



Ahmed Zabana University Center of Relizane



Industrial Engineering and Sustainable Development Laboratory.

**Revue
des Matériaux
&
Energies Renouvelables**

ISSN-Online: 2661-7595

Volume 4, Issue 1 (January 2021)



Reacherch Review of Sciences and Technologies

Sommaire:

Numerical Investigation of Free Convection in Conical Annular Space with Discrete Heat Surface.....**1**

Mohamed A MEDEBBER^{1,2,}, Belkacem OULD SAID¹, Noureddine Retiel¹. Abderrahmane AISSA²*

Problem solving product distribution in a supply chain using a multi-criteria method.....**8**

Yachba Khadidja^{1}, Mankour Ikram².*

Performance evaluation of concrete incorporating granite powder as partial substitution of cement in aggressive environments.....**22**

Hamid Sellaf^{1,2}, Hadj Mostafa Adda³

Etude structurales et électroniques du ZnO pure et dopé par le Fluor.....**29**

Beloufa Nabil^{a}, Mebarki Djallel^a, Chercheb Youcef^c, Bekheira Samir^b*

L'utilisation de l'algorithme Génétique dans l'optimisation de la composition chimique de la vase issue du Dragage**38**

Marouf Hafida^{1}, Semcha Abdelaziz², Mahmoudi Nour-Eddine³*

Editorial:

This issue presents articles that illustrate the diversity of research activity and development carried out on materials and renewable energies, and reflect the spirit with which we find the fruits of our researchers and PhD students. Our goal is to federate scientific actions

on materials and renewable energies to ensure a link between the academic and industrial communities.

Prof. MAHMOUDI. N

Editorial:

Ce numéro présente des articles qui illustrent la diversité d'activité de recherche et de développement menés sur les matériaux et les énergies renouvelables, et reflètent bien l'esprit avec lequel l'on trouve les fruits de nos chercheurs et thésards. Notre but est de fédérer les actions scientifiques sur les matériaux et les énergies renouvelables pour assurer un lien entre les communautés académiques et industrielles.

Prof. MAHMOUDI. N



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : www.cu-relizane.dz

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Open
Access

NUMERICAL INVESTIGATION OF FREE CONVECTION IN CONICAL ANNULAR SPACE WITH DISCRETE HEAT SURFACE

Mohamed A MEDEBBER^{1,2,*}, Belkacem OULD SAID¹, Nouredine Retiel¹, Abderrahmane AISSA²

¹ Abdelhamid Ibn Badis University, Laboratory Numerical and Experimental Modeling of Mechanical phenomena, Mechanical Engineering Department, , Mostaganem, Algeria.

² Mustapha stambouli University, Mechanical Engineering Departments, Mascara, Algeria

ABSTRACT

Natural convection heat transfer in a vertical conical annular space with discrete heat sources is investigated numerically. The heating sources is maintained at the middle of the inner wall, while the top and bottom walls are considered adiabatic, the outer wall is kept at a lower temperature, and the non-heated parts of the horizontally wall are considered adiabatic. The steady-state continuity, Navier–Stokes and energy equations were discretized using the control volume method and solved numerically via the SIMPLER algorithm. The result shows that the discrete heat sources significantly altered the temperature distribution and the flow patterns. The results are plotted in streamlines and the isotherms as well as for different values of Rayleigh numbers and various boundary conditions in the annulus.

Article history:

Received 23 March 2020

Received in revised form ...25 March 2020...

Accepted 09 July 2020

Keys word: Conical annular, Volume finite method , Natural convection, Discrete heating, Numerical simulation.

Copyright © 2020 - All rights reserved

1. INTRODUCTION

The heat transfer analysis by natural convection in an enclosure is a large research topic owing to its wide variety of engineering applications involving energy conversion, storage and transmission systems. Case of using annulus geometry solar thermal collection, the field of heat exchangers and nuclear energy design. A comprehensive review has been documented in the literature considered to investigate the thermal natural convection in different cavity shapes. Among the very first investigations, “Chu et al. (1976)” and “Valencia and Frederick (1989).” has been analyzed numerically the heat transfer problem by natural convection flow of micropolar fluid in rectangular enclosure, to study the effect of the conductive vertical divider. The case of square and rectangular cavities was reported by “Aydin and Yang (2000).” numerically investigated the natural convection of air-filled in a vertical square cavity with the localized isothermal heating on the bottom wall. The free convection heat transfer in a vertical rectangular enclosure with three discrete flush-mounted heaters which produce time-dependent heating has been analyzed numerically by “Bae and Hyun (2004).” .The design of these electronic devices requires a deep understanding of the thermal behavior of the fluid flow in an enclosure with different arrangements of heat sources “Bazylak et al. (2006)” and “Sharif and Mohammad (2005).” . Natural convection due to two and three discrete source-sink pairs on the vertical sidewalls of a square cavity has been numerically studied by

* Corresponding author. E-mail address: m.medebber@univ-mascara.dz

“Deng (2008).” to understand the size and arrangement effects of the source-sink pairs on the fluid flow and heat transfer phenomena. “Muftuoglu and Bilgen (2008).” Determined the optimum position of a discrete heater in an open square cavity by maximizing the conductance, and then studied the heat transfer and volume flow rate with the discrete heater at its optimum position. The numerical study of natural convection the phenomenon of heat transfer in vertical concentric annulus with isothermal inner and outer vertical walls. Several problems that have been widely studied in reason to its many applications of technologies have received much attention. The studies of free convection heat transfer conducted by “de Vahl Davis and Thomas (1969)” and “Keyhani et al. (1983)” and “Prasad and Kulacki (1985)” and “Kumar and Kalam (1991).” in a vertical annulus cavity. A parametric study numerically of the natural laminar convection within vertical closed annulus by the heat generation rod variation centrally vertically by “Venkata Reddy and Narasimham (2008).” “Khan and Kumar (1989)” and “Sankar and Do (2010).” have been extensively investigated numerically the natural convection heat transfer in a vertical annulus in the literature for uniform or discrete heating. The majority of the previous investigations in the annular cavities have treated with the uniform heating of inner wall “Sankar et al. (2006)” and “Nadeem and Akbar (2012).” “Sankar and Do (2010).” Have investigated effect natural convection in a vertical annular bounded by to two finite size heaters in the size and location is fixed. More recently, the effects of size and the location of discrete heating on thermal convection in a filled porous vertical annulus were numerically investigated “Sankar et al. (2011).” Few research works have been reported for the case of conical, have numerically solved the coupled by natural convection heat transfer and thermal radiation problem in a conical annular cylinder porous fixed is presented by “Salman et al. (2009).” These studies have been limited to conduction heat transfer only. The present paper covers the laminar natural convection in discretely heated conical annular space. On the other hand, the direct numerical simulation necessary for well resolved the study of free natural convection flow, the computational resources required by (DNS) approach it's very well suited with of the actual capacities for the majority of real industrial problems. We will be concerned with the effect of the Rayleigh number and aspect ratio and radius ratio of the annulus as well as the size and location of heated surface has a very profound effect on the flow and heat transfer in these cavity geometry.

2. Physical and mathematical formulation

2.1. Physical Domain

In this present study, the analysis domain is delimited by two concentric conical cavity with discrete heater surface. It is placed at the middle inner wall of length h , but the upper and lower horizontal walls are kept adiabatic wall. While the outer and inner wall are maintained respectively at lower and height temperature, as shown in Fig. 1. The buoyancy induced flow is expected to be laminar, and the fluid studied is incompressible with constant fluid properties except the density variation. The Boussinesq approximation is used to compute the density variation with the temperature.

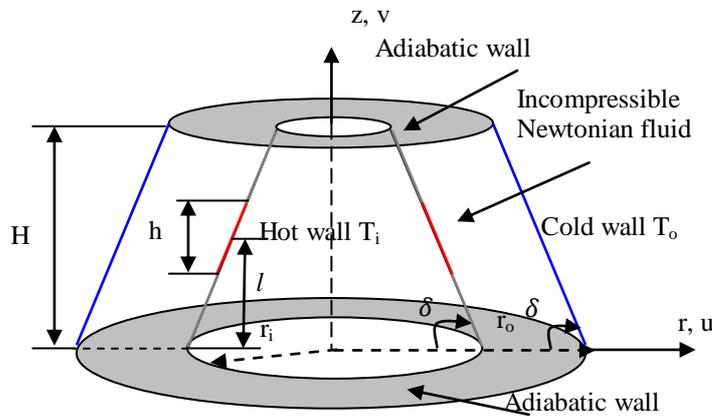


Fig.1. Physical Model

2.2. Governing Equations

The problem description and the assumptions application on the fluid properties, the governing differential equations in vector form can be written as:

Continuity,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (1)$$

Momentum,

$$\rho(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})\vec{V} = \mu \nabla^2 \vec{V} - \vec{\nabla} p - \rho \vec{g} \quad (2)$$

Energy,

$$\rho c_p (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) T = \lambda (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) T \quad (3)$$

In present study can be written as the governing dimensionless equations in cylindrical coordinates in the following forms.

Continuity,

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (RU) + \frac{\partial V}{\partial Z} = 0 \quad (4)$$

R momentum,

$$U \frac{\partial U}{\partial R} + V \frac{\partial U}{\partial Z} = -\frac{\partial P}{\partial R} + Pr \left[\frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (RU) \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right] \quad (5)$$

Z momentum with the Boussinesq approximation for the buoy-ancy term,

$$U \frac{\partial V}{\partial R} + V \frac{\partial V}{\partial Z} = -\frac{\partial P}{\partial Z} + Pr \left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial V}{\partial R} \right) + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right] + Pr Ra (T^* - 0.5) \quad (6)$$

Energy

$$U \frac{\partial T^*}{\partial R} + V \frac{\partial T^*}{\partial Z} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial T^*}{\partial R} \right) + \frac{\partial^2 T^*}{\partial Z^2} \quad (7)$$

Where the dimensionless variables and numbers are defined as follows:

$$U = \frac{uL}{\alpha}; V = \frac{vL}{\alpha}; R = \frac{r - r_i}{D}; Z = \frac{z}{H}; Ar = \frac{H}{D}; K = \frac{r_o}{r_i}; L = \frac{l}{H}; D = r_o - r_i \quad (8)$$

$$\varepsilon = \frac{h}{H}; T^* = \frac{T - T_o}{T_i - T_o}; P = \frac{pL^2}{\rho \alpha^2}; Pr = \frac{\nu}{\alpha}; Ra = \frac{\beta g \Delta T L^3}{\alpha \nu} \quad (9)$$

2.3. Boundary Conditions

The corresponding dimensionless boundary conditions for the radial and vertical velocity are equals to zero at all walls. The temperature boundary conditions are as follows.

-At $0 \leq Z \leq \frac{H}{D}$ and $R_o \leq R \leq R_o - \frac{H}{D} \cot \delta$: $U = V = 0$ and $T^* = 0$ for the isothermal Cold tilted wall.

-At $L - \frac{\varepsilon}{2} \leq Z < L + \frac{\varepsilon}{2}$ and $R_i - (L - \frac{\varepsilon}{2}) \cot \delta \leq R \leq R_i - (L + \frac{\varepsilon}{2}) \cot \delta$: $U = V = 0$ and $T^* = 1$ for the isothermal Hot tilted wall.

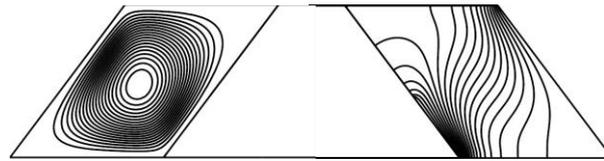
-At $L + \frac{\epsilon}{2} \leq Z \leq \frac{H}{D}$ and $R_i - (L + \frac{\epsilon}{2}) \cot \delta \leq R \leq R_i - \frac{H}{D} \cot \delta$: $U = V = 0$ and $\frac{\partial T^*}{\partial R} = 0$ for the adiabatic tilted wall.

-At $0 \leq Z < L - \frac{\epsilon}{2}$ and $R_i \leq R \leq R_i - (L - \frac{\epsilon}{2}) \cot \delta$: $U = V = 0$ and $\frac{\partial T^*}{\partial R} = 0$ for the adiabatic walls wall.

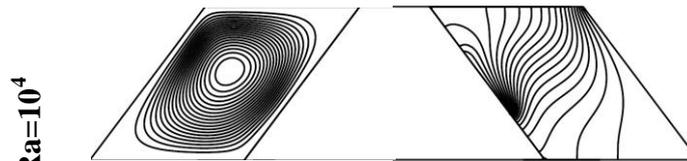
-At $Z = \frac{H}{D}$ and $Z = 0$: $U = V = 0$ and $\frac{\partial T^*}{\partial Z} = 0$ for the adiabatic horizontal walls.

3. Results and discussion

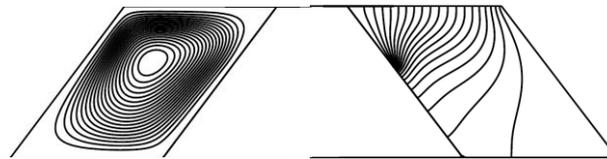
These numerical results of the natural convection flow in vertical conical annular cavity are presented for several sizes of discrete heating surface. Three locations $L = 0.25, 0.625$ & 1 for various parameters of the Rayleigh number in range of $(10^4 \leq Ra \leq 10^6)$.



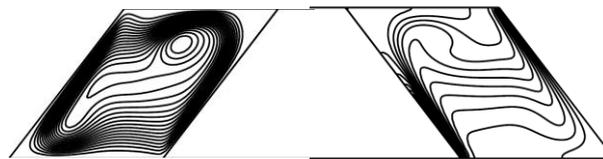
a) $Ra=10^4, L=0.25$



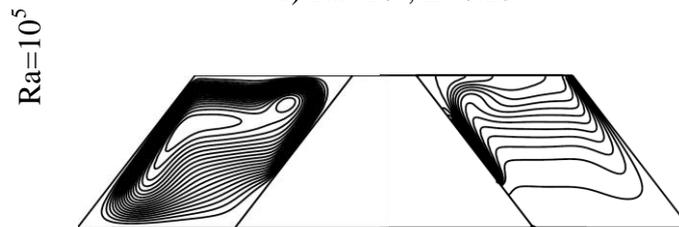
b) $Ra=10^4, L=0.625$



c) $Ra=10^4, L=1$



d) $Ra=10^5, L=0.25$



e) $Ra=10^5, L=0.625$

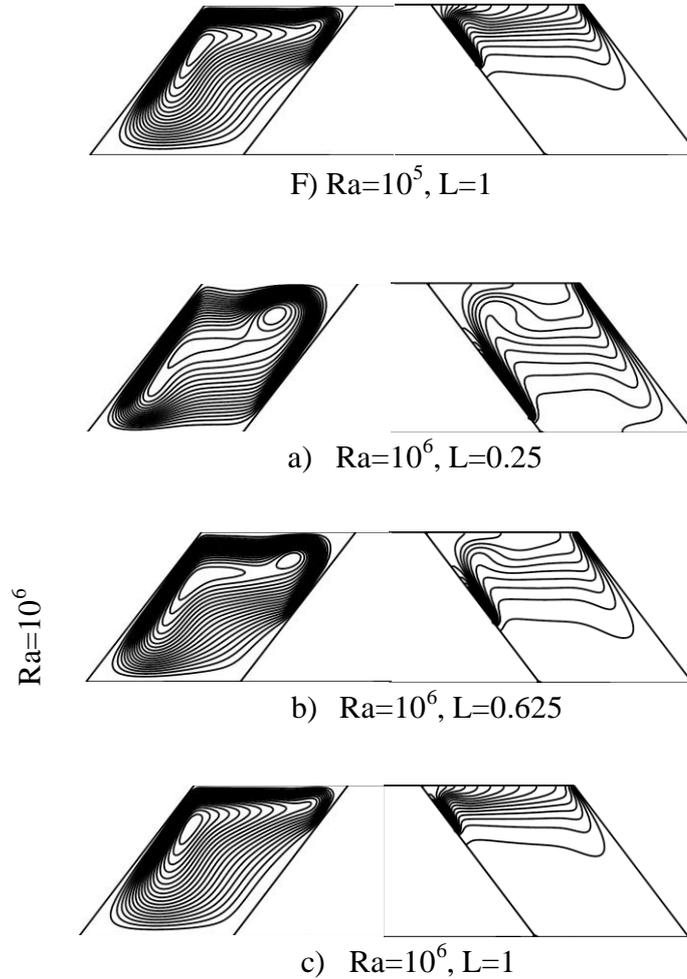


Fig. 3. Streamlines and isotherms for annulus Aspect ratio $Ar=1, \epsilon = 0.25, K=2$ and $\delta= 45^\circ$ at different locations of the heated wall.

