Modélisation et simulation numérique de la thermomécanique des écoulements dans les co-malaxeurs

Lucas Sardo

▶ **To cite this version:**

Lucas Sardo. Modélisation et simulation numérique de la thermomécanique des écoulements dans les co-malaxeurs. Matériaux et structures en mécanique [physics.class-ph]. Université Paris sciences et lettres, 2016. Français. NNT : 2016PSLEM044 . tel-01649228

HAL Id: tel-01649228
https://pastel.hal.science/tel-01649228

Submitted on 27 Nov 2017

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

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

THÈSE DE DOCTORAT

de l'Université de recherche Paris Sciences et Lettres
PSL Research University

Préparée à MINES ParisTech

Modélisation et simulation numérique de la thermomécanique des écoulements dans les co-malaxeurs

École doctorale n°364

SCIENCES FONDAMENTALES ET APPLIQUÉES

Spécialité MÉCANIQUE NUMÉRIQUE ET MATÉRIAUX

COMPOSITION DU JURY :

M Christian CARROT
Université de Saint-Etienne, Président

M Amine AMMAR
Arts et Métiers ParisTech, Rapporteur

M José A. COVAS
University of Minho, Rapporteur

Mme Chantal DAVID
Sciences Computers Consultants, Examinatrice

M. Jean Jacques FLAT
Arkema, Examinateur

M Rudy VALETTE
Mines-Paristech, Directeur de thèse

M Bruno VERGNES
Mines-Paristech, Co-directeur de thèse

M Richard BOTTET
Gerflor, Invité

Soutenue par **Lucas SARDO**
le 19 Juillet 2016

Dirigée par **Rudy VALETTE**
ET **Bruno VERGNES**

MINES ParisTech | PSL RESEARCH UNIVERSITY PARIS

Remerciements

Tout d'abord, je souhaite remercier Rudy Valette et Bruno Vergnes de m'avoir proposé cette thèse. Je les remercie également pour leur disponibilité et leurs conseils durant les 3 ans et quelques de la thèse.

Je souhaite également remercier tous les membres de mon jury de thèse pour avoir accepté d'évaluer mon travail.

Je remercie également l'ensemble des partenaires du projet ANR LUCOMAX dans lequel s'inscrit cette thèse. Merci à Benjamin Monchatre, également doctorant au cœur du projet, pour toutes les discussions permettant de mieux cerner le fonctionnement du co-malaxeur ainsi qu'à ses encadrants. Je remercie également les partenaires industriels du projet pour les informations fournies et les éléments de vis du co-malaxeur qu'ils m'ont fourni tout au long de cette thèse.

Je remercie également l'ensemble des personnels de la délégation et du Cemef qui m'ont permis de réaliser ma thèse et ma soutenance dans de bonnes conditions.

Je remercie l'ensemble de mes collègues de promo et autres que j'ai côtoyé au quotidien durant cette thèse et qui ont fait qu'elle s'est déroulée dans une bonne ambiance. Notamment Valentin avec qui j'ai partagé le bureau, de nombreux cafés durant 3 ans, Stéphanie, alias Raïbeur, pour ses visites lors de sa régulière tournée des bureaux, et aussi Jérôme, Guillaume, Valentine et José.

Je tiens également à remercier mes parents, mon frère, mes amis et Yasmina pour leur soutien notamment pour la rédaction.

Table des matières

Introduction **1**

1 Bibliographie **3**
1.1 Analyse mécanique du mélange 4
1.2 Le co-malaxeur 5
1.2.1 Les éléments courants du co-malaxeur 7
1.2.1.1 Les éléments de transport 7
1.2.1.2 Les éléments de mélange 8
1.2.1.3 Les éléments bague de restriction 9
1.2.2 Les oscillations et les doigts de malaxage 10
1.3 Modélisation de l'extrusion monovis 12
1.3.1 Hypothèses usuelles de la modélisation d'une extrudeuse monovis . 13
1.3.2 Modélisation mécanique 14
1.3.3 Prise en compte de la thermique 15
1.3.4 Courbes caractéristiques 16
1.4 Modélisation du co-malaxeur 18
1.5 Simulation 3D d'un co-malaxeur 43
1.6 Conclusion : Objectif d'une modélisation, les apports et les questions . . . 54

2 Modèle mécanique et résolution numérique de l'écoulement dans le co-malaxeur **57**
2.1 Les hypothèses simplificatrices 58
2.2 Le modèle mécanique 59
2.3 Implémentation 66
2.3.1 Formulation faible 66
2.3.2 Conditions aux limites 68
2.3.2.1 Condition de Dirichlet 68
2.3.2.2 Condition de Neumann 68
2.3.2.2.1 Imposer un débit 68
2.3.2.2.2 Imposer la non-pénétration du polymère 68
2.3.2.3 Conditions de périodicité 69
2.3.3 Organigramme du code 70
2.4 Validation du modèle 72
2.4.1 Écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles 72

2.4.2 Ecoulement avec hauteur variant dans le chenal 72
2.4.3 Ecoulement de Poiseuille avec continuité droite-gauche 72
2.4.4 Convergence du code 74
2.4.5 Comparaison 2D-3D au niveau des bagues de restrictions 76
2.5 Prise en compte des oscillations et des doigts de malaxage 77
2.5.1 La vitesse d'oscillation 77
2.5.1.1 Prise en compte de la vitesse d'oscillation 77
2.5.1.2 Impact de la vitesse d'oscillation sur le débit 78
2.5.1.3 Imposer un débit au cours de l'oscillation 79
2.5.1.3.1 Imposer un débit fixe 79
2.5.1.3.2 Imposer un débit moyen sur une rotation 80
2.5.1.3.3 Évaluation de ces deux méthodes 80
2.5.1.3.4 Imposer un débit basé sur un type d'élément . . . 82
2.5.2 La prise en compte des doigts de malaxage 89
2.5.2.1 Ajout des doigts de malaxage au maillage 89
2.5.2.2 Imposer la forme des doigts de malaxage 89
2.5.2.3 Imposer la non-pénétration du polymère 91
2.5.3 Influence des doigts de malaxage sur l'écoulement 91
2.5.4 Conclusion 93

3 Équation de transport, thermique, gestion du remplissage, indice de mélange et résolution numérique 97
3.1 Le modèle thermique 98
3.2 Implémentation numérique d'une équation de transport 100
3.2.1 Prise en compte du sous-remplissage 100
3.2.1.1 Gestion du sous-remplissage par volumes finis 100
3.2.2 Gestion du sous-remplissage par éléments finis - La méthode level set 102
3.2.2.1 Formulation faible de la level set 103
3.2.2.1.1 Validation et tests de Zalesak 103
3.2.2.1.2 Stabilisation avec la méthode SUPG 104
3.2.2.1.3 Tests de remplissage 106
3.2.3 Redistanciation de l'interface 107
3.2.4 Filtrer la fonction level set 108
3.3 Implémentation numérique du modèle thermique 109
3.3.1 Formulation faible de l'équation de la thermique 109
3.3.2 Conditions aux limites 110
3.3.2.1 Température imposée en entrée 111
3.3.2.2 Transfert thermique aux parois 111
3.3.3 Organigramme du code - Couplage thermo-mécanique 111
3.3.4 Validation du modèle thermique 111
3.3.5 Exemple de résultats 113
3.4 Suivi de déformation 114

3.5 Conclusion 118

4 Etude paramétrique du modèle et comparaison aux données expérimentales 121

4.1 Étude paramétrique 123
4.2 Comparaison avec les données expérimentales 128
4.2.1 Comparaison des températures 128
4.2.2 Comparaison des pressions et des longueurs de remplissage 137
4.2.3 Comparaison des taux de remplissage 140

5 Conclusions et perspectives 149

Références 151

Introduction

De nos jours, de nouveaux matériaux polymères sont créés pour répondre à des besoins de plus en plus spécifiques, tels que des matériaux peu denses, plus résistants, ignifuges, antistatiques et qui respectent les nouvelles normes environnementales telles REACH. Ces matériaux complexes nécessitent une mise au point rapide dans un marché concurrentiel. Afin de réaliser ces nouveaux matériaux, différents procédés de mélange existent, comme les extrudeuses monovis ou bi-vis, les mélangeurs internes ou encore les co-malaxeurs de type BUSS. Les procédés les plus utilisés sont les extrudeuses bi-vis et les co-malaxeurs. Les extrudeuses bi-vis ont été étudiées depuis de nombreuses années et des logiciels commerciaux existent déjà pour simuler les écoulements et prédire les propriétés finales du mélange, alors que ce n'est pas encore le cas pour le co-malaxeur, inventé en 1945. Ce dernier est donc généralement utilisé comme une boîte noire, du fait de la complexité de ses écoulements.

En effet, le co-malaxeur est une extrudeuse monovis qui, comme toutes les extrudeuses, effectue une rotation, mais de plus, oscille d'avant en arrière. Les filets de la vis sont interrompus et des doigts de malaxage sont fixés sur le fourreau. Le profil de cette vis est également entièrement modulable. Le co-malaxeur est connu pour mélanger efficacement, tout en ayant des taux de cisaillement relativement faibles, donnant donc lieu à peu d'échauffement thermique, ce qui est nécessaire pour les polymères thermo-sensibles.

Cette thèse s'inscrit dans un projet soutenu par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR), le projet LUCOMAX. Au sein de ce projet sont présents deux laboratoires de recherche, trois industriels utilisateurs du co-malaxeur et un éditeur de logiciel. Le but de ce projet est de produire un logiciel permettant de décrire les écoulements dans le co-malaxeur ainsi que de prédire les propriétés du produit final. Ce logiciel devrait permettre aux industriels de tester numériquement de nombreux profils et paramètres procédés en peu de temps, afin de réduire le temps de mise au point d'un nouveau produit. Pour ce faire, une étude expérimentale du co-malaxeur est nécessaire. Cette partie a été réalisée par le laboratoire IMP de l'Université de Saint Étienne. Dans ce cadre là, un co-malaxeur de diamètre 30 mm a été acquis pour le projet et les essais expérimentaux ont été réalisés sur cette machine. La petite taille du co-malaxeur de laboratoire ne permet malheureusement pas l'installation de capteurs de pression le long de la vis. Les données expérimentales concernent donc essentiellement des mesures de température, des taux de remplissages, des distributions de temps de séjour, ainsi que le couple fourni par la machine. L'ensemble de ces données expérimentales ainsi que celles fournies par les trois industriels du projet,

utilisateurs de co-malaxeurs de taille industrielle, permettront de valider le modèle développé.

