Le tableau 3.1 présente les stencils obtenus dans quelques cas particuliers.

Condition au bord	Stencil	Erreur
$f(0) = 0$	$f_{1/2} = \frac{19\bar{f}_{1/2} - \bar{f}_{3/2}}{16}$	$\mathcal{O}(h^3)$
$f'(0) = 0$	$f_{1/2} = \frac{25\bar{f}_{1/2} - \bar{f}_{3/2}}{24}$	$\mathcal{O}(h^3)$
$f''(0) = 0$	$f_{1/2} = \bar{f}_{1/2}$	$\mathcal{O}(h^3)$

Tableau 3.1 Stencils de reconstruction près de la frontière

Lorsqu'il s'agit d'un champ décalé (figure 3.7b), le système est plutôt

$$\frac{h}{2} \bar{f}_0 = F(h/2) - F(0)$$

$$h \bar{f}_1 = F(3h/2) - F(h/2) \quad ,$$

$$h \bar{f}_2 = F(5h/2) - F(3h/2)$$

ce qui résulte en

$$f_1 = \frac{-4\bar{f}_0 + 67\bar{f}_1 - 3\bar{f}_2}{60},$$

avec une erreur en $\mathcal{O}(h^3)$.

3.3.3 Différences finies

Les dérivées servant à calculer les termes sources et les termes de flux dans (3.17) sont discrétisées au moyen de différences finies (Mitchell and Griffiths, 1980) centrées usuelles d'ordre deux :

$$\begin{aligned} f'_i &= \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \\ f''_i &= \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \end{aligned} \quad (3.19)$$

lorsqu'elles sont évaluées sur la même grille que le champ, ou :

$$\begin{aligned} f'_i &= \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{h} \\ f''_i &= \frac{f_{i+3/2} - f_{i+1/2} - f_{i-1/2} + f_{i-3/2}}{2h^2} \end{aligned}$$

lorsqu'elles sont évaluées sur une grille décalée par rapport au champ.

3.3.3.1 Traitement des bords

Les mêmes problèmes que lors de la reconstruction surviennent lorsqu'il s'agit de discrétiser les dérivées près des bords. On procède donc de la même façon pour obtenir les stencils présentés dans le tableau 3.2.

3.3.4 Interpolation

Lorsqu'une valeur comprise entre deux points de grille est requise, on l'approche au moyen d'une interpolation linéaire centrée. Par exemple, pour le calcul de ρv_x , il faut interpoler ρ , qui n'est pas définie sur la même grille que v_x :

$$\rho_i = \frac{\rho_{i-1/2} + \rho_{i+1/2}}{2} + \mathcal{O}(h^2).$$

Condition au bord	Stencils (champ non décalé)	Stencils (champ décalé)	Erreur
$f(0) = 0$	$f'_{1/2} = \frac{3f_{1/2} + f_{3/2}}{3h}$ $f'_1 = \frac{-f_{1/2} + f_{3/2}}{h}$	$f'_{1/2} = \frac{f_1}{h}$ $f'_1 = \frac{f_2}{2h}$	$\mathcal{O}(h^2)$
$f'(0) = 0$	$f'_{1/2} = \frac{-f_{1/2} + f_{3/2}}{2h}$ $f'_1 = \frac{-f_{1/2} + f_{3/2}}{h}$	$f'_{1/2} = \frac{-f_1 + f_2}{3h}$ $f'_1 = \frac{-2f_1 + 2f_2}{3h}$	$\mathcal{O}(h^2)$
$f''(0) = 0$	$f'_{1/2} = \frac{-f_{1/2} + f_{3/2}}{h}$ $f'_1 = \frac{-f_{1/2} + f_{3/2}}{h}$	$f'_{1/2} = \frac{-f_1 + f_2}{h}$ $f'_1 = \frac{-f_1 + f_2}{h}$	$\mathcal{O}(h^2)$

(a) dérivées premières

Condition au bord	Stencils (champ non décalé)	Stencils (champ décalé)	Erreur
$f(0) = 0$	$f''_{1/2} = f''_1 = \frac{-12f_{1/2} + 4f_{3/2}}{3h^2}$	$f''_{1/2} = f''_1 = \frac{-2f_1 + f_2}{h^2}$	$\mathcal{O}(h)$
$f'(0) = 0$	$f''_{1/2} = f''_1 = \frac{-f_{1/2} + f_{3/2}}{h^2}$	$f''_{1/2} = f''_1 = \frac{-2f_1 + 2f_2}{3h^2}$	$\mathcal{O}(h)$
$f''(0) = 0$	$f''_{1/2} = f''_1 = 0$	$f''_{1/2} = f''_1 = 0$	$\mathcal{O}(h)$

(b) dérivées secondes

Tableau 3.2 Stencils des dérivées près de la frontière

Cette formule et l'erreur inhérente est aisément obtenue en évaluant en $x_0 - h/2$ et en $x_0 + h/2$ le développement de Taylor de $\rho(x)$ autour de x_0 .

3.3.5 Exemple : discrétisation du terme d'inertie

Illustrons les précédents propos en prenant pour exemple la discrétisation du terme d'inertie pour la composante en x de la quantité de mouvement :

$$-\nabla \cdot (\rho v_x \mathbf{v}).$$

On s'intéresse au volume de contrôle centré en $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$, tel qu'illustré par la figure 3.6. L'intégrale de ce terme sur ce volume donne :

$$\begin{aligned} & -\Delta y \Delta z \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z \left(\rho_{i+\frac{1}{2}, j, k} v_x^2 ; i+\frac{1}{2}, j, k} - \rho_{i-\frac{1}{2}, j, k} v_x^2 ; i-\frac{1}{2}, j, k} \right) \\ & -\Delta z \Delta x \mathcal{M}_z \mathcal{M}_x \left(\rho_{i, j+\frac{1}{2}, k} v_x ; i, j+\frac{1}{2}, k} v_y ; i, j+\frac{1}{2}, k} - \rho_{i, j-\frac{1}{2}, k} v_x ; i, j-\frac{1}{2}, k} v_y ; i, j-\frac{1}{2}, k} \right) \\ & -\Delta x \Delta y \mathcal{M}_x \mathcal{M}_y \left(\rho_{i, j, k+\frac{1}{2}} v_x ; i, j, k+\frac{1}{2} v_z ; i, j, k+\frac{1}{2} - \rho_{i, j, k-\frac{1}{2}} v_x ; i, j, k-\frac{1}{2} v_z ; i, j, k-\frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

On applique à cette expression l'opérateur

$$\frac{\mathcal{R}_x \mathcal{R}_y \mathcal{R}_z}{\Delta x \Delta y \Delta z}$$

pour obtenir

$$\begin{aligned} & -\mathcal{R}_x \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}, j, k} v_x^2 ; i+\frac{1}{2}, j, k} - \rho_{i-\frac{1}{2}, j, k} v_x^2 ; i-\frac{1}{2}, j, k}}{\Delta x} \\ & -\mathcal{R}_y \frac{\rho_{i, j+\frac{1}{2}, k} v_x ; i, j+\frac{1}{2}, k} v_y ; i, j+\frac{1}{2}, k} - \rho_{i, j-\frac{1}{2}, k} v_x ; i, j-\frac{1}{2}, k} v_y ; i, j-\frac{1}{2}, k}}{\Delta y} \\ & -\mathcal{R}_z \frac{\rho_{i, j, k+\frac{1}{2}} v_x ; i, j, k+\frac{1}{2} v_z ; i, j, k+\frac{1}{2}} - \rho_{i, j, k-\frac{1}{2}} v_x ; i, j, k-\frac{1}{2} v_z ; i, j, k-\frac{1}{2}}}{\Delta z}, \end{aligned}$$

où les quantités sont interpolées comme suit :

- ρ :

$$\begin{aligned} \rho_{i, j+\frac{1}{2}, k} &= \frac{\rho_{i-\frac{1}{2}, j, k} + \rho_{i-\frac{1}{2}, j+1, k} + \rho_{i+\frac{1}{2}, j, k} + \rho_{i+\frac{1}{2}, j+1, k}}{4} \\ \rho_{i, j-\frac{1}{2}, k} &= \frac{\rho_{i-\frac{1}{2}, j, k} + \rho_{i-\frac{1}{2}, j-1, k} + \rho_{i+\frac{1}{2}, j, k} + \rho_{i+\frac{1}{2}, j-1, k}}{4} \end{aligned}$$

et de même selon l'axe z ;

- v_x :

$$\begin{aligned} v_x ; i+\frac{1}{2}, j, k &= \frac{v_x ; i, j, k + v_x ; i+1, j, k}{2} \\ v_x ; i-\frac{1}{2}, j, k &= \frac{v_x ; i, j, k + v_x ; i-1, j, k}{2} \\ v_x ; i, j+\frac{1}{2}, k &= \frac{v_x ; i, j, k + v_x ; i, j+1, k}{2} \\ v_x ; i, j-\frac{1}{2}, k &= \frac{v_x ; i, j, k + v_x ; i, j-1, k}{2} \end{aligned}$$

et de même selon l'axe z ;

- v_y :

$$\begin{aligned} v_y ; i, j+\frac{1}{2}, k &= \frac{v_y ; i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k + v_y ; i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}{2} ; \\ v_y ; i, j-\frac{1}{2}, k &= \frac{v_y ; i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k + v_y ; i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}{2} \end{aligned}$$

et

- v_z :

$$\begin{aligned} v_z ; i, j, k+\frac{1}{2} &= \frac{v_z ; i-\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2} + v_z ; i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}{2} \\ v_z ; i, j, k-\frac{1}{2} &= \frac{v_z ; i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2} + v_z ; i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}{2} \end{aligned}$$

Les opérateurs de reconstruction sont discrétisés en utilisant (3.16).

3.4 Discrétisation temporelle

L'intégration temporelle est effectuée selon différents schémas selon les termes :

- Adams–Bashforth d'ordre deux (AB2) explicite pour tous les termes sauf ceux de diffusion :

$$f^{(n+1)} = f^{(n)} + \Delta t \left\{ \frac{3}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(n)} - \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(n-1)} \right\} ; \quad (3.20)$$

- Euler arrière (EA) implicite pour les termes de viscosité et de diffusion magnétique :

$$f^{(n+1)} = f^{(n)} + \Delta t \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(n+1)}, \quad (3.21)$$

où $f^{(n)}$ désigne la valeur du champ discret f au n^e pas de temps, idem pour $f^{(n+1)}$ et $f^{(n-1)}$, et Δt est la longueur du pas de temps. Puisque $f^{(n-1)}$ n'existe pas au premier pas de temps ($n = 0$), on utilise un schéma de type Euler avant pour celui-ci :

$$f^{(1)} = f^{(0)} + \Delta t \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(0)}.$$

Étant donné la grandeur du coefficient du terme diffusion magnétique, un schéma implicite, tel EA, s'imposait. Ce dernier permet par ailleurs d'imposer correctement les conditions aux frontières, ce qui justifie son utilisation pour le terme de viscosité.

On a choisi d'intégrer les autres termes en utilisant AB2, un schéma stable et peu dispersif, approprié pour simuler un système qui tend à générer des ondes, comme les vagues à la surface de l'aluminium liquide. La stabilité du schéma AB2 a été étudiée en détail par Canuto et al. (1987).

En discrétisant (2.38), (2.39) et (3.1) selon ces schémas, on obtient le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{(n+1)} - \phi^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{3}{2} \mathbf{F}_{\phi}^{(n)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}_{\phi}^{(n-1)} \\ \frac{\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{3}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{v}}^{(n)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{v}}^{(n-1)} + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\text{Re}_t \text{Al}} 2\mathbf{D} \right)^{(n+1)} - \nabla p^{(n+1)} \\ \frac{\mathbf{a}^{(n+1)} - \mathbf{a}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{3}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{a}}^{(n)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{a}}^{(n-1)} + \frac{1}{\text{Lu}^{(n+1)}} \nabla^2 \mathbf{a}^{(n+1)} \end{aligned} \quad (3.22)$$

où

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_\phi &= -\nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) \\
\mathbf{F}_\mathbf{v} &= -\frac{1}{\text{Fr}^2 \text{Al}^2} \rho' \hat{\mathbf{z}} + \mathbf{J}_0 \times \mathbf{b} + \mathbf{j} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \mathbf{b}) - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{v}) \\
\mathbf{F}_\mathbf{a} &= \mathbf{v} \times (\mathbf{B}_a + \mathbf{B}_0 + \nabla \times \mathbf{a}) - \left(\frac{1}{\text{Lu}} - \frac{1}{\text{Lu}_0} \right) \mu_0 \mathbf{J}_0
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= \rho \mathbf{v} \\
\mathbf{J} &= \mathbf{J}_0 + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla^2 \mathbf{a}
\end{aligned}$$

3.4.1 Schémas implicites et opérateurs matriciels

L'utilisation d'un schéma implicite nécessite une inversion de matrice. En effet, les champs et les opérateurs discrets peuvent être considérés comme des vecteurs et des matrices respectivement.

3.4.1.1 Une seule dimension

Pour un système à une dimension, par exemple, l'application du stencil D_x^2 de différence finie d'ordre deux, donné par (3.19), est représentée par :

$$\frac{1}{h^2} \underbrace{\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{D_x^2} \underbrace{\begin{pmatrix} \vdots \\ f_{i-1} \\ f_i \\ f_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}}_f = \frac{1}{h^2} \underbrace{\begin{pmatrix} \vdots \\ f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i \\ f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1} \\ f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2} \\ \vdots \end{pmatrix}}_{f''}$$

L'opérateur D_x^2 est ainsi représenté par une matrice tridiagonale.

3.4.1.2 Plusieurs dimensions

Dans le cas d'un système à plusieurs dimensions, les dimensions supplémentaires sont repliées sur la première. Voici, par exemple, la représentation du champ scalaire f à deux dimensions :

$$f = \begin{pmatrix} \vdots \\ f_{i-1,j-1} \\ f_{i,j-1} \\ f_{i+1,j-1} \\ \vdots \\ f_{i-1,j} \\ f_{i,j} \\ f_{i+1,j} \\ \vdots \\ f_{i-1,j+1} \\ f_{i,j+1} \\ f_{i+1,j+1} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Le laplacien correspondant aurait la forme d'une matrice pentadiagonale :

$$L = \begin{pmatrix} \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots \\ & m_y & & m_x & -2m_{xy} & m_x & & m_y \\ & & m_y & & m_x & -2m_{xy} & m_x & & m_y \\ & & & m_y & & m_x & -2m_{xy} & m_x & & m_y \\ & & & & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$

où $m_x = 1/\Delta x^2$, $m_y = 1/\Delta y^2$ et $m_{xy} = m_x + m_y$.

Pour notre système à trois dimensions, le laplacien est représenté par une matrice heptadiagonale.

3.4.1.3 Termes implicites

Maintenant, prenons pour exemple l'équation pour \mathbf{a} dans (3.22), qui peut se récrire :

$$\underbrace{\left(1 - \frac{\Delta t}{L u^{(n+1)}} L\right)}_{L'} \mathbf{a}^{(n+1)} = \mathbf{a}^{(n)} + \Delta t \left(\frac{3}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{a}}^{(n)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{a}}^{(n-1)} \right). \quad (3.23)$$

Au n^{e} pas de temps, on dispose de toutes les données nécessaires pour calculer le membre droit de cette équation, et l'opérateur L' est effectivement une matrice heptadiagonale, qu'il suffit d'inverser pour trouver la valeur de \mathbf{a} au pas de temps suivant :

$$\mathbf{a}^{(n+1)} = L'^{-1} \left[\mathbf{a}^{(n)} + \Delta t \left(\frac{3}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{a}}^{(n)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}_{\mathbf{a}}^{(n-1)} \right) \right].$$

Il faut également spécifier des conditions aux frontières sur \mathbf{a} implicitement et définir les éléments correspondants de L de façon adéquate. Si les conditions aux frontières de a_x , a_y et a_z dépendaient mutuellement l'une de l'autre, il faudrait résoudre (3.23) pour les trois composantes simultanément, ce qui s'avérerait très coûteux en mémoire physique pour les ordinateurs.

Dans le code `ns3mhd`, on utilise une méthode itérative pour inverser L' . Les détails en seront donnés à la section 3.5.