The fluid flow and temperature distribution inside the conical annular space with discretely heated surface are presented by means of the streamlines and isotherms in Fig. 3. As Rayleigh number $Ra \leq 10^4$, the circulation intensity is weaker due to the weak buoyancy forces and the corresponding isotherms exhibit the characteristics of pure conduction. When Rayleigh number value is higher $Ra = 10^6$, the convection intensity is stronger and therefore the heat transfer flow by convection dominated the thermal field in the annulus. As the heated portion moves upwards, the fluid flow centre transformed into a single cell and becomes larger near the cold wall when the heated part is placed adjacent the horizontal wall, at lower Rayleigh number the isotherms are parallel, have deformed and move towards the cold wall.

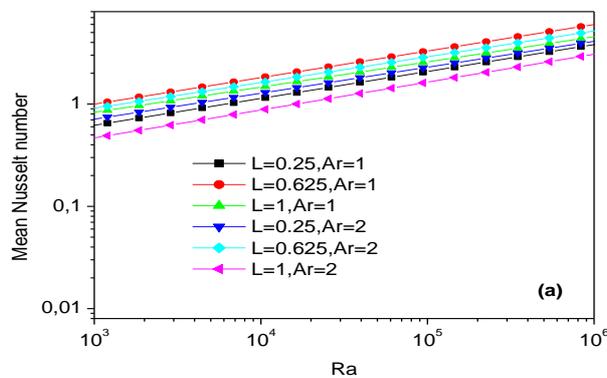


Fig. 4. Nusselt number variation with Rayleigh number for $\epsilon = 0.25, K=2$.

The Nusselt number variation with various locations L of the discrete source and aspect ratio Ar of the annulus are presented in Fig. 4. The figure clearly shows that size and location of the discretely heated part plays an important role in maximum heat removal from the heated surface. In addition, The average heat transfer rate increases as the Rayleigh number is increased.

4. Conclusion

In this paper, the natural convection heat transfer in a Two-Dimensional vertical conical annular space for steady-state regime with discrete heat source has been investigated numerically. The effect of main parameters such as the location of heater length, Rayleigh number. From the discussion of the results, the following conclusions can be concluded:

- The heat transfer decreased when the heater length and aspect ratio increased.
- The increase of different Rayleigh numbers reinforces the natural convection flow which explains by the reducing of discrete heat source.

REFERENCES

- [1]. Aydin, O. and Yang, J., (2000) Natural Convection in Enclosures with Localized Heating from Below and Symmetrically Cooling from Sides, *Intl J Numer Meth Heat Fluid Flow.*, 10, pp. 518-529.
- [2]. Bae, J.H. and Hyun, J.M., (2004) Time-dependent buoyant convection in an enclosure with discrete heat sources, *Intl J Therm Sci.*, 43, pp.3-11.
- [3]. Bazylak, A. and Djilali, N. and Sinton, D., (2006) Natural convection in an enclosure with distributed heat sources, *Numer Heat Transfer, Part A: Appl.*, 49, pp.655-667.
- [4]. Chu, H.H.S. and Churchill S.W. and Patterson C.V.S., (1976) The effect of heater size, location, aspect ratio, and boundary conditions on two-dimensional, laminar, natural convection in rectangular channels, *J Heat Transfer.*, 98, pp.194-201.
- [5]. Deng, Q.H., (2008) Fluid flow and heat transfer characteristics of natural convection in square cavities due to discrete source-sink pairs, *Intl J Heat Mass Transfer.*, 51, pp.5949-5957.
- [6]. de Vahl Davis, G. and Thomas, R.W., (1969) Natural convection between concentric vertical cylinders, *High speed computing in fluid dynamics, Phys Fluids.*, Suppl II:198-207.
- [7]. Keyhani, M. and Kulacki, F.A. and Christensen, R.N., (1983) Free convection in a vertical annulus with constant heat flux on the inner wall, *ASME J Heat Transfer.*, 105, pp.454-459.
- [8]. Khan, J.A. and Kumar, R., (1989) Natural convection in vertical annuli: a numerical study for constant heat flux on the inner wall, *ASME J Heat Transfer.*, 111, pp. 909-915.
- [9]. Kumar, R. and Kalam, M.A., (1991) Laminar Thermal Convection between Vertical Coaxial Isothermal Cylinders. *Intl J Heat Mass Transfer.*, 34, pp.513-524.
- [10]. Muftuoglu, A. and Bilgen, E., Natural Convection in an Open Square Cavity with Discrete Heaters at their Optimized Positions, *Intl J Therm Sci.*, 47, pp. 369-377, 2008.
- [11]. Nadeem, S. and Akbar, N.S., (2012) Effects of heat and mass transfer peristaltic flow of Williamson fluid in a vertical annulus, *Meccanica*, 47, pp.141-151.
- [12]. Prasad, V. and Kulacki, F.A., (1985) Free convection heat transfer in a liquid-filled annulus, *J Heat Transfer.*, 107, pp.596-602.
- [13]. Salman, N.J.A. and Irfan, A.B. and Zainal, Z.A. and Khaleed, H.M.T. and Jeevan, K. (2009) Heat transfer in a conical cylinder with porous medium, *Intl J Heat Mass Transfer.*, 52, 3070-3078.
- [14]. Sankar, M. and Do, Y., (2010) Numerical simulation of free convection heat transfer in a vertical annular cavity with discrete heating, *Intl Comm Heat Mass Transfer.*, 37, pp.600-606.
- [15]. Sankar, M. and Park, Y. and Lopez, J.M. and Do, Y., (2011) Numerical study of natural convection in a vertical porous annulus with discrete heating, *Intl J Heat Mass Transfer.*, 5, pp.1493-1505.
- [16]. Sankar, M. and Do, Y. (2010) Numerical simulation of free convection heat transfer in a vertical annular cavity with discrete heating, *Intl Comm Heat Mass Transfer.*, 37, pp.600-606.
- [17]. Sankar, M. and Venkatachalappa, M. and Shivakumara, I.S., (2006) Effect of magnetic field on natural convection in a vertical cylindrical annulus, *Intl J of Engineering Sci.*, 44, pp.1556-1570.

- [18]. Sharif, M.A.R. and Mohammad, T.R., (2005) Natural convection in cavities with constant flux heating at the bottom wall and isothermal cooling from side walls, *Intl J Therm Sci.*, 44, pp.865-878.
- [19]. Valencia, A. and Frederick, R.L., (1989) Heat transfer in square cavities with partially active vertical walls, *Intl J of Heat Mass Transfer.*, 32, pp.1567-1574.
- [20]. Venkata Reddy, P. and Narasimham, G. S.V.L., (2008) Natural convection in a vertical annulus driven by a central heat generating rod, *Intl J Heat Mass Transfer.*, 51, 5024-5032.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : www.cu-relizane.dz

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Problem solving product distribution in a supply chain using a multi-criteria method

Open
Access

Yachba Khadidja ^{1*}, Mankour Ikram ².

¹ LIO Laboratory , Departement of computer Sciences, University Center of Relizane , Bourmadia, 48000 , Relizane

² Département of computer Sciences, University Center of Relizane , Bourmadia, 48000 , Relizane

ABSTRACT

Article history:

Received 15 July 2020

Received in revised form ...17 July 2020...

Accepted 19 July 2020

One of the objectives that a company sets for itself is customer satisfaction. This is a priority element, which clearly shows that the concerns of companies are geared towards the customer and the speed with which it will be served. The work deals with the problem of the distribution of final products in the various warehouses, scattered throughout the national territory. The problem dealt with in this paper is multi-criteria, taking into account the following criteria: the neighboring population of customer, condition of the path taken by the truck, the length of the path taken from the depot to the customer (distance traveled by transporting a product) and Traffic on the way. The multi-criteria method used in this work is Electre III.

Keys words Logistics ; Warehouse ; Distribution ; Customer ; Electre III ; Criteria.

Copyright © 2020 - All rights reserved

Copyright © 2020

..... - All
rights reserved

1. Introduction

The logistics sector has grown strongly in recent years and is becoming a major player in the current economic organization. It allows the Traffic and management of goods and information flows between the different links in the production and distribution chain. The opening of the national market, the development of infrastructures and the importance of new possibilities in terms of data exchange are leading an increasing number of companies to define their activity in terms of material and information flows. Logistics must integrate supply, production and distribution flows into a global, coherent and profitable system . It must also ensure the management of this system, its rapid and flexible adaptation to market developments. Freight transport is one of the most obvious manifestations of logistics activities.

Transport represents an important budget item for companies, it is considered as <strategic> in the global logistics of the company, it is often treated as an external <basic> service which must respond with very little flexibility to the constraints imposed on both by the sender and by the recipient.

The transport of goods plays a major role in a logistics chain, in fact the main entities (suppliers, distribution factories and end customers) that are in a logistics chain are linked together by connections involving different modes of transport.

The cost of transport is a very sensitive parameter for a society which directly affects the price of the product and the profit generated by the product itself. These forces transport networks to regularly improve their distribution circuit and to review their industrial organization. This tendency led them to act on the minimization of all the costs relating to the distribution and which can have an important influence. So you have to know how to optimize distribution and delivery to stay in the competitive world. The goal of any business is to distribute products with minimal cost, that is, to minimize the total transportation cost of a shipping plan. A transportation problem is a program to minimize the cost of transportation and calculate the optimal route for distribution, reliably and accurately. Its aim is to transport goods at low cost from m origins to n destinations. Our work affects the field of multi-criteria decision support, or we offer alternative solutions which may or may not be retained in order to help the decision maker (in our case the person in charge of vehicle movements: manager) to find the best path for the evolution of the operating costs of the company's vehicles or its carriers and this we take into consideration four criteria: the neighbouring population of a warehouse, the state of the road taken to transport a product, The distance travelled, and the traffic on the path taken.

The present work is to propose a tool essentially made up of a multi-criteria decision support method allowing the identification of the best transport solution according to the demand at the level of each distribution center. The latter makes it possible to minimize the cost of transport in the network while guaranteeing the satisfaction of customer orders, while respecting the four criteria: the neighbouring population of customer, state of the path taken by driver, length of the path taken from depot to the customer (Distance travelled by transporting a product) and Traffic on the way.

2. Related Work

Freight transportation is a complex system. Whichever method is chosen, the purpose of the transport is the delivery of a product to the right destination, on time adequate and respecting its integrity.

Optimizing transport involves thinking and mixing different techniques or possible modes. From factory direct to customer delivery for full driver to small packages there are various usable techniques

which are dependent on a number of factors like distance, size of shipment or pickup, constraints of handling, types of equipment and vehicles used.

The authors present in this section a global view of recent research on the distribution problem in the supply chain management.

Hokey and Gengui (Hokey, 2002) synthesized past supply chain modelling efforts and identifies key challenges and opportunities associated with supply chain modelling. In this research paper authors provided various guidelines for the successful development and implementation of supply chain models.

In the research work of Labarthe (Labarthe, 2006) a definition of an agent oriented approach to model and simulate supply chains in a mass customization context was proposed. A methodological framework structured according to three levels of abstraction: Domain Model, Conceptual Model and Operational Model was done.

Eddoug and elhaq (Eddoug, 2015) addressed the issue of flow management in a multi distribution logistics chain level in a stochastic environment. This work aims to implement delivery flow management solutions, replenishment, inventory allocation and transshipment for a combined optimization of the costs of stocks and transport. The methodology adopted in this work is based on a simulation approach. Indeed, the approach based on modelling and simulation for the evaluation and analysis of performance of complex systems has been proven for years, in various fields of scientific research.

Trujillo (Trujillo et al., 2015) presented design of the Multicriteria Decision Network (MCDN), used to support decision-making by managers of goods and transportation companies for modes or carriers selection in the Supply Chain.

The work of Bessid (Bessid et al, 2018) aimed at studying the optimization of distribution costs in the supply chain through minimization of storage costs and transport in the distribution chain and to study problems of application of formal scientific methods.

3. Positioning the Contribution

The particularity of this work is articulated in the proposal of two basic contributions, which are:

- A decision support model for solving the problem of distribution of final product.
- The Electre III method for founding the best path to send a product.
- This work takes into account four criteria: the neighboring population, the state of the road taken, the distance travelled and traffic on the way.

The contribution is to propose a model for decision support that helps us to make predictions for different paths using a multi-criteria method Electre III.

The authors of this article are interested in the research in the fields of Decision Support Systems (urban, road, maritime transportation, and health), Logistic, Optimization, Simulation, Cooperative and Distributed System, Knowledge bases and Multi Criteria Decision Making. This work forms part of the research work in the field of multi criteria decision applied to transport (Yachba et al.2015), (Yachba et al. 2016), (Yachba, 2017), (Yachba et al.20 17) (Belayachi et al. 2017).

4. Design and Modeling

Our study concerns the product distribution operation known as the travelling sales man problem (PVC), which is an almost real-time decision-making process, which determines a shorter path that visits each city one and one. Only once and that ends in a warehouse. To facilitate and accelerate the distribution operation at the warehouse level, we use an Electre III multi-criteria decision support method. The

determination of the best path obtained using this method must be carried out in such a way as to reduce the distances travelled by the carriers.

This work has the following objectives:

- Best process for visiting customers,
- Reduction of transport costs
- Minimize the time required to deliver the product to the customer,
- Improve the organization of customers in relation to their Cities by avoiding assigning the customer to two or more warehouses,
- Help the manager to make the best decision regarding the distribution of products.

5. The Proposed Model

The decision support model presented in this study for product distribution is inspired by that proposed by Bouamrane (Bouamrane, 2005). This decision model proposed for the case of a warehouse manager who manages a transport network is broken down into four distinct phases. Each of these phases includes a set of steps as shown in Figure 1.

Step 1 (Allocation of customers to warehouses): After configuring the initial state, each customer is assigned to a warehouse which is located in the same city before receiving the order for the products.

Step 2 (Decision support method to minimize the cost of distribution): In this phase, the manager has the possibility of launching a mechanism that allows him to build solutions for finding paths at a lower cost. This mechanism offers an optimal feasible solution using Electre III which is invisible to the manager.

Step 3 (Choice and validation of a solution) : This is a step in choosing one of the solutions proposed by the decision support system. Once the manager has made his choice, he must validate it.

Step 4 (Adoption of the chosen solution): This phase essentially aims at social acceptance of the result given by the decision support system. It is an implementation of the decision adopted by the manager. The manager (decision maker) is free to accept one of the solutions offered by the system or to ignore the help offered.