Cette thèse porte sur la modélisation des écoulements dans le co-malaxeur. Il s'agit de développer un modèle permettant de calculer en un temps réduit l'écoulement dans un co-malaxeur. Il appartiendra donc de trouver un bon compromis entre le temps de calcul et la précision des résultats. La simulation devant fournir rapidement des résultats, et compte tenu de la complexité de la géométrie du co-malaxeur, nous nous concentrerons sur un modèle 2D, fournissant un relativement bon compromis. Dans un premier temps, le chapitre bibliographique présentera le co-malaxeur ainsi que les précédentes études expérimentales et modélisations, puis, par la suite, seront présentés le modèle thermomécanique, son implémentation numérique et la confrontation du modèle aux données expérimentales issues des travaux de l'IMP.

Chapitre 1

Bibliographie

Sommaire

1.1 Analyse mécanique du mélange 4

1.2 Le co-malaxeur 5

1.2.1 Les éléments courants du co-malaxeur 7

1.2.2 Les oscillations et les doigts de malaxage 10

1.3 Modélisation de l'extrusion monovis 12

1.3.1 Hypothèses usuelles de la modélisation d'une extrudeuse monovis 13

1.3.2 Modélisation mécanique 14

1.3.3 Prise en compte de la thermique 15

1.3.4 Courbes caractéristiques 16

1.4 Modélisation du co-malaxeur 18

1.5 Simulation 3D d'un co-malaxeur 43

1.6 Conclusion : Objectif d'une modélisation, les apports et les questions 54

1.1 Analyse mécanique du mélange

Les extrudeuses sont de plus en plus utilisées dans le but de développer des matériaux composites répondant aux nouvelles demandes des utilisateurs. Ces extrudeuses ont pour rôle de disperser des charges dans une matrice polymère. D'un côté, les agglomérats doivent être cassés en agglomérats plus petits, c'est ce qui est appelé le mélange dispersif. De l'autre, la charge doit être équitablement répartie dans le polymère, c'est le mélange distributif (Figure 1.1).

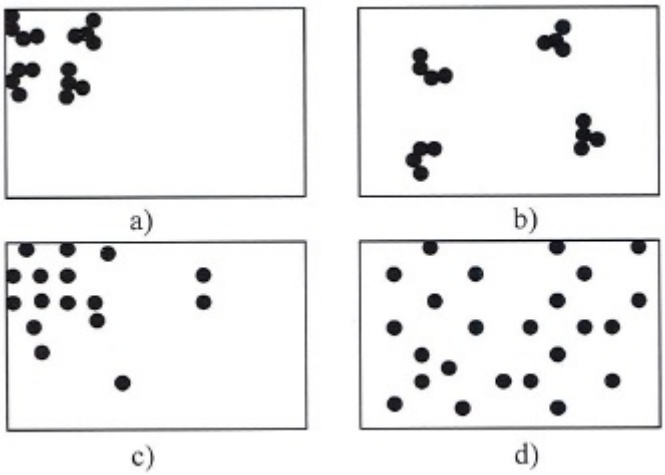


FIGURE 1.1 – Exemples de mélange a) mal dispersé, mal distribué b) mal dispersé, bien distribué ; c) bien dispersé, mal distribué ; d) bien dispersé, bien distribué (d'après Manas-Zloczower, 1997)

Afin d'évaluer numériquement les capacités de mélange des extrudeuses et de leur profil, il faudra estimer leur capacité concernant à la fois les mélanges dispersif et distributif. Pour des écoulements 3D mais également 2D, il est possible d'évaluer à partir des trajectoires le mélange distributif. A partir des vitesses d'écoulement en chaque point du domaine, on calcule au cours du temps la distance entre ces deux points initialiement proches (Froeschlé, 1984). Le mélange peut donc être estimé par ce que l'on appelle l'allongement moyen :

$$\lambda = \frac{||M\ M'||}{||M_0\ M_0'||} \tag{1.1}$$

avec M_0 et M_0', la position initiale des deux points considérés et M et M', la position de ces deux points à l'instant t. Il est également possible de calculer numériquement des distributions de temps de séjour. Ceci peut s'effectuer en résolvant dans l'écoulement complet l'équation suivante :

$$\frac{dt}{dt} = \frac{\partial t}{\partial t} + \vec{v}\nabla t = 1 \tag{1.2}$$

avec t, le temps et v, le champ de vitesses. Une deuxième méthode consiste à utiliser des lâchers de particules. Néanmoins, beaucoup de particules peuvent être perdues durant la résolution des trajectoires, certaines trajectoires pouvant sortir du domaine de calcul. Ceci nécessite un maillage fin et donc des temps de calcul très longs, que ce soit pour

l'écoulement mécanique ou pour le suivi des particules. Il est donc nécessaire d'en lâcher un très grand nombre pour compenser la perte. A partir des positions des particules au cours du temps, il est possible d'estimer l'efficacité de l'extrudeuse à mélanger. Une troisième méthode pour évaluer le mélange et les séparations des écoulements est le mapping (Meijer *et al.*, 2009). Pour cela, on trace virtuellement des lignes sur le domaine et l'on observe au cours du temps l'évolution des lignes suite à leur transport par les vitesses d'écoulement dans le domaine. (Figure 1.2).

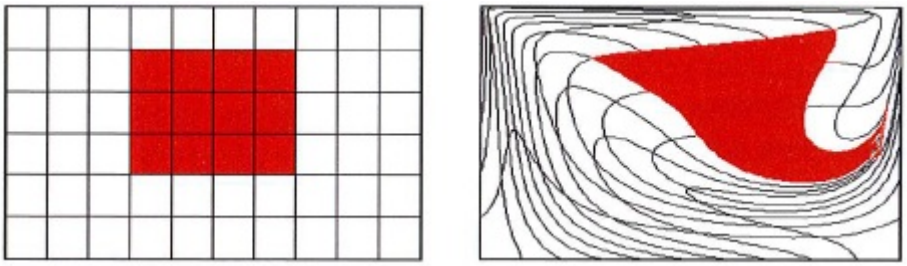


FIGURE 1.2 – Exemple de mapping sur une grille déformée par un écoulement (Meijer *et al.*, 2009)

Pour le mélange dispersif, il est beaucoup plus difficile de le quantifier puisque chaque type d'écoulement peut donner lieu à des états de dispersion différents. Manas-Zloczower (1994) propose un coefficient évaluant le mélange dispersif à partir du cisaillement et de la composante de vorticité de l'écoulement.

$$\alpha = \frac{|\bar{\dot{\gamma}}|}{|\bar{\dot{\gamma}}| + |\bar{\dot{\omega}}|} \tag{1.3}$$

avec $|\ \bar{\dot{\gamma}}\ |$, le taux de cisaillement moyen et $|\ \bar{\dot{\omega}}\ |$ la valeur absolue de la vorticité moyenne. Pour un écoulement cisaillant pur, $\alpha = 0.5$. Un mélange dispersif efficace se traduit par des valeurs de α proches de 1, car ce sont les sollicitations élongationnelles qui favorisent le mélange dispersif, mais il faut néanmoins également prendre en compte les contraintes en plus du coefficient α.

1.2 Le co-malaxeur

Le co-malaxeur est une extrudeuse particulière inventée en 1945 par Heinz (1950) et initialement commercialisée par la société BUSS AG. Cette extrudeuse dispose de bonnes capacités de dispersion et de distribution des charges. Elle est couramment utilisée pour la gélification du PVC ou la dispersion de fibres, d'additifs ou de noir de carbone dans des matrices polymères. Le co-malaxeur est composé de deux unités d'extrusion (Figure 1.3) ; la première partie du co-malaxeur est la zone destinée au "mélange", tandis que la deuxième partie est une extrudeuse monovis de reprise, destinée à lisser le débit pulsé sortant du co-malaxeur et à mettre le produit en pression au niveau de la filière fixée à son extrémité.

La société BUSS AG est le principal constructeur de co-malaxeurs dans le monde. Elle propose différentes tailles et configurations de la vis principale du co-malaxeur selon les

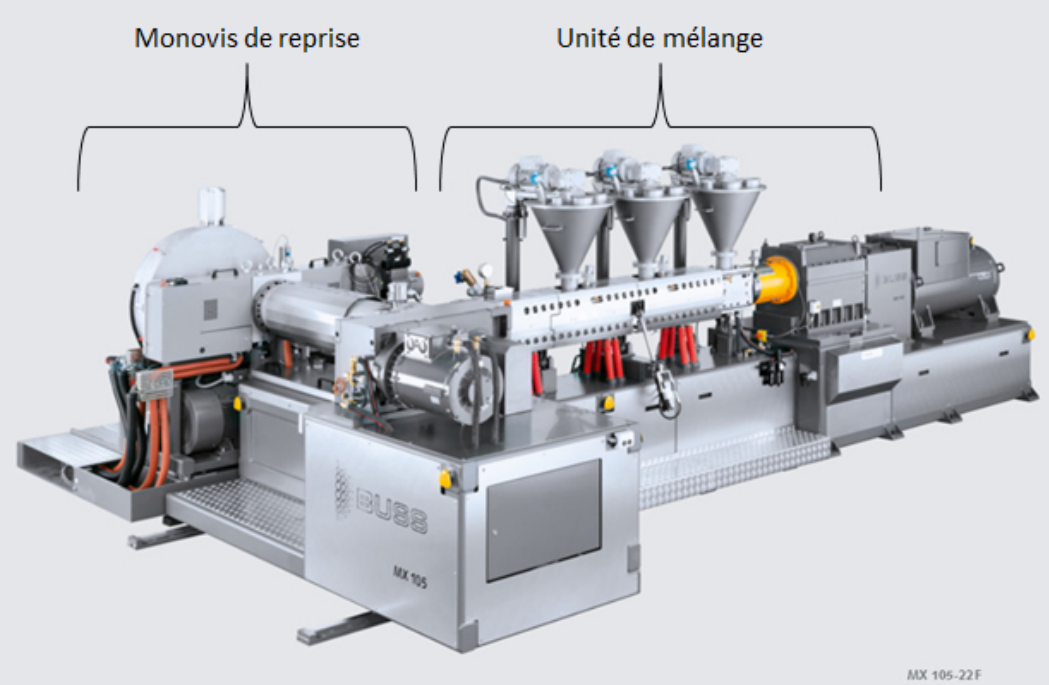


FIGURE 1.3 – Photo d'un co-malaxeur Buss MX 105, L/D = 22 (Buss Corporation)

usages souhaités. Cette vis principale peut avoir des diamètres compris entre 30 mm et 750 mm, des longueurs comprises entre 7 et 22 L/D, avec L/D le rapport entre la longueur et le diamètre de la vis de l'extrudeuse, et des débits compris entre 5 et 90 000 $kg \cdot h^{-1}$. Le co-malaxeur est une extrudeuse monovis mais, contrairement aux autres monovis « classiques », celle-ci se différencie par des interruptions de filets, une géométrie modulaire faite d'éléments interchangeables, un mouvement oscillatoire de la vis, et des doigts de malaxage fixés sur la face intérieure du fourreau (Figure 1.4). De plus, elle fonctionne essentiellement en sous-remplissage. En effet, les éléments de transport des profils sont souvent partiellement remplis. Grâce aux interruptions de filets et à l'oscillation de la vis, le polymère passe de chenaux en chenaux et donc se mélange efficacement.