3.5 Algorithme

L'algorithme de résolution, illustré schématiquement par la figure 3.8 est constitué des étapes suivantes :

1. Transport de ϕ :

$$\phi^{(n)}, \mathbf{v}^{(n)} \rightarrow \phi^{(n+1)}$$

2. Réinitialisation de $\phi^{(n+1)}$ autour de l'interface

3. Transport partiel de \mathbf{v} via $\mathbf{u} = \rho\mathbf{v}$:

$$\begin{aligned}\phi^{(n)} &\rightarrow \rho^{(n)} \\ \rho^{(n)}, \mathbf{v}^{(n)} &\rightarrow \mathbf{u}^{(n)} \\ \mathbf{b}^{(n)} &\rightarrow \mathbf{j}^{(n)} \\ \rho^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{v}^{(n)}, \mathbf{j}^{(n)}, \mathbf{b}^{(n)} &\rightarrow \mathbf{u}^{*(n+1)} \\ \phi^{(n+1)} &\rightarrow \rho^{(n+1)} \\ \rho^{(n+1)}, \mathbf{u}^{*(n+1)} &\rightarrow \mathbf{v}^{*(n+1)}\end{aligned}$$

4. Résolution implicite de la viscosité (GMRES) :

$$\begin{aligned}\phi^{(n+1)} &\rightarrow \nu^{(n+1)} \\ \nu^{(n+1)}, \mathbf{v}^{*(n+1)} &\rightarrow \mathbf{v}^{**(n+1)}\end{aligned}$$

5. Projection dans $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ (GMRES) :

$$\begin{aligned}\phi^{(n+1)} &\rightarrow \rho^{(n+1)} \\ \rho^{(n+1)}, \mathbf{v}^{**(n+1)} &\rightarrow \mathbf{p}^{(n+1)} \\ \rho^{(n+1)}, \mathbf{p}^{(n+1)} &\rightarrow \mathbf{v}^{(n+1)}\end{aligned}$$

6. Transport partiel de \mathbf{b} (GMRES) :

$$\mathbf{b}^{(n)}, \mathbf{v}^{(n)} \rightarrow \mathbf{b}^{*(n+1)}$$

7. Résolution implicite de la diffusion magnétique (GMRES) :

$$\begin{aligned}\phi^{(n+1)} &\rightarrow \eta^{(n+1)} \\ \eta^{(n+1)}, \mathbf{b}^{*(n+1)} &\rightarrow \mathbf{b}^{(n+1)}\end{aligned}$$

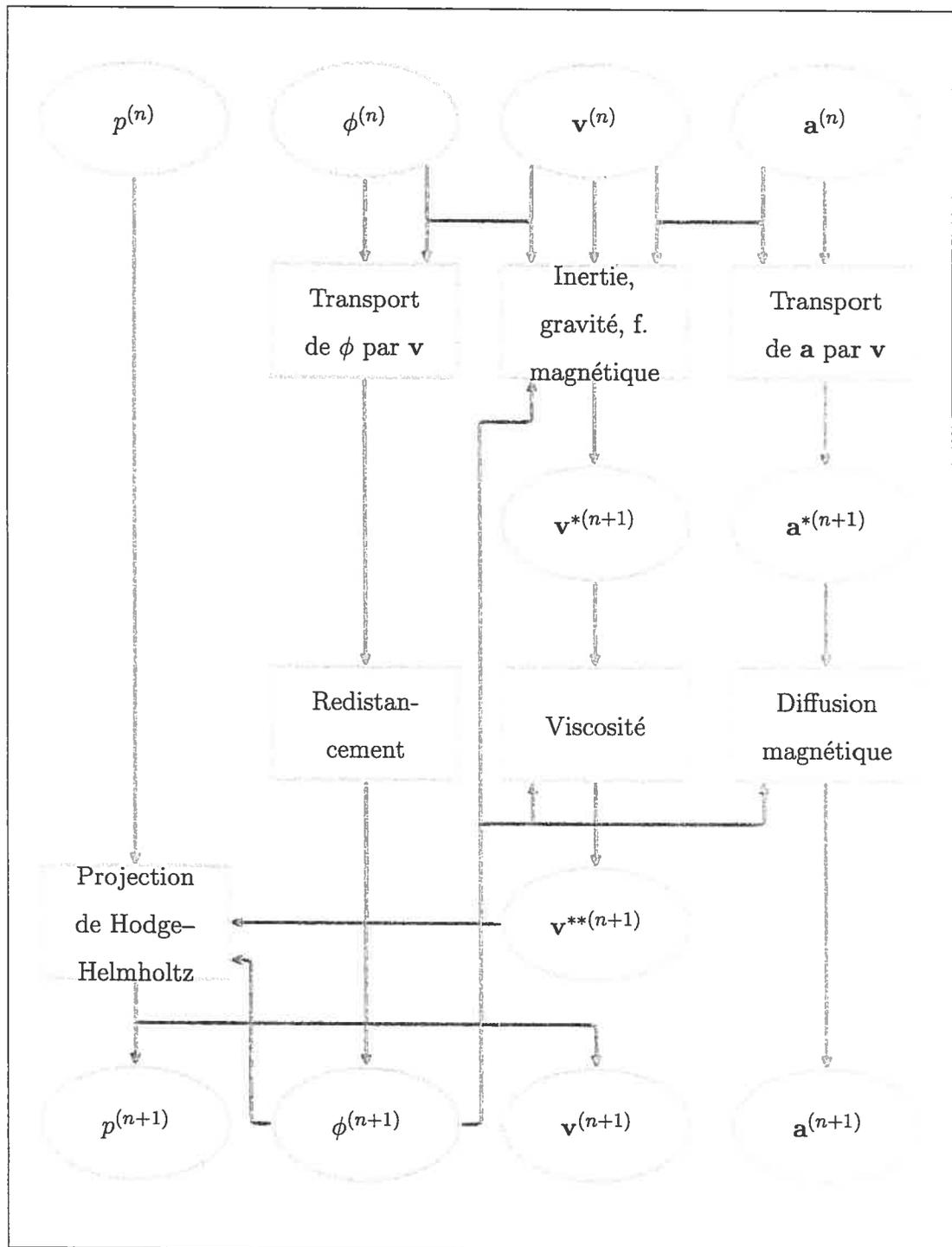


Figure 3.8 Algorithme de résolution numérique

L'implémentation du solveur itératif de type *Generalized Minimal Residual* (GMRES), préconditionné avec une factorisation *Symmetric Successive Over Relaxation* (SSOR), est celle de la bibliothèque de fonctions Petsc (Balay et al., 2001).

3.5.1 GMRES et SSOR

Le GMRES est une méthode itérative faisant partie de la classe des méthodes de projection dans les sous-espaces de Krylov (Saad, 2000). On s'en sert pour résoudre des systèmes linéaires, comme (3.23), de type

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (3.24)$$

où \mathbf{A} est une matrice et \mathbf{x} est la solution qu'on cherche. La solution $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ est approchée par $p(\mathbf{A})\mathbf{b}$, où p est un polynôme adéquat. À chaque itération, on calcule une meilleure estimation de \mathbf{x} en minimisant le résidu

$$\mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^{(n)},$$

où $\mathbf{x}^{(n)}$ est l'estimation de \mathbf{x} à l'itération n .

Le préconditionnement est une technique visant à accélérer la convergence des méthodes itératives tel le GMRES en transformant le système à résoudre en un autre système ayant la même solution, mais plus facile à résoudre (Saad, 2000). Par exemple, le système (3.24) deviendrait :

$$M^{-1}\mathbf{Ax} = M^{-1}\mathbf{b},$$

où M est une application ne comportant pas nécessairement de forme explicite, et dont l'inverse est peu coûteuse à appliquer à un vecteur quelconque. Le préconditionneur de type SSOR consiste à factoriser partiellement la matrice \mathbf{A} , de façon itérative, dans une forme particulière dont les détails ne seront pas donnés ici.

Les précisions au sujet du GMRES et du SSOR sont fournies par des ouvrages spécialisés sur les méthodes itératives, comme Saad (2000).

La technique de discrétisation des termes implicites est décrite à la section 3.4.1.3.

Chapitre 4

Expériences numériques

Les simulations ont été effectuées avec les paramètres tels que spécifiés dans les tableaux 2.1 et 2.2, sauf pour les dimensions horizontales et le rapport de conductivité électrique, qui a été réduit à 10^2 pour éviter les instabilités numériques. Les dimensions horizontales L_x et L_y utilisées pour les calculs varient d'une expérience à l'autre¹.

4.1 Ondes gravitationnelles pures

Pour vérifier que le code produit de bons résultats sans effets magnétiques, nous avons effectué quelques simulations en basse précision avec deux cuves différentes : une de dimensions horizontales de $3,04 \text{ m} \times 1,52 \text{ m}$ et l'autre de $6,08 \text{ m} \times 1,52 \text{ m}$. Les pas de grille et de temps sont $\Delta x = \Delta y = 1,3 \times 10^{-1}$, $\Delta z = 5,0 \times 10^{-2}$ et $\Delta t = 5,0 \times 10^{-3}$.

¹Le temps de calcul requis pour simuler la cuve complète avec une précision acceptable aurait dépassé les six mois, aussi une telle simulation n'a-t-elle pas été effectuée.

La rapport d'aspect étant significativement grand, on peut en fait estimer la valeur théorique de la période $\tau = 2\pi/\omega$ en utilisant la partie réelle de la relation de dispersion (1.3) en l'absence d'effets magnétiques :

$$\omega = \sqrt{\frac{\Delta\rho gk}{\rho_a \coth kh_a + \rho_e \coth kh_e} - \frac{\gamma^2}{4}}, \quad (4.1)$$

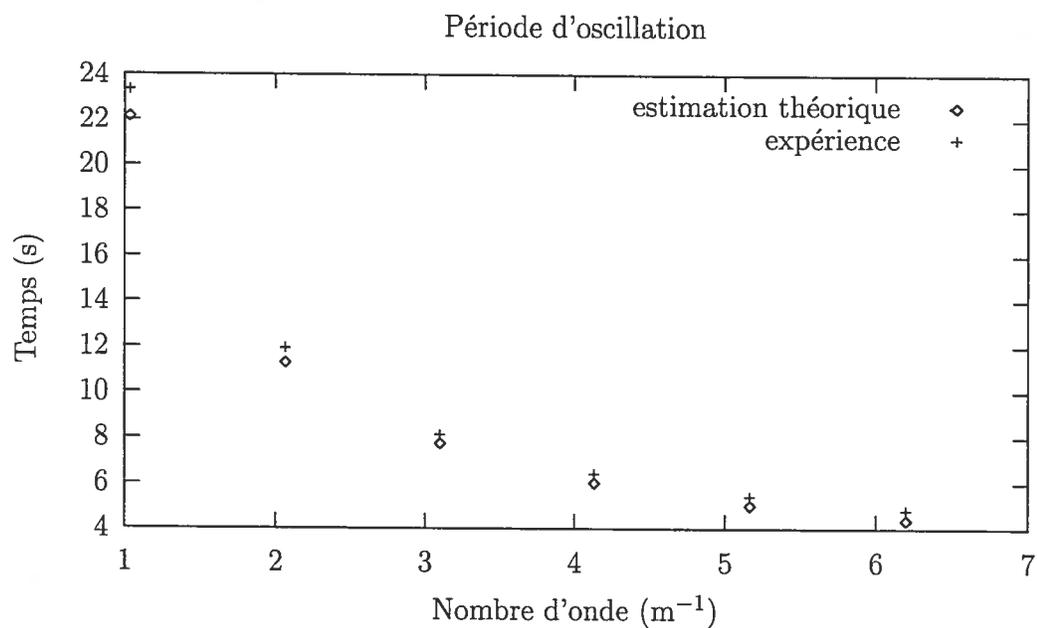
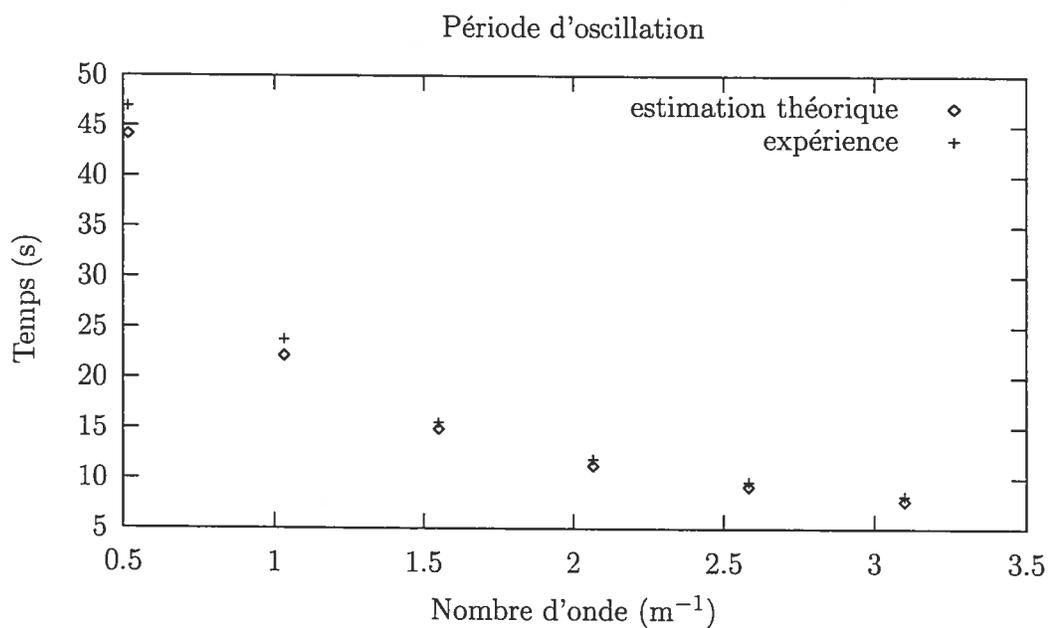
où le facteur d'amortissement γ dépend du nombre d'onde k (voir (1.4)). Ce dernier peut être estimé en considérant que l'amplitude de la vague $\zeta(t)$ varie comme $e^{-\gamma t/2}$, comme le suggère la partie imaginaire de (1.3). On définit alors la valeur expérimentale de γ comme :

$$\gamma_{\text{exp}} = \frac{2}{\tau_{\text{exp}}} \ln \frac{\zeta(0)}{\zeta(\tau_{\text{exp}})},$$

et on utilise cette valeur comme approximation de γ dans (4.1).

La figure 4.1 compare les périodes estimées τ aux périodes expérimentales des modes $\cos(kx)$, où $k = m\pi/L_x$. L'écart, inférieur à 10 % (a) et à 7 % (b), est attribuable à la modélisation différente de la dissipation mécanique pour les simulations et pour le calcul théorique, ainsi qu'au fait que les dimensions horizontales ne sont pas infinies. D'ailleurs, l'écart est inférieur dans le cas de la cuve plus longue.

Nous en concluons que le code disperse de façon satisfaisante les modes d'oscillation gravitationnelle pure.

(a) cuve de 3,04 m \times 1,52 m(b) cuve de 6,08 m \times 1,52 m**Figure 4.1** Période d'oscillation gravitationnelle

4.2 Roulis du métal liquide

Nous avons effectué une série d'expériences numériques sur le roulis de la surface de l'aluminium liquide en variant différents paramètres. Le tableau 4.1 les énumère. Nous commencerons par présenter qualitativement les caractéristiques communes de ces expériences, après quoi nous analyserons leurs différences.

Expérience	β	L_x/L_z	L_y/L_z	$\Delta x = \Delta y$	Δz	Δt
B2-1×1	2	1	1	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-4}$
B3-1×1	3	1	1	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-4}$
B4-1×1	4	1	1	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-4}$
B6-1×1	6	1	1	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-5}$
B8-1×1	8	1	1	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$2,5 \times 10^{-6}$
B3-2×2	3	2	2	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$5,0 \times 10^{-4}$
B3-3×3	3	3	3	$3,13 \times 10^{-2}$	$3,13 \times 10^{-2}$	$5,0 \times 10^{-4}$
B3-4×4	3	4	4	$1,3 \times 10^{-1}$	$5,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-3}$
B3-6×6	3	6	6	$1,3 \times 10^{-1}$	$5,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-3}$
B3-8×8	3	8	8	$1,3 \times 10^{-1}$	$5,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-3}$

Le paramètre β est une mesure de l'intensité du champ magnétique vertical ambiant, défini par l'équation (2.13) : $\mathbf{B}_a = \beta \mu_0 J_0 L_z \hat{\mathbf{z}}$.

Tableau 4.1 Expériences de roulis

Remarquons que :

- pour la plupart des expériences, le paramètre β est fixé à 3, cela correspondant tout simplement à un champ ambiant de 9,8 mT, ce qui est près de la valeur moyenne mesurée en salle de cuves ;
- lorsque le rapport d'aspect varie, c'est la densité de courant J_0 qui est gardée constante et non le courant total.

4.2.1 Mécanisme du roulis

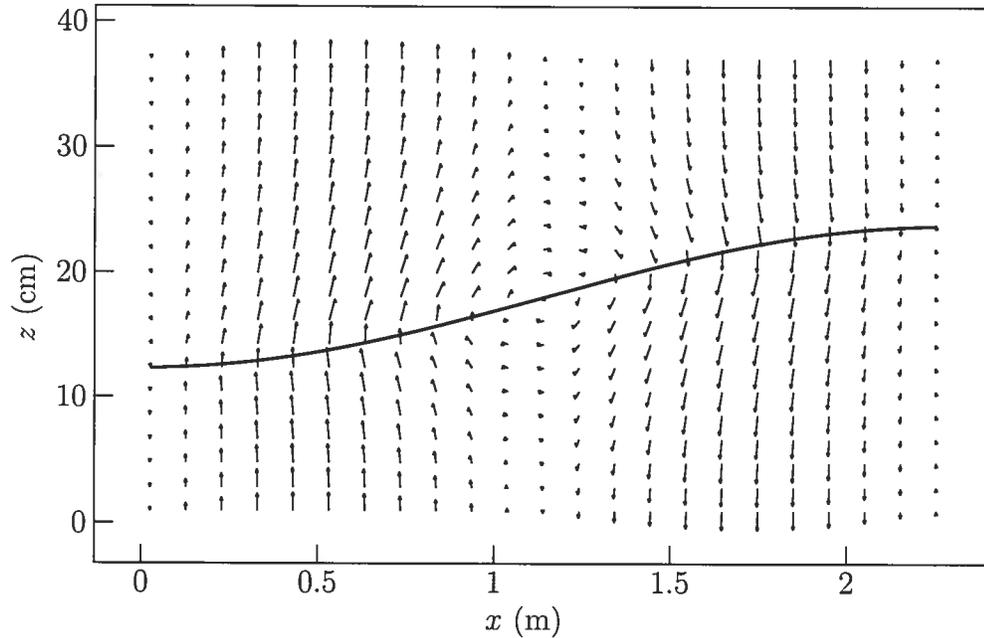
Nous prendrons ici pour exemple l'expérience B3-6×6, afin de caractériser qualitativement le roulis.

Durant les 6 premières secondes de simulation, on gardait le champ de vitesse nul et on maintenait l'interface dans sa position initiale, afin de laisser au courant électrique le temps de s'adapter à la forme sinusoïdale de celle-ci. La figure 4.2 montre une coupe verticale de la distribution de la fluctuation du courant électrique par rapport au courant stationnaire vertical, à $t = 6$ s, juste avant de tout relâcher.