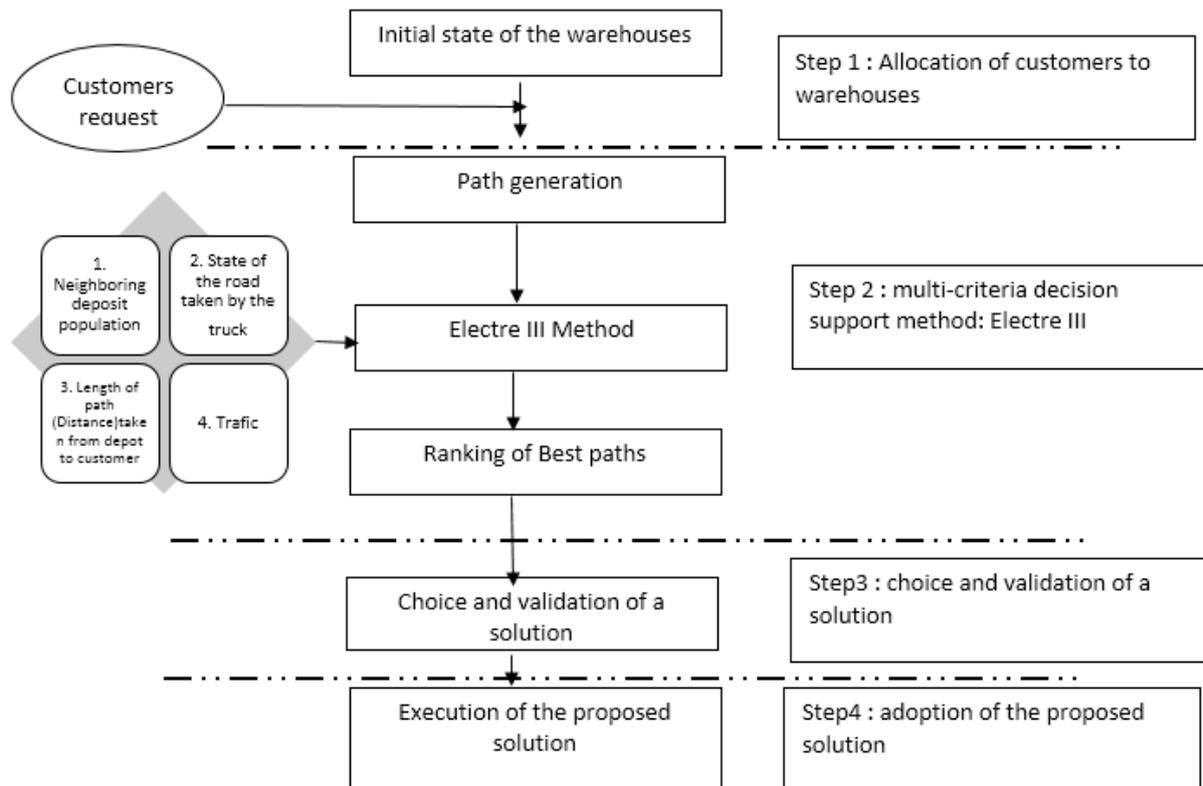


Figure 1– The Proposed Decision Model

6. Description of the Electre III Method and Adaptation to the Case Study

Electre III Allows to classify the actions from best to the worst then select the (or them) Action (s) that seem (s) the most adequate (s). To do this, Electre III processes an evaluation matrix containing actions and pseudo criteria. The upgrade treatments provided on this matrix will make it possible to establish a partial final pre-order (Martin , 2005).

6.1. General Algorithm of Electra III

The general principle of the operation of Electra III is given by the flowchart illustrated in the Figure 2 (Martin, 2005):

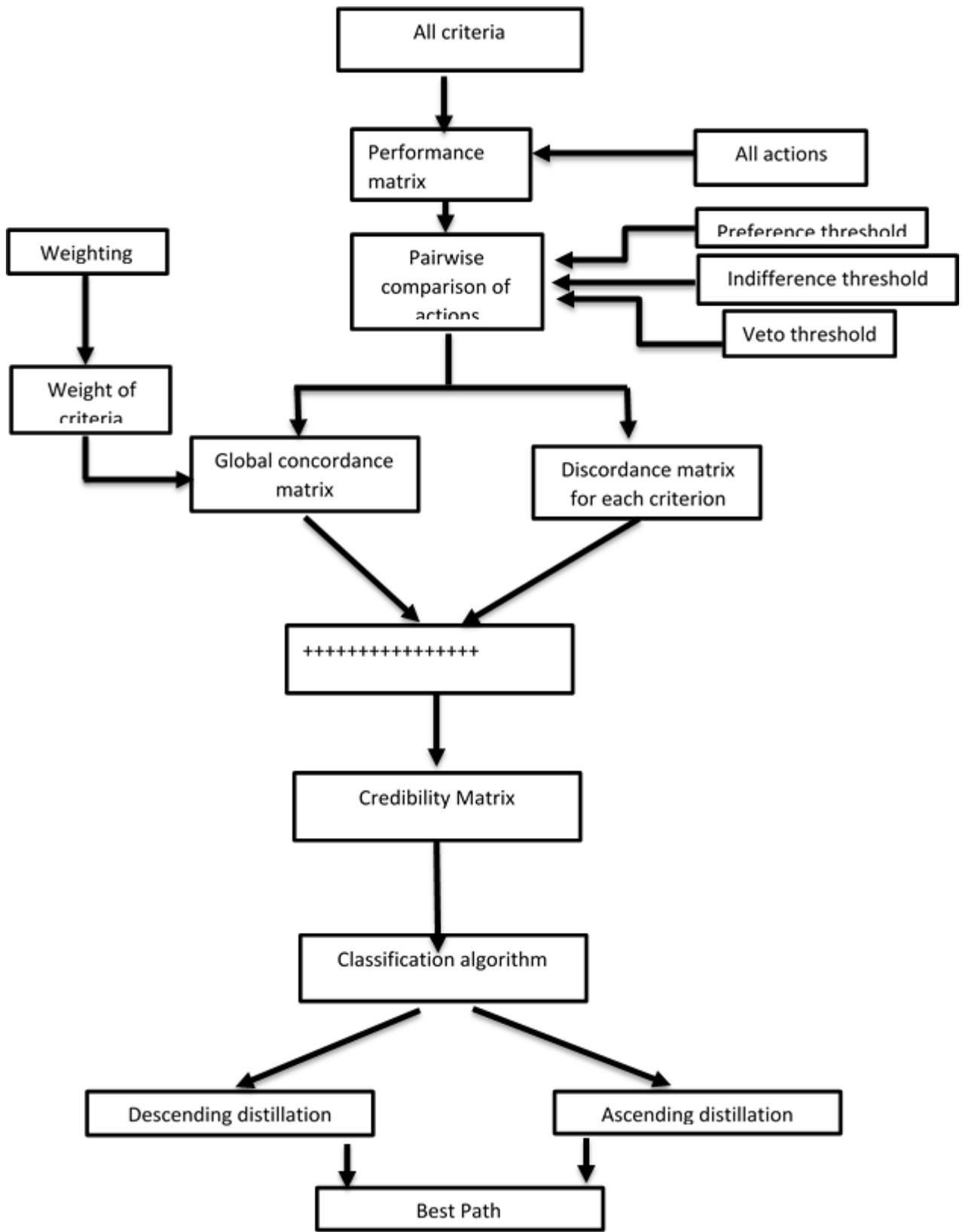


Figure 2– The Electre III Method Application Process

6.2. Determination of the Performance Table and Subjective Parameters

The construction of the criteria is a delicate step which requires an understanding of the problem posed and an interaction with the actors involved in the decision-making. It is a question of identifying the stakes and the nature of the possible consequences on the object of the decision, ie the actions considered. Defining the criteria then requires an assessment of the contribution and influence of each criterion in the final decision.

This results in weights which are defined by the actors involved or obtained by an iterative process following interaction with the actors concerned [Nafi et al, 2009]. In this study each action represents a possible path from any station to any depot, and we consider the following criteria:

- Cr1: Neighbouring Customer population
- Cr2: State of the road taken by the driver
- Cr3: Length of the path taken from depot to customer
- Cr4: Traffic

For the Cr2 and Cr4 criteria we make a discretization to facilitate the task such as:

$$\text{State of the road} = \begin{cases} 1 & \text{If State of the road} = \text{Good} \\ 2 & \text{If State of the road} = \text{Medium} \\ 3 & \text{If State of the road} = \text{Bad} \end{cases}$$

$$\text{Traffic} = \begin{cases} 1 & \text{If Traffic} = \text{Strong} \\ 2 & \text{If Traffic} = \text{Average} \\ 3 & \text{If Traffic} = \text{Low} \end{cases}$$

In the frequent case, where the analysis of the consequences of potential actions has led to the construction of several criteria, it is the multi-criteria analysis which makes it possible to give answers to the problem posed. For each action considered, and for each criterion, a preference threshold p , of indifference q and a veto threshold v are estimated. Each criterion is assigned a weight k reflecting its contribution in the final decision.

For the case study the performance matrix is illustrated in the following table:

In line we have 20 possible paths, and we collate we have the four criteria. The intersection between row and column represents the evaluation of criteria in relation to actions.

The result of the consequence analysis is presented in a performance table [Nafi al, 2009]. The evaluation of each criterion is contained in the table 1.

Table 1 : Performance Chart

	Cr1	Cr2	Cr3	Cr4
Action 1 : Path1	923654	2	0.00806	1
Action 2 : Path2	342567	3	0.07650	3
Action 3 : Path3	142678	1	0.0123	2
Action 4 : Path4	345765	2	0.0654	1
Action 5 : Path5	473124	2	0.1765	2
Action 6 : Path6	543654	3	0.2340	1
Action 7 : Path7	132456	1	0.2078	3
Action 8 : Path8	765000	3	0.9876	3
Action 9 : Path9	129009	2	0.6543	1
Action 10 : Path10	123987	3	0.0456	2
Action 11 : Path11	354098	1	0.0876	2
Action 12 : Path12	234987	2	0.0543	1
Action 13 : Path13	345698	3	0.09876	3
Action 14 : Path14	3546890	3	0.0765	1
Action 15 : Path15	321587	2	0.0564	3
Action 16 : Path16	349290	1	0.0231	2
Action 17 : Path17	300456	1	0.0122	2
Action 18 : Path18	453987	2	0.0112	1
Action 19 : Path19	432156	3	0.0778	2
Action 20 : Path20	222999	2	0.0666	3

The importance of criteria in decision-making is assessed by a set of weights $K = \{k_1, k_2, \dots, k_n\}$. For the Electre III method, the indifference, preference and veto thresholds depend on the evaluation of the action (path) for each criterion. For an action a , evaluated by $g_j(a)$ for criterion j , in this case the indifference threshold is noted $q_j(g_j(a))$, the preference threshold by $p_j(g_j(a))$ and the threshold of veto by $v_j(g_j(a))$. These three thresholds are shown in the table 2:

Table 2 : Subjective Parameters

	Cr1	Cr2	Cr3	Cr4
Indifference :Q	1	1	0.25	0.5
Preference : P	3	2	0.75	1.5
Veto : V	4	3	2	1
Weight :W	0.5	1.5	2	0.2

6.3 Concordance Matrix

In a first step, the method Electre III computes matrix coefficients which summarize the information of concordance and discordance between actions of the problem. In a second step, the

coefficients are used to build two pre-rankings, a first one which classifies solutions from the best to the worst and a second one which classifies from the worst to the best. The outranking matrix and the table rank are then deduced by crossing the two pre-rankings results.

The concordance and discordance indices implement the principles of majority and respect for minorities in order to affirm the upgrade (or not) from a to b. This can be done in different ways and with more or less high levels of requirement.

The concordance matrix: this result displays the indexes of the concordance matrix computed with the following equation.

$$C(a_1, a_2) = \frac{1}{P} \sum_{j=1}^r p_j c_j(a_1, a_2) \quad (1)$$

Where:

$$P = \sum_{j=1}^r p_j \quad (2)$$

$$c_j(a_1, a_2) = \begin{cases} 1 & \text{if } g_j(a_1) + q_j \geq g_j(a_2) \\ 0 & \text{if } g_j(a_1) + p_j \geq g_j(a_2) \quad j=1,2,\dots,r \\ \frac{p_j + g_j(a_1) - g_j(a_2)}{p_j - q_j} & \text{Otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

With:

a_1, a_2 : two different actions.

p_j : the weight of criterion j .

$g_j(a_1)$: the evaluation of criterion j for action a_1 .

j : the index of the criterion.

p, q : the preference and indifference thresholds respectively.

The values of the concordance index $c_j(a_1, a_2)$ belong to the interval $[0, 1]$. The following table (Table 3) represents the concordance matrix.

Table 3 : Concordance Matrix

	Action 1	Action 2	Action 3	Action 4	Action 5	Action 6	Action 7	...
Action 1	0.001	0.9524	0.9762	1.0	0.9762	1.0	0.9524	...
Action 2	0.881	0.0	1.0	0.881	0.881	0.881	1.0	...
Action 3	0.881	0.5	0.0	0.881	0.881	0.5238	0.9762	...
Action 4	0.881	0.9524	0.9762	0.0	0.8571	0.881	0.9524	...
Action 5	0.881	0.9762	1.0	1.0	0.0	0.881	0.9762	...
Action 6	0.881	0.9524	0.9762	1.0	0.9762	0.0	0.9524	...
Action 7	0.881	0.5238	0.881	0.881	0.881	0.5238	0.0	...
...

6.4 Discordance Matrix

This result displays the indexes of the discordance matrix computed with the equation given in the description section of the method. This principle is introduced by the following formulas:

$$d_j(a_1, a_2) = \begin{cases} 0 & \text{if } g_j(a_1) + p_j \geq g_j(a_2) \\ 1 & \text{if } g_j(a_1) + v_j \leq g_j(a_2) \\ \frac{g_j(a_2) - g_j(a_1) - p_j}{v_j - p_j} & \text{Otherwise} \end{cases} \quad j=1,2,\dots,r \quad (4)$$

Discordance matrices are then realized for each criterion (m matrices $n \times n$ including the discordance indices $d_j(a_1, a_2)$). The following table (Table 4) present the discordances matrix of the case study.

Table 4 : Discordance Matrix

	Action 1	Action 2	Action 3	Action 4	Action 5	Action 6	Action 7	...
Action 1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 2	1.0	0.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 3	1.0	1.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 4	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 5	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	...
Action 6	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 7	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 8	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 9	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...
Action 10	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...
Action 11	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 12	1.0	1.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 13	1.0	0.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 15	1.0	1.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 16	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 17	1.0	1.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	...
Action 18	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	...
...

6.5 Credibility Matrix

If the concordance index > the discrepancy index the degree of credibility = the concordance index.

If the concordance index < the discrepancy index the degree of credibility = the weakened concordance index of the Discordance indices.

The degree of credibility for each pair $(a_1, a_2) \in A^2$ is determined as follows:

$$S(a_1, a_2) = \begin{cases} C(a_1, a_2), & \text{if } d_j(a_1, a_2) \leq C(a_1, a_2) \quad \forall j \\ C(a_1, a_2) * \prod_{j \in J(a_1, a_2)} \frac{1 - d_j(a_1, a_2)}{1 - C(a_1, a_2)} & \text{where } J(a_1, a_2) \text{ the set of criteria} \\ & \text{such that } d_j(a_1, a_2) > C(a_1, a_2) \end{cases} \quad (5)$$

A matrix of credibility degrees is then generated (matrix $n \times n$ including credibility degrees $S(a_1, a_2)$ for each pair $(a_1, a_2) \in A^2$) (Table 5).

Table 5: Credibility Matrix

	Action 1	Action 2	Action 3	Action 4	Action 5	Action 6	Action 7	...
Action 1	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	...
Action 2	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	...
Action 3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 5	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 6	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 8	0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...
Action 9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 11	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 13	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	...
Action 14	1.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	...
Action 15	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	...
Action 16	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	...
Action 17	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	...
...

6.6 Final Ranking and Discussion of Result

The Final ranking of this case study is represented in the table 6.

Table 6: Final Ranking

	Upward distillation	Downward distillation
Action1	2.0	7.0
Action2	4.0	4.0
Action3	11.0	12.0
Action4	10.0	10.0
Action5	2.0	2.0
Action6	5.0	8.0
Action7	7.0	11.0
Action8	1.0	1.0
Action9	3.0	14.0
Action10	8.0	14.0
Action11	5.0	6.0
Action12	12.0	13.0
Action13	2.0	3.0
Action14	1.0	6.0
Action15	5.0	5.0
Action16	6.0	7.0
Action17	9.0	9.0
Action18	7.0	9.0
Action19	4.0	4.0
Action20	6.0	8.0

The final ranking (classification) of the different paths is illustrated in the Table 6. The actions (Action i) represent the paths (path i) such that i is the path index. Two types of ranking are presented in the previous table.