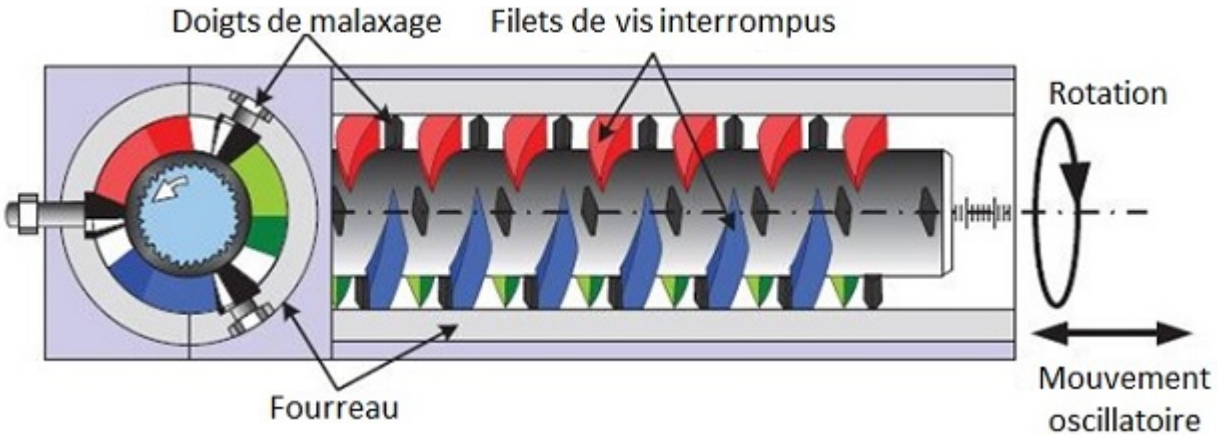


FIGURE 1.4 – Schéma du fonctionnement d'un co-malaxeur (Brito Bazan, 2011)

Les éléments de vis, que l'on détaillera dans la section suivante (§1.2.1), peuvent présenter trois ou quatres interruptions de filet selon le modèle. Dans le cas de notre projet, un co-malaxeur trois ailettes D = 30 mm a été acquis, nous nous concentrerons donc sur les

co-malaxeurs trois ailettes. D'autres sociétés commercialisent des extrudeuses ayant des géométries de vis et des caractéristiques très similaires.

1.2.1 Les éléments courants du co-malaxeur

Comme nous l'avons vu ci-dessus, la vis principale du co-malaxeur est modulable. Nous allons donc voir ici les principales caractéristiques des éléments les plus utilisés dans un co-malaxeur. Les trois éléments les plus couramment utilisés sont :

— Les éléments de transport (notés EZ pour Einzugelemente en allemand)
— Les éléments de mélange (notés KE ou KN pour Knetelemente en allemand)
— Les éléments bague de restriction (notés ST pour Stauringelemente en allemand)

Dans la section suivante, nous présenterons les éléments de co-malaxeur utilisés sur le co-malaxeur BUSS MK30, celui utilisé pour la partie expérimentale du projet. Toutefois, nous savons que la géométrie des éléments est similaire, quelle que soit la taille du co-malaxeur.

1.2.1.1 Les éléments de transport

Cet élément est un élément de vis monofilet avec une seule interruption de filet (Figure 1.5) et son rôle principal est de transporter le polymère.

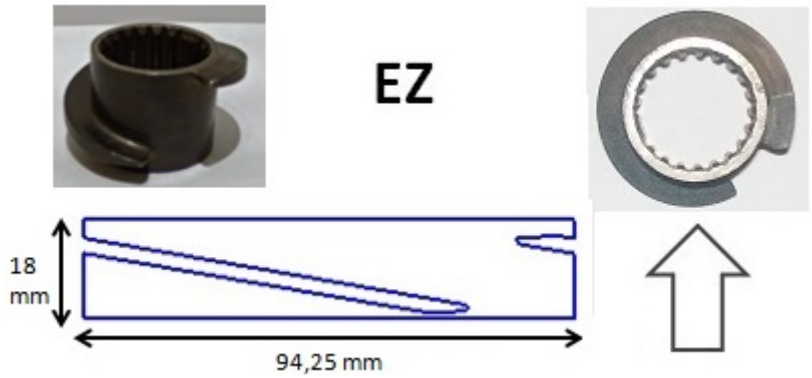


FIGURE 1.5 – Vue déroulée et photo de l'élément EZ du MK30

Il existe deux types de variantes à cet élément, un élément avec des interruptions de filets plus grandes (Figure 1.6.a) et un élément avec un pas plus grand (Figure 1.6.b).

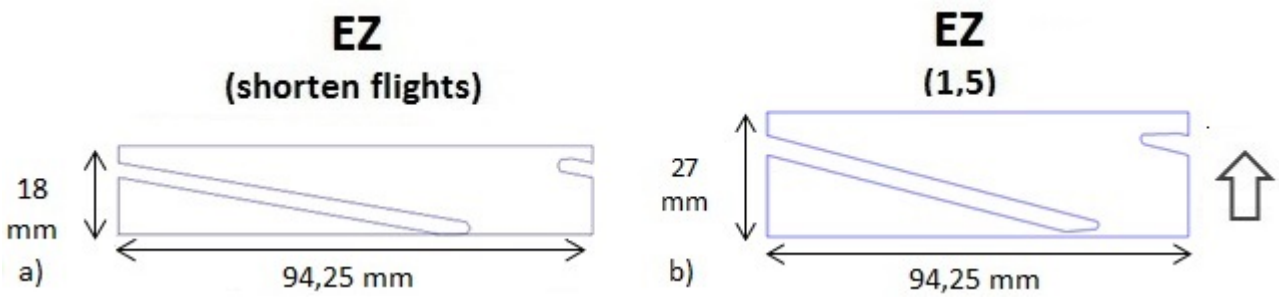


FIGURE 1.6 – Plan, cote et vue "déroulée" des variantes des éléments EZ du MK30

Dans le cas du co-malaxeur BUSS du projet, le MK30, les principales caractéristiques de

cet élément sont notées dans le tableau 1.1.

Tableau 1.1 – Dimensions des éléments de transport (EZ) pour un MK30

	EZ	EZ (1.5)
Diamètre extérieur (mm)	30	30
Hauteur (mm)	5	5
Longueur (mm)	18	27
Angle du filet (°)	9,8	15,96
Largeur du chenal (mm)	15,30	24,14
Nombre de doigts de malaxage	2	2

Comme nous pouvons le voir sur la Figure 1.7, si l'on joint deux éléments, l'on s'aperçoit que les filets des éléments de transport ne sont pas alignés.

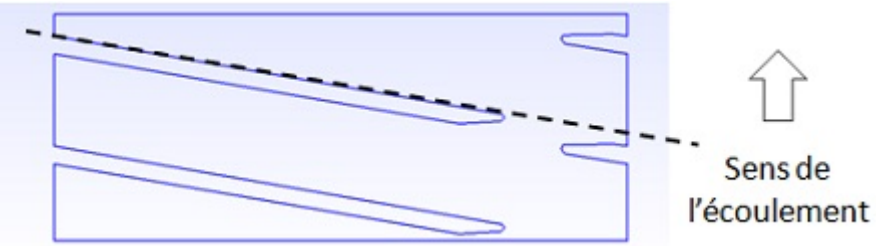


FIGURE 1.7 – Schéma montrant le non-alignement des filets sur des éléments de transport (EZ)

1.2.1.2 Les éléments de mélange

Cet élément de vis est un élément bi-filet utilisé pour mélanger le polymère. En effet, comme nous pouvons le voir sur la Figure 1.8, cet élément dispose de trois interruptions de filet. Toutes ces interruptions de filets doivent permettre des séparations et recombinaisons multiples des flux.

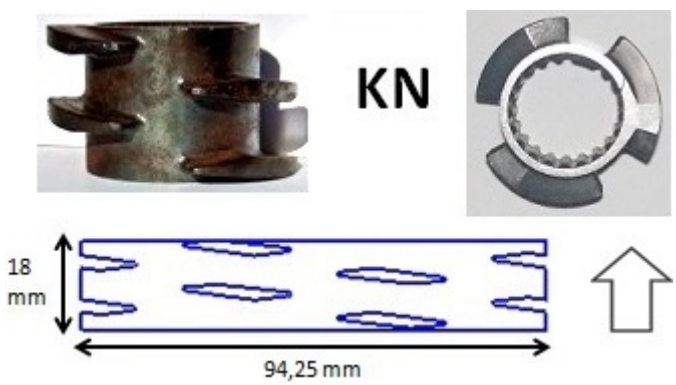


FIGURE 1.8 – Plan, cote et vue "déroulée" de l'élément KN du MK30

Nous pouvons également remarquer que, ici aussi, les filets ne sont pas alignés (Figure 1.9).

FIGURE 1.9 – Schéma montrant le non-alignement des filets sur des éléments de mélange (KN)

Il existe pour cet élément également deux variantes couramment utilisées ; la première (Figure 1.10.a) est un élément de malaxage avec des interruptions de filets plus grandes, tandis que la seconde (Figure 1.10.b) est un élément plus court (demi-élément).