Tout comme Sele (1977) l'avait supposé, on observe que le courant dans le bain électrolytique se concentre là où la distance interpolaire est la plus courte, tandis qu'il se rétablit dans l'aluminium. La distribution du courant est, par contre, un peu moins idéale que celle illustrée par la figure 1.4, en raison du rapport de conductivité réduit pour nos simulations et de la forme sinusoïdale plutôt que linéaire de l'interface.

La composante horizontale du courant dans l'aluminium étant orientée en sens contraire de celle dans le bain, le champ magnétique vertical induira des forces en sens contraires dans les deux milieux. Néanmoins, par une redistribution de la pression, au lieu de s'opposer, elles contribueront à incliner l'interface dans le même sens, soit à 90 degrés par rapport à son inclinaison.

Le roulis de l'aluminium ainsi déclenché est illustré par la figure 4.3, qui montre les courbes de niveau de l'interface en différents temps pendant une période d'oscillation.



Les vecteurs montrent la distribution, sur une coupe verticale de la cuve, de la déviation du courant électrique par rapport au courant vertical imposé, et le trait gras représente la position l'interface.

Figure 4.2 Interface et fluctuation du courant électrique initiaux (B3-6×6)

Sur le graphique du haut de la figure 4.4, on constate d'abord que la position de l'interface oscille sur une période de 16,9 s avec une amplitude décroissante à cause des forces de dissipation. La première oscillation du point $(0, L_y/2)$ est encore peu perturbée et présente une forme sinusoïdale. Mais, à mesure que le roulis s'établit, une inclinaison en y apparaît. On peut apprécier l'importance du mouvement transversal en mesurant le déplacement de l'interface au point $(L_x/2, 0)$. L'amplitude devient voisine de celle au point $(0, L_y/2)$, donc le roulis devient plus *isotrope*. Le déphasage d'un quart de période entre les deux courbes est caractéristique de la rotation.

D'autre part, toujours sur la figure 4.4, le déphasage d'une demi-période entre la courbe de l'énergie cinétique E_c et celle de l'énergie potentielle gravitationnelle E_g illustre l'échange W_g de la figure 2.1 du bilan d'énergie. De façon analogue, les

courbes des densités moyennes de force inertielle f_i et de force gravitationnelle f_g ¹ présentent ce même déphasage. Il s'agit d'un comportement caractéristique d'une onde gravitationnelle.

La force magnétique f_m exhibe cependant un comportement particulier. On remarque d'abord son déplacement vertical f_{m0} chevauché d'une composante oscillatoire sinusoïdale d'amplitude f'_m , de sorte que $f_m \simeq f_{m0} + f'_m \sin(\omega(t - t_0))$. Le déplacement f_{m0} d'environ 183 N/m^3 correspond en fait à la force d'interaction entre le courant stationnaire vertical J_0 et la composante en y uniforme $B_{y0} \approx 27 \text{ mT}$ du champ d'induction magnétique². Celui-ci apparaît durant les premières secondes de la simulation à cause de la boucle de courant (figure 4.2), mais ne se résorbe pas par la suite. La densité de force en x résultante est de l'ordre de $J_0 B_{y0} \approx 183,2 \text{ N/m}^3$, ce qui explique le déplacement f_{m0} . Soulignons enfin le fait que ce dernier n'engendre aucun mouvement dans la cuve car il est complètement compensé par un déplacement du gradient de pression en x . En effet, la moyenne spatiotemporelle de $\partial p / \partial x$ est d'environ $185,2 \text{ N/m}^3$.

Dans le cas précédent, on avait $f'_m < f_{m0}$. Mais, lorsque la composante oscillatoire de f_m est de plus grande amplitude que son déplacement, on obtient une courbe comme celle de $f_{m,x}$ dans la section du milieu de la figure 4.5. Sa fréquence semble doublée. Il ne s'agit cependant que d'une différence apparente, attribuable au fait que l'on considère la moyenne de la valeur absolue de la force magnétique. La figure 4.6 compare les deux cas : le trait continu et le trait pointillé sont analogues à $f_{m,x}$ dans B3-6×6 et B3-4×4 respectivement. À la lumière de ces dernières explications, il devient clair que les minima de f_m dans la figure 4.4 correspondent en fait à des maxima d'intensité de sa composante oscillatoire $f'_m \sin(\omega(t - t_0))$.

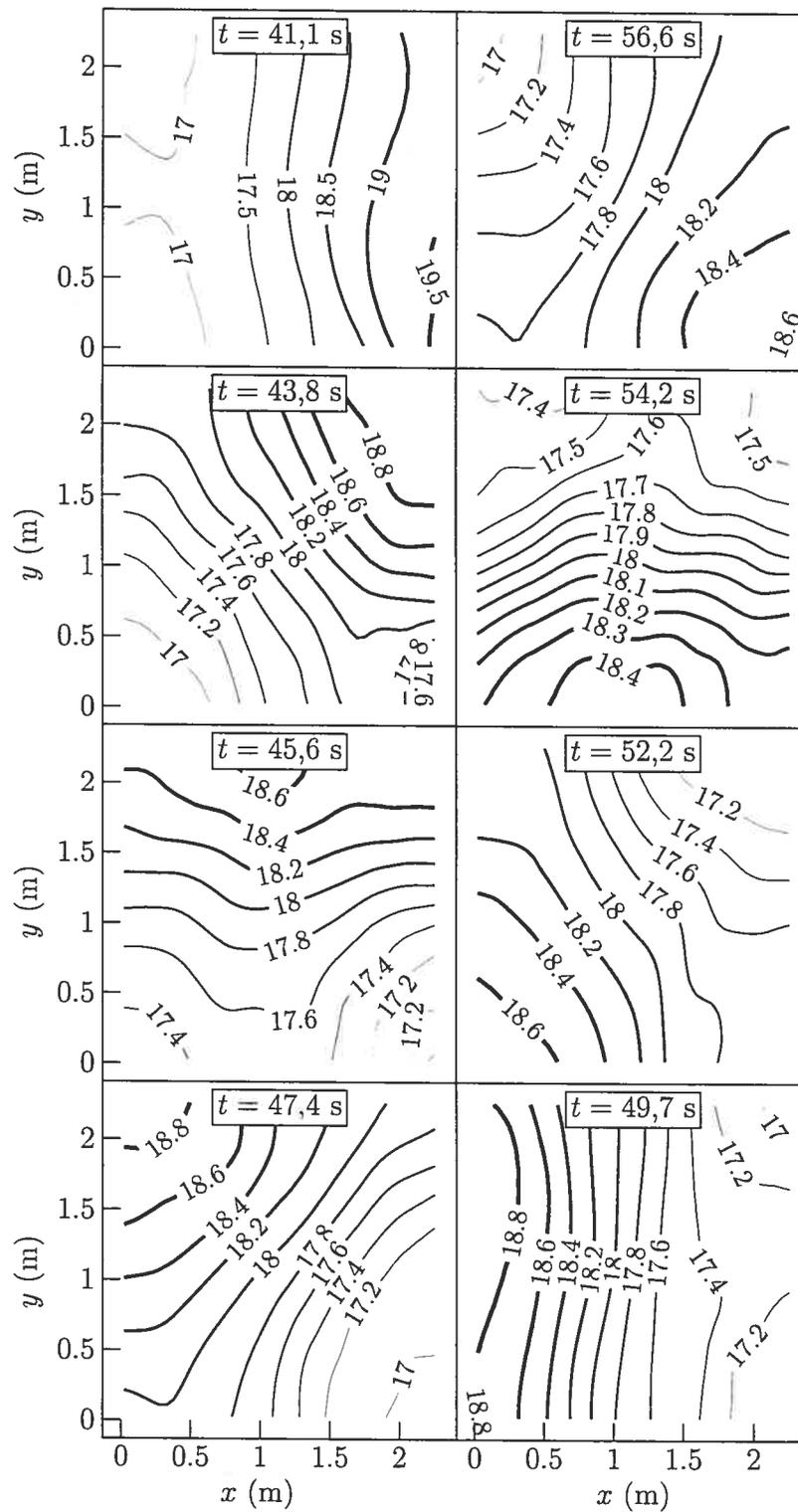
¹Il s'agit en fait des modules moyens de ces forces ; les forces agissant souvent dans des directions dans les deux fluides, les véritables moyennes tendraient vers zéro.

²Cette valeur approximative est en fait la moyenne temporelle et spatiale de B_y dans la cuve durant le roulis, ce qui correspond effectivement à la moyenne dans le cas de variations sinusoïdales.

On remarque ensuite que les maxima de $f_{m,x}$ sont alignés avec les extrema du déplacement de l'interface au point $(L_x/2, 0)$, qui est en fait une mesure de l'inclinaison de celle-ci selon l'axe y . On pourrait d'abord croire qu'il s'agit de la force qui entretient le roulis tel que décrit par Sele (1977). Mais, en mesurant l'intensité de $f_{m,x}$ pour $t < 12$ s, alors que l'inclinaison en y est pratiquement absente, on doit déduire qu'il s'agit simplement d'une force s'opposant au mouvement. Cette dernière est en partie due à la présence de courants induits par les mouvements des fluides et sera commentée à la section 4.2.3.

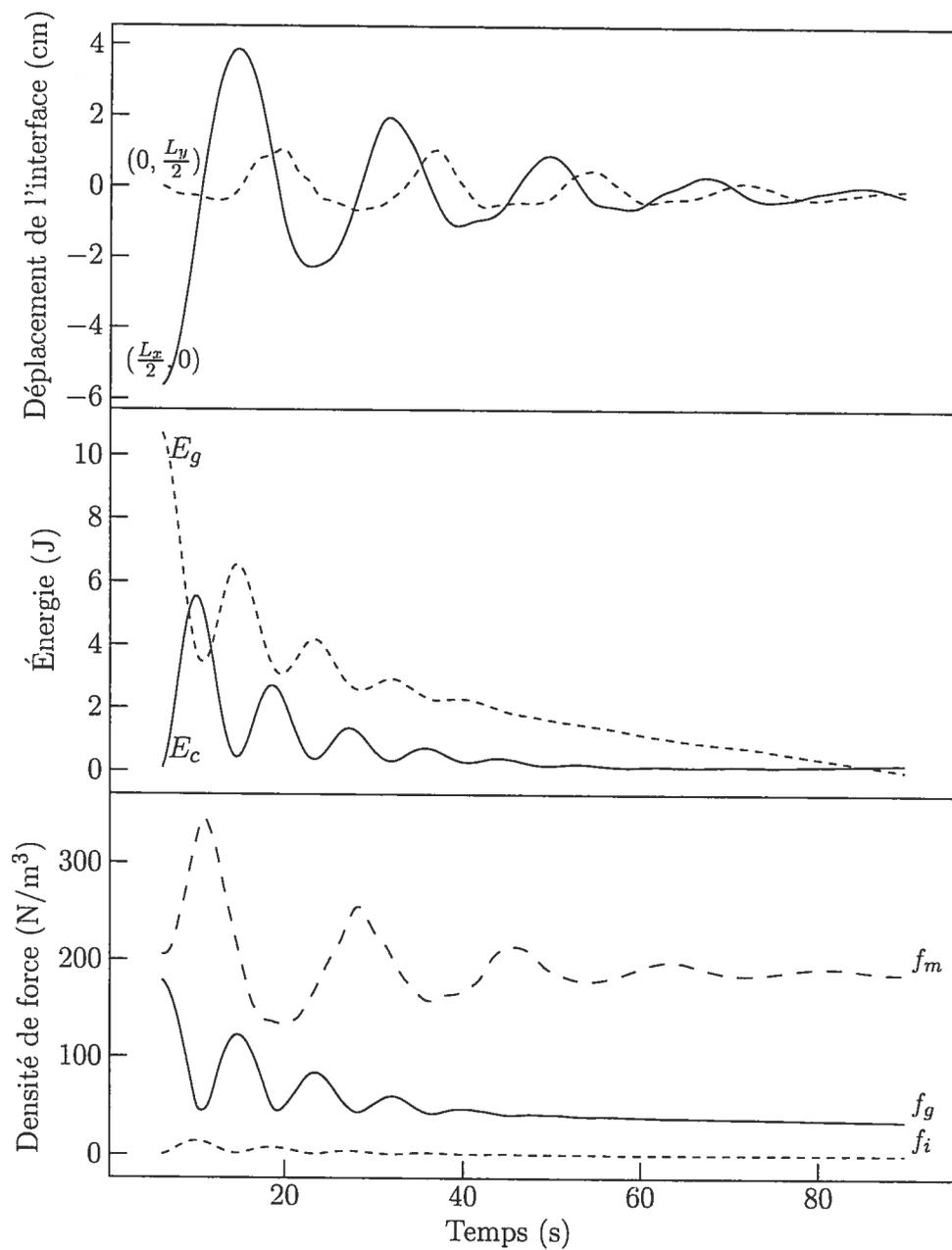
D'autre part, alors que l'inclinaison en x est la plus forte, l'intensité des forces en y au tout début de l'écoulement nous permet d'obtenir une borne supérieure pour la densité de force de roulis. Elle se situe autour de 10 N/m^3 , ce qui est environ dix fois moindre que la force d'amortissement magnétique.

Ainsi, d'après ces observations, bien qu'elles perturbent l'onde d'interface en lui affectant une composante transversale, *les forces magnétiques intervenant dans le roulis semblent pour la plupart avoir un effet stabilisateur.*



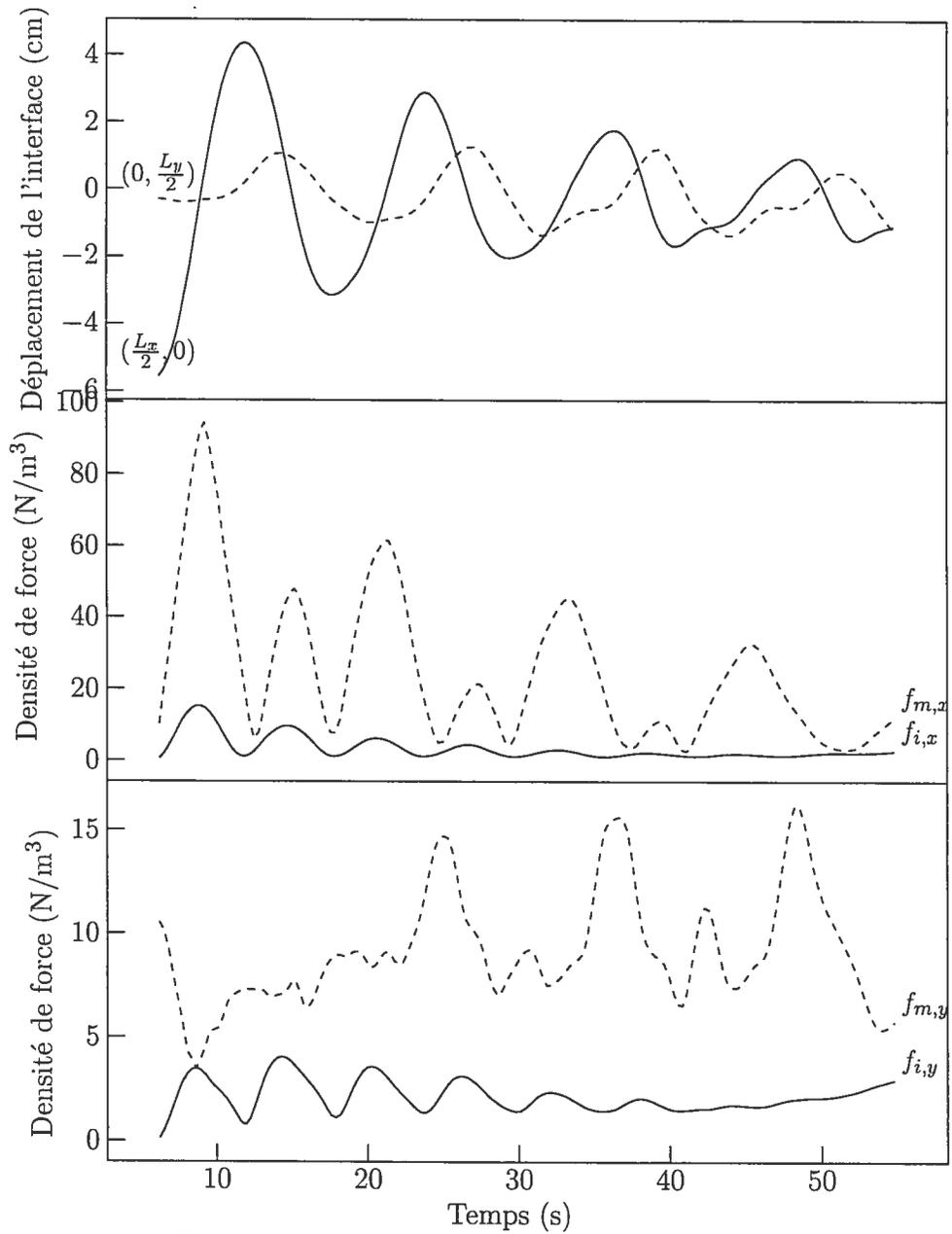
Les valeurs des courbes de niveau sont exprimées en centimètres.

Figure 4.3 Hauteur de l'interface (B3-6x6)



En haut : déplacement de l'interface par rapport à sa position d'équilibre aux points $(0, L_y/2)$ et $(L_x/2, 0)$ sur les bords. Au milieu : énergie cinétique E_c et énergie potentielle gravitationnelle E_g . En bas : densités moyennes de force inertielle $f_i = |-\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v}|$, de force magnétique $f_m = |\mathbf{J} \times \mathbf{B}|$ et de force gravitationnelle $f_g = |-\Delta \rho g \hat{z}|$.