Upward distillation: ranks the measurements from the worst to the least bad;
Downward distillation: ranks the measurements from the Best to the least good;. Path 8 (Action8) represents the best path among the different possible paths followed by path 14 (Action8).

7. Conclusion

The transport activity is not limited to simple physical movement of goods which should be optimized in terms of costs, time or non-monetary costs (security, comfort...). The transport activity is in fact combining more and more other operations (processing of information flows, operation of processing of goods...) which makes it difficult to represent it uniformly through physical flows, and to process it. Regardless of logistics. We therefore observe a variety of transport situations, depending on the logistics services added. If transport and logistics must be considered together, they must also indicate their links with the operating modes of companies. Logistic processes must indeed deal with a certain number of productive constraints (nature of demand, production models, types of resources used, and types of products...) which result for their

part from the characteristics of trade and interactions between actors. Relations with other actors in the production chain (suppliers, customers, subcontractors, etc.) condition the organization of flows, and therefore transport needs.

In this article the authors have used the multi-criteria decision support method Electre III in order to find the best routes for the delivery of final products to different customers. This research method allowed us to find solutions that best respond to our problem in a reasonable time.

REFERENCES

- [1]- Belayachi N, Gelareh G, Yachba K, Bouamrane K, 2017, "The logistic of empty container return in the liner shipping network", *Transport and Telecommunication Journal*, 18(3) : 207-219.
- [2]- Bendaoud Z, Yachba K, 2017, "Towards a decision support system, application: Optimization of Container Placement in a Container Terminal", *International Journal of Strategic Information Technology and Applications (IJSITA)* 8(3).
- [3]- Bouamrane K, Tahon C, Marc Sevaux, Beldjilali B, 2005, "Decision making system for regulation of a bimodal urban transportation network, associating classical and multi-agent approaches", *INFORMATICA*, Vol 16, N°3, pp 1-30, (ISSN 0868-4952).
- [4]- Nafii A, Wery C, 2009 "Aide à la décision multicritère : introduction aux méthodes d'analyse multicritère de type ELECTRE", *Unité Mixte de Recherche Cemagref-Enges en Gestion des Services Publics*.
- [5]- Martin C, Legret M, 2005, "La méthode multicritère ELECTRE III Définitions, principe et exemple d'application à la gestion des eaux pluviales en milieu urbain", *Laboratoire Central des Ponts et Chaussées, bulletin des laboratoires des ponts et chaussées - 258-259 octobre-novembre-décembre 2005 - réf. 4568 - PP. 29-46*
- [6]- Bessid S, Zouari A, Benabdelhafid A, 2018, "Étude de l'optimisation des coûts de la chaîne de distribution: cas des coûts de stockage et de transport", *Conference: 1er Colloque International sur l'E-Supply Chain (CESCA'2018), At: Agadir – Maroc, 2018*.
- [7]- Eddoug K, S Lissane elhaq S, 2015, "Optimisation conjointe des coûts de transport et de stockage dans une chaîne logistique de distribution multi niveau : Une approche basée sur la simulation", *Xème Conférence Internationale : Conception et Production Intégrées*, CPI 2015, 2-4 Décembre 2015, Tanger – Maroc.
- [8]- Labarthe O, 2006, "Modélisation et simulation orientées agents de chaînes logistiques dans un contexte de personnalisation de masse : modèles et cadre méthodologique", *Thèse de doctorat en cotutelle : Informatique et Sciences de l'Administration, Université Laval Québec et Université Paul Cézanne Marseille*.
- [9]- Díaz J T, Tarcisio A V C, Rojas M M, Bolivar H, Franco C F, González J F P, 2015, "Criteria for decision-making in transportation logistics function", DOI: 10.1109/IEOM.2015.7093776.
- [10]- Min H, Zhou G, 2002, "Supply chain modeling: past, present and future", *Computers and Industrial Engineering*, Vol. 43, p.231-249.
- [11]- Yachba K, Bouamrane K, 2015 "Containers storage optimization in a container terminal using a multimethod multi-level approach", *The International Conference on Computers & Industrial Engineering (CIE45)*, 28-30 October 2015, Metz, France. ISSN 2164-8689.
- [12]- Yachba K, Gelareh S, Bouamrane K, 2016, "Storage management of hazardous containers using the genetic algorithm", *Transport and Telecommunication Journal*, 17(4) :371–383.
- [13]- Yachba K, 2017, "Vers une contribution dans le transport maritime de marchandises : Optimisation de placement des conteneurs dans un port maritime", *Thèse de doctorat, Computer science Département, Université d'Oran1 Ahmed Benbella*.



Revue des Matériaux et Energies Renouvelable

Journal homepage: <https://icmre.000webhostapp.com>
ISSN: 507-554



Performance evaluation of concrete incorporating granite powder as partial substitution of cement in aggressive environments

Open
Access

Hamid Sellaf^{1,2}, Hadj Mostafa Adda³

¹. Département Génie Civil et Hydraulique, Faculté de Technologie, Université de Saida B.P. 20000 Saida hamidsellaf@yahoo.com

². LGCE Laboratoire de Génie Civil et Environnement, Département de Génie Civil, Université Djillali Liabès, Sidi Bel Abbés, Algérie.

³. Laboratoire de Génie Industriel et Développement Durable. Centre Universitaire de Relizane B.P. 48000 Relizane
addahadjmostefa@gmail.com

ARTICLE INFO (Times New Roman, 09pt, bold)

ABSTRACT

Article history:

Received 30 November 2017

Received in revised form 21 March 2020

Accepted 09 July 2020

Keys word: Granite, Concrete, Durability, the Resistances, aggressive environments

This work is a part of a research project on the valuation of the waste of granite and the evaluation of the influence of the substitution of a part (party) of the cement portland by the waste of granite. Reference concretes and cement-based concretes portland with addition of various proportions of powder of granite (5, 10, 15 and 20 %) are kept (preserved) 28 days in solutions of sulfate and the solutions of chloride at an ambient temperature of 23 °C. The resistance, in its various acid solutions, of these specimens, is estimated by the follow-up of the variation of the mass and the resistance

Copyright © 2018 - All rights reserved

* Corresponding author. Tel.: +213770932432.

E-mail address: hamidsellaf@yahoo.com

Évaluation et performances des bétons incorporant de la poudre de granite comme substitution partielle du ciment dans des milieux agressifs

Hamid Sellaf^{1,2}, Hadj Mostafa Adda³

¹Département Génie Civil et Hydraulique, Faculté de Technologie, Université de Saida B.P. 20000 Saida
hamidsellaf@yahoo.com

²LGCE Laboratoire de Génie Civil et Environnement, Département de Génie Civil, Université Djillali Liabès, Sidi Bel
Abbés, Algérie.

³Laboratoire de Génie Industriel et Développement Durable. Centre Universitaire de Relizane B.P. 48000 Relizane
addahadjmostefa@gmail.com

Résumé. Ce travail fait partie d'un projet de recherche sur la valorisation des déchets de granite et l'évaluation de l'influence de la substitution d'une partie du ciment portland par les déchets de granite. Les bétons de références et les bétons à base de ciment portland avec ajout de différentes proportions de poudre de granite (5, 10,15 et 20 %) sont conservés 28 jours dans des solutions de sulfates et des solutions de chlorure à une température ambiante de 23C°. La résistance, à ces différentes solutions acides, de ces spécimens, est évaluée par le suivi de la variation de la masse et la résistance à la compression et à la traction. Les résultats mécaniques dans le cas de l'acide chlorhydrique étaient faible comparé au cas de l'acide sulfurique ceci peut être expliqué par le fait que les ions de chlorure Cl⁻ dans l'eau accélèrent l'hydratation du clinker portland encore existant.

Mots-clés : Granite, Béton, Durabilité, Résistances, Milieux agressifs.

1. Introduction

Le ciment est la principale source des impacts sur l'environnement de l'utilisation du matériau béton. Afin d'optimiser l'utilisation de ce dernier, il est nécessaire de réduire son dosage. Cela peut être entrepris en remplaçant une partie du ciment par des additions minérales lors de la confection des bétons [1].

Les analyses de cycle de vie de structures en béton montrent que, parmi les différents constituants du béton, que le ciment représente la source principale des impacts sur l'environnement, et des émissions de gaz à effet de serre en particulier [2,3,4,5]. Cette part importante du ciment dans les émissions de CO₂ du béton est due aux fortes émissions liées à sa production en cimenterie. En effet, la quantité de CO₂ émise lors de la fabrication du ciment correspond en moyenne mondiale à 810 kg de CO₂ émis par tonne de clinker [6].

Le ciment est un composant essentiel des matériaux cimentaires tels que le béton et le mortier. Il assure une fonction mécanique, car il lie le squelette granulaire, mais il est aussi en grande partie responsable de la tenue à long terme du matériau cimentaire. La conception d'un matériau cimentaire est extrêmement liée à l'environnement dans lequel il va être exposé durant sa durée de vie. Certains ions, dans un environnement aqueux, peuvent être néfastes pour le ciment hydraté, et par conséquent, pour l'intégrité du matériau [7]. Parmi ces ions agressifs, figurent les sulfates et le chlore.

Plusieurs travaux de recherche ont été réalisés sur des mortiers ou bétons afin d'évaluer l'influence de remplacement partiel du ciment par des matériaux naturels tel que la pouzzolane naturelle ou par différents déchets ainsi que l'évolution des performances mécaniques et de durabilité [8, 9,10, 11, 12, 13].

Dans ce travail, nous étudions l'effet de la poudre granite sur les résistances mécaniques et les performances de durabilité vis-à-vis des milieux acides des bétons confectionnés. Pour cela, nous avons comparé le comportement des bétons élaborés à base de ciment seul (CPA 42.5) et celui des bétons contenant différents dosages de poudre de granite.

2. Matériaux utilisés ;

Dans cette étude six types de bétons sont formulés selon les proportions indiquées au tableau 1

2.1 La poudre granite

L'analyse physico-chimique de la poudre résultante du broyage et du tamisage du déchet granite est reportée dans les tableaux 1. D'autre part, l'examen de la diffraction aux rayons X du granite montre qu'il est constituée de minéraux cristallins riches en silice, alumine, fer et magnésium avec des minerais d'argile (montmorillonite) plongés dans une masse amorphe (verre volcanique).

Le ciment utilisé est le ciment Portland CPJ CEM II II/A 42,5 provenant de la cimenterie d'El Hassasna (Saida). Les compositions chimiques de ciment et la poudre granite sont représentés dans le Tableau 1.

Tableau 1. Analyses chimiques du ciment et de la poudre de granite (cimenterie Saida)

<i>Composition chimique</i>	<i>Ciment</i>	<i>Poudre granite</i>
Silice (SiO ₂ %)	22,76	20.61
Chaux (CaO %)	63,43	44.63
Magnésie (MgO %)	0,21	1.92
Oxyde de Fer (Fe ₂ O ₃ %)	3,57	3.20
Alumine (Al ₂ O ₃ %)	5,96	5.09
Sulfates (SO ₃ %)	1,91	0.63
Perte au feu (P.F %)	2,20	23.92
Totale %	100	100

Les ciments CPJ CEM II sont les plus utilisés aujourd'hui dans la construction en Algérie selon l'industrie du ciment.

2.2 Le ciment:

Le ciment utilisé est un ciment portland composé (CPJ-CEM II/A) 42.5, ses caractéristiques chimiques sont présentées dans le tableau 1 (Cimenterie de Saida).

2.3 Les granulats

La formulation des bétons étudiés nécessite l'utilisation des granulats de nature calcaires, concassés appartenant aux classes granulaires présentées comme suit :

- Un sable de gisement de la carrière de Hachem (wilaya de Mascara) de classe granulaire 0/1.82 caractérisé par un équivalent de sable de 75 et une masse volumique apparente de 240kg/m³
- Un gravier de classe granulaire 3/8 et 8/15 issus de la carrière de Tizi (Mascara -Algérie) à prédominance de calcites et de masses volumiques apparentes de 1873 et 2076 kg/m³.

Les bétons sont confectionnés dans un malaxeur d'une capacité de 100 litres. Les éprouvettes destinées aux essais de compression sont des éprouvettes cylindriques 11x22cm et prismatiques 7x7x28cm pour les essais de traction par flexion. Elles sont soumises à une vibration externe (table vibrante). Les résultats des essais des bétons à l'état frais sont présentés dans le tableau 2.

Tableau 2. Formulation et propriétés rhéologiques des bétons testés

<i>Matériaux</i>	<i>BT</i>	<i>BG5</i>	<i>BG10</i>	<i>BG15</i>	<i>BG20</i>
Ciment (kg/m ³)	350	332.5	315	297.5	280
Eau (kg/m ³)	175	175	175	175	175
Poudre granite (kg/m ³)	0	17.5	35	52.5	70
Gravier 4/10 (kg/m ³)	1150	1150	1150	1150	1150
Sable (kg/m ³)	670	670	670	670	670
Affaissement (cm)	16	15	14	13	13
Etalement (cm)	68	66	60	61	61

Avec :

BT : 100% Ciment,

BG5 : 95% Ciment +5% Poudre de granite

BG10: 90% Ciment +10% Poudre de granite

BG15 : 85% Ciment +15% Poudre de granite

BG20 : 80% Ciment +20% Poudre de granite.

3. Résultats et discussion

3.1 Résistance en compression et Résistance en traction par flexion:

Nous constatons que la résistance à la compression sur les éprouvettes 11x22 cm à 28 jours varie d'une composition à une autre. Elles atteignent plus de 5 à 20% respectivement pour les BG5, BG10, BG15, BG20 par rapport au béton témoin BT (Figure 1).

La résistance à la compression et à la traction diminue considérablement avec l'augmentation du pourcentage d'ajout (granite) à 28 jours. A titre d'exemple, un remplacement du ciment par 20% de poudre de granite diminue la résistance à la compression de 25% et 30%. Ces résultats sont prouvés par [12].

Ce phénomène s'explique par l'interaction entre la silice réactive qui se situe dans la partie vitreuse de la poudre granite et le $\text{Ca}(\text{OH})_2$ (Hydroxyde de Calcium) libéré par l'hydratation du CPA. La réaction poudre granite n'est pas prédominante au jeune âge, ceci mène à une hydratation moins intense aux jeunes âges en induisant de faibles résistances (effet de retardateur de prise).

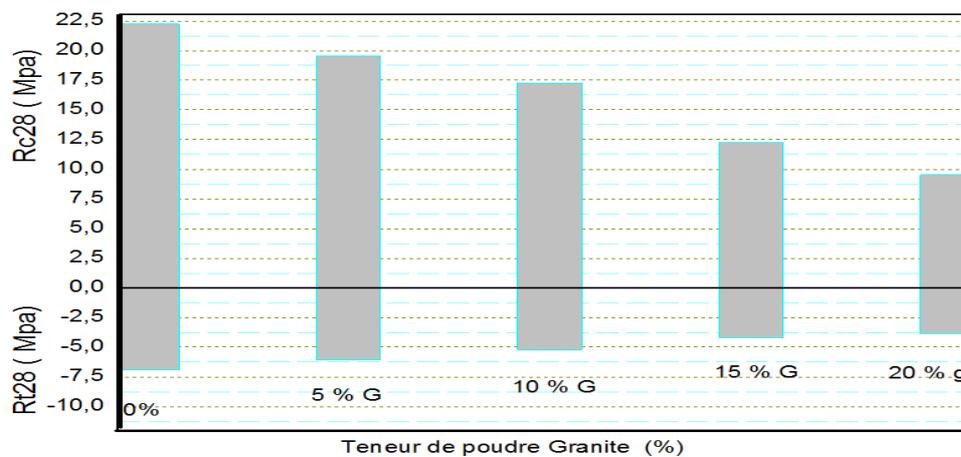


Figure 1. Résistances mécaniques (à la compression et à la traction par flexion) des différents Bétons à 28 jours.

3.2 Durabilité :

3.2.1. Perte de masse : Durant l'échauffement du béton, sa masse est soumise à une variation due à l'évaporation de l'eau figure 2.



Figure 2. Les éprouvettes des différents types du béton dans milieux agressif.