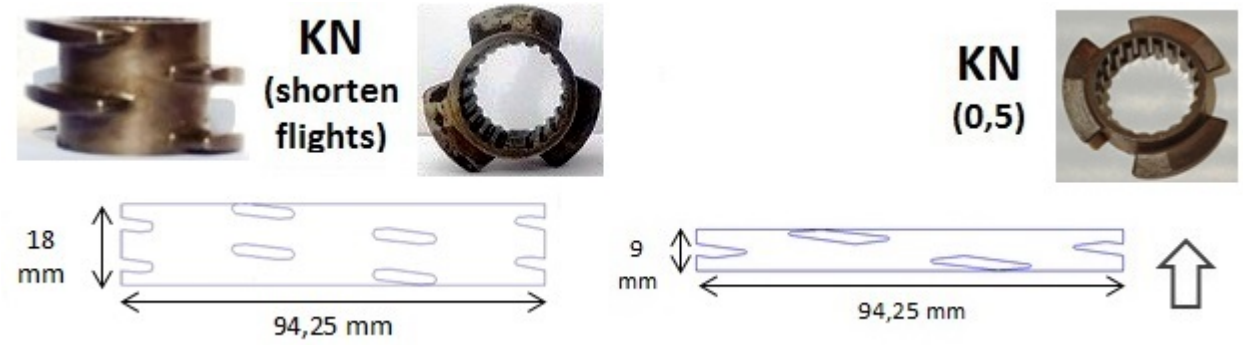


FIGURE 1.10 – Plan, cote et vue "déroulée" des variantes des éléments KN du MK30

Les principales caractéristiques des éléments de mélange du co-malaxeur BUSS du projet, le MK30, sont notées dans le tableau 1.2.

Tableau 1.2 – Dimensions des éléments de mélange (KN) pour un MK30

	KN (1)	KN (0.5)
Diamètre extérieur (mm)	30	30
Hauteur (mm)	5	5
Longueur (mm)	18	9
Angle du filet (°)	6,3	6,3
Largeur du chenal (mm)	6,53	6,53
Nombre de doigts de malaxage	6	3

1.2.1.3 Les éléments bague de restriction

L'élément bague de restriction se compose d'un élément similaire à un élément de mélange suivi d'un élément de transport (Figure 1.11) et d'une bague de restriction (Figure

1.12) fixée en vis à vis sur le fourreau, qui permet de réduire la hauteur du chenal. Cet élément a une double fonction ; il permet d'améliorer la fusion du polymère dans la première partie du co-malaxeur - le polymère étant comprimé par l'oscillation et les doigts de malaxage sur la bague de restriction qui limite fortement la possibilité pour des granulés de passer - et, dans la deuxième partie du co-malaxeur dans laquelle le polymère est fondu, la réduction de hauteur le met en pression et donc permet d'imposer un remplissage des éléments présents en amont.

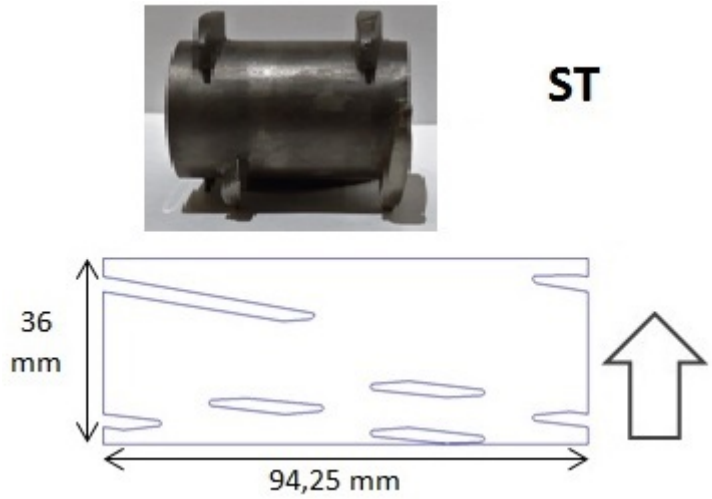


FIGURE 1.11 – Plan, cote et vue "déroulée" de l'élément ST du MK30

FIGURE 1.12 – Photo de bagues de restriction (Monchatre, 2015)

Plusieurs coquilles, de différents diamètres permettant de modifier la hauteur du chenal d'écoulement, sont disponibles.

1.2.2 Les oscillations et les doigts de malaxage

Comme nous l'avons vu auparavant, la vis principale du co-malaxeur effectue un mouvement oscillatoire en plus du mouvement de rotation habituel. La course peut être décrite par une sinusoïde :

$$Z(t) = A * cos(\omega t); \tag{1.4}$$

avec A, l'amplitude, ω la fréquence, $\omega = 2\pi\ N(rpm)/60$ et t le temps. Le co-malaxeur est également doté de doigts de malaxage vissés sur le fourreau. Les doigts de malaxage

étant fixés sur le fourreau, leur trajectoire relative est donnée par les mouvements de la vis. (Figure 1.13)

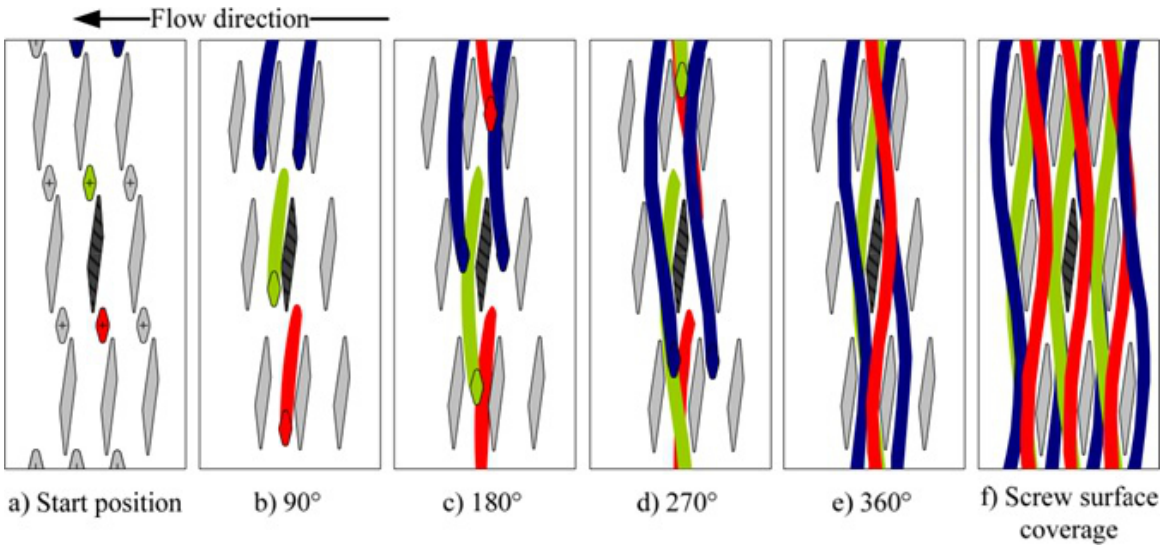


FIGURE 1.13 – Trajectoires des doigts de malaxage dans un élément de mélange au cours d'une rotation (Brito Bazan, 2011)

Il existe différents types de doigts de malaxage (Figure 1.14). Pour chaque profil de vis, selon le type d'éléments, certaines positions peuvent accueillir des doigts de malaxage, d'autres doivent impérativement être libres afin de permettre la rotation de la vis. Pour modifier le cisaillement, il est, par exemple, possible de retirer un doigt de malaxage pour le remplacer par un doigt "bouchon", doigt de malaxage affleurant la surface interne du fourreau.

FIGURE 1.14 – Photos des différents doigts de malaxage d'un MK30 (Monchatre, 2015) a) doigt de malaxage, b) demi-doigt de malaxage, c) doigts bouchon, d) doigts de malaxage permettant l'injection d'un liquide via un trou d'environ 1 mm

Le rôle des doigts de malaxage est, selon la brochure du constructeur (Figure 1.15), de créer localement une forte vitesse de déformation lorsque le doigt de malaxage se trouve très proche du filet de la vis.

$$\dot{\gamma} = \frac{\pi D N}{s\ 60} \tag{1.5}$$

avec D, le diamètre, N, la vitesse de rotation en tour par minute et s, la distance entre le doigt de malaxage et le filet ; cette valeur dépend de la taille du co-malaxeur ainsi que

des doigts de malaxage choisis.

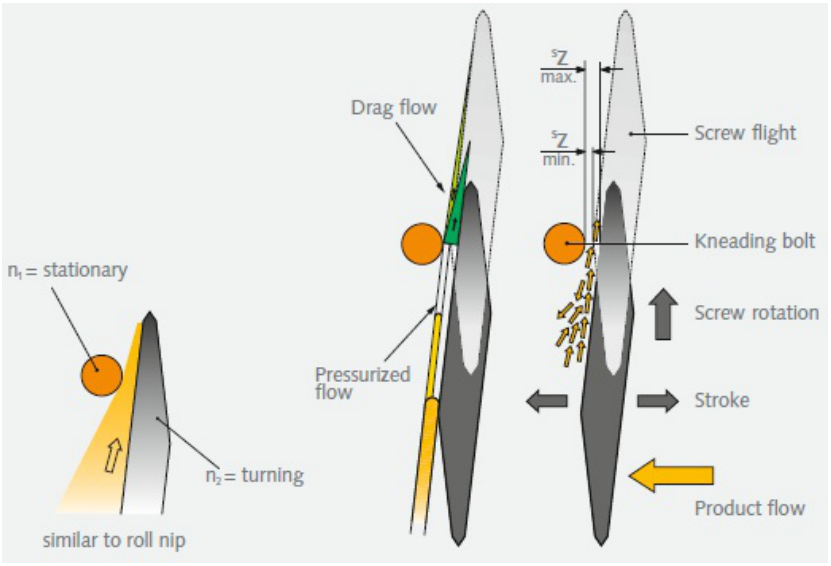


FIGURE 1.15 – Description schématique du rôle du doigt de malaxage (BUSS SA, 2015)

1.3 Modélisation de l'extrusion monovis

Dans ce paragraphe, nous décrirons les notions de base de l'extrusion monovis. Pour plus de détails, nous renvoyons à la lecture d'ouvrages de référence (Vergnes et Puissant, 2002; Agassant *et al.*, 2014; Lafleur et Vergnes, 2014)

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, la fusion du polymère dans le co-malaxeur s'effectue dans la première partie de l'extrudeuse grâce aux doigts de malaxage, aux oscillations et à la bague de restriction. Nous allons, dans notre cas, modéliser uniquement le transport et l'écoulement du polymère fondu et donc, négliger cette partie. Les extrudeuses monovis couramment utilisées peuvent être modélisées en considérant 3 zones différentes (Figure 1.16) :

— la zone d'alimentation, où le polymère solide est convoyé ;
— la zone de fusion-plastification, où le polymère fond et où il est mis sous pression grâce à une variation de la profondeur du chenal ;
— la zone de pompage, zone où le polymère est fondu et dans laquelle la profondeur du chenal est fixe.