Figure 4.4 Hauteur, énergie et forces (B3-6×6)



En haut : déplacement de l'interface par rapport à sa position d'équilibre aux points $(0, L_y/2)$ et $(L_x/2, 0)$ sur les bords. Au milieu et en bas : composantes en x et en y respectivement des densités absolues moyennes de force inertielle f_i et de force magnétique f_m .

Figure 4.5 Hauteur, énergie et forces (B3-4×4)

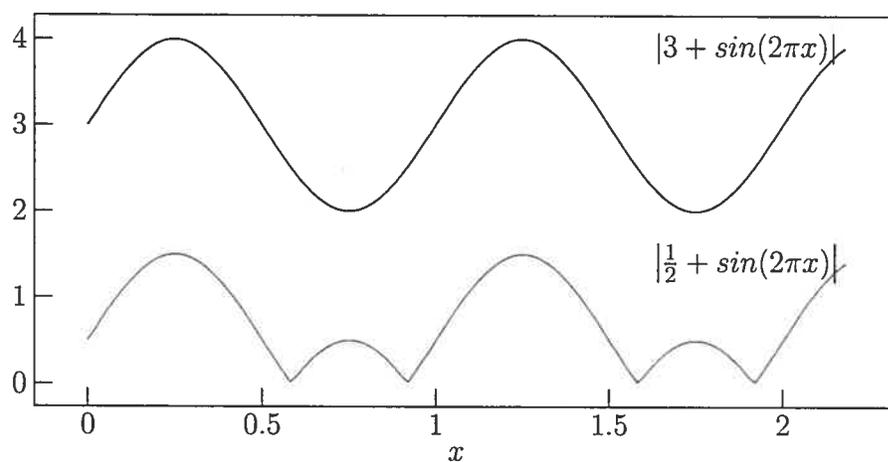


Figure 4.6 Valeur absolue d'un sinus déplacé

4.2.2 Rapport d'aspect

Nous avons effectué une série d'expériences en variant le rapport d'aspect de la cuve pour comparer les périodes de rotation aux périodes d'oscillation gravitationnelles naturelles (voir section 4.1). Le tableau 4.2 montre que les valeurs concordent bien, ce qui confirme que le roulis est en fait une onde gravitationnelle interne, quoique perturbée par les forces magnétiques.

Expérience	Période	Période naturelle
B3-1×1	3,8 s	3,6 s
B3-2×2	6,2 s	6,0 s
B3-3×3	8,7 s	8,8 s
B3-4×4	11,8 s	11,3 s
B3-6×6	16,7 s	16,8 s
B3-8×8	21,8 s	22,5 s

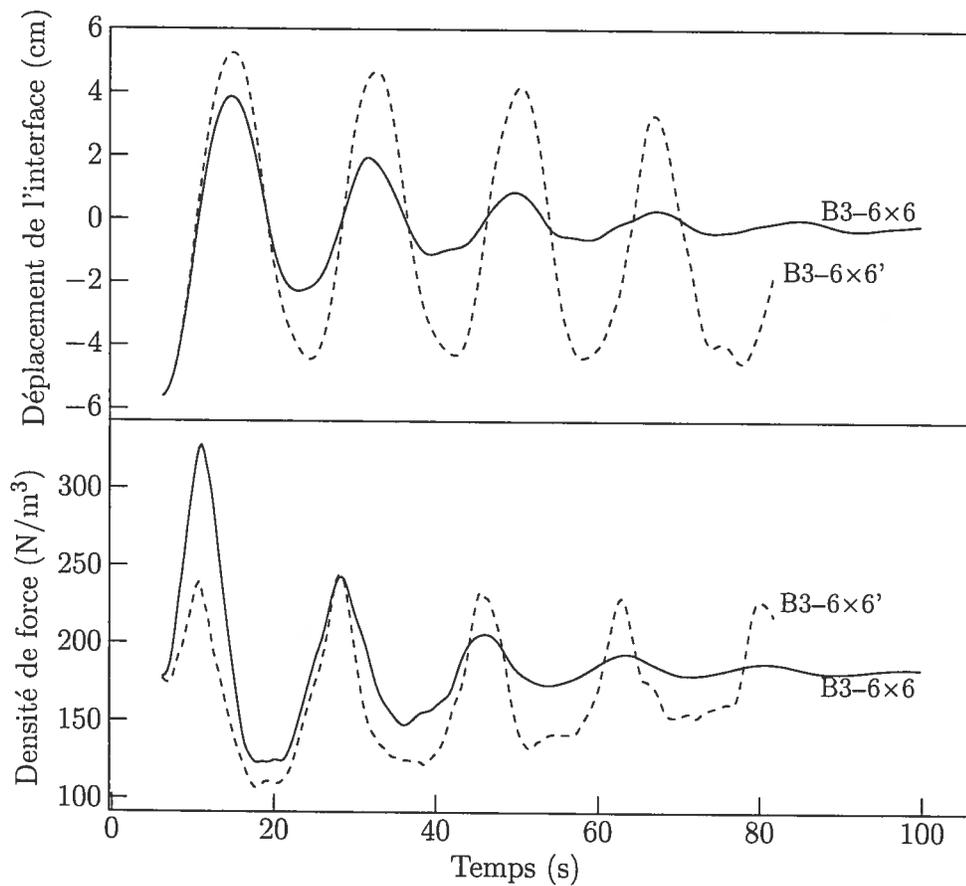
La période théorique est calculée avec l'équation (4.1). Le facteur d'amortissement est estimé de la même façon qu'à la section 4.1.

Tableau 4.2 Roulis et rapport d'aspect

Nous avons par ailleurs remarqué que la valeur estimée du facteur d'amortissement γ se situe en moyenne autour de $0,1 \text{ s}^{-1}$, soit quatre à cinq fois plus élevé que dans les expériences sans force magnétique de la section 4.1. Cela constitue un argument supplémentaire à celui de la section 4.2.1 pour affirmer que les forces magnétiques semblent plus souvent stabilisatrices.

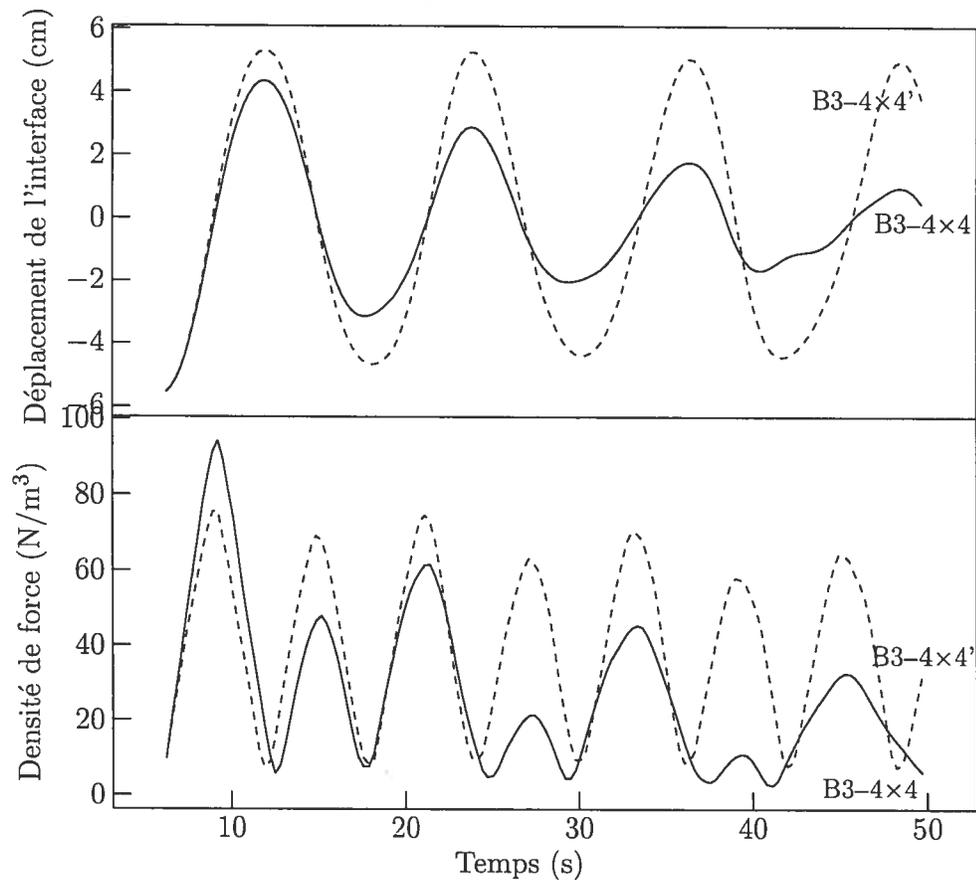
4.2.3 Influence des courants induits

Nous avons voulu vérifier l'influence qu'ont sur l'écoulement les courants induits par les mouvements des fluides : $\sigma \mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Nous avons donc effectué deux simulations sans ce terme dans les équations : B3-6×6' et B3-4×4', analogues de B3-6×6 et B3-4×4 respectivement.



Le trait continu correspond à l'expérience B3-6×6 et le pointillé, à B3-6×6'. *En haut* : déplacement de l'interface par rapport à sa position d'équilibre au point $(0, L_y/2)$. *En bas* : densité moyenne de force magnétique en x .

Figure 4.7 Hauteur et force magnétique en x (B3-6×6 et B3-6×6')

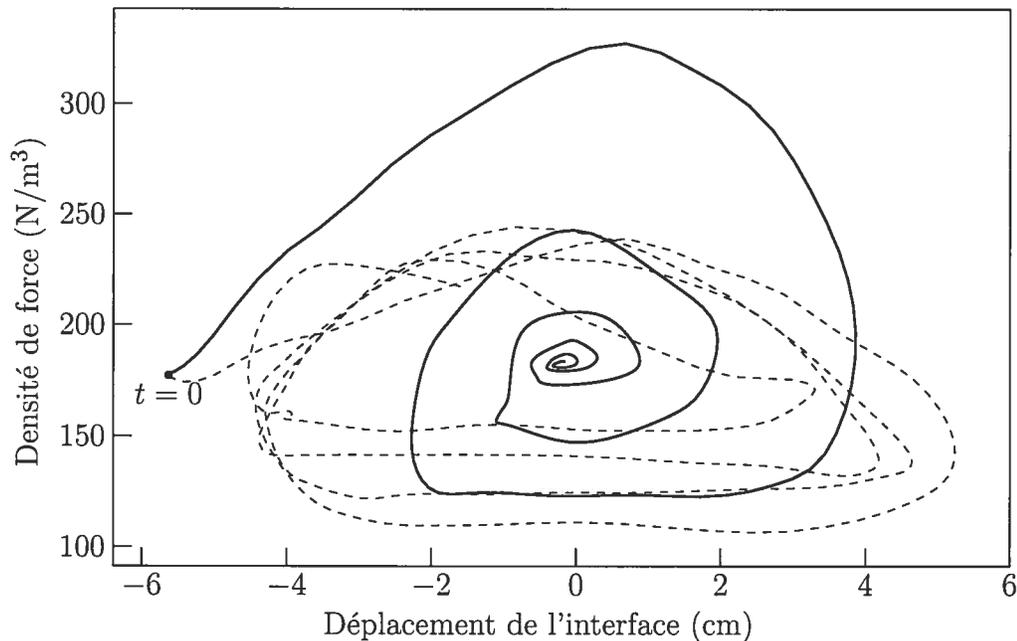


Le trait continu correspond à l'expérience B3-4×4 et le pointillé, à B3-4×4'. *En haut* : déplacement de l'interface par rapport à sa position d'équilibre au point $(0, L_y/2)$. *En bas* : densité moyenne de force magnétique en x .

Figure 4.8 Hauteur et force magnétique en x (B3-4×4 et B3-4×4')

Le haut de la figure 4.7 montre combien l'amplitude de l'onde d'interface décroît à cause de l'amortissement par les courants induits. Le graphique du bas montre que la force magnétique en x , s'opposant au mouvement, est plus forte en présence de ces courants. La figure 4.8 le confirme pour une autre expérience (B3-4×4) avec un rapport d'aspect différent. Toutefois, l'amortissement décroît à mesure que l'onde s'atténue, et puisque qu'elle s'atténue plus rapidement dans le cas de B3-6×6, les courbes se croisent pour $t > 40$ s. Aussi est-il plus pertinent de tracer l'intensité de la force magnétique en x en fonction du déplacement en x , qui est une mesure

de l'amplitude de l'onde. Sur la figure 4.9, il ne faut pas s'attarder à l'étendue des trajectoires, mais plutôt à leur forme : le profil aplati pour B3-6×6' caractérise une force magnétique moins prononcée pour une même amplitude de l'onde. La présence d'un point attracteur, au centre du graphique, indique que le système évolue vers la stabilité.



Le trait continu correspond à l'expérience B3-6×6 et le pointillé, à B3-6×6'.

Figure 4.9 Force magnétique en x en fonction du déplacement (B3-6×6 et B3-6×6')

En conclusion, nous venons de montrer que les courants induits ont en fait une influence très stabilisatrice sur l'écoulement. Or, comme on l'a décrit à la section 1.2.2, dans la plupart des développements analytiques, les auteurs les avaient négligés. Cela signifie que les critères de stabilité analytiques ainsi obtenus sont probablement beaucoup trop conservateurs. Nuancions un peu cette conclusion en remarquant que le rapport de conductivité réduit dans nos expériences a pour effet d'exagérer l'intensité des courants induits dans le bain électrolytique, mais pas dans l'aluminium liquide.

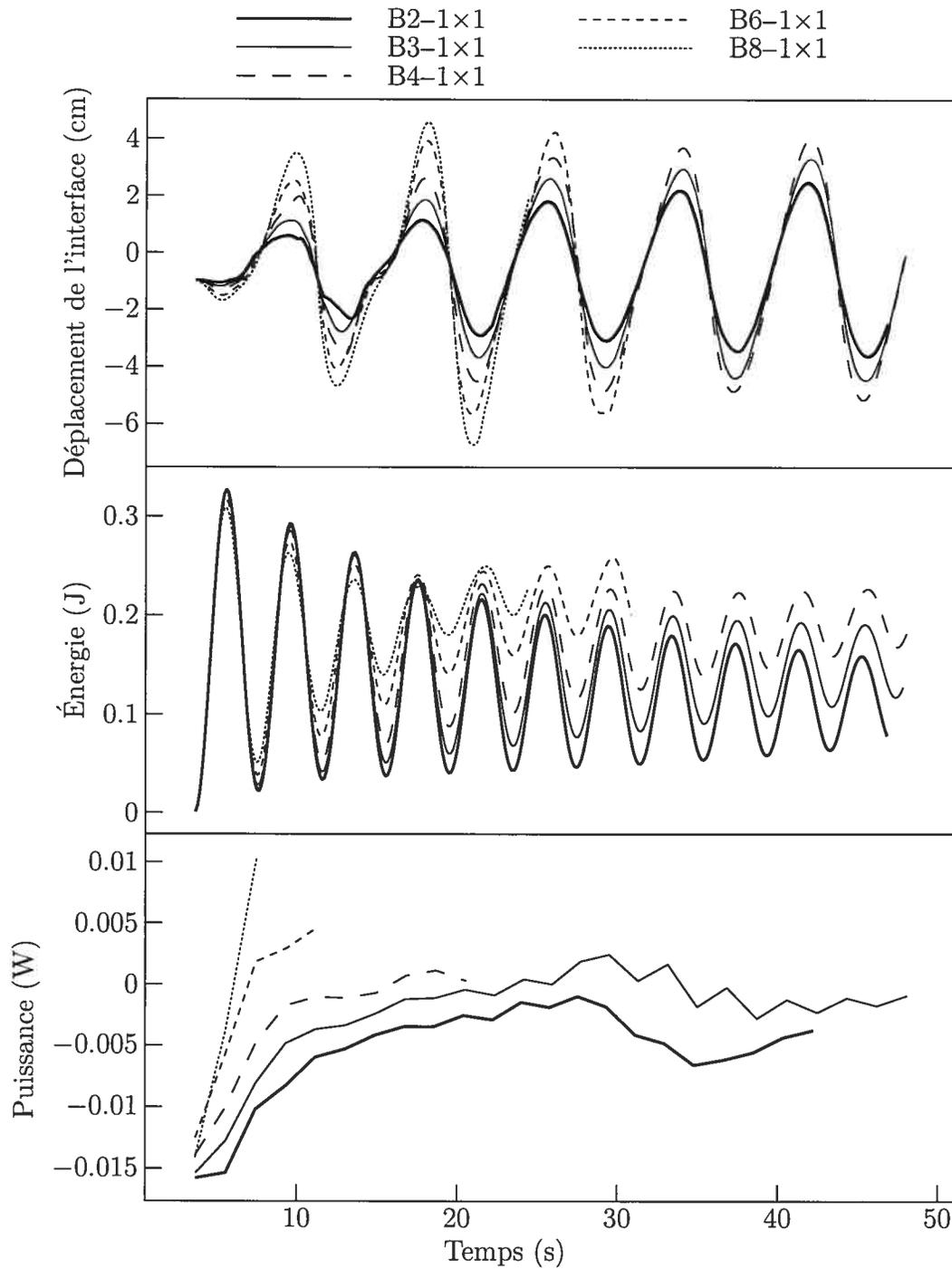
4.2.4 Influence du champ magnétique ambiant

Nous avons effectué une série d'expériences avec une cuve cubique pour voir l'influence de l'intensité du champ magnétique ambiant vertical. Les conditions initiales sont semblables à celles décrites à la section 4.2.1. Comme on le voit dans le tableau 4.1, nous avons dû réduire considérablement le pas de temps pour les grandes valeurs de β . Cela était nécessaire pour éviter l'instabilité numérique lors de la simulation en raison du trop haut taux de croissance de l'énergie dans le système.