Les résultats de calcul de la perte de masse sont présentés dans la figure 3:

Après 24h jusqu'à 28 jours les différents **BT** (béton normalise) et **BG** (béton composé avec différentes teneurs de la poudre de granite) augmentent leurs aptitudes à résister aux attaques acides. On constate une perte de masse permanent à compter de 1 jour jusqu'à 28 jours d'immersion dans les acides.

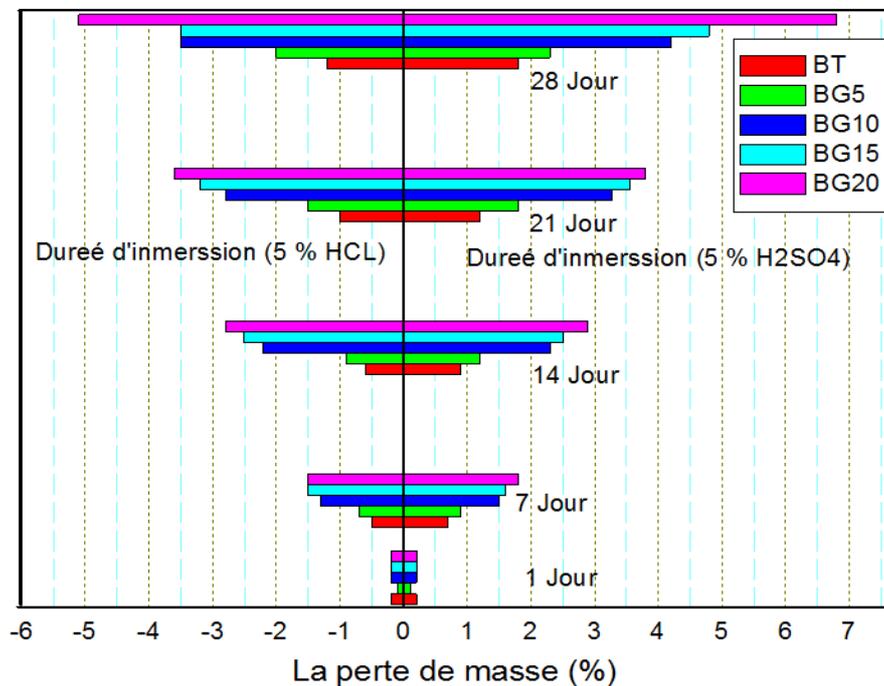


Figure 3. La Perte de masse du béton dans un milieu avec 5% de HCl et 5% de H₂SO₄

Les bétons contenant 5%, 10%, 15% et 20% de poudre de granite sont immergés dans l'acide chlorhydrique (HCl), la réduction de la perte de masse est de 5.50%, 6.50%, 8.60% et 8.90% respectivement. Pour ceux immergés dans l'acide sulfurique (H₂SO₄) la réduction de la perte de masse est de 6.30%, 6.80%, 8.90% et 9.90% respectivement par rapport au béton témoin.

La perte de masse est due au fait que le Ciment Portland Artificiel, après hydratation, a libéré une partie considérable d'hydroxyde de calcium libre (CH) qui peut être lixiviée à l'extérieur quand elle est soumise à l'acide.

3.2.2 Influence des attaques acide sur le comportement mécanique du béton :

Pour les bétons contenant 5%, 10%, 15% et 20% de granite immergés dans l'acide Chlorhydrique (HCl), la perte de masse est de 7, 28, 35 et 58 % respectivement. Et pour ceux immergés dans l'acide Sulfurique (H₂SO₄) la perte de masse est de 23, 31, 50 et 60% respectivement par rapport au béton témoin voir la figure 4.

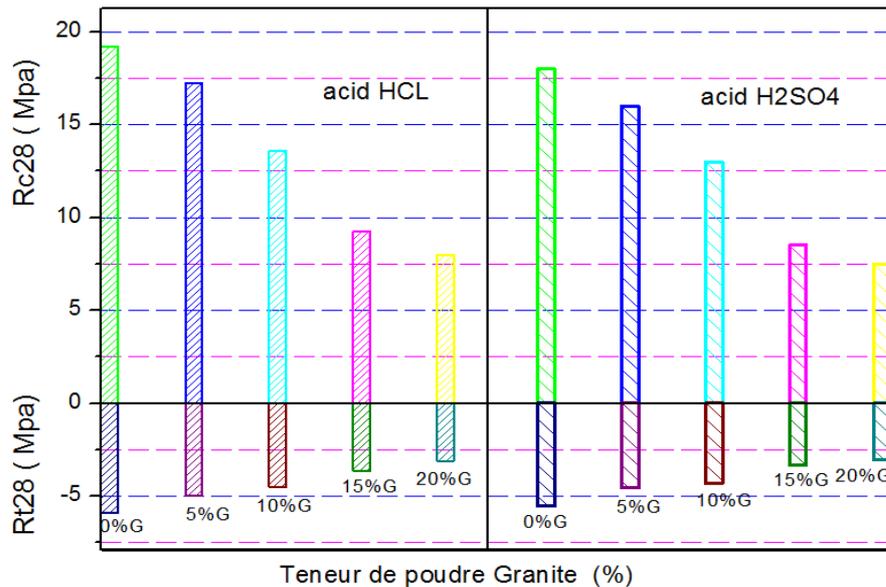


Figure 4. Résistance mécanique des Béton après immergé dans milieux agressifs.

4. Conclusion :

Au cours de ce travail, nous avons réussi à quantifier l'effet de la poudre de granite comme substituant du ciment, sur la carbonatation et sur la décalcification dans l'acide sulfurique et chlorhydrique. Les résultats de cette recherche ont montré que la poudre de granite, contribue à l'amélioration de la durabilité des bétons vis-à-vis de ces deux types d'attaque. Ainsi le choix d'utiliser la poudre de granite comme substituant au ciment est avantageux du point de vue économique et écologique (recyclage d'un déchet) et offre la possibilité d'améliorer la durabilité des bétons voir aussi celle des mortiers.

Bibliographie et références

- [1] Akli Y (2011). Carbonatation de bétons à forts taux de substitution du ciment par des additions minérales thèse de Doctorat de l'Université de La Rochelle Discipline
- [2] Parrott L.J (2002). Cement, concrete and sustainability. A report on the progress of the UK cement and concrete industry towards sustainability, British Cement Association.
- [3] Flower D.J.M., Sanjayan J.G.(2007), Green House Gas Emissions due to Concrete Manufacture, International Journal of Life Cycle Assessment, 12 (5), 2007, 282-288.
- [4] Habert G., Roussel N.(2008), Comment concevoir un béton ayant un faible impact environnemental, XXVIèmes Rencontres Universitaires de Génie Civil, Nancy, 4-6 .
- [5] Collins F.(2010), Inclusion of Carbonation during the Life Cycle of Built and Recycled Concrete: Influence on their Carbon Footprint, International Journal of Life Cycle Assessment, 15 (6), 2010, 549-556.
- [6] Hendriks C.A., Worrell E., deJager , K. Block, Riemer P.(1998), Emission reduction of greenhouse gases from the cement industry, International Energy Agency, California.
- [7] Raymond D. (2004) . Granulat, sol, ciment et béton » : caractérisation des matériaux de génie civil par les essais de laboratoire, Edition Casteili.
- [8] Chihaoui R. (2008) . Durabilité des matériaux cimentaires vis-à-vis d'un environnement chimiquement agressif (Mémoire de Magister- USTMB d'Oran .
- [9] Senhadji A. (2006): L'influence de la nature du ciment sur le comportement des mortiers vis-à-vis des attaques chimiques (acides et sulfatiques) (Mémoire de Magister- USTMB d'Oran .
- [10] Medine M., Trouzine H, Aguiar J.B., Asroun A., (2018) "Durability Properties of Five Years Aged Lightweight Concretes Containing Rubber Aggregates", Periodica Polytechnica Civil Engineering
- [11] Hyvert .N (2009) Application de l'approche probabiliste à la durabilité des produits préfabriqués en béton (Thèse de doctorat - l'Université Toulouse III - Paul Sabatier.

- [12] David S. (2007) Etude des interactions physico-chimiques aux interfaces fibres de chanvre/ciment. Influence sur les propriétés techniques du composite .
- [13] Burak F, .(2006) Comparative study on the performance of sandsrich and poor in fines in self-compacting concrete”, Construction and Building Material .



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : www.cu-relizane.dz

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Open
Access

Etude structurales et électroniques du ZnO pure et dopé par le Fluor

BELOUFA NABIL L^{a*}, MEBARKI DJALLEL^a, CHERCHEB YUCEF^c, BEKHEIRA SAMIR^b

^a Laboratoire de Micro et Nanophysiques (LaMiN), ENP, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran

^b Laboratoire de Micro des Matériaux (LabMat), ENP, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran

^c Centre universitaire de Relizane, Département des sciences exacte , BP 48000, Bormadia, 048000 Relizane, Algeria

RESUME

En utilisant des ondes phases augmentées linéairement (FP-LAPW), basé sur la théorie de la densité DFT, nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques et optiques du composé ZnO. Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA et mbj dans certaines phases et nous avons déterminé la phase la plus stable, Nous avons dopé l'oxyde de zinc avec du fluor à différents taux et le calcul a été effectué en utilisant Wien2K.

Les résultats ainsi obtenus étaient confrontés aux données expérimentales issues de la littérature ainsi qu'avec d'autres résultats des travaux théoriques.

Article history:

Received 18 April 2020

Received in revised form ... 19 April 2020...

Accepted 10 June 2020

Keys word: DFT, FP-LAPW, Wien2k, ZnO :F, mbj, GGA.

Copyright © 2020 - All rights reserved

1. Introduction

Les oxydes transparents conducteurs (OTC) sont des matériaux qui présentent une double propriété intéressante une conductivité électrique et une transparence dans le visible, par conséquent, font constamment des candidats idéaux pour des applications en optoélectronique, en photovoltaïque, médicale ou encore des fenêtres électro-chromiques.

Nous avons choisi d'étudier un TCO qui possède d'excellentes propriétés, c'est l'Oxyde de Zinc (ZnO), c'est l'un des matériaux les plus prometteurs, puisque il a un gap très large, faible toxicité, activité antibactérienne, disponibilité et il est caractérisé par une stabilité thermique, mécanique et chimique. Par conséquent les travaux de recherche sur ce type de matériaux sont de plus en plus nombreux.

Le dopage est l'un des moyens pour atteindre une performance élevée, effectivement, les recherches ont prouvé que le ZnO dopé par Ga, Al et Si présente une conductivité électrique élevée sans perturbée significativement la transmittance optique . Plusieurs études montrent que la substitution de l'atome d'oxygène (O) par l'atome de Fluor (F), conclus à des résultats intéressants, effectivement, il peut réduire les défauts native du ZnO.

2. Matériel et Méthodes

Nous avons utilisé le code (Wien 2K) [1] (Wien pour le nom de la ville de Wien (Vienne) et 2K pour 2000 l'année de lancement de la version wien2k) l'implémentation de la méthode FP-LAPW . Ce code permet de calculer les propriétés

* beloufa.nabil@gmail.com

physiques comme la structure de bande électronique, la densité d'états électroniques et l'énergie totale d'un cristal périodique en se basant sur la connaissance du groupe spatial et le numéro atomique (Z) du matériau considéré. Pour le calcul du potentiel d'échange et de corrélation nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA (PBE96) [2]. En ce qui concerne la région des sphères muffin-tin nous avons utilisé pour assurer la Convergence des harmoniques sphériques $l_{max}=10$, les fonctions d'ondes dans la région interstitielle sont étendue en ondes planes avec une énergie de coupure $k_{max}= 9RMT$ (où RMT est le petit rayon des sphères muffin –tin. Le critère de convergence des cycles auto cohérents (self-consistent) n'est atteinte que lorsque l'énergie totale est stable à 0.1 mRy[3]. Nous avons pris comme oxydes métalliques des semiconducteurs, Le ZnO qui présente des caractéristiques physiques importantes, telle que la largeur de leurs bandes interdites qui fait de ZnO un candidat promoteur pour les applications dans le domaine de l'optoélectronique et les photovoltaïques. Dans cette partie, nous présentons les propriétés structurales et électroniques du ZnO dans les phases Rock-Salt (B1), CsCl (B2), ZincBlende (B3) et Wurtzite (B4) .

3. Résultats et discussions

3.1 ZnO pure

3.1.1 Propriétés structurales

Pour déterminer les propriétés statiques d'équilibre du ZnO, à savoir le paramètre du réseau à l'équilibre a_0 , le module de compressibilité B et sa dérivée B' , on a effectué un calcul auto cohérent de l'énergie totale pour différentes valeurs du paramètre du réseau. Ces paramètres sont pris au voisinage du paramètre du réseau expérimental. Le paramètre du réseau à l'équilibre est calculé en ajustant la courbe de l'énergie totale obtenue à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan[4] donnée par :

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B_0 V}{B'(B'-1)} \right] \cdot \left[B' \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad \text{Eq : I}$$

Où V_0 est le volume de la maille unitaire à l'état fondamental. le module de compressibilité B et sa dérivée B' sont à leur tour liés au volume de la maille unitaire .

L'optimisation structurale du ZnO dans les trois structures « B3, B1, B2 » se fait en calculant l'énergie totale en fonction du volume. Pour la phase Wurtzite (B4) du ZnO, l'optimisation structurale s'effectue en calculant l'énergie totale en fonction des trois variables u (décalage entre le cation et l'anion), c/a , et V .

3.2 Recherche de la stabilité structurale du ZnO

Les propriétés structurales a été effectuée en utilisant la GGA sont obtenues par une minimisation de l'énergie en respectant les critères de convergence. Les paramètres du réseau à l'équilibre, le module de compressibilité B et sa dérivée B' sont calculées à partir de l'équation d'état du Murnaghan. Le composé ZnO cristallise dans quatre phases différentes: la phase NaCl (B1), la phase CsCl (B2), la phase zinc-blende (B3) et la phase wurtzite (B4). La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les quatre Phase du ZnO est illustrée à Fig (I). Les paramètres structuraux de maille a_0 , le module de compression B ainsi que sa dérivée B' et le volume minimal V_0 sont calculées par l'approche (GGA) et comparés avec des résultats expérimentaux et théoriques. Tous les résultats sont regroupés dans les tableaux suivant. Les résultats sont regroupés dans les tableaux (1).