Dans notre cas, la modélisation concerne la partie du co-malaxeur avec une profondeur de chenal plutôt constante et dans laquelle le polymère est fondu. Par analogie, on se rapproche donc de la zone de pompage.

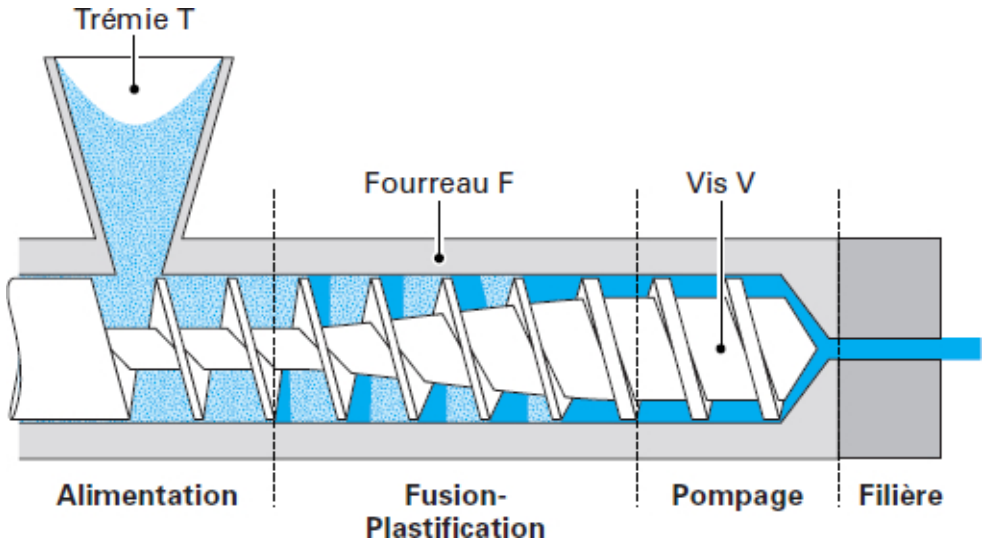


FIGURE 1.16 – Zones phénoménologiques d'une extrudeuse (Vergnes et Puissant, 2002)

1.3.1 Hypothèses usuelles de la modélisation d'une extrudeuse monovis

Une des principales difficultés de la modélisation des écoulements dans une extrudeuse monovis est la géométrie du chenal dans lequel le polymère s'écoule. La vis a une géométrie hélicoïdale et, du fait de sa rotation, elle est instationnaire. Pour simplifier cela, deux hypothèses sont couramment faites (McKelvey, 1962; Tadmor et Gogos, 2006) ; la première consiste à dérouler le chenal de la vis (Figure 1.17), le chenal obtenu est alors rectangulaire et rectiligne.

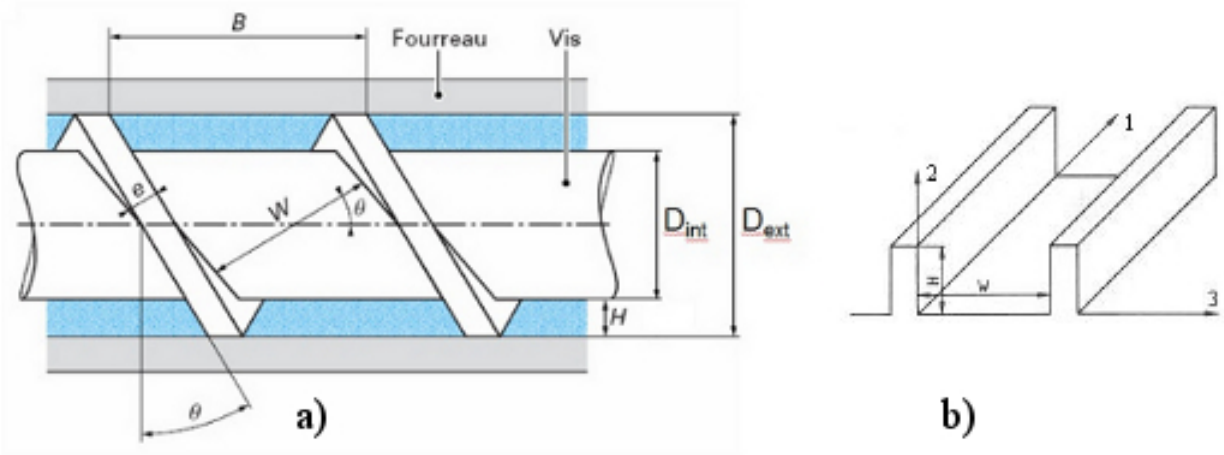


FIGURE 1.17 – Schéma du chenal enroulé autour de la vis (a) et du chenal déroulé (b) (Vergnes et Puissant, 2002; Agassant *et al.*, 2014)

Cette approximation a pour effet d'étirer la partie inférieure du chenal, ou de contracter la partie supérieure ou bien les deux, selon le rayon choisi pour dérouler le chenal. Cette approximation est d'autant plus justifiée que la hauteur du chenal est faible devant le rayon de la vis. La deuxième approximation consiste à considérer la vis comme immobile

et donc considérer le fourreau mobile, (Figure 1.18), avec une vitesse relative :

$$V_F = V_{Fx} + V_{Fz} = \pi D \frac{N}{60} sin(\theta) + \pi D \frac{N}{60} cos(\theta) \tag{1.6}$$

avec D, le diamètre choisi pour dérouler le chenal et N, la vitesse de rotation en tours par minute.

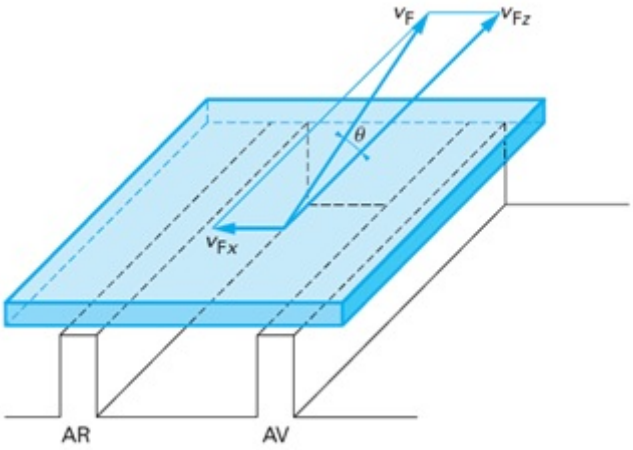


FIGURE 1.18 – Vitesse du fourreau par rapport à la vis (Vergnes et Puissant, 2002)

1.3.2 Modélisation mécanique

Maintenant que la géométrie est simplifiée, il est possible de simplifier la modélisation de l'écoulement dans le chenal en le considérant comme la superposition d'écoulements entre plaques parallèles. Dans le cas d'un comportement newtonien, du fait de la linéarité des équations de Stokes, il est possible de superposer un écoulement induit par la vitesse du fourreau et un autre induit par une différence de pression :

$$V(y) = \frac{V_z y}{H} + \frac{\partial p}{\partial z} \frac{1}{2} \frac{1}{\eta} (y^2 - Hy) \tag{1.7}$$

$$Q = Q_{cis} + Q_{cp} = V_z \frac{H}{2} W - \frac{H^3}{12\eta} \frac{\Delta P_f}{Z_p} W \tag{1.8}$$

Cette approximation n'est valide que pour un comportement newtonien. Elle suppose qu'il n'y a pas de fuites de polymères entre le filet et le fourreau et que la largeur du chenal est infinie (pas d'impact des parois latérales sur l'écoulement). Des facteurs de correction permettent d'apprécier l'influence de ces parois sur le débit et de le corriger si nécessaire. Ces facteurs de correction se calculent selon les équations suivantes :

— Facteur de forme pour l'écoulement induit par la rotation de la vis

$$F_d = \frac{16W}{\pi^3 H} \sum_{i=1,3,5}^{n} \left(\frac{1}{i^3} tanh\left(\frac{i\pi H}{2W}\right)\right) \tag{1.9}$$

— Facteur de forme pour l'écoulement dû à la pression.

$$F_P = 1 - 192 \frac{H}{\pi^5 W} \sum_{i=1,3,5}^{n} \left(\frac{1}{i^5} tanh\left(\frac{i\pi W}{2H}\right)\right) \tag{1.10}$$

.

L'évolution de ces facteurs en fonction du rapport H/W est indiqué sur la Figure 1.19 L'équation du débit devient donc

$$Q = Q_{cis}F_d + Q_{cp}F_p = V_z\frac{H}{2}WF_d - \frac{H^3}{12\eta}\frac{\Delta P_f}{Z_p}WF_p \tag{1.11}$$

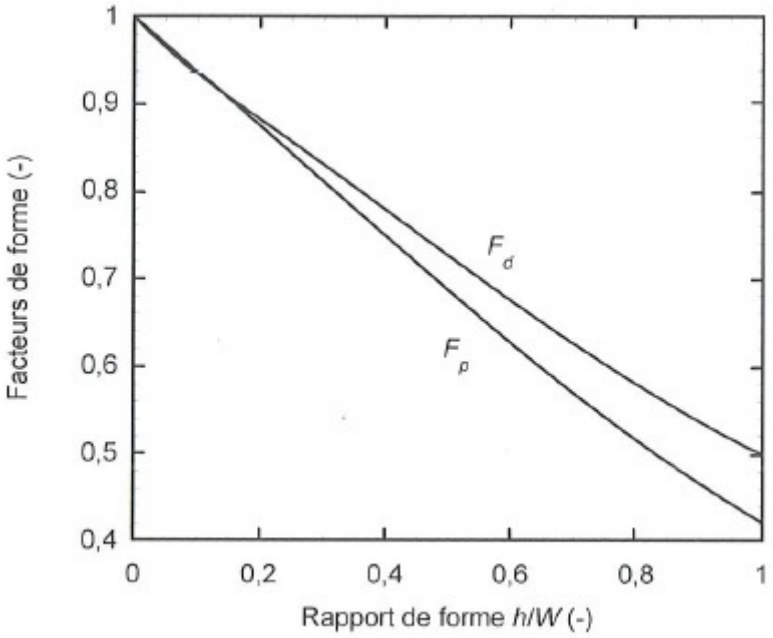


FIGURE 1.19 – Evolution des facteurs de forme en fonction des dimensions du chenal (Lafleur et Vergnes, 2014)

Il est également courant, pour prendre en compte les variations de viscosité le long de l'écoulement, de calculer localement la viscosité en fonction du taux de cisaillement moyen et de la température moyenne et de modifier les équations (1.7) et (1.8) en remplaçant η par la viscosité locale calculée. L'additivité des débits n'est alors plus respectée mais reste une faible approximation dans le cas où le débit induit par la pression est faible devant le débit total.