Le graphique du haut de la figure 4.10 donne une mesure de l'inclinaison en y de l'interface en fonction du temps, dont l'amplitude correspond à celle de l'onde de roulis. On voit nettement l'influence déstabilisatrice de l'accroissement du champ magnétique ambiant vertical, comme l'avait prédit Sele (1977) et obtenu Gerbeau et al. (2001). Dans l'analyse de Sneyd (1985, 1992), par contre, cette composante uniforme du champ ambiant est considérée comme un déplacement sans influence sur le développement des ondes. Ce résultat confirme que les hypothèses de ces modèles analytiques sont trop réductrices.

De plus, le comportement croissant ou décroissant de l'énergie cinétique dans le graphique du centre appuie cette dernière conclusion. On y voit que les maxima d'énergie décroissent pour $\beta = 2$, restent à peu près constants pour $\beta = 3$ et croissent pour $\beta = 4, 6, 8$. Cela implique un seuil de stabilité autour de 9,8 mT pour cette cuve cubique. On voit d'ailleurs clairement sur le graphique du bas que le taux d'accroissement de l'énergie cinétique demeure négatif pour B2-1×1, frise le zéro pour B3-1×1, et devient positif pour B4-1×1, B6-1×1 et B8-1×1. Ces trois dernières expériences ont effectivement été rapidement interrompues par une instabilité numérique, tandis que l'écoulement s'est complètement arrêté dans B2-1×1.

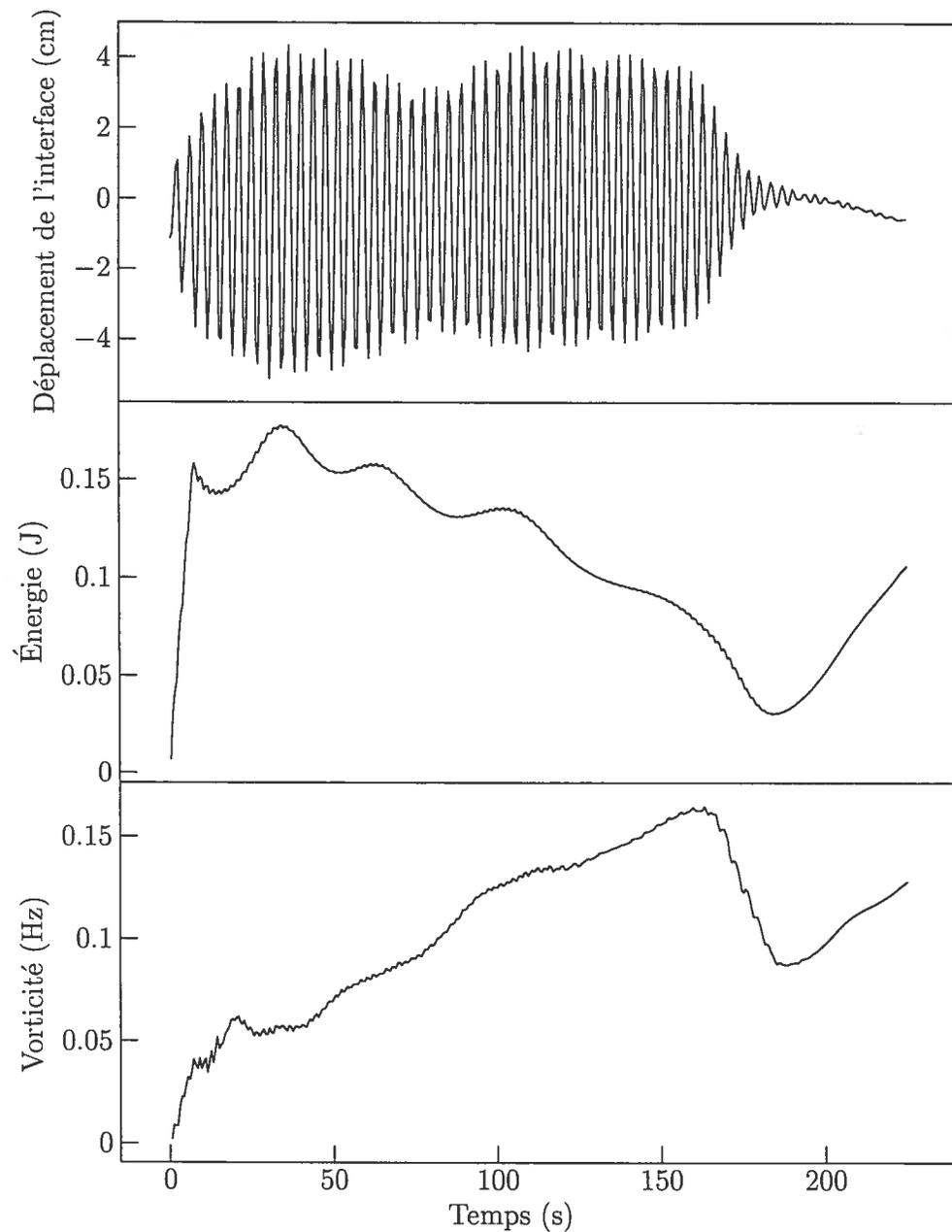
Nous avons prolongé la simulation B3-1×1 pour voir ce qui se passait près du seuil de stabilité. Sur la figure 4.11, on voit que, même si l'énergie cinétique totale diminue avec le temps, elle le fait au profit d'une vorticit  verticale moyenne croissante.



En haut : déplacement de l'interface par rapport à sa position d'équilibre au point $(L_x/2, 0)$. *Au milieu* : énergie cinétique. *En bas* : taux de croissance de l'énergie cinétique.

Figure 4.10 Influence du champ magnétique ambiant vertical

C'est-à-dire qu'une rotation horizontale s'établit peu à peu. Puis, entre $t = 165$ s et $t = 185$ s, l'interface cesse de bouger, le roulis prend fin et l'écoulement entre dans un régime différent, qui fera l'objet de la prochaine section.

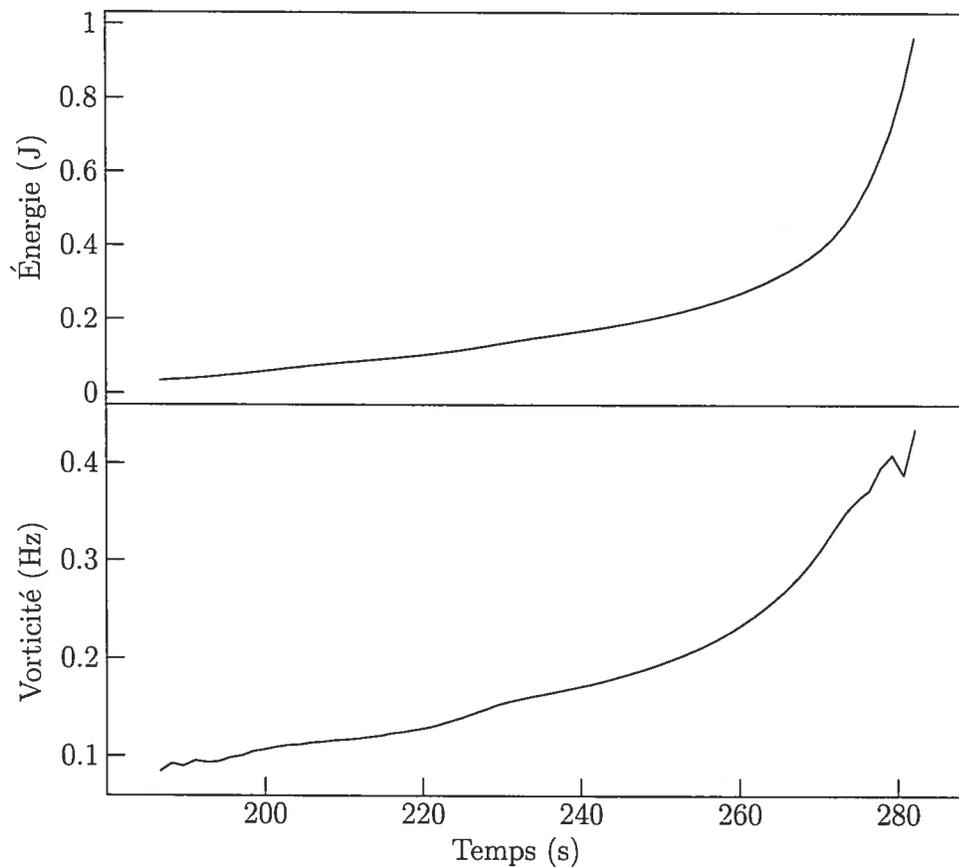


En haut : déplacement de l'interface par rapport à sa position d'équilibre au point $(L_x/2, 0)$. *Au milieu* : énergie cinétique E_c . *En bas* : vorticité verticale moyenne ω_z . Les courbes de E_c et de ω_z ont été lissées avec un filtre rectangulaire 7,4 s pour réduire les oscillations rapides et laisser voir leur comportement à long terme.

Figure 4.11 Énergie et vorticité du roulis près du seuil de stabilité

4.3 L'aspirateur MHD

Nous analyserons dans cette section le régime rotationnel, mentionné à la section 4.2.4, suivant le roulis dans l'expérience B3-1×1 pour $t > 185$ s. Le roulis s'étant arrêté, l'interface aluminium-électrolyte est alors pratiquement plane et horizontale. La figure 4.12 montre l'évolution, durant ce régime d'écoulement, de l'énergie cinétique et de la vorticité verticale moyenne. Nous allons ici tenter d'expliquer leur croissance exponentielle.



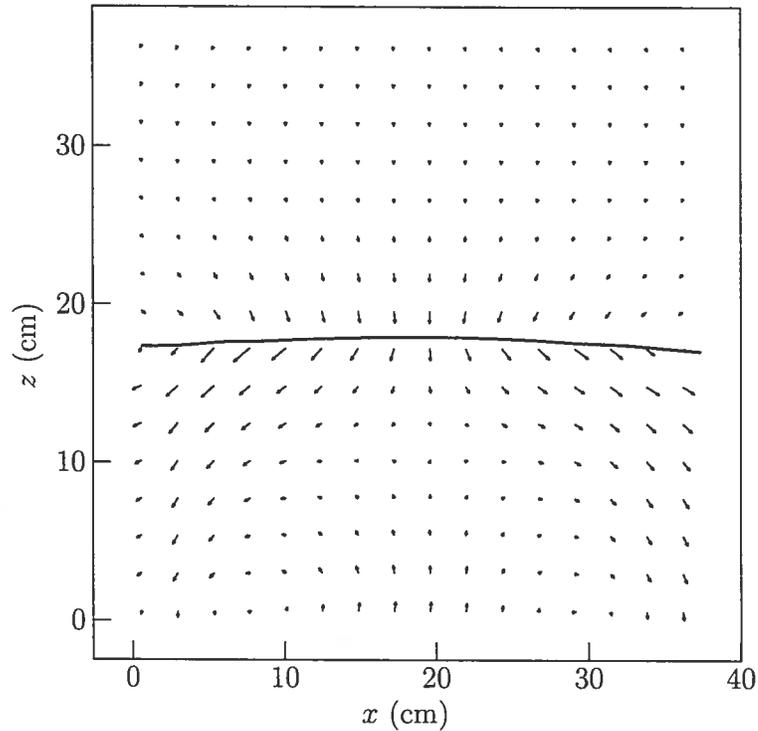
En haut : énergie cinétique E_c . En bas : vorticité verticale moyenne ω_z .

Figure 4.12 Énergie et vorticité de l'aspirateur MHD

Au départ, le champ magnétique présent dans la cuve est celui qui a été établi durant le roulis et, hormis quelques faibles fluctuations locales, il a approximativement la forme suivante :

$$\mathbf{b} = \mu_0 J_0 \begin{pmatrix} (x/L - \frac{1}{2})\beta_x \\ (y/L - \frac{1}{2})\beta_y \\ (z/L - \frac{1}{2})\beta_z \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

où $\beta_x \approx 5,07$, $\beta_y \approx -9,70$ et $\beta_z \approx 4,63$ à $t = 259,4$ s, par exemple. Rappelons que la cuve est cubique pour cette expérience et que $L_x = L_y = L_z = L$. On vérifie aisément que ces valeurs assurent $\nabla \cdot \mathbf{b} = (\beta_x + \beta_y + \beta_z)/L \approx 0$. Les fluctuations du courant électrique, au plus de l'ordre de $0,23J_0$ à ce moment, sont illustrées par la figure 4.13.



Le champ vectoriel représente la déviation du courant électrique par rapport au courant vertical imposé.

Figure 4.13 Coupe verticale du courant électrique pour l'aspirateur MHD ($t = 259,4$ s)

Si, de prime abord, on néglige ces fluctuations du courant, on obtient la densité de force magnétique suivante :

$$\mathbf{f}_m = \mathbf{J}_0 \times \mathbf{b} = \mu_0 J_0^2 \begin{pmatrix} (y/L - \frac{1}{2})\beta_y \\ -(x/L - \frac{1}{2})\beta_x \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Supposons une géométrie cylindrique (r, θ, z) centrée en $(L_x/2, L_y/2, 0)$ avec les transformations suivantes :

$$\frac{x}{L} - \frac{1}{2} = r \cos \theta, \quad \frac{y}{L} - \frac{1}{2} = r \sin \theta.$$

La densité de force magnétique devient alors :

$$\mathbf{f}_m = -\mu_0 J_0^2 \left(\frac{\beta_x - \beta_y}{2} \right) \nabla (r^2 \sin \theta \cos \theta) - \mu_0 J_0^2 \left(\frac{\beta_x + \beta_y}{2} \right) r \hat{\theta}.$$

Le premier terme sera compensé par un gradient de pression, alors que le second donnera lieu à une accélération angulaire. Si on néglige les forces visqueuses, on obtiendra un champ de vitesse tournant en sens antihoraire, puisque $\beta_x + \beta_y < 0$. C'est effectivement ce que montre la figure 4.14.

Dans une situation semblable, mais avec une surface libre sur le dessus, on obtiendrait un pompage d'Ekman (Guyon et al., 2001) : en raison de l'absence de frottement visqueux sur la surface du haut, les forces horizontales sont différentes dans le bas et dans le haut du système, ce qui déclenche une convection ascendante au centre et descendante aux bords. Toutefois, notre système ne dispose pas de frontière sans frottement.

On obtient néanmoins, comme le montrent les courbes de fréquence angulaire Ω sur la figure 4.15, un comportement analogue. En effet, bien que la force horizontale soit égale dans l'aluminium et dans le bain, ce dernier subit une plus grande accélération en raison de sa plus faible densité. Plus précisément, lorsque la vitesse est $U(r)$ dans l'aluminium, elle devrait être de $(\rho_a/\rho_e)U(r)$ dans le bain, selon notre modèle. Puisque la vitesse devrait avoir le même profil radial que la composante angulaire de la force magnétique, on s'attend à ce que $U(r) = \Omega r/L$, où Ω est une constante

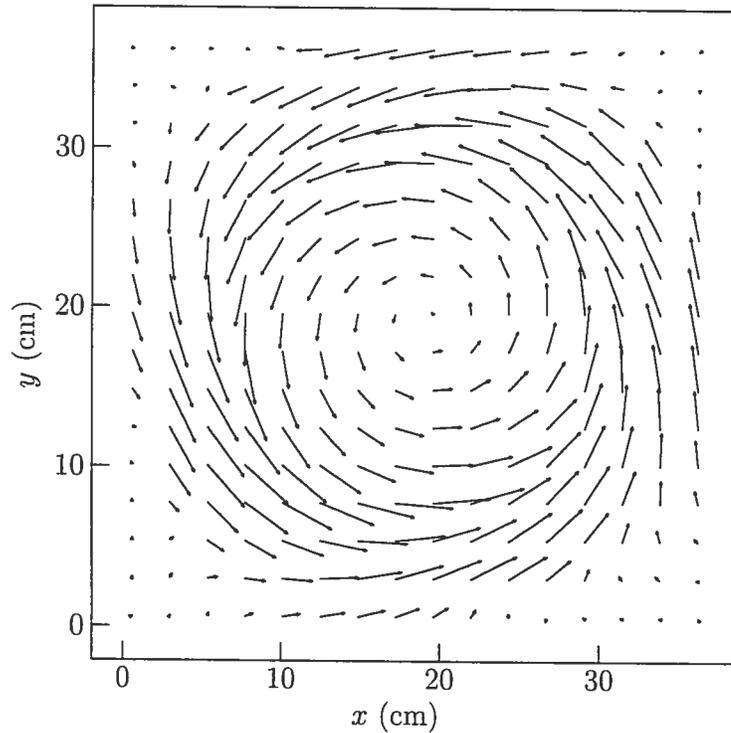
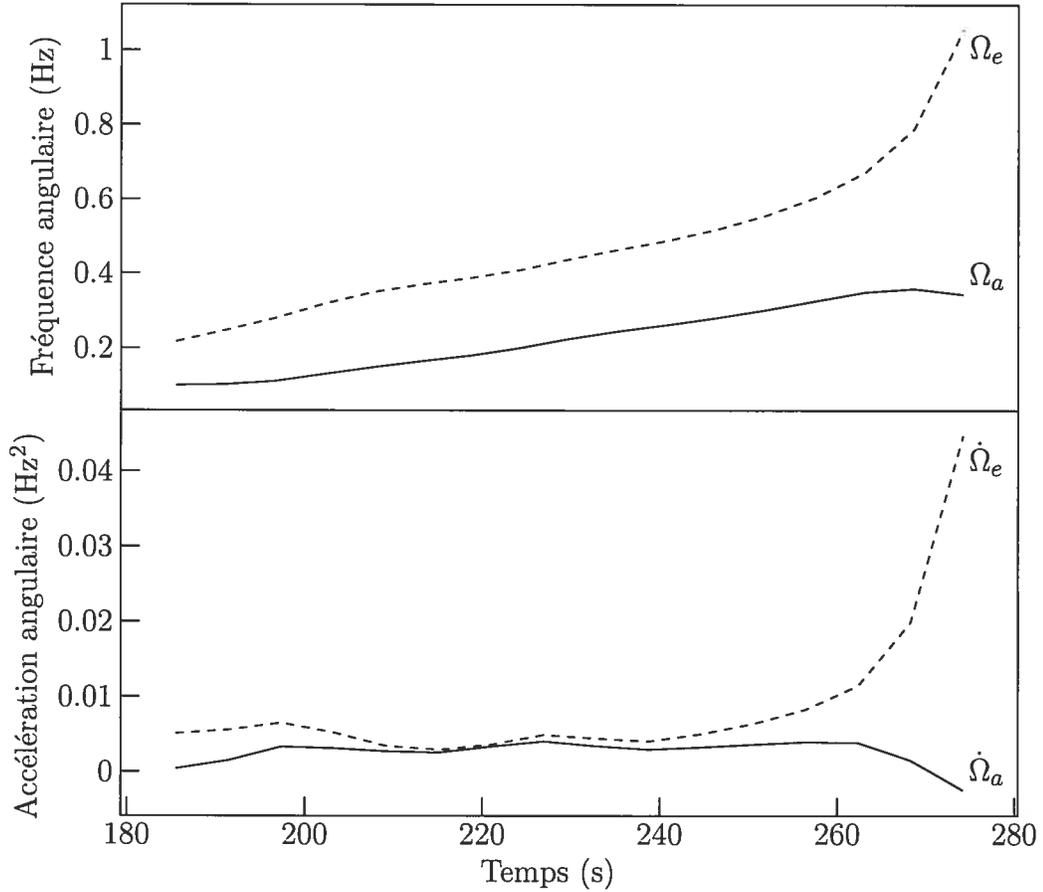


Figure 4.14 Coupe horizontale du champ de vitesse pour l'aspirateur MHD ($t = 259,4$ s)

spatiale. C'est encore une fois à peu près ce que montre la figure 4.14, sauf près des bords.