Phase	Paramètres	Nos Calculs	Autres Calculs	Expérimental
Rocksalt NaCl(B1)	$E_{coh}(eV/cell)$	6.83	7.61 ^b , 6.91 ^c , 6.2 ^d	7.61 ^b , 6.2 ^d
	B (GPa)	162.60	170.86 ^a , 161.45 ^b , 167.8 ^c , 222 ^d	228 ^a , 202.5 ^b , 194 ^c , 228 ^d
	B'	4.92	4.18 ^a , 4.66 ^b , 5.3 ^c , 4 ^d	4 ^a , 3.54 ^b , 4.8 ^c , 4 ^d
	V (Å) ³	20.35	20.39 ^b , 20.3 ^d	19.60 ^b
CsCl(B2)	a (Å)	4.334	4.334 ^a , 4.334 ^c , 4.33 ^d	4.271 ^a , 4.271 ^d
	$E_{coh}(eV/cell)$	5.68	5.1 ^d	
	B (GPa)	156.36	158 ^d	
	B'	4.81	4.1	
Zincblende ZnS (B3)	V (Å) ³	19.443	19.4 ^d	
	a (Å)	2.689	2.69 ^d	
	$E_{coh}(eV/cell)$	7.10	7.88 ^b , 7.19 ^c , 6.5 ^d	6.2 ^d
	B (GPa)	134.58	133.73 ^b , 131.6 ^c , 116 ^d , 129.228 ^e	194 ^c , 228 ^d
Wurtzite(B4)	B'	4.65	3.44 ^a , 4.79 ^b , 3.3 ^c , 4.3 ^d , 4.43 ^e	4.8 ^c , 4 ^d
	V (Å) ³	24.91	24.86 ^b , 24.6 ^d	24.65 ^b
	a (Å)	4.638	4.616 ^a , 4.627 ^c , 4.61 ^d , 4.6227 ^e	4.271 ^a , 4.62 ^d , 4.47 ^e
	E_{coh} eV/cell)	7.12	7.905 ^b , 7.20 ^c	7.52 ^b , 7.52 ^c
	B (GPa)	134.74	135.05 ^a , 129.73 ^b , 131.5 ^c	181 ^a , 142.6 ^b , 181 ^c , 181 ^e
	B'	4.44	4.9 ^a , 4.68 ^b , 4.2 ^c , 4.3 ^d , 4.424 ^e	4a, 3.3.6 ^b , 4 ^c , 4 ^e
	V (Å) ³	24.95	24.9.39 ^b , 24.6 ^d	23.819 ^b ,
	a (Å)	3.299	3.281 ^a , 3.283 ^c , 3.294 ^e	3.258 ^a , 3.258 ^c , 3.258 ^e ,
	c (Å)	5.294	5.256 ^a , 5.309 ^c , 5.316 ^e	5.22 ^a , 5.220 ^c , 5.22 ^e , 5.218 ^g
	c/a	1.604	1.6043 ^b , 1.603 ^f	1.6021 ^b , 1.601 ^f
u	0.379	0.3856 ^b , 0.3786 ^c , 0.378 ^e	0.3823 ^b , 0.382 ^c , 0.382 ^e	

Références: a) Réf. [5], b) Ref.[6], c), Réf. [7], d) Réf. [8],e) Réf. [9], f) Réf. [10], g) Réf. [11]

Tableau 1– Les propriétés structurales du ZnO (B4, B3, B2, B1).Le paramètre du réseau d'équilibre a est relié au volume d'équilibre

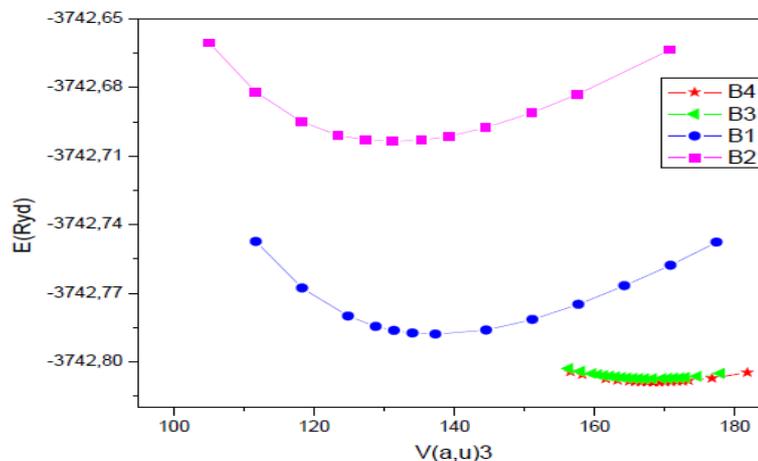


Figure 1– La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les quatre structures, en utilisant la GGA.

La variation de l'énergie totale en fonction du volume en utilisant la GGA pour les quatre structures est donnée dans la figure 1. On remarque que la structure wurtzite (B4) est une énergie minimale donc elle est la plus stable.

Nos valeurs pour le ZnO dans les quatre structures sont en générales en bon accord avec les autres calculs. A partir de la figure 1, on remarque que la structure la plus stable est la structure Wurtzite. L'ordre des phases selon leurs énergies sont d'après cette figure:

$E_{B4} < E_{B3} < E_{B1} < E_{B2}$. Nous remarquons d'après le Tableau 1 que nos résultats pour les paramètres du réseau sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques de la littérature. Pour le module de compressibilité B et sa dérivée première par rapport à la pression B' , nos résultats sont dans le même ordre avec les résultats disponibles.

On note que l'approximation de GGA corrige l'énergie de cohésion par rapport à LDA, mais surestime le paramètre de réseau et aussi elle sous-estime le module de compressibilité contrairement à LDA. Cependant, il faut se rappeler que seules les phases qui se trouvent à gauche de la phase la plus stable B4 peuvent être concernées par les transitions de phase par l'effet de pression, car cette dernière a pour effet de réduire le volume.

3.3 Propriétés électroniques

3.3.1 Structures de bandes

Nous avons effectués le calcul scalaire relativiste (sans spin-orbite) de la structure de bandes de ZnO dans la phases (B4) en utilisant la méthode FP-LAPW.

La figure 2 correspond aux structures de bandes de composé ZnO dans la phase la plus stable (wurtzite (B4)) qui appartient au groupe de symétrie P63mc, Le maximum et minimum de la bande de valence et de conduction respectivement se trouve au point Γ ; donc on a une transition directe, la dispersion des bandes est similaire à celle des résultats trouvés par les travaux théoriques et expérimentales. Les gaps d'énergie (directe et indirecte) et les largeurs des bandes de valence sont classés dans le tableau 2. A partir de ce tableau 2 on constate que la partie inférieure des bandes de valence est dominée par l'état (2s) de l'atome non métal (oxygène) avec une largeur égale à 1.155 eV pour une dispersion maximale entre Γ et M pour la phase la plus stable. Pour la position de l'état (3d) du cation Zn considérée localisée influencée par le poids de dix électrons, elle est relativement proche du maximum de la bande de valence dérivée du l'anion (p), et elle est estimée de -5.8397 eV qui est très comparable avec les calculs prédits par FPLMTO (- 5.1eV) [12], pseudo potentiel (-5.21eV) [13], GW (-6.4eV) [14] et la valeur expérimentale (-6.95eV) [15].

phase(B4)			Nos résultats		Travaux Théoriques	Exp	
Gap d'énergie (eV)	Direct	$(\Gamma \rightarrow \Gamma)^*$	GGA	mbj	Autres calculs 0.759 ^b , 2.683 ^b , 0.830 ^b , 2.647 ^b , 0.81 ^c , 0.80 ^d , 0.68 ^e , 0.75 ^e , 0.76 ^e , 0.73 ^e , 0.55 ^e , 1.57 ^f , 0.783 ^g , 1.80 ^g	3.44 ⁱ	
		(A→A)	3.63	5.32			3.90 ^c , 3.91 ^d
		(M →M)	6.19	8.20			6.73 ^c , 6.79 ^d
	Indirect	$(\Gamma \rightarrow A)$	3.23	5.03	3.48 ^c		
		$(\Gamma \rightarrow M)$	5.45	7.59	1.69 ^c		
		$\Delta E_{BV}(s)$	1.13	0.70			
Largeur des bandes (eV)		$\Delta E_{BV}(p)$	4.19	3.36			
		Bande de Valence-totale	17.79	18.82	18.06 ^c , 18.25 ^d		
		Zn-3d (moyenne)	4.4	3.59			
		Gap antisymétrique	10.29				

* : désigné le gap fondamental

Références:b) Réf. [16] c) Réf.[17] d) Réf.[18] e) Réf.[19] f) Réf. [6] g) Réf.[10] i) Réf.[20]

Tableau 2– résumés des différentes valeurs des gaps d'énergie et la largeur de la bande de valence dans la structure ZnO (B4).

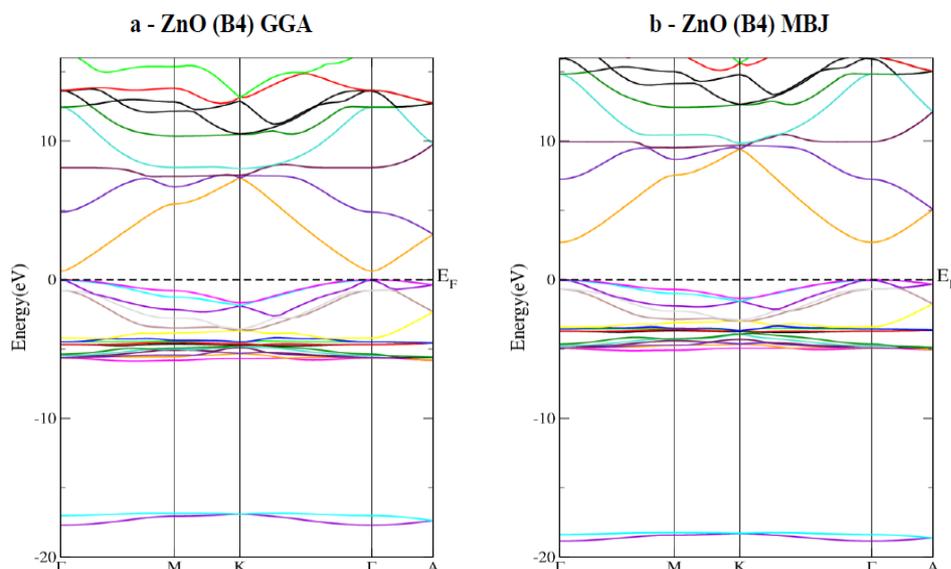


Figure 2– La structure de bandes du ZnO dans la phase Wurtzite (B4), calculés par : (a) GGA et (b) mbj.

Selon les figures (Fig 2) on voit que le composé ZnO appartient à la famille des semiconducteurs avec des bandes interdites directes. On voit aussi que les valeurs calculées des bandes interdites de ce composé en utilisant les méthodes GGA et mbj coïncide approximativement avec les résultats théoriques.

On voit que l'utilisation de mbj fait une bonne amélioration dans les valeurs des bandes interdites comparé avec celles des GGA.

3.3.2 Densités d'état total et partiel (DOS)

La densité d'états de ces composés est calculée par la méthode du Tétraèdre [16] qui nécessite un grand nombre de points spéciaux (on a utilisé 273 points spéciaux dans la zone de Brillouin pour le wurtzite (ZnO)).

Le DOS total et les PDOS (partiels) sont montrés sur la figure 3-1-2 (2D et 3D).

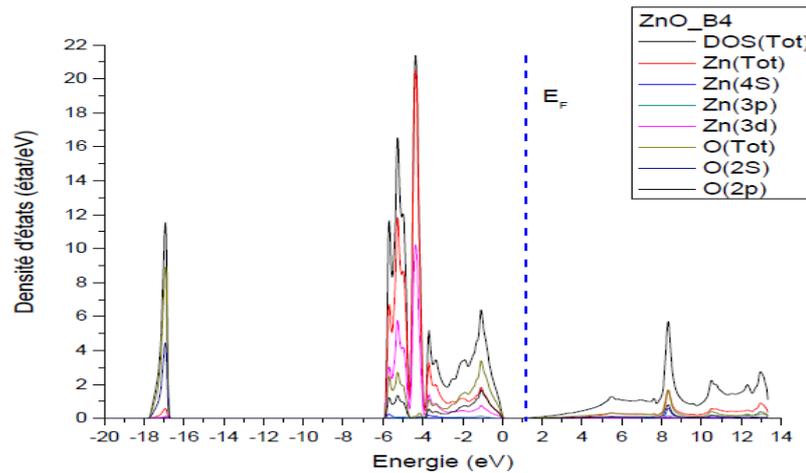


Figure 3.1– Densités d'états totale (DOS) et partielle de ZnO en phase wurtzite (B4)

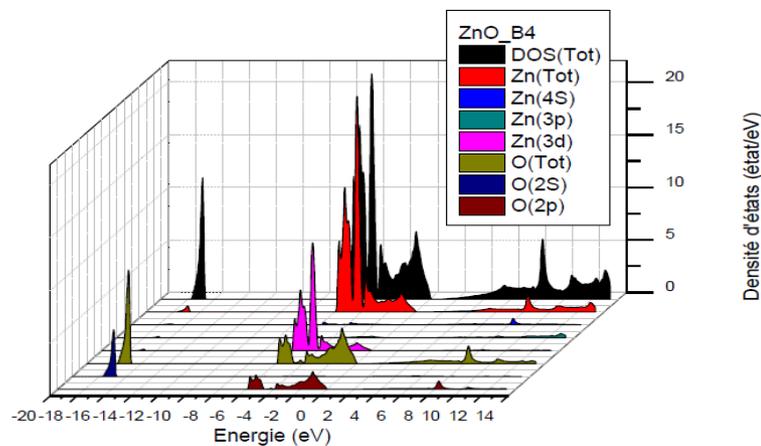


Figure 3. 2– Densités d'états totale (DOS) et partielle de ZnO en phase wurtzite (B4) (3D)

La BV est divisée en trois régions:

-La première région s'étale entre -20 eV et -16 eV est dominée principalement par la contribution des états (2s) de l'atome O.

-La deuxième région s'étale entre -6 eV et -4 eV montre une forte contribution de l'orbitale (3d) de l'atome Zn est dominante proche du maximum de la bande de valence avec une très faible contribution de orbitale (2p) de l'atome O.

-La troisième région s'étale entre -4 eV et 0 eV la contribution de l'orbitale (2p) de l'atome O avec une contribution plus petite de l'orbitale (3d) de l'atome Zn. On remarque une forte hybridation entre les états 3d du Zn et les états 2s du O. La bande de conduction CB est formée principalement des états 4s du cation Zn et 2p de l'anion O. On remarque que nos résultats obtenus par l'approximation GGA sont en bon accord avec d'autres travaux cités dans les références [21, 22].

3.4 Pour le ZnO dopé

3.4.1 Propriétés électroniques

3.4.1.1 Structure de Bandes

La structure de bandes du ZnO dopé de Fluor de 6.25% et de 12.5% est illustrée par la figure IV, nous avons tracée cette structure de bande suivant les points et les directions de hautes symétries dans la première zone de Brillouin et pour plus de clarté nous avons comparées leurs structures avec celle du ZnO non dopé (pur). On voit clairement dans la bande de valence (BV) qu'il y a des bandes supplémentaires apparait dans la région d'énergie -10 eV, qui sont due à l'introduction de l'atome de Fluor (F). Le niveau de Fermi est ramené à l'énergie 0 eV et considéré comme origine d'énergie, on peut conclure que : Pour le ZnO pur, le gap est de valeur égale à 0.8eV au point Γ , tandis on observe que le niveau de Fermi est décalé à l'intérieur de la bande de conduction, en produisant un caractère métallique de type n et relativement une conductivité électrique extrinsèque élevée [23], Quand un électron est excité de la bande de valence vers les états de la bande de conduction pour occuper les états situés au minimum de la bande de conduction qui travail comme extra barrière qui s'ajoute dans la bande interdite, on peut justifier se changement par le phénomène appelé l'effet de Burstein-Moss [24,25] où il été observer expérimentalement dans les couches minces de ZnO dopé de F [26,27] et pour d'autres dopants comme In et Ga substituant l'atome Zn [28,29]. Il est démontré que ce phénomène est derrière l'augmentation de la largeur de l'énergie du gap optique [24,25].