1.3.3 Prise en compte de la thermique

La prise en compte de la thermique dans les écoulements de polymère est nécessaire puisque la viscosité des polymères est fortement thermodépendante et qu'ils sont particulièrement visqueux et peu conductifs. De ce fait, la majorité de la chaleur créée lors de l'écoulement provient de la dissipation visqueuse (Agassant *et al.*, 2014). L'équation de la chaleur considérée est la suivante :

$$\int_\Omega \rho c\frac{dT}{dt}d\Omega = \int_\Omega k\Delta T d\Omega + \int_\Omega \dot{W}d\Omega \tag{1.12}$$

avec ρ, la densité, c, la capacité calorifique, k, la conductivité et $\dot{W}$, la dissipation visqueuse :

$$\dot{W} = \eta\dot{\gamma}^2 \tag{1.13}$$

Dans le cas d'une température moyennée dans la hauteur, la chaleur reçue par conduction au niveau de la vis et du fourreau s'exprime ainsi :

$$k\Delta T \approx h_T(\bar{T} - T_p) \tag{1.14}$$

avec $\bar{T}$ la température moyenne dans la hauteur, T_p la température de régulation à la paroi et h_T, le coefficient de transfert thermique.

L'équation de la thermique complète, c'est à dire en prenant en compte les gradients dans l'épaisseur, est relativement lourde à résoudre dans le cas d'un écoulement mais il est possible de négliger certains membres après avoir évalué leur importance. Le nombre de Brinkman évalue l'impact de la dissipation visqueuse (1.13) par rapport à la chaleur échangée par conduction aux parois (1.14)

$$Br = \frac{\eta \bar{V}^2}{k(\bar{T} - T_p)} \tag{1.15}$$

Du fait du caractère visqueux des polymères, la dissipation visqueuse est plus importante que l'énergie échangée à la paroi pour une température du polymère proche de la température de régulation des parois.

Le nombre de Peclet, lui, évalue, en ordre de grandeur, l'importance de la convection par rapport à la conduction :

$$Pe = \frac{\rho c \bar{V} L}{k} \tag{1.16}$$

avec $\bar{V}$, la vitesse moyenne et L la longueur considérée de l'écoulement. L'ordre de grandeur du nombre de Peclet pour un écoulement de polymère fondu est supérieur à 10^4 , les termes de conduction sont donc négligeables devant les termes de convection.

1.3.4 Courbes caractéristiques

Comme nous l'avons vu auparavant (1.11), le débit dans le chenal de la vis dépend de la vitesse de rotation et du gradient de pression. Il est donc possible de tracer une courbe caractéristique indiquant le débit en fonction du gradient de pression pour une vitesse de vis fixée. On obtient ainsi à vitesses fixées pour un gradient de pression nul, le débit maximal de l'écoulement (sur l'axe des ordonnées) et la perte de charge maximale que l'on peut obtenir pour un débit nul (sur l'axe des abscisses). Des courbes caractéristiques peuvent aussi être réalisées pour des filières. Dans le cas d'une extrudeuse monovis, le point de fonctionnement est l'intersection entre la courbe caractéristique de l'extrudeuse et celle de la filière (Figure 1.20).

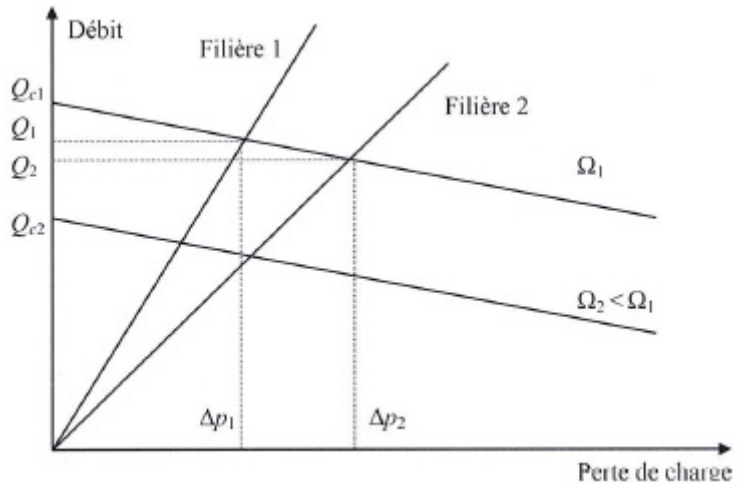


FIGURE 1.20 – Courbes caractéristiques d'extrudeuses et de filières (Lafleur et Vergnes, 2014)

1.4 Modélisation du co-malaxeur

Une des premières études sur le co-malaxeur a été realisée par Booy et Kafka (1987). Dans cette étude, ils ont développé un modèle basé sur les approximations de la lubrification hydrodynamique et pris en compte l'impact des filets de vis sur l'écoulement total grâce aux facteurs de corrections. Ils ont également réalisé des simulations 3D grâce au logiciel POLYFLOW. Les résultats 3D permettent de mettre en évidence les séparation et recombinaison de flux qui sont responsables des bonnes performances de mélange du co-malaxeur. Les résultats 3D montrent également les taux de cisaillement élevés induits par le passage rapproché des doigts de malaxage le long des filets : ils sont de l'ordre de 400 et $2000\,s^{-1}$ pour des vitesses de rotation de 60 et $300\,tr \cdot min^{-1}$. Les auteurs évaluent également le temps de séjour moyen pour une zone de mélange composée d'environ 12 éléments de mélange pour un co-malaxeur Buss de diamètre D = 200 mm à Q = $1575\,kg \cdot h^{-1}$. Ils trouvent un temps de séjour de 48 s et estiment à 60 le nombre de séparations dans la zone de mélange. Ils comparent et notent quelques différences entre les résultats issus du modèle 1D et des simulations 3D, mais ces différences valident néanmoins le modèle 1D qui est plus simple à mettre en œuvre.

Des modèles complets ont été développés pour des extrudeuses monovis dotées de doigts de malaxage, fixés sur le fourreau, et d'interruptions de filet (Figure 1.21), comme les co-malaxeurs, mais sans mouvement oscillatoire de la vis. Ces extrudeuses sont utilisées dans le domaine des caoutchoucs.

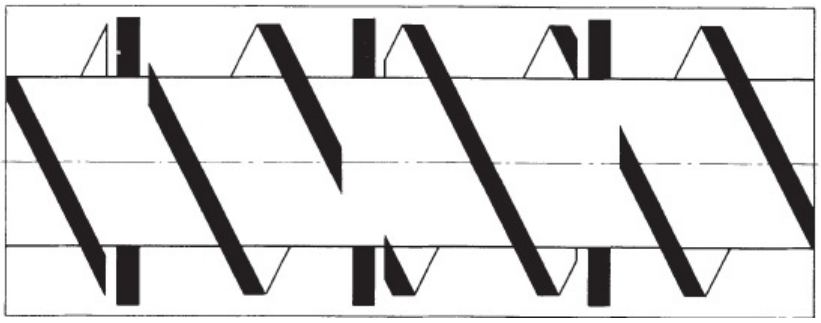


FIGURE 1.21 – Extrudeuse monovis avec doigts de malaxage (Brzoskowski *et al.*, 1988)

Ces premiers modèles ont été mis au point par l'équipe de White à Akron, (Brzoskowski *et al.*, 1988; Yabushita *et al.*, 1989; Brzoskowski et White, 1990; Brzoskowski *et al.*, 1991). Ce sont des modèles 2D. Les simplifications classiques (chenal déroulé, mouvement relatif du fourreau et vis immobile) sont effectuées (Figure 1.22) et l'écoulement est, dans un premier temps, considéré comme newtonien et isotherme.
Brzoskowski *et al.* (1988) développent un modèle basé sur une méthode de différences finies (FAN). Ils modélisent également l'écoulement de manière analytique, en se basant sur le principe de superposition d'un écoulement induit par le cisaillement et d'un écoulement de contre-pression (§1.3.2), en négligeant la présence et l'impact des doigts de malaxage sur l'écoulement. Le bilan des flux étant différent au cours de l'écoulement, ils découpent le chenal déroulé en 2 types de zones (Figure 1.23) :

— les zones I, zone de chenal clos / sans interruptions de filets

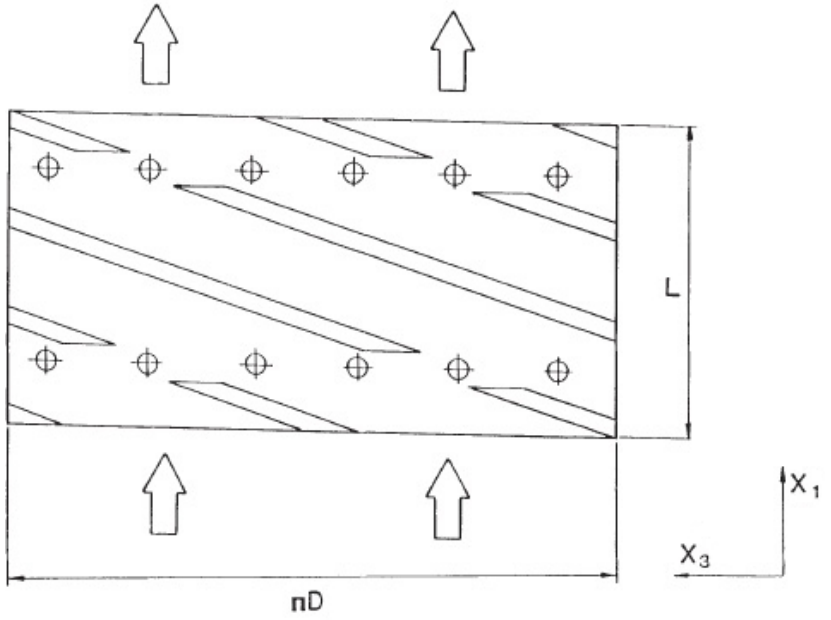


FIGURE 1.22 – Chenal déroulé de l'extrudeuse monovis avec des doigts de malaxage fixés sur le fourreau (Brzoskowski *et al.*, 1988)

— Les zones II, zone de chenal avec interruptions de filets et donc écoulement de fuite vers/depuis l'amont et l'aval.