En pratique, la différence des fréquences de rotation (haut de la figure 4.15) est plus grande que le rapport ρ_a/ρ_e , car le système n'est pas complètement au repos au début de l'écoulement. On voit tout de même que l'accélération angulaire $\dot{\Omega}$ (bas de la figure 4.15) est supérieure dans le bain. Le rapport moyen de $\dot{\Omega}_e/\dot{\Omega}_a \approx 1,77$, significativement plus grand que $\rho_a/\rho_e \approx 1,1$, indique que d'autres forces déstabilisatrices agissent sur l'écoulement. Poussons l'analyse avec notre modèle simplifié pour les voir apparaître.

La force centrifuge engendrée par cette rotation est équilibrée par le gradient de la pression dynamique :



En haut : fréquence angulaire dans l'aluminium (Ω_a) et dans le bain (Ω_e). En bas : accélération angulaire. Pour $t > 260$ s, le système devient complètement instable.

Figure 4.15 Fréquence et accélération angulaires (aspirateur MHD)

$$p_d = \frac{1}{2}\rho U^2 = \begin{cases} \frac{1}{2}\rho_a\Omega^2 r^2 & \text{dans l'aluminium} \\ \frac{1}{2}\frac{\rho_a^2}{\rho_e}\Omega^2 r^2 & \text{dans le bain.} \end{cases}$$

Ainsi, la force nette vers le bas appliquée sur un anneau de rayon r et d'épaisseur dr sur l'interface est de

$$F_p = \left(\frac{\rho_a}{\rho_e} - 1\right)\pi\rho_a\Omega^2 r^3 dr.$$

Si les variations temporelles sont lentes, on peut considérer la forme de l'interface à l'état stationnaire, pour lequel la force F_p est compensée par la poussée d'Archimède vers le haut sur le même anneau :

$$P_A = -2\pi r [h(r) - h_0] \Delta\rho g dr,$$

où $h(r)$ est la hauteur de l'interface et h_0 , une position d'équilibre tenant compte de la conservation du volume. Puis, en posant $F_p = P_A$, on obtient :

$$h(r) = h_0 - \frac{\rho_a \Omega^2 r^2}{\rho_e 2g}. \quad (4.3)$$

On pourrait déterminer h_0 en exigeant la conservation du volume :

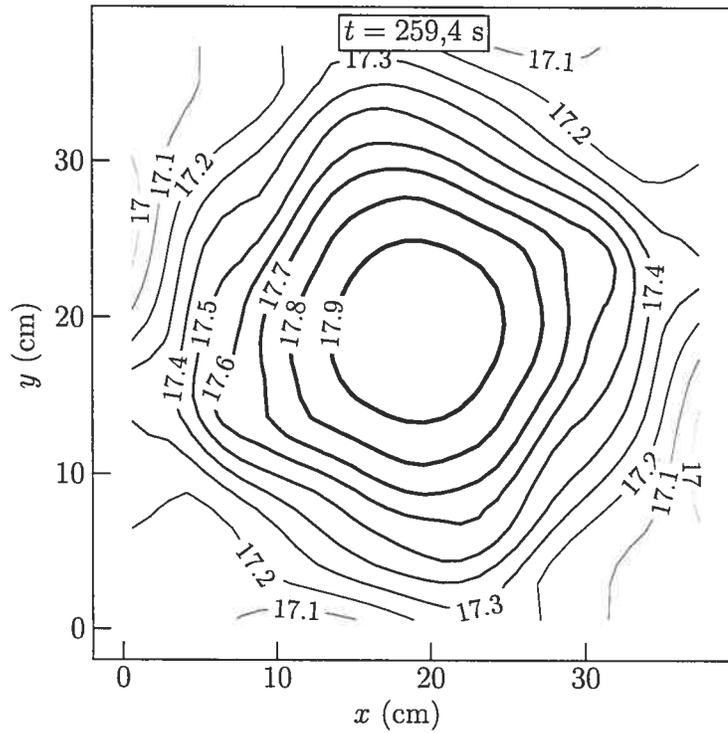
$$\iint_{\text{surface de la cuve}} h(r) dr = 0,$$

mais l'essentiel est de constater que (4.3) implique une forme parabolique inversée de l'interface, centrée au milieu de la cuve. C'est bien ce qu'on observe, du moins loin des bords où les forces visqueuses affectent l'écoulement, comme le montre la figure 4.16.

En réaction à ce déplacement de l'interface, le courant électrique sera dévié. Afin d'emprunter le chemin où la distance interpolaire est la plus courte, il se concentrera vers le centre de la cuve dans le bain électrolytique et se rétablira dans l'aluminium. La figure 4.17 illustre le phénomène à un temps ultérieur. Nous allons maintenant montrer que la croissance de ces courants horizontaux est en fait déstabilisatrice.

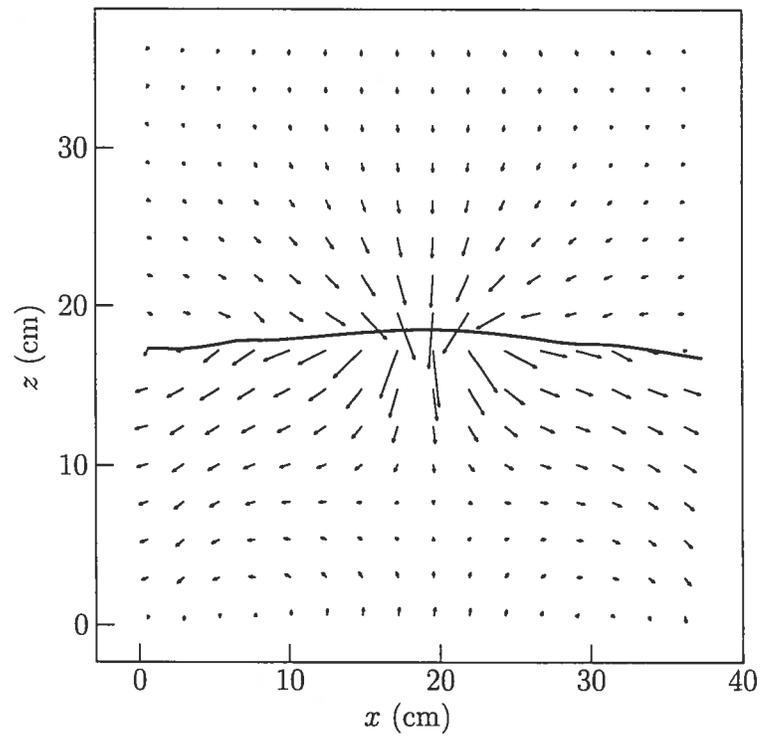
Ceux-ci interagissent en effet avec le champ magnétique vertical pour générer une force angulaire en sens antihoraire dans le bain, et en sens contraire dans l'aluminium, tel qu'illustré par la figure 4.18. Cela a pour effet d'accroître la différence de vitesse de rotation entre les deux milieux et, par le fait même, la différence de pression. Ainsi, la déformation de l'interface s'amplifie, ce qui accentue la déviation du courant électrique, et ainsi de suite. On assiste à un phénomène d'emballement. La figure 4.19 montre les derniers instants de la simulation, pendant lesquels l'aluminium gicle vers le haut.

En somme, nous avons montré que la configuration du champ magnétique exprimée par (4.2) est extrêmement instable, car la réponse des courants à la déformation de l'interface est déstabilisatrice.



Les valeurs des courbes de niveau sont exprimées en centimètres.

Figure 4.16 Position de l'interface pour l'aspirateur MHD ($t = 259,4 \text{ s}$)



Le champ vectoriel représente la déviation du courant électrique par rapport au courant vertical imposé.

Figure 4.17 Coupe verticale du courant électrique pour l'aspirateur MHD ($t = 271,2$ s)

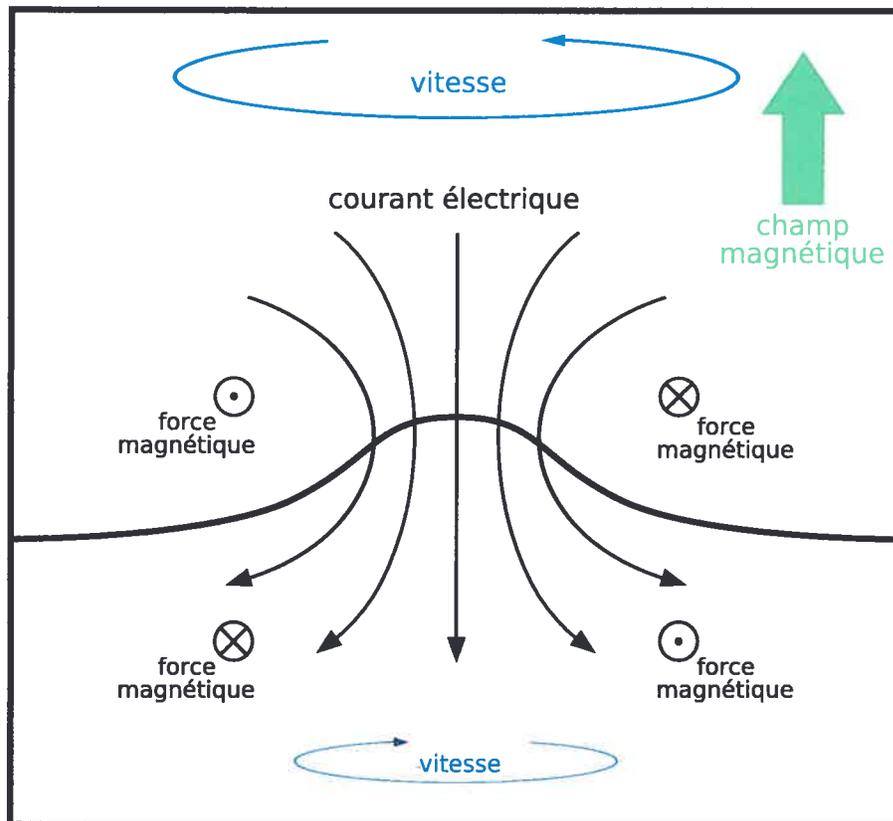
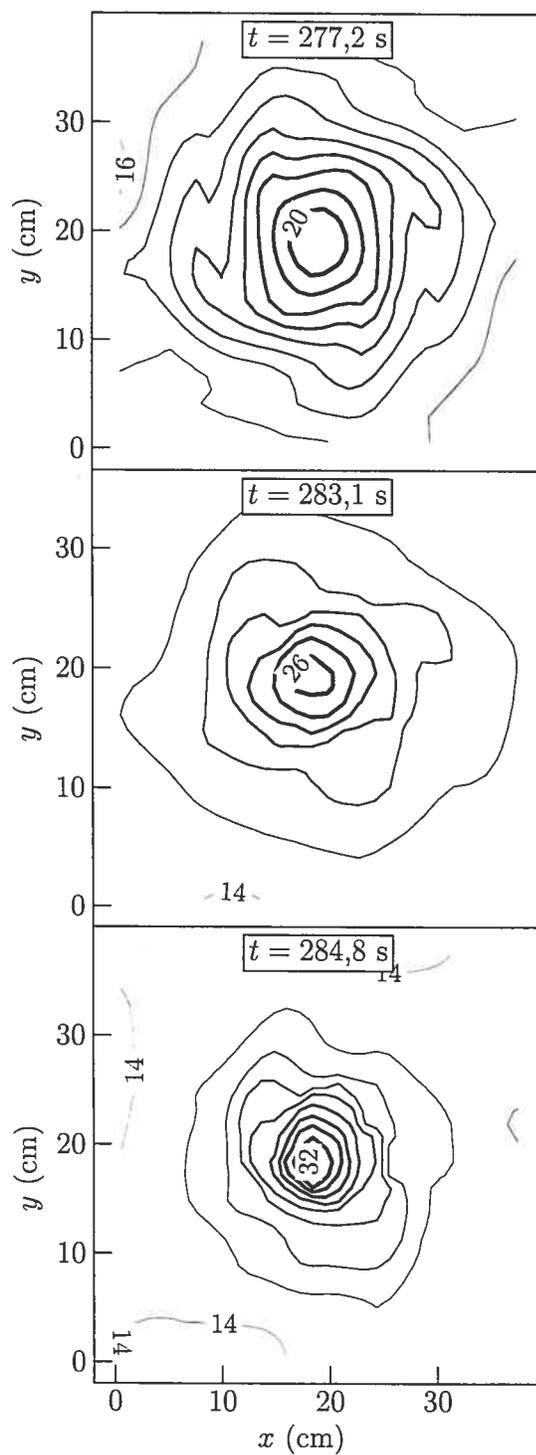


Figure 4.18 Influence déstabilisatrice des courants horizontaux.



Les valeurs des courbes de niveau sont exprimées en centimètres.

Figure 4.19 Aspiration de l'aluminium vers le haut

Chapitre 5

Conclusion

Nous avons étudié, au moyen de la simulation numérique, le problème des instabilités magnétohydrodynamiques (MHD) dans les cuves de production d'aluminium, et plus particulièrement celle qu'on appelle *le roulis* du métal liquide.

À cette fin, nous avons élaboré un algorithme numérique nouveau combinant la méthode des contours avec un modèle complètement dynamique tridimensionnel pour résoudre les équations de la MHD, avec une discrétisation en volumes finis. Afin de contourner le problème bien connu du champ magnétique numériquement non solénoïdal, nous avons dérivé et utilisé une équation d'évolution du potentiel magnétique vectoriel.

Les résultats de nos calculs ont confirmé que le roulis était une onde gravitationnelle perturbée par les forces magnétiques et ont illustré de quelle façon les différentes forces dictant l'écoulement interagissent. À cet effet, nous avons montré que les courants électriques induits par l'écoulement, négligés dans la plupart des analyses théoriques, avaient une influence stabilisatrice. Puis, nous avons confirmé, comme Gerbeau et al. (2001), la théorie de Sele (1977) selon laquelle le roulis devient instable pour un champ magnétique vertical trop intense.

Nous avons, par ailleurs, mis en relief une nouvelle instabilité par laquelle l'aluminium est aspiré par un vortex vers le haut de la cuve. Nous avons identifié les gradients horizontaux du champ magnétique ambiant comme étant à la source de cette instabilité, et expliqué le mécanisme de déstabilisation. Ce faisant, nous avons ensuite démontré que, en présence d'un champ magnétique vertical, la déviation des courants par la déformation de l'interface était déstabilisatrice.

Finalement, nos expériences numériques nous ont permis de mieux comprendre les instabilités dans la cuve de Hall-Héroult. Ajoutons pour terminer que, afin d'avoir une description complète des mécanismes physiques en jeu, il resterait à inclure un modèle de turbulence MHD tridimensionnelle dans nos équations, ainsi qu'à établir l'équation décrivant l'instabilité seulement et ses possibles solutions analytiques, ce qui fera l'objet d'un prochain travail.

Bibliographie

- Ai, D. K. (1985). The Hydrodynamics of the Hall–Heroult Cell. *Light Metals*, pages 593–607.
- Antille, J., Flueck, M. et Romerio, M. V. (1994). Steady Velocity Fields in Aluminium Reduction Cells Derived from Measurements of the Anodic Current Fluctuations. *Light Metals*, pages 305–312.
- Balay, S., Gropp, W. D., McInnes, L. C. et Smith, B. F. (2001). PETSc home page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A. et Zang, T. A. (1987). *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer–Verlag.
- Chaudry, M. H. (1993). *Open Channel Flow*. Prentice Hall, Engelwood Cliffs, New Jersey.
- Cowling, T. G. (1960). *Magnétohydrodynamique*. Dunod, Paris.
- Davidson, P. A. et Lindsay, R. I. (1998). Stability of interfacial waves in aluminium reduction cells. *J. Fluid Mech.*, 362:273–295.
- Dedner, A., Kemm, F., Kröner, D., Munz, C.-D. et Schnitzer, T. et al. (2002). Hyperbolic Divergence Cleaning for the MHD Equations. *J. Comput. Phys.*, pages 645–673.
- Dedner, A., Kröner, D., Rohde, C. et Wesenberg, M. (2003). Efficient Divergence Cleaning in Three-Dimensional MHD Simulations. *High Performance Computing in Science and Engineering '02*, edited by E. Krause and W. Jäger, pages 323–334.
- Drazin, P. G. et Reid, W. H. (1982). *Hydrodynamic Stability*. Cambridge University press.
- Evans, J. W., Zundelovich, Y. et Sharma, D. (1981). A Mathematical Model for Prediction of Currents Magnetic Fields, Melt Velocities, Melt Topography and Current Efficiency in Hall–Héroult Cells. *Metallurgical Transactions B*, 12B:353–360.