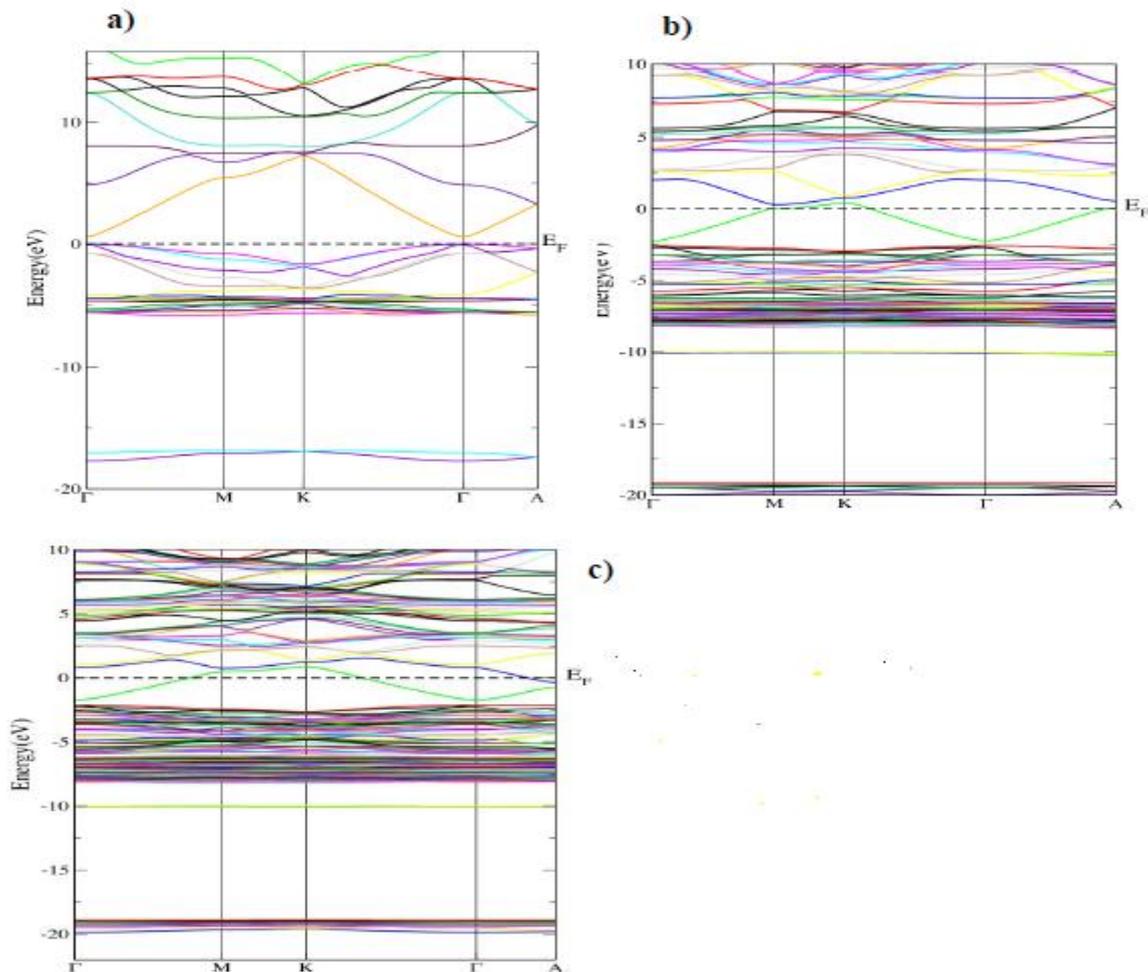


Figure 4– Structure de bandes du ZnO a) pur, b) dopé de 12.5% de F, c) dopé de 6.25% de F.

3.4.1.2 Densité d'état (DOS)

La densité d'état totale (TDOS) et partielle (PDOS) de ZnO dopé 12.5% et dopé 6.25% sont présentées sur les figures 5.1 et 5.2. Nous avons étudié le cas pur dans le chapitre III, où nous avons dévoilé que la bande de valence est divisé principalement en deux régions :

pour le maximum de la bande de valence est dominé par un mélange entre l'état O-2p et l'état Zn-3d et la l'autre région inférieur à 10 eV est dominé par l'état O-2s. La bande de conduction est dérivée principalement de l'état Zn-4s. Dans le cas de ZnO dopé, il apparait une perturbation significative au minimum de la bande de conduction et un niveau donneur est crée, à pour cause un décalage de niveau de Fermi dans la bande de conduction. Au voisinage du niveau de Fermi est caractérisé principalement par F-2p, peut être responsable premièrement de la conductivité électrique extrinsèque causé par le dopage du ZnO par le Fluor même remarque est citée dans le cas de ZnO dopé Ga [30]. On voit que la bande de valence est divisée en trois régions :

- la région située moins 10 eV est dérivée de l'état O-2s.
- la région située entre -10 eV et -7 eV est caractérisée par F-2p.
- la région située au maximum de la bande de valence dérivée principalement de Zn-3d, O-2p déjà observée dans le ZnO pur sauf qu'il y a une légère contribution de l'atome Fluor

La bande de conduction est dérivée principalement de Zn-4s, et en faible contribution d'états O-2p et F-2p.0

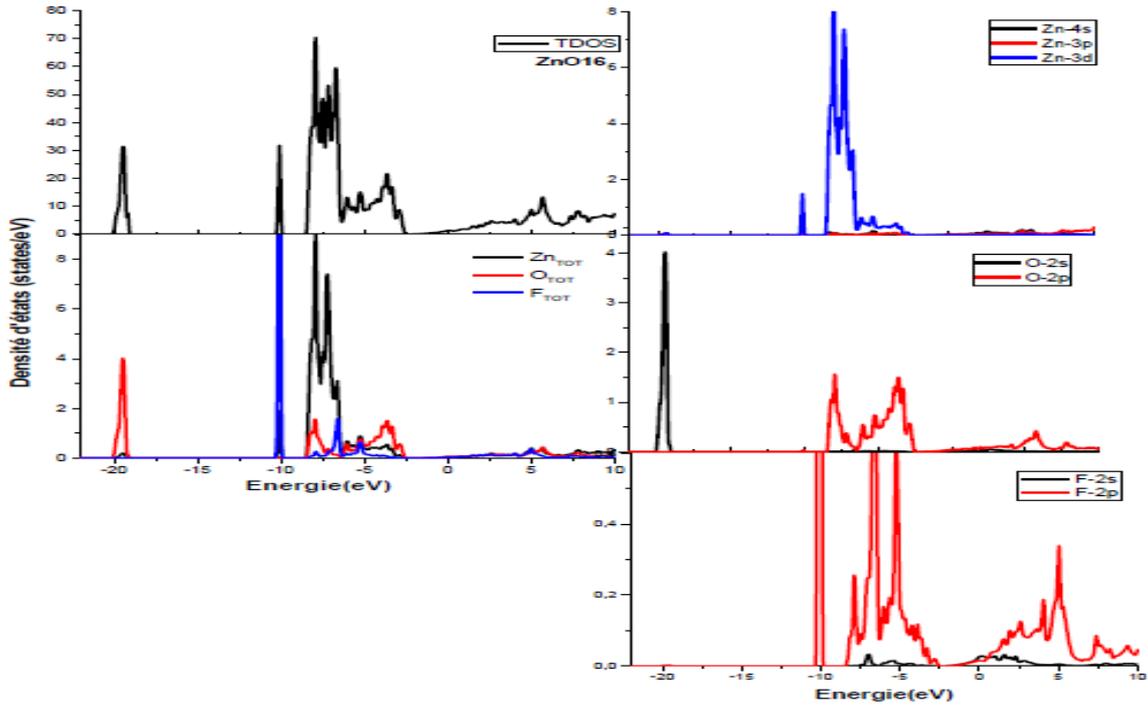


Figure5. 1– Densité d'état Totale(TDOS) et partielle du ZnO16 ZnO :F de 12.5%.

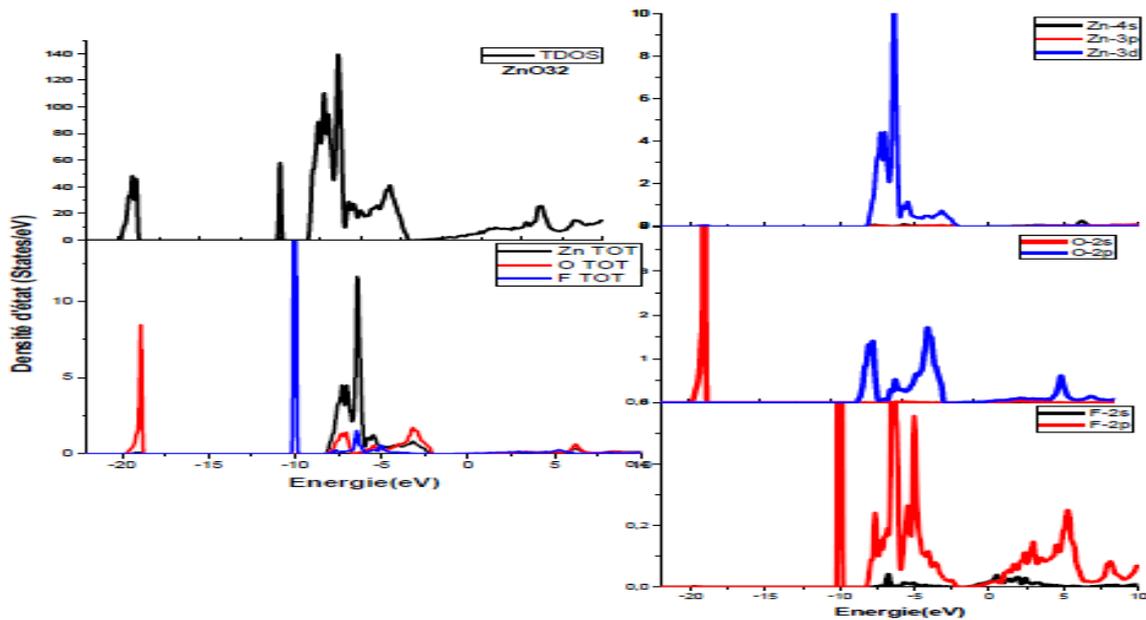


Figure5. 2– Densité d'état Totale(TDOS) et partielle du ZnO32 ZnO :F de 6.25%.

3.4.1.3 Densité d'état proche du niveau de Fermi

Nous avons tracé la densité d'état au voisinage du niveau de Fermi, la courbe correspondante est illustrée par la figure VI-6. On voit nettement la dépendance des états occupés au voisinage du niveau de Fermi de degré de dopage de Fluor et donc de niveau du dopant. En conséquence, il y a une influence sur la concentration en électrons altérée par la concentration de donneur. La figure VI, montre que l'amplitude de remplissage des états par le dopant augmente avec le taux de dopage de Fluor, qui signifie que la concentration en électrons augmente dans la bande de conduction et par conséquence, la conductivité électrique dépend fortement du taux de dopage en Fluor.

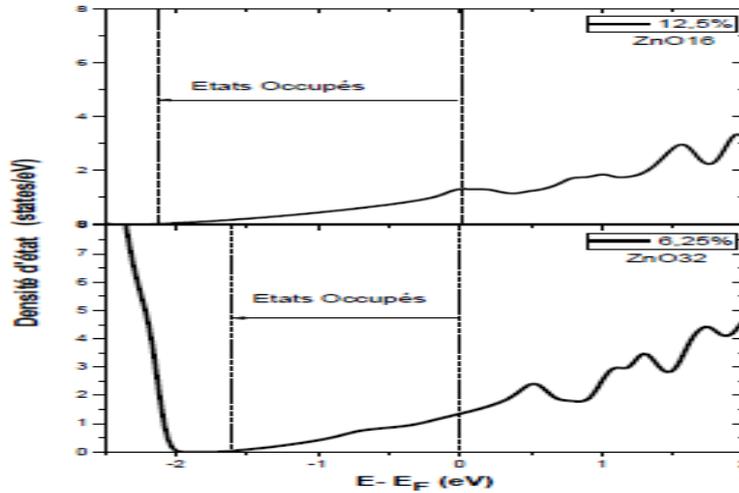


Figure 6– Densité d'état au voisinage du niveau de Fermi du ZnO :F

4. Conclusion

Dans ce travail, nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurales, et électroniques de l'Oxyde de Zinc (ZnO) pur et dopé, en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2k. Nous avons utilisé l'approximation gradient généralisé GGA, pour performer le calcul des gaps nous avons utilisé l'approximation mBJ.

Pour le ZnO pur

Nous avons vérifié à partir d'un calcul effectué sur le matériau le ZnO que les propriétés de l'état fondamentale de notre composé ainsi que les autres phases incluant, le constant de réseau d'équilibre, module de compression et sa dérivée est en bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux.

Il a été constaté que la phase Wurtzite (B4) est la phase la plus stable. D'après les graphes obtenus, les phases B1 et B2 sont des phases probables à la transition de ZnO à haute pression.

La structure de bande de notre matériau dans la phase la plus stable, présente un gap direct au point Γ . Mais, avec sous-estimation de sa valeur à cause de l'utilisation de l'approximation

de GGA, pour surmonter ce problème nous avons utilisé la méthode dite (mBJ) qui a pour rôle de corriger le gap pour confronté les valeurs expérimentales. On note que nos résultats sont très comparables aux travaux expérimentaux.

La structure de bande de notre matériau dans la phase la plus stable, présente un gap direct au point Γ . Mais, avec sous-estimation de sa valeur à cause de l'utilisation de l'approximation de GGA,

pour surmonter ce problème nous avons utilisé la méthode dite (mBJ) qui a pour rôle de corriger le gap pour confronté les valeurs expérimentales. On note que nos résultats sont très comparables aux travaux expérimentaux.

Le calcul de la densité d'état donne une explication détaillée de la contribution des différents orbitaux, ainsi nous signalons l'importance de l'effet de la bande 3d pour le ZnO

Pour le ZnO dopé

On signale l'apparition des bandes supplémentaires dans la région d'énergie -10 eV, qui sont dues à l'introduction de l'atome de Fluor (F). Le niveau de Fermi est décalé à l'intérieur de la bande de conduction, en produisant un caractère métallique de type n. Quand un électron est excité de la bande de valence vers les états de la bande de conduction pour occuper les états situés au minimum de la bande de conduction qui travaille comme une barrière supplémentaire qui s'ajoute dans la bande interdite, on peut justifier ce changement par le phénomène appelé l'effet de Burstein-Moss, cette dernière est due à l'augmentation de la largeur de l'énergie du gap optique.

Au voisinage du niveau de Fermi est caractérisé principalement par F-2p, peut être responsable premièrement de la conductivité électrique extrinsèque causé par le dopage du ZnO par le Fluor. On voit nettement la dépendance des états occupés au voisinage du niveau de Fermi de degré de dopage de Fluor et donc de niveau du dopant. En conséquence, il y a une influence sur la concentration en électrons altérée par la concentration de donneur.

L'amplitude de remplissage des états par le dopant augmente avec le taux de dopage de Fluor, qui signifie que la concentration en électron augmente dans la bande de conduction et par conséquent, la conductivité électrique dépend fortement du taux de dopage en Fluor.