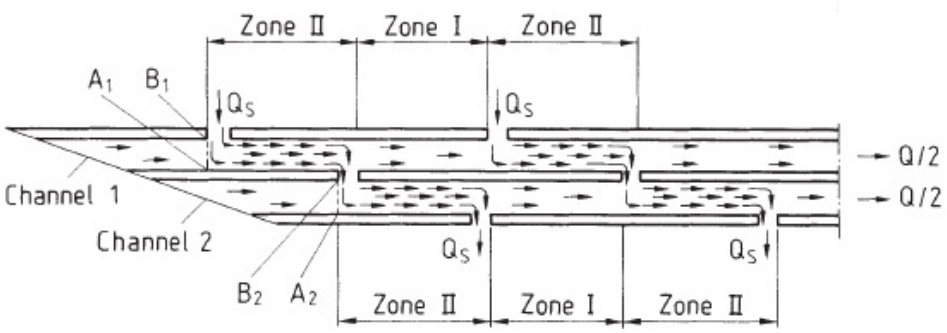


FIGURE 1.23 – Chenal déroulé de l'extrudeuse monovis, séparé en 2 types de zones (Brzoskowski *et al.*, 1988)

Ils obtiennent donc le système d'équations suivantes :

$$\begin{cases} Q_{II} = Q_I + Q_s \\ Q_I = \frac{1}{2}V_1 HWF_d - \frac{WH^3F_p}{12\eta}\left(\frac{\Delta P_I}{dz_I}\right) \\ Q_{II} = \frac{1}{2}V_1 HWF_d - \frac{WH^3F_p}{12\eta}\left(\frac{\Delta P_{II}}{dz_{II}}\right) \\ Q_s = \frac{1}{2}V_2 HSF_{ds} - \frac{SH^3F_{ps}}{12\eta}\left(\frac{\Delta P_{II}}{e}\right) \end{cases} \tag{1.17}$$

avec V_1, la vitesse dans le sens du chenal, V_2, la vitesse au travers des interruptions de filet, H, la hauteur, W la largeur du chenal, S, la largeur de l'interruption de filet, F_x des facteurs de corrections, η, la viscosité.

Afin de déterminer l'impact des simplifications sur les résultats de la modélisation, ils comparent les deux modèles. Les simulations sont réalisées avec une viscosité de $5000\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$, une extrudeuse tournant à $60\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, de 45 mm de diamètre, des doigts de malaxage de 3,8 mm de diamètre, une hauteur de 9 mm pour une largeur de 16 mm.

Ils ont ainsi pu constater que l'impact des doigts de malaxage, négligés dans le modèle analytique, semble bien négligeable (Figure 1.24).

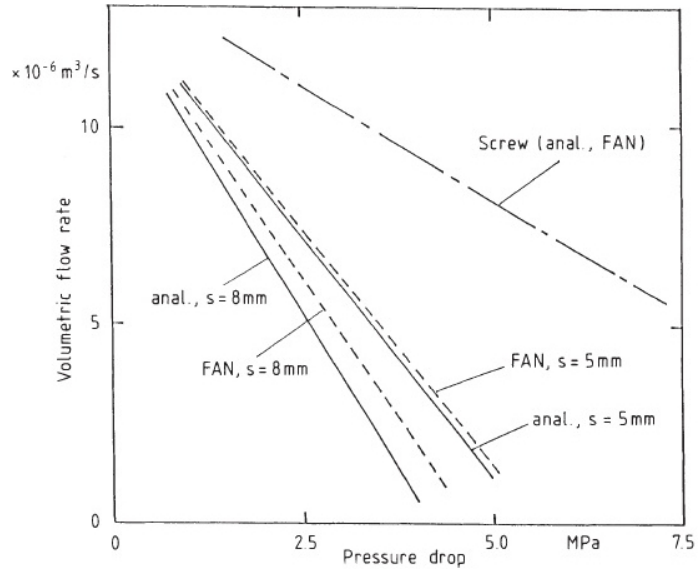


FIGURE 1.24 – Comparaison des résultats obtenus avec les méthodes FAN et analytique (Brzoskowski *et al.*, 1988)

Ils notent également l'influence des interruptions de filets sur le débit total, "Screw" correspondant à un chenal sans aucune interruption de filet et s = 5 ou 8 mm, des éléments avec respectivement, des interruptions de filet de 5 et 8 mm (Figure 1.24). Yabushita *et al.* (1989) ont réalisé des essais expérimentaux sur une extrudeuse monovis ayant des dimensions proches de celle simulée lors de la précédente étude (D = 44,82 mm, une longueur de L/D = 10, des éléments bifilet de hauteur de 9 mm et de pas de 45 mm). A partir de leurs essais expérimentaux ils montrent (Figure 1.25) que la présence ou non de doigts de malaxage n'influe que peu les pertes de charges mesurées dans l'extrudeuse.

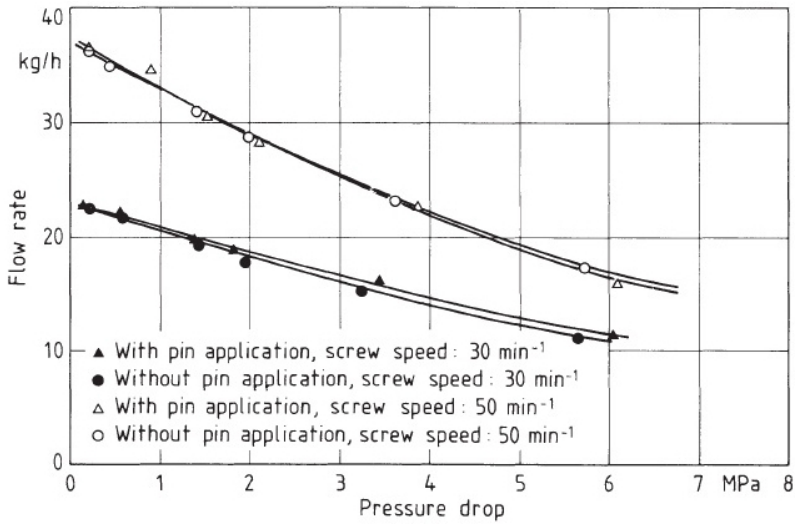


FIGURE 1.25 – Comparaison des débits expimentaux obtenus avec et sans doigts de malaxage (Yabushita *et al.*, 1989)

Brzoskowski et White (1990) adaptent ensuite leur modèle analytique à différents profils de vis (monofilet, bifilet, avec ou sans interruptions de filet). Ils prennent également

en considération le caractère non newtonien de la viscosité du polymère grâce à une loi puissance (Figure 1.26), où K représente la consistance du polymère. Comme attendu, la prise en compte du caractère non-newtonien induit un débit plus faible à contre-pression égale.

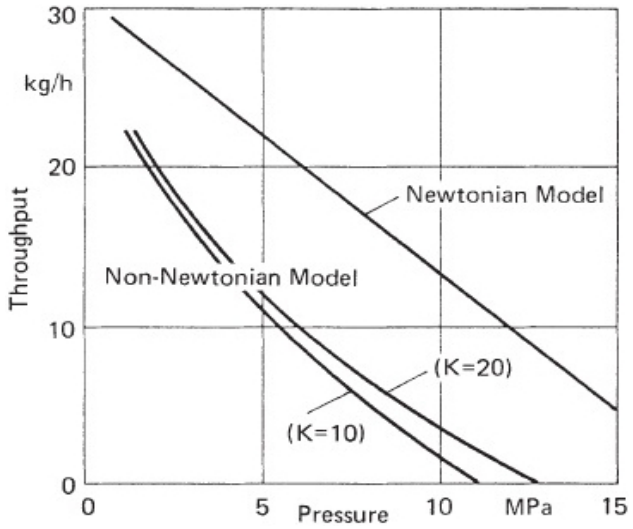


FIGURE 1.26 – Courbes caractéristiques obtenues avec les modèles newtonien et non newtonien (Brzoskowski et White, 1990)

Brzoskowski *et al.* (1991) adaptent par la suite leur modèle aux éléments de mélange des co-malaxeurs. Lors de cette adaptation, ils calculent localement l'impact sur l'écoulement induit par la vitesse du fourreau en intégrant la présence des doigts de malaxage. (Figure 1.27 et Tableau 1.3). Sur cette figure ne sont présentés que les facteurs de corrections "locaux" pour l'écoulement induit par la vitesse du fourreau. Ces facteurs de correction proches de 2 à proximité des doigts de malaxage permettent de prendre en compte leur impact sur l'écoulement induit par la vitesse du fourreau. Ces facteurs doivent être recalculés pour chaque position du doigt de malaxage. Les valeurs des facteurs de correction supérieures à 1, situées à proximité des doigts de malaxage, traduise l'écoulement bouchon qui se créé lorsque le doigt de malaxage se déplace.