-
- Fearn, D. R. (2000). 4H MHD Lecture Notes.
<http://www.maths.gla.ac.uk/~drf/courses/mhd/mhd.htm>.
- Ferziger, J. H. et Perić, M. (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 3rd edition.
- Gerbeau, J.-F., Bris, C. L. et Lelievre, T. (2001). Simulations of MHD Flows with Moving Interfaces. *INRIA research report*, 4277.
- Gilman, P. A. (2000). Magnetohydrodynamic « Shallow Water » Equations for the Solar Tachocline. *The Astrophysical Journal*, pages L79-L82.
- Givry, J. P. (1967). Computer Calculation of Magnetic Effects in the Bath of Aluminium Cells. *Transactions of the Metallurgical Society of Aime*, 239:1161–1166.
- Grjotheim, K., Krohn, C., Malinovsky, M., Matiasovsky, K. et Thonstad, J. (1982). *Aluminum Electrolysis*. Aluminium-Verlag, Dusseldorf, 2nd edition.
- Guyon, E., Hulin, J.-P. et Petit, L. (2001). *Hydrodynamique physique*. Matière condensée / Savoirs Actuels. Nouvelle édition, revue et augmentée.
- LaCamera, A. F., Ziegler, D. P. et Kozarek, R. L. (1991). Magnetohydrodynamics in the Hall-Héroult Process, an Overview. *Magnetohydrodynamics in Process Metallurgy*, pages 91–98.
- Lauder, B. E. et Spalding, D. B. (1974). Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. , 3:269–289.
- Leboucher, L., Pericleous, K., Panaitescu, I. et Repetto, M. (1999). A finite-volume shallow layer method for the computation of MHD instabilities in an Aluminium Production Cell. *2nd Int. Conf. on CFD in the Minerals and Process Industries*, pages 335–338.
- LeVeque, R. J., Mihalas, D., Dorfi, E. et Mueller, E. (1998). *Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods for Astrophysical Fluid Flow, lecture notes*. O. Steiner and A. Gautschy, Springer-Verlag. 27th Saas-Fee Advanced Course Lecture Notes.
- Lympany, S. D. et Evans, J. W. (1983). The Hall-Héroult Cell : Some Design Alternatives Examined by a Mathematical Model. *Metallurgical Transactions B*, 14B:63–70.

-
- Mitchell, A. R. et Griffiths, D. F. (1980). *The Finite Difference Method in Partial Differential Equations*. Wiley.
- Moreau, R. et Evans, J. W. (1984). An Analysis of the Hydrodynamics of Aluminum Reduction Cells. *J. Electrochem. Soc.*, 131(10):2251–2259.
- Moreau, R. J. et Ziegler, D. (1986). Stability of Aluminum Cells – A New Approach. *Light Metals*, pages 359–364.
- Moreau, R. J. et Ziegler, D. (1988). The Moreau–Evans Hydrodynamic Model Applied to Actual Hall–Héroult Cells. *Metallurgical Transactions B*, 19B:737–744.
- Mori, K., Shiota, K., Urata, N. et Ikeuchi, H. (1976). The Surface Oscillation of Liquid Metal. *Light Metals*, 11:77–95.
- Osher, S. et Sethian, J. A. (1988). Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed : Algorithms Based on Hamilton–Jacobi Formulations. *J. Comp. Phys.*, 79:12–49.
- Pigny, S. et Moreau, R. (1992). Stability of fluid interfaces carrying an electric current in the presence of a magnetic field. *Eur. J. Mech*, 11(1).
- Potočnik, V. (1989). Modelling of metal-bath interface waves in Hall-Héroult cells. *Proceedings of the Metallurgical Society of the Canadian Institute of Mining and Metallurgy*.
- Potočnik, V. (1991). Principles of MHD Design of Aluminum Electrolysis Cells. *Magnetohydrodynamics in Process Metallurgy*, pages 99–105.
- Reichl, L. E. (1998). *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 2nd edition.
- Rider, W. J. (1995). Approximate projection methods for incompressible flows : Implementation, variants and robustness. *Technical Report, Los Alamos National Laboratory*.
- Roache, P. (1972). *Computational methods in Fluid Dynamics*. Hermosa Publishers, Albuquerque.
- Saad, Y. (2000). Iterative methods for sparse linear systems.
<http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>.

-
- Saint-Venant, A. J. C. B. (1871). Théorie du mouvement non permanent des eaux avec application aux crues de rivières et à l'introduction des marées dans leurs lits. *Comptes rendus des séances de l'Académie des sciences*, pages 147-154,237-240.
- Segatz, M. et Droste, C. (1994). Analysis of Magneto-hydrodynamic Instabilities in Aluminum Reduction Cells. *Light Metals*, pages 313–322.
- Segatz, M., Vogelsang, D., Droste, C. et Baekler, P. (1993). Modelling of Transient Magneto-Hydrodynamic Phenomena in Hall-Héroult Cells. *Light Metals*, pages 361–368.
- Sele, T. (1977). Instabilities of the Metal Surface in Electrolytic Alumina Reduction Cells. *Metallurgical Transactions B*, 8B:613–618.
- Shu, C. W. et Osher, S. (1989). Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. *J. Comp. Phys.*, 83:32–78.
- Sneyd, A. D. (1985). Stability of fluid layers carrying a normal electric current. *J. Fluid Mech.*, 156:223–236.
- Sneyd, A. D. (1992). Interfacial instabilities in aluminium reduction cells. *J. Fluid Mech.*, 236:111–126.
- Sneyd, A. D. et Wang, A. (1994). Interfacial instability due to MHD mode coupling in aluminium reduction cells. .
- Sussman, M. et Fatemi, E. (1999). An efficient, interface preserving level set re-distancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(4):1165–1191.
- Sussman, M., Smereka, P. et Osher, S. (1994). A Levelset Approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comp. Phys.*, 114:146–159.
- Urata, N. (1985). Magnetics and Metal Pad Instability. *Light Metals*, pages 581–591.
- Urata, N., Mori, K. et Ikeuchi, H. (1976). Behavior of bath and molten metal in aluminum electrolytic cell. *J. Japan Inst. Light Metals*, 26(11):573–583.
- Valdettaro, L. (1992). *Simulations numériques d'écoulements magnétohydrodynamiques compressibles en géométrie sphérique*. Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier, Toulouse, France. CERFACS, Report TH/IT/92/10.

Wangsness, R. K. (1986). *Electromagnetic Fields*. John Wiley and Sons, New York, 2nd edition.

Ziegler, D. P. (1993). Stability of Metal/Electrolyte Interface in Hall-Héroult Cells : Effect of the Steady Velocity. *Metallurgical Transactions B*, 24B:899-906.

A Acte de conférence à CFD 2004

Les pages suivantes incluent un acte de conférence publié :

D. Munger et A. Vincent, 2004, *Numerical Simulation of the Magnetohydrodynamic Instabilities in Aluminium Reduction Cells*, 12th Annual Conference of the CFD Society of Canada, « CFD 2002 », Ottawa, Canada, 9–11 mai 2004, présentation le 11 mai 2004.

Numerical Simulation of the Magnetohydrodynamic Instabilities in Aluminium Reduction Cells

D. Munger and A. Vincent

Département de physique, Université de Montréal, Montréal, QC, H3C 3J7, Canada

ABSTRACT

We propose a new numerical method to simulate three-dimensional non-stationary instabilities at the aluminium-electrolyte interface in aluminium production cells. The algorithm uses a finite volumes second order semi-implicit scheme and the GMRES-SSOR technique. To solve the exact position of the interface, we use the level set technique. We found that the instability occurs under the form of a roll with velocities of about 5 cm/s . We show that the onset of instability depends on the the background magnetic field's intensity. This is in agreement with available observations on operational industrial production cells but also with simulations from authors using different numerical techniques. However, we pushed further the developpment of the instability and found a roll period of a few seconds whereas the kinetic energy also oscillates though with a much larger 60 s period. Long term stability of this last regime is still an open question.

1 INTRODUCTION

Aluminium electrolysis, often referred to as aluminium reduction or Hall-Héroult process after its inventors, basically consists in its extraction from alumina, an aluminium oxide, dissolved into molten cryolite. The production of 1 kg of aluminium requires approximately 2 kg of alumina and 6.5 kWh of electricity. An intense current of the order of 400 kA is thus carried out downward through the so-called aluminium reduction cell, in which the thin electrolytic bath lies over a liquid aluminium layer. The cell is topped by carbon anodes issuing the current and bounded at the bottom by a large carbon cathode. Typical dimensions are showed in Figure 1.

Multiple cells, connected together with a conductor bus, are grouped in a large room called smelter. Because of its great intensity, the electric current flowing

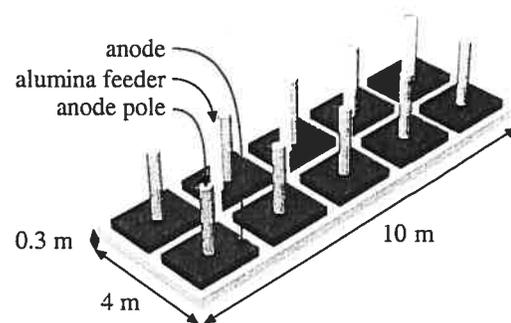


Figure 1: The aluminium reduction cell showing carbon anodes immersed into the electrolytic bath, itself lying over liquid aluminium.

through the bus induces an important magnetic field of the order of 10 mT throughout the smelter, thus rising up strong magnetic forces inside the fluids. These forces are indeed required to maintain a steady stirring, which redistributes supplied alumina in the electrolytic bath. Sometimes, these eddies become unstable and result in motions of the aluminium-electrolyte interface, hence the aluminium surface might short-circuit the anode. Therefore, the electrolytic bath layer must be kept thick enough to avoid this critical situation. However, its conductivity is nearly 10^4 times smaller than that of aluminium, so this is where the main power losses occur. In order to make the process more effective, one would wish to make the electrolytic bath as thin as possible.

These magnetohydrodynamic (MHD) instabilities have been extensively studied by several authors. By means of linear analysis, Moreau and Ziegler [2] derived a dispersion relation and showed that magnetic forces may generate large scale waves, while Sneyd [5] showed that the stability of the system mostly depends on the external magnetic field, due to far current sources. Potočnik [3] also performed finite volume

simulations but using the PHOENIX industrial code. Recently, Gerbeau [13] has also done simulations using finite elements and observed the well-known metal pad roll.

On the practical level, MHD instabilities are usually avoided with using real-time control of the current in individual anodes, therefore are seldom observed nowadays. Besides, the physical mechanism driving the stirring and leading to the instability remains unknown. The purpose of our work is to provide a better understanding of them.

We focus on the largest scales of interfacial motion, that is, the ones due to the magnetic forces, leaving aside shear and capillarity waves. Hypothetical triggers include the escape of carbon dioxide bubbles resulting from electrolysis, current gaps in inter-anodic channels, and horizontal currents near the interface.

2 PHYSICAL MODEL

2.1 Idealized System

Figure 2(a) shows a cut of the actual aluminium reduction cell with its typical dimensions. In our model, the anodes are approximated to span over the whole top of the cell, the bottom cathode is assumed to be completely flat, and we restrict the simulation domain to a small horizontal portion of the cell, as illustrated by Figure 2(b). The latter limitation restricts the size of the largest scales.

We do not take into account the effects of gas bubbles nor of thermal buoyancy forces, which are orders of magnitude weaker than the magnetic forces.

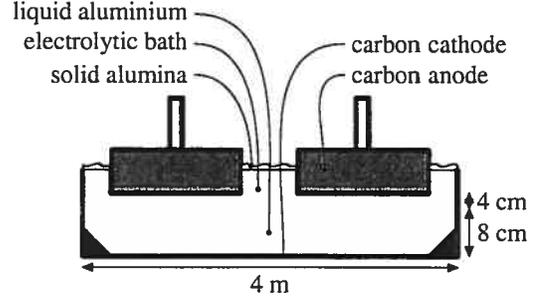
Except for the electrical conductivity, both fluid share similar physical properties. Magnetic induction variations propagate almost instantaneously in the electrolytic bath because of its low conductivity. Since of the reduced size of the system, we also chose to study the behavior fluids with a higher conductivity.

2.2 Conservation Equations

We are solving the conservation equations for incompressible magnetohydrodynamics [1]. The velocity field \mathbf{v} and the magnetic induction field \mathbf{B} are advanced according to the following:

- momentum transport:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - 2\mu \mathbf{D} + p \hat{\mathbf{n}}) - \rho g \hat{\mathbf{z}} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (1)$$



(a) Actual cell.



(b) Idealized cell.

Figure 2: Idealization of the aluminium reduction cell.

where μ is the dynamic viscosity, \mathbf{D} is the strain rate tensor whose components are given by

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right),$$

and $\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{B} / \mu_0$ is the electric current;

- mass conservation or incompressibility:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0;$$

- magnetic induction transport, which has been derived using Maxwell's equations together with Ohm's law:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{v}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (2)$$

where $\eta = 1/\mu_0 \sigma$ is the magnetic diffusivity and directly depends on the electrical conductivity σ of the medium.

Let's note that initial conditions on the magnetic induction has to satisfy $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, which simply states that there are no magnetic monopoles.

2.3 Scaling

The different transport mechanisms involved in the conservation equations act on different scales. Choos-

ing the system's height and the magnetic forces propagation time as the characteristic length and time, we obtain the following non-dimensioned equations from (1) and (2):

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \frac{2}{\text{Re}} \mathbf{D} + p' \right) - \frac{\rho - \rho_0}{\text{Fr}^2} \hat{\mathbf{z}} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}$$

and

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{v}) + \frac{1}{\text{Lu}} \nabla^2 \mathbf{B},$$

where p' is the variation from hydrostatic pressure and the dimensionless numbers are explained in Table 1, with the related characteristic times in Table 2.

Number	Meaning	Value
Froude (Fr)	τ_g / τ_u	2×10^{-1}
Reynolds (Re)	τ_v / τ_u	10^3
Lundqvist (Lu)	τ_η / τ_m	$1, 10^{-2}$

Table 1: Dimensionless numbers of the simulated system. The first Lundqvist number refers to aluminium, while the second applies to the electrolytic bath. The characteristic times τ_g , τ_u , τ_v and τ_η are defined in Table 2.

Mechanism	Characteristic time
magnetic diffusion	$\tau_\eta = L^2 / \eta$
buoyancy	$\tau_g = \sqrt{\rho L / \Delta \rho g}$
magnetic force	$\tau_m = \sqrt{\rho L / J_0 B_0}$
inertia	$\tau_u = L / U$
viscous forces (turbulent)	$\tau_v = L^2 / \nu$

Table 2: Definitions for the characteristic times of the transport mechanisms. The ratio of the mass density difference $\Delta \rho = \rho_a - \rho_e$ to the mass of the electrolytic bath ρ_e is about 9 %. The latter is has been chosen as the reference density.

2.4 Boundary Conditions

The boundary conditions on the velocity field are given by

$$\mathbf{v}|_{\partial \Omega} = 0,$$

namely solid walls with no slip.

Following Descloux et al. [6], we assume that there is no current disturbance on the cell's walls, i.e. $\nabla \times \mathbf{b} = 0$, where $\mathbf{b} = \mathbf{B} - \mathbf{B}_0$, and \mathbf{B}_0 comprises the background magnetic field, due to distant currents, and the field induced by the local steady vertical current.

This condition is satisfied by the following stronger assumption, which is the boundary condition we use:

$$\frac{\partial b_i}{\partial x_j} \Big|_{\partial \Omega} = 0,$$

3 NUMERICAL MODEL

3.1 Spatial Discretization

In order to end up with an exact projection without grid decoupling, we chose to define the discretized vector and scalar fields on staggered grids, as shown in Figure 3.

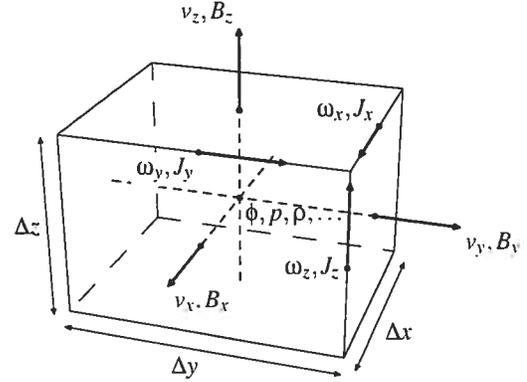


Figure 3: Staggered grids control volume. Scalar quantities are defined at the center of the volume, while primary vectors (\mathbf{v} , \mathbf{B}) are defined on the center of the faces. Vectors that are computed from the curl of the latter are defined on the middle of the edges.