References

- [1] P. Blaha, K. Schwaerz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, (2001). WIEN2K, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Vienna University of Technology, Vienna, Austria).
- [2] D. C. Langreth and J. P. Perdew (1980), Phys. Rev. B 21, 5469.
- [3] A. Schleife, F. Fuchs, J. Furthmüller, and F. Bechstedt (2006). Phys. Rev. B 73, 245212.
- [4] Murnaghan F. D. (1944) Proc. Nat. Acad. Sci. USA 30, 244.
- [5] A. S. Mohammadi, S. M. Baizae and H. Salehi (2011) World Applied Sciences Journal 14 (10): 1530-1536.
- [6] Charifi, H. Baaziz, and Ali Hussain Reshak (2007) phys. stat. sol. (b) 244, No. 9, 3154–3167.
- [7] A. Schleife, F. Fuchs, J. Furthmüller, and F. Bechstedt (2006). Phys. Rev. B 73, 245212.
- [8] A.J. Cinthia, G. Sudhapriyanga, (2014) Procedia Materials Science, 5, 1034.
- [9] H.I. Berrezouga, A.E. Merada, A. Zergab, Z. Sari Hassoun. (2015) Energy Procedia 74, 1517.
- [10] Rita John, S. Padmavathi, vCrystal Structure Theory and Applications, 5, 24,.
- [11] GUERINIK Amine, (2016) Mémoire de Magister, intitulé « Elaboration et caractérisation de couches minces de monoxyde de Zinc ZnO » ENPO, Oran.
- [12] Walter R. L. Lambrecht, Sukit. Limpijumng, and B. Segall, J. (1999) Nitride Semicond. Res. 4S1, G6.8.
- [13] P. Schroer, Krüger, P, et Pollmann, (1993) J phys. Rev. B 47, 6971.
- [14] Massidda, S., Resta, R., Posternak, M., et Baldereschi, (1995) A. Phys. Rev. B 52, 16977.
- [15] Girard R. T, Tjernberg, O., Chiaia, G., Söderholm, S., Karlsson, U. O., Wigren, C et Lindau, (1997) I. Surf. Sci. 373, 409.
- [16] U.H. Bakhtiar, R. Ahmed, R., Khenata, Ahmed R, Hussain, R. (2013) Materials Science in Semiconductor Processing 16 1162.
- [17] B. Amran., I. Chiboub, S. Hiadi, T. Benmessabih, N. Hamdadou. (2006) Solid State Commun. 137 395–399.
- [18] CUI, S, FENG, W, HU, H, FENG, Z et Wang, (2009) Y. Journal of Alloys and Compounds, vol. 476, no 1, 306.
- [19] Azam Soltani Mohammadi, Seyed. Mahdy Baizae and Hamdollah Salehi. (2011) World Applied Sciences Journal 14 (10): 1530-1536.
- [20] A. Mang, K. Reimann, S. Rubenacke, (1995) Solid State Commun. 94, 251.
- [21] Darma, Y. Setiawa, F. G. Majidi, M. A., Rusydi, A (2015), Adv. Mater. Res. 1112, 41.
- [22] Decremps, F, Datchi, F., Saitta, A. M., Polian, A., Pascarelli, S., Di Cicco, A et Baudalet, F. (2003) Phys. Rev. B., 68: 104101.
- [23] SLASSI, A., ZIAT, Y., ZARHRI, Z. Physica Scripta, (2015) vol. 90, no 8, 085801.
- [24] Moss T S, (1954) Proc. Phys. Soc. B 67.
- [25] Burstein E, (1954) Phys. Rev. 93 632.
- [26] Zhang, P., Tian, X., Cheng, G., Xie, Y., Zhang, H. et Wei, Z. J. (2013) Alloys Compd. 57631.
- [27] Shi Q, Zhou K, Dai M, Lin S, Hou H, Wei C and Hu F (2013) Vacuum 94 81.
- [28] Wu H-C, Peng Y-C and Chen C-C (2013). Opt. Mater. 35 509–15.
- [29] Zhou X H, Hu Q-H and Fu Y, (2008) J. Appl. Phys. 104 063703.
- [30] KHUILLI, M, FAZOUAN, N, EL MAKARIM, H. (2016) Journal of Alloys and Compounds, vol. 688, 368.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : www.cu-relizane.dz

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



L'utilisation de l'algorithme Génétique dans l'optimisation de la composition chimique de la vase issue du Dragage

Open
Access

Marouf Hafida^{1*}, Semcha Abdelaziz², Mahmoudi Nour-Eddine³

¹ Département de Génie Civil, Centre universitaire Belhadj Bouchaib, Ain Témouchent, Algérie

² Département de Génie Civil, Université Ahmed Draya, Adrar, Algérie

³ Département de Génie Mécanique, Université Dr. Moulay Tahar, Saida, Algérie.

Article history:

Received 17 April 2020

Received in revised form ... 19 April 2020...

Accepted 11 July 2020

Mots Clés: Valorisation; Vase; Caractérisation Chimique ; Brique ; Optimisation.

RESUME

Le taux d'envasement alarmant de nombreux barrages Algériens nécessite des opérations de curages urgentes. Dans cette étude nous nous intéressons au barrage de Bouhanifia qui se situe au nord ouest de l'Algérie, et qui fait l'objet d'actions curatives par les gestionnaires, avec la réalisation de bassins de capture de matériaux dragués.

Nous proposons la valorisation de la vase draguée en vue de son utilisation dans la technologie de confection de brique cuite. Une caractérisation complète a été faite sur ce matériau, d'où il ressort que ce dernier répond aux seuils recommandés pour une application dans le domaine de la céramique et que ses propriétés avoisinent celles des argiles exploitées en briqueteries.

Dans ce contexte, une méthodologie de gestion des sédiments et du matériel de base destinée à la fabrication de briques cuites, dans lequel nous abordons le problème du choix des échantillons de boue de dragage des barrages algériens en particulier (Barrage de Bouhanifia, à l'ouest de l'Algérie) et le choix de l'argile provenant de différents gisements.

Nous proposons une approche d'échantillonnage à l'aide d'un modèle d'optimisation informatique qui permet de résoudre et d'optimiser une caractérisation pour retenir l'échantillon le mieux adapté (chimiquement) en utilisant l'algorithme génétique.

Copyright © 2020 - All rights reserved

1. Introduction

L'Algérie dispose d'un parc de plusieurs barrages destinés à l'alimentation en eau potable et l'irrigation. Ces ouvrages en exploitation subissent un grand envasement en matériaux fins résultant de l'érosion. Parmi ces barrages, celui de Bou Hanifia situé au nord Ouest de l'Algérie sur Oued El Hammam, emmagasine actuellement des dizaines de millions de mètres cubes de vase correspondant à une perte de stockage pour l'eau. Des actions alternatives de dévasement sont incontournables pour permettre au barrage de continuer à sécuriser la ressource d'eau potable et les besoins de l'irrigation.

L'installation de 15 bassins de capture au voisinage du site de dragage tend à se préoccuper du devenir réel des vases et des boues de dragage.

Dans ce contexte, une méthodologie de gestion des sédiments et du matériel de base destinée à la fabrication de briques cuites, dans lequel nous abordons le problème du choix des échantillons de boue de dragage des barrages algériens en particulier (Barrage de Bouhanifia à l'ouest de l'Algérie) et le choix de l'argile provenant de différents gisements.

* Corresponding author. E-mail address: maroufhafida@yahoo.com

Nous proposons une approche d'échantillonnage à l'aide d'un modèle d'optimisation informatique qui permet de résoudre et d'optimiser une caractérisation pour retenir l'échantillon le mieux adapté (chimiquement) en utilisant l'algorithme génétique.

2. Contexte de la Recherche

Le barrage de Bouhanifia est situé au nord ouest d'Algérie à 20Km de Mascara. C'est un barrage en enrochement. Ce grand barrage connaît un envasement très important tenant compte du climat semi aride, et de la disposition en cascade des barrages qui se situe dans la région ouest (Ouzert en amont et Fergoug en aval de Bouhanifia), voir figure1. Le charriage continu des matériaux fins et entraîne le dépôt au pied du barrage des plus fines particules.

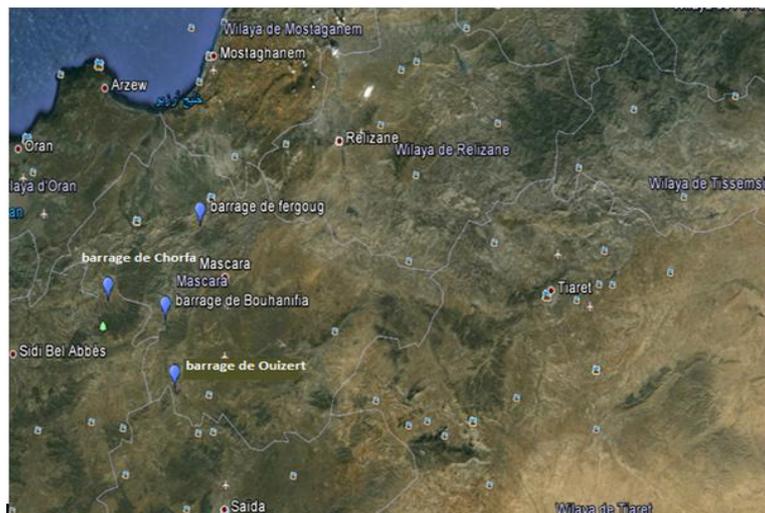


Figure.1 Disposition des barrages

Le dévasement de ce barrage a pour objectif de prolonger la durée de vie de cette infrastructure, et de récupérer sa capacité de stockage réduite par l'accumulation de la vase. Afin d'atteindre cet objectif quinze grands bassins de décantation des boues ont été aménagés près du barrage (Figures 2 et 3).



Figure.2 Opération de dragage



Figure.3 Evacuation et décantation de la boue de dragage

La préoccupation du devenir réel des vases et des boues de dragage est indispensable étant donné que ce matériau abandonné est considéré comme déchet au sens de la directive du 5 juillet 1975 (75-442) qui définit sous ce générique " tout résidu d'un processus de production, de transformation ou d'utilisation, toute substance, tout matériau produit ou, plus

généralement tout bien meuble abandonné, que son détenteur destine à l'abandon...ou qu'il est tenu d'abandonner". [OTV N°2, 1997]

Une caractérisation complète du matériau est primordiale avant tout traitement et réutilisation. La valorisation des sédiments fluviaux dans la brique à bâtir a fait l'objet de plusieurs études : vase du barrage+argile jaune pour la fabrication de la brique cuite à 900C° [Remini, 2006], sédiment du barrage de Fergoug pour la fabrication de la brique du type silico-calcaire [Semcha, 2006], valorisation de la vase de rivière polluée dans la brique d'argile [Zoubeir Lafhaj, 2007]. D'autres chercheurs ont travaillé sur les sédiments portuaires pour la conception de la brique cuite exemple [Benallal, 2011], [Andréa Mezencevova, 2012], par contre Martinez Garcia (2011) a valorisé la boue des eaux usées dans la céramique.

Dans ce contexte, une réflexion pour une utilisation rationnelle de ces sédiments a été menée dans les matériaux de construction et en particulier dans la fabrication de la brique cuite.

3. Le Principe de l'Algorithme Génétique

Les algorithmes génétiques ont la particularité de s'inspirer de l'évolution des espèces dans leur cadre naturel. Les espèces s'adaptent à leur cadre de vie qui peut évoluer, les individus de chaque espèce se reproduisent, créant ainsi de nouveaux individus, certains subissent des modifications, certains disparaissent. L'algorithme génétique va reproduire le modèle d'évolution dans le but de trouver des solutions pour un problème donné.

L'algorithme génétique de notre exemple est bâti comme suit : [Marouf, H. 2018]

- Une population sera un ensemble d'échantillons de vase draguée ou d'argiles de différents gisements
- Un individu sera une solution à un problème donné
- Un gène sera une partie d'une solution, donc d'un individu
- Une génération est une itération de notre algorithme

Dans la figure 4 illustre le fonctionnement de l'Algorithme génétique

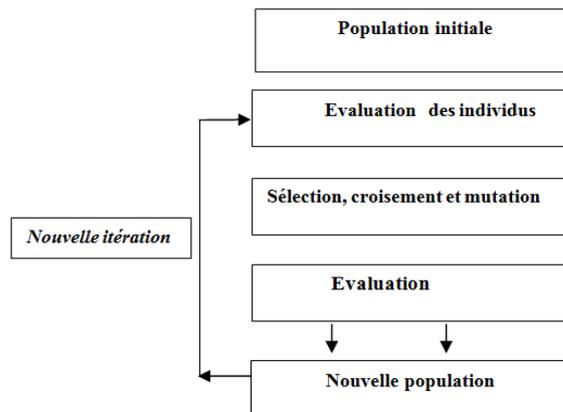


Figure.4 Le principe de l'Algorithme Génétique

Dans notre exemple on le fixe à 50 itérations. Parce que le nombre optimal des itérations doit être entre 10 et 500 itérations. Le modèle proposé est présenté dans la figure 5

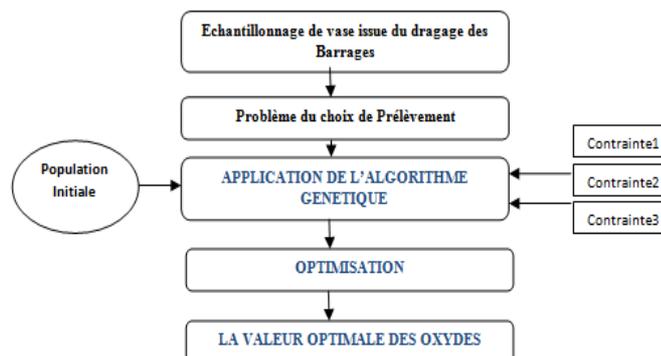


Figure.5 Modèle Proposé

4. Comparaison avec les argiles des Gisements d'Ouest Algérie

L'algorithme génétique commence par la sélection de la population. La population choisie se compose de dix gisements de l'Ouest Algérien. En suivant le principe des paramètres d'algorithme génétique, premièrement ont abouti aux résultats développés au tableau 1.

Tableau 1. La Sélection de la Population Initiale des Briqueteries

Selection		Croisement		Mutation		Meilleur individu		Meilleure composition	
N°	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	K ₂ O+N ₂ O ₃ +P ₂ O ₅	TiO ₂	L F
1	54.09	12.24	4.94	9.93	2.56	0.11	2.62	0.66	12.86
2	48.12	15.5	5.49	9.97	3.01	0.52	3.23	0.75	13.41
3	47.86	12.67	5.34	12.26	3.15	0.37	2.73	0.68	14.96
4	48.17	14.46	5.78	10.49	3.01	0.03	3.21	0.71	14.31
5	47.83	16.83	6.1	9.04	2.68	0.07	3.38	0.79	13.19
6	47.71	15.81	5.91	9.94	2.88	0.46	3.09	0.78	13.41
7	47.91	14.4	5.94	10.4	2.73	0.4	3.00	0.78	14.44
8	62.33	11.04	5.58	7.32	1.51	0.01	1.70	0.58	9.93
9	53.88	10.75	5.39	11.94	1.79	0.02	1.92	0.57	13.74
10	52	9.99	4.96	13.49	2.02	0.06	1.97	0.53	14.97

Deuxièmement à la meilleure composition tirée (voir tableau2). On comparant avec la composition chimique de la vase issue du barrage de Bouhanifia.

Tableau.2 Comparaison entre les compositions chimiques et la vase du barrage de Bouhanifia

Sélection		Croisement		Mutation		Meilleur individu		Meilleure Composition		
SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	K ₂ O+N ₂ O ₃	TiO ₂	L F	Fitness	
47.83	16.83	6.1	9.04	2.68	0.07	3.38	0.79	13.19	2.841	
Composition Chimique de la Vase issue du Barrage de Bouhanifia										
49.36	12.26	5.13	10.03	2.34	1.77	3.33	0.63	15.15	4.02	

5. Conclusion

En conclusion, dans cet article nous avons présenté les étapes d'une approche d'optimisation d'un ensemble d'échantillons qui répondent aux seuils recommandés pour l'analyse chimique de l'argile utilisée pour la fabrication d'une brique cuite. Le modèle utilisé est l'algorithme génétique qui nous a donné l'analyse chimique optimale d'un échantillon à adapter à la conception d'une brique cuite. L'étude expérimentale avait pour but, avec le choix de ce modèle, la comparaison entre différents échantillons analysés et la correction de leur composition chimique afin de trouver la formulation typique pour une application donnée. Indépendamment à la nature de l'application proprement dite cette méthode peut être appliquée à d'autres cas pour l'optimisation d'un paramètre donné.

References

- [1]. Collection OTV « TRAITER ET VALORISER LES BOUES ».Ouvrage collectif N°2 1997.
- [2]. Remini, B .2006 « VALORISATION DE LA VASE DES BARRAGES QUELQUES EXEMPLES ALGERIENS ». *Larhyss Journal*, ISSN 1112-3680, n° 05, Juin 2006, pp.75-89
- [3]. Semcha, A. 2006 « VALORISATION DES SEDIMENTS DE DRAGAGE : APPLICATIONS DANS LE BTP, CAS DU BARRAGE DE FERGOUG ».Thèse doctorat Université de Reims Champagne-Ardenne France.
- [4]. Lafhaj, Z. 2007 « Polluted river sediments from the North region of France: Treatment with Novosol_ process and valorization in clay bricks » *Construction and Building Materials* 22 (2008) 755–762.
- [5]. Benallal, L. 2011 « Valorisation des sédiments de dragage portuaire du nord du Maroc dans des matériaux de construction en terre cuite ». Coastal and Maritime Mediterranean Conference.
- [6]. Mezencevova, A.2012 « Utilization of Savannah Harbor river sediment as the primary raw material in production of fired brick » *Journal of Environmental Management* 113 (2012) 128-136.
- [7]. Martinez, G. 2011 « Sludge valorization from wastewater treatment plant to its application on the ceramic industry ». *Journal of Environmental Management* 95 (2012) S343-S348.
- [8]. Marouf, H. 2018 « GENETIC PROGRAMMING FOR BRICK'S CHEMICAL ANALYSIS MODELLING ». *Journal of Fundamental and Applied Sciences* ISSN 1112-986. 2018, 10(2), 321-335.