Tableau 1.3 – Correspondance des facteurs de corrections de la Figure 1.27

Nombre	F_p, F_d	Nombre	F_p, F_d
0	0 à 0,3	6	0,95 à 1,0
1	0,3 à 0,5	7	1,0 à 1,2
2	0,5 à 0,7	8	1,2 à 1,4
3	0,5 à 0,8	9	1,4 à 1,6
4	0,8 à 0,9	M	1,6 à 2,0
5	0,9 à 0,95		

Grâce à ce modèle, les auteurs ont pu obtenir des cartes de pression et analyser les pressions aux alentours des doigts de malaxage. Pour ce faire, ils tracent les profils de pression obtenus à droite et à gauche d'un doigt de malaxage (Figure 1.28). Ils notent

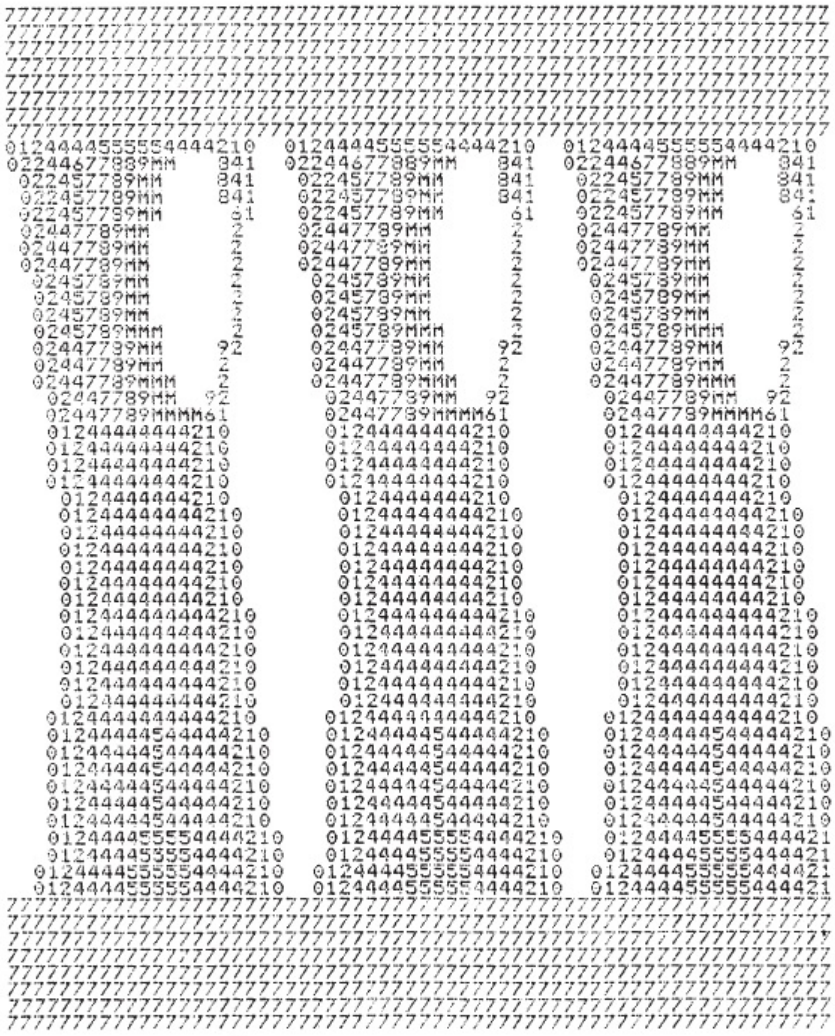


FIGURE 1.27 – Facteur de correction pour le cisaillement calculé en prenant en compte la présence des doigts de malaxage (Brzoskowski *et al.*, 1991)

une surpression en amont à gauche du doigt de malaxage, dans l'axe de sa vitesse de déplacement, et une dépression à l'arrière droit du doigt de malaxage, causée par un effet de succion dû au déplacement du doigt.

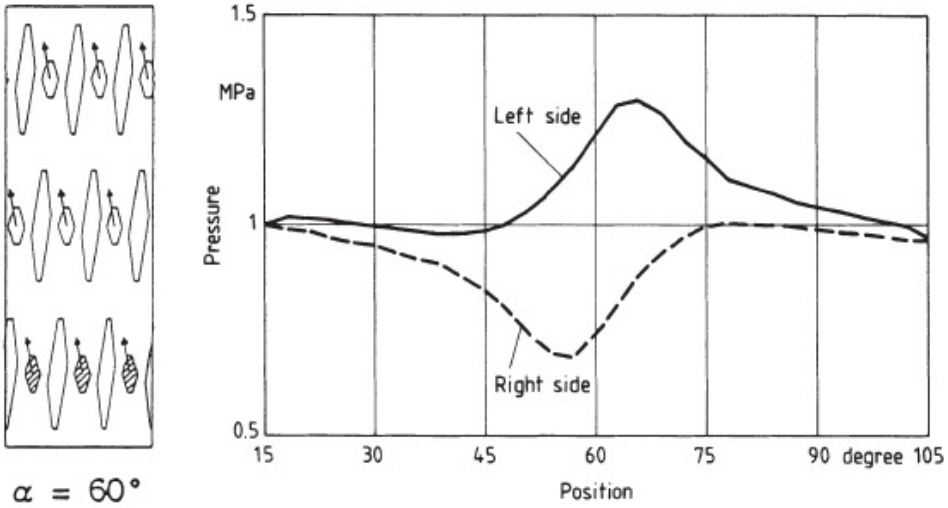


FIGURE 1.28 – Profil de pression à droite et à gauche du doigt de malaxage (Brzoskowski *et al.*, 1991)

Ils ont également analysé l'impact de l'oscillation et des doigts de malaxage sur le débit (Figure 1.29). Ils remarquent que, lorsque la vis n'oscille pas, le débit est constant alors que lorsqu'elle oscille, le débit oscille sinusoïdalement. Lorsqu'ils prennent en compte les doigts de malaxage, on voit un net impact au niveau des débits, les débits extrema sont modifiés d'un facteur 2.

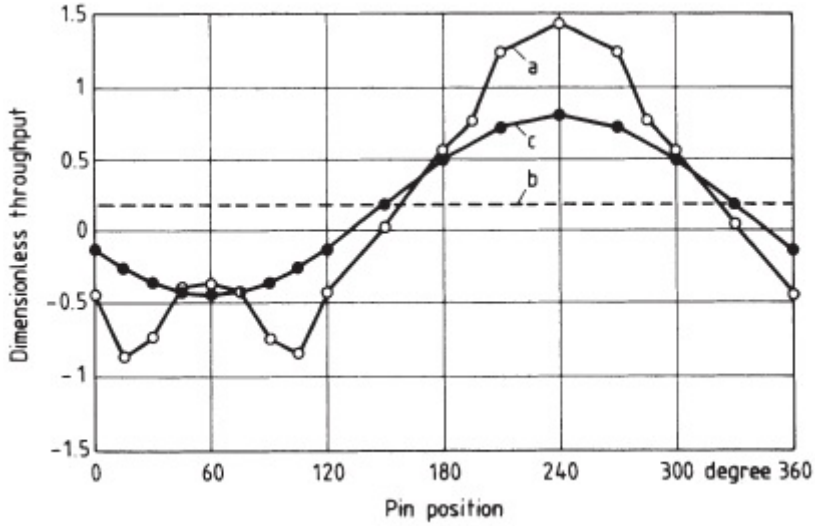


FIGURE 1.29 – Débit adimensionné pour a) un co-malaxeur avec les oscillations et les doigts de malaxage, b) la vis sans oscillation ni doigts de malaxage et c) la vis avec les oscillations (Brzoskowski *et al.*, 1991)

Dans la lignée des études précédentes, Lyu et White (1995) continuent la modélisation du co-malaxeur complet et disposent d'un BUSS MDK/E46i de diamètre 46 mm et de longueur L/D = 16 pour réaliser des essais en vue de valider le modèle. Ils intègrent au

modèle l'oscillation de la vis et donc modifient les équations précédentes (1.17). La vitesse devient donc instationnaire :

$$\begin{cases} V(t) = \pi DN + Acos(\omega t) \\ V_1(t) = \pi DNcos(\phi) + S_0\omega cos(\omega t)cos(\phi) \\ V_3(t) = \pi DNsin(\phi) + S_0\omega cos(\omega t)sin(\phi) \end{cases} \tag{1.18}$$

Comme cela a été fait pour diverses extrudeuses par Brzoskowski *et al.* (1991), ils séparent le co-malaxeur également en différentes zones (Figure 1.30) .

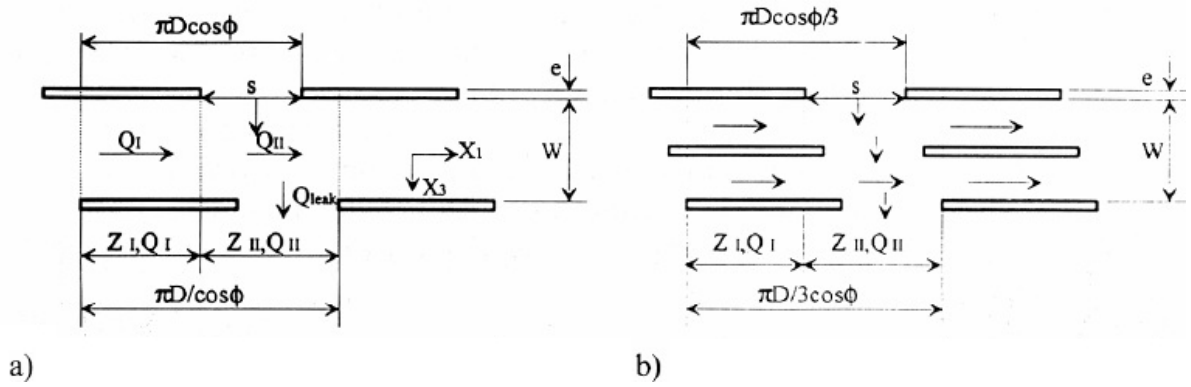


FIGURE 1.30 – Séparation en 2 zones pour un élément de transport (a) et un élément de mélange (b) (Lyu et White, 1995)

Ils modifient également les équations précédentes pour tenir compte de l'oscillation et négligent l'impact des filets sur l'écoulement total.

$$\begin{cases} Q_{II} = Q_I + Q_{leak} \\ Q_I = \frac{1}{2}V_1(t)HW - \frac{WH^3}{12\eta}(\frac{\Delta P_I}{dz_I}) \\ Q_{II} = \frac{1}{2}V_1(t)HW - \frac{WH^3}{12\eta}(\frac{\Delta P_{II}}{dz_{II}}) \\ Q_{leak} = \frac{1}{2}V_3(t)HW - \frac{sH^3}{12\eta}(\frac{\Delta P_{II}}{e}) \end{cases} \tag{1.19}$$

Ce modèle leur permet d'obtenir les courbes caractéristiques des principaux éléments utilisés sur les profils de vis des co-malaxeurs (Figure 1.31).

Le co-malaxeur ayant une oscillation au niveau de sa vis, les débits et les gradients de pression varient au cours du temps. Les auteurs ont fait le choix de présenter les courbes caractéristiques pour 2 positions précises. La position "forward" qui correspond au moment où la vis avance au cours de l'oscillation et la position "backward" qui correspond au moment où la vis recule. La position exacte n'est pas précisée, mais l'on peut supposer que ce sont les positions où la vitesse axiale est à un extremum. Le débit des éléments de mélange est fortement affecté par les oscillations alors que le débit de l'élément de transport l'est moins. Ceci s'explique par le fait que l'élément de mélange a 3 interruptions de filet contre une seule pour l'élément de transport. Lyu et White (1996) ajoutent au modèle le caractère non newtonien du polymère. Pour celà, ils calculent une viscosité locale à partir du taux de cisaillement moyen. Les auteurs ayant choisi