All discrete derivatives are second order centered

3.2 Finite Volumes Method

Adapting the method described by Ferziger and Perić [14], all previously stated time evolution equations are written in the following form:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q_f - \nabla \cdot \mathbf{J}_f,$$

where f is the density of a generic transported quantity, Q_f is the production rate of f , and \mathbf{J}_f is the current of f . Integrating over a control volume \mathcal{V} and normalizing by its volume $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ results in

$$\frac{d\bar{f}}{dt} = \bar{Q}_f - \frac{1}{V} \oint_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{J}_f \cdot d\mathbf{a}, \quad (3)$$

where $\bar{\cdot}$ denotes spatial averaging over the control volume. In the case of a rectangular volume, the last integral may be written as

$$\frac{1}{V} \oint_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{J}_f \cdot d\mathbf{a} = \sum_{k=1}^3 \frac{\overline{J_{f,k}^+} - \overline{J_{f,k}^-}}{\Delta x_k} \hat{\mathbf{x}}_k,$$

where $\overline{J_{f,k}^\pm}$ denotes the spatial average of the k^{th} component of J_f over the surface with normal $\pm \hat{\mathbf{x}}_k$, as illustrated by Figure 4.

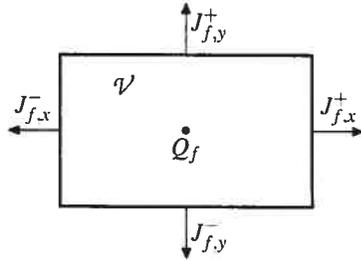


Figure 4: Two-dimensional illustration of the finite volumes method.

Denoting the averaging operators along each axis by $\mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y, \mathcal{M}_z$ and the reconstruction operators by $\mathcal{R}_x = \mathcal{M}_x^{-1}, \mathcal{R}_y = \mathcal{M}_y^{-1}, \mathcal{R}_z = \mathcal{M}_z^{-1}$, we may rewrite (3) as

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{M}_x \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z} \frac{\partial f}{\partial t} &= \mathcal{M}_x \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z Q_f - \frac{\mathcal{M}_y \mathcal{M}_z (J_{f,x}^+ - J_{f,x}^-)}{\Delta x} \\ &\quad - \frac{\mathcal{M}_z \mathcal{M}_x (J_{f,y}^+ - J_{f,y}^-)}{\Delta y} - \frac{\mathcal{M}_x \mathcal{M}_y (J_{f,z}^+ - J_{f,z}^-)}{\Delta z}. \end{aligned}$$

Then, assuming that operators against different axes commute, let's apply reconstruction $\mathcal{R}_x, \mathcal{R}_y, \mathcal{R}_z$ to the last equation:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= Q_f - \frac{\mathcal{R}_x (J_{f,x}^+ - J_{f,x}^-)}{\Delta x} - \frac{\mathcal{R}_y (J_{f,y}^+ - J_{f,y}^-)}{\Delta y} \\ &\quad - \frac{\mathcal{R}_z (J_{f,z}^+ - J_{f,z}^-)}{\Delta z} \quad (4) \end{aligned}$$

Using this formulation allows avoiding the unwanted numerical diffusion due to the successive application of the discretized versions of the averaging and reconstruction operators, while keeping the flux terms in a physically meaningful form.

Standard third order reconstruction stencils are constructed in a manner similar to that described in [9] for a regular grid. Without any flux control, the formulation shown in (4) is thus equivalent to discretizing the divergence operator with fourth order finite differences.

3.3 Time Marching Scheme

Since we are tracking waves, we have adopted a stable non-dispersive second order *Adams–Bashforth* (AB2) scheme:

$$f^{(n+1)} = f^{(n)} + \Delta t \left\{ \frac{3}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(n)} - \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(n-1)} \right\},$$

to advance all but the diffusion terms which are implicitly solved with a backward Euler (BE) scheme:

$$f^{(n+1)} = f^{(n)} + \Delta t \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]^{(n+1)},$$

so that boundary conditions are properly applied, allowing in the same time large diffusivity coefficients, such as the actual inverse Lundqvist numbers. We use the generalized minimal residuals (GMRES) preconditioned with the symmetric successive overrelaxation (SSOR) method from the Petsc [15] library as the implicit solver.

4 LEVEL SET FORMULATION

4.1 Overview of the method

Following [7], we define a level set function $\phi(\mathbf{r})$ whose purpose is to implicitly define the position of the interface between the two fluids, as shown in Figure 5. Let's mention that this technique is particularly well suitable for including surface tension effects.

Let Ω be the spatial domain where liquid aluminium is present. Then, $\phi(\mathbf{r}) > 0$ for all $\mathbf{r} \in \Omega$, while $\phi(\mathbf{r}) = 0$ defines the boundary $\partial\Omega$ and $\phi(\mathbf{r}) < 0$ elsewhere.

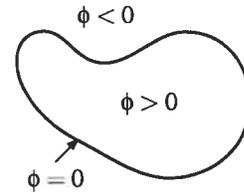


Figure 5: Example of usage of the level set function ϕ .

Therefore, we can compute the value of any fluid-dependant physical property in the following manner:

$$\rho = H(\phi) \rho_a + [1 - H(\phi)] \rho_e$$

where the mass density ρ has been chosen to illustrate the idea, the subscripts a and e referring to aluminium

and electrolytic bath respectively, and

$$H(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi \geq 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

is the usual Heavyside function. Since the interface is subject to advection by the velocity field, the level set function has to be transported according to

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}\phi), \quad (6)$$

which ensures that the zero-level of ϕ will move at a velocity \mathbf{v}

4.2 Discretization

A smooth volume-preserving discretization of (5) is provided by

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi > \varepsilon \\ 0 & \text{if } \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\varepsilon}\right) \right] & \text{otherwise} \end{cases},$$

where ε is the transition length, i.e. the *width* of the interface (see Figure 6. The sign function is accordingly discretized:

$$\text{sign}_\varepsilon(\phi) = 2H_\varepsilon(\phi) - 1.$$

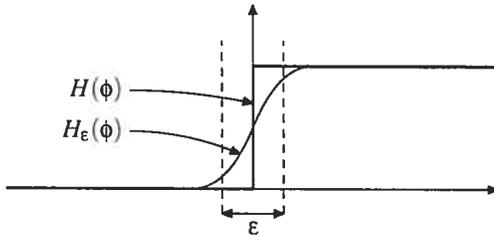


Figure 6: Smooth volume-preserving discretization of the Heavyside function.

Since (6) comprises no diffusion term, ϕ will eventually become pretty rippled with overvalued derivatives and lead to mistransport of the interface. To overcome this difficulty, ϕ is chosen to be locally kept as a signed distance function around the interface, that is

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi_0) (1 - |\nabla \phi|), \quad (7)$$

is solved iteratively after each time step with initial condition $\phi = \phi_0$, using second order ENO spatial

derivatives and a second order Runge–Kutta time stepping scheme. The parameter τ is an artificial time variable, while $\text{sign}(x)$ is just the sign of x or zero when x is null. The purpose of $\text{sign}(\phi_0)$ in (7) is not to modify the zero-level, while making ϕ a *signed* distance function. Even though the exact resolution preserves the position of the interface, the discretized form might not conserve the volume enclosed by $\phi = 0$. This problem is addressed in [12] with a variational approach, involving an additional step to after solving (7) over an artificial time length $\Delta\tau$, which consists in adding the following correction to the newly computed ϕ :

$$\Delta\tau \lambda H'_\varepsilon(\phi_0) |\nabla \phi|,$$

where H'_ε is simply the derivative of H_ε , and

$$\lambda = \frac{\int_{\mathcal{V}} H'_\varepsilon(\phi_0) \frac{\phi - \phi_0}{\Delta\tau} dV}{\int_{\mathcal{V}} [H'_\varepsilon(\phi_0)]^2 |\nabla \phi_0| dV},$$

where the integral is taken over a unit control volume.

5 ALGORITHM

All variables are advanced using the following algorithm:

1. advance the level set function ϕ with AB2;
2. advance the momentum $\rho\mathbf{v}$ partially with AB2 (omitting the viscous term and the pressure gradient);
3. implicitly solve for the viscous term with BE;
4. make the Hodge–Helmoltz projection of the velocity field \mathbf{v} into the space of solenoidal fields (GMRES);
5. advance the magnetic induction \mathbf{B} partially with AB2 (omitting the diffusion term);
6. implicitly solve for magnetic diffusion with BE;
7. project \mathbf{B} into the space of solenoidal fields (GMRES).

We stress the fact that even though evolving (2) from initial conditions with zero divergence will preserve this property, it may not remain so while evolving the discretized equation. Therefore, step 7 has been explicitly appended to the algorithm, as suggested by LeVeque [10]. We have indeed run tests without this projection, which revealed the divergence of \mathbf{B} to be 10 times larger than when using the projection. Moreover, it caused the magnetic energy to grow unexpectedly. This problem has been fixed by using step 7.

6 SIMULATION RESULTS

6.1 Initial conditions

Simulations were performed using null initial velocity and no magnetic induction disturbance, with a sinusoidal interface shape along the x axis, as depicted in Figure 7(a). We used a 5×10^{-4} time step, and a grid with a $32 \times 32 \times 32$ resolution. The same simulations were also performed using a doubled resolution and yielded the same results.

6.2 Metal Pad Roll Regime

Let's consider the simulation with a 32 mT background magnetic induction. First, we observed a few straight oscillations of the interface, driven by gravitational forces, with a 3.75 s period. Then a lateral motion of the interface, due to the magnetic forces takes place: this is the metal pad roll (see [4]), observed in operational aluminium reduction cells. Figure 7 illustrates this behavior after a 47.8 s offset. As expected, the roll frequency is the same as in the gravity-driven state. A kinetic energy plot is shown in Figure 8. The decay of the curve is due to dissipation by viscosity forces as well as by transfer to magnetic energy, which is in turn dissipated by means of magnetic diffusion.

During this roll regime, the velocity was about 2.5 cm/s, which is around the lower bound of what is actually observed in aluminium reduction cells, while the magnetic induction and the current disturbances were of about 5 % of background and 2 times that imposed respectively.

Multiple runs were taken upon varying the intensity of the background magnetic field B_0 . Depending on its value, the metal pad roll either:

- damped off (weak B_0);
- lead to instability (strong B_0);
- entered a transitional vortex transport state (intermediate B_0 strength).

6.3 Vortex Transport Regime

When the background magnetic field's magnitude lies within a critical range around 50 mT, instead of damping or becoming unstable, the metal pad roll turns into a different regime in which a small vortex is slowly transported around the cell, with a period of approximately 60 s. Figure 9 shows the evolution of the ki-

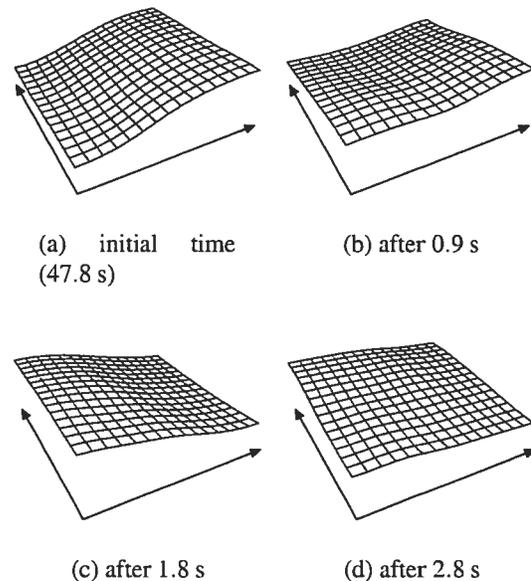


Figure 7: Stable metal pad roll with period of about 3.75 s. The z -scale has been amplified 12 times to make the interface shape changes more apparent. After 4 s, the interface is tilted the same way as in its initial state, with decreased amplitude.

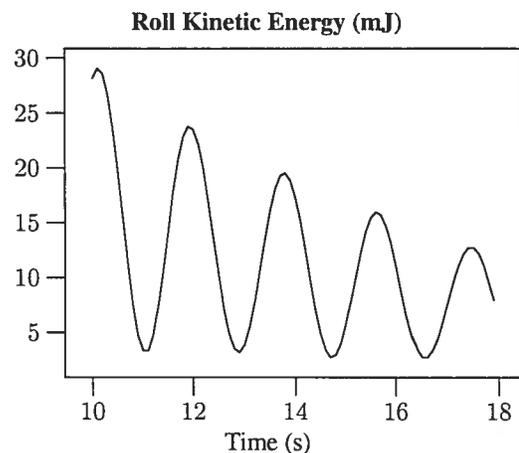


Figure 8: Evolution of the kinetic energy during the metal pad roll, showing the approximate 3.75 s period. Valleys correspond to states shown in Figures 7(a) and 7(c).

netic energy during this regime. The dashed line, plotted from results of a simulation not using the projection of the magnetic induction into solenoidal fields (step 7 of algorithm), shows a behavior different from that obtained when using the complete algorithm. This shows that to properly simulate the vortex transport, we need now a scheme that ensures $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ exactly.

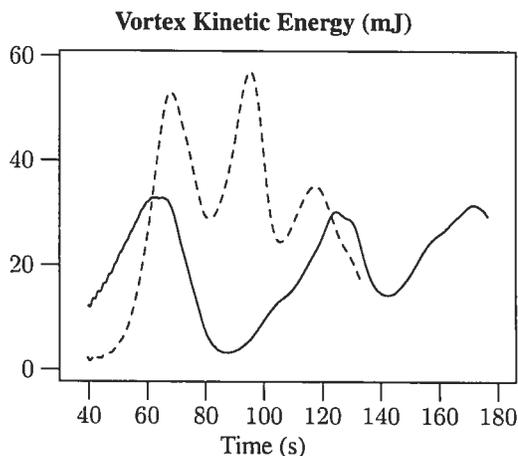


Figure 9: Evolution of the kinetic energy during the vortex transport state, showing a much longer period than that of the metal pad roll. The dashed line was obtained when not using the magnetic induction projection. Comparison to Figure 8 emphasizes the time scale difference with the metal pad roll.

The computed velocities average around 15 cm/s, which is the same order as that usually observed stable cells. The magnetic induction disturbance had a magnitude over 10 % of the background value, while the current disturbance intensity was around 8 times the imposed current. These values have not been observed in actual aluminium reduction cells, since the process is usually stopped as soon as the metal pad roll begins.

7 CONCLUSIONS AND OPEN QUESTIONS

We are currently investigating this wave-like behavior, which has not been the subject of any research yet. It seems to constitute a transition to a turbulent state. Whether it is stable or it will damp away after a transient time is an open question.

We have observed that straight oscillations of the metal pad tend to turn into a regular roll, which either damps, becomes unstable, or lead to a vortex transport state, depending on the magnitude of the background magnetic field.

We also argued that using an improper numerical scheme may lead to quantitatively inexact description of the vortex transport regime. To impose a numerically null divergence of the magnetic induction, we are currently working towards a formulation of the equations in terms of the magnetic vector potential, such that the following discretized equations will implicitly ensure $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$.

Future developments will also include:

- better understanding the mechanism of vortex energy transfer;
- investigating the more realistic turbulent stirring in a stable aluminium reduction cell.

ACKNOWLEDGMENTS

This research is supported by *Alcan International Limited*, joint with Alcan's *Arvida Research and Development Center of Canada*. Most of the calculations were performed using computers from the *Réseau québécois de calcul haute performance (RQCHP)*.

REFERENCES

- [1] T. G. Cowling, 1960, *Magnétohydrodynamique*, Dunod, Paris.
- [2] R. J. Moreau and D. Ziegler, 1986, *Stability of Aluminum Cells – A New Approach*, *Light Metals* 1986, pp. 359–364.
- [3] V. Potočnik, 1989, *Modelling of metal-bath interface waves in Hall-Héroult cells*, *Proceedings of the Metallurgical Society of the Canadian Institute of Mining and Metallurgy*.
- [4] A. F. LaCamera, D. P. Ziegler, R. L. Kozarek, 1991, *Magnetohydrodynamics in the Hall-Héroult Process, an Overview*, *Magnetohydrodynamics in Process Metallurgy* 1991, pp. 91–98.
- [5] A. D. Sneyd, 1992, *Interfacial instabilities in aluminium reduction cells*, *J. Fluid Mech.*, vol. 236, pp. 111–126.
- [6] J. Descloux, M. Flueck and M. V. Romerio, 1994, *Stability in Aluminium Reduction Cells: A spectral Problem Solved By An Iterative Procedure*, *Light Metals* 1994, pp. 275–281.
- [7] M. Sussman, P. Smereka and S. Osher, 1994, *A Levelset Approach for computing solutions to incompressible two-phase flow*, *J. Comp. Phys.*, vol. 114, pp. 146–159.

-
- [8] H.-K. Zhao, T. Chan, B. Merriman and S. Osher, 1996, A Variational Level Set Approach to Multi-phase Motion, *J. Comput. Phys.*, v. 127, pp. 179–195.
- [9] C.-W. Shu, 1998, Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, in *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*, B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu and E. Tadmor (Editor: A. Quarteroni), *Lecture Notes in Mathematics*, volume 1697, Springer, pp. 325–432.
- [10] R. J. LeVeque, 1998, *Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods for Astrophysical Fluid Flow*, lecture notes, as appeared in *Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow*, by R. J. LeVeque, D. Mihalas, E. Dorfi, and E. Mueller, 27th Saas-Fee Advanced Course Lecture Notes, Edited by O. Steiner and A. Gautschy, Springer-Verlag, 1998.
- [11] M. Sussman, A.S. Almgren, J.B. Bell, P. Colella, L. Howell, and M. Welcome, 1999, An adaptive level set approach for incompressible two-phase flow, *J. Comp. Phys.*, Volume 148, pp. 81–124.
- [12] M. Sussman and E. Fatemi, 1999, An efficient, interface preserving level set re-distancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow, *SIAM J. Sci. Comput.*, Volume 20, number 4, pp 1165–1191.
- [13] J.-F. Gerbeau, 2001, *Simulations of MHD Flows with Moving Interfaces*, INRIA research report.
- [14] J. H. Ferziger and M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3rd edition, 2002, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- [15] Satish Balay and William D. Gropp and Lois C. McInnes and Barry F. Smith, 2001, PETSc home page, <http://www.mcs.anl.gov/petsc>, unpublished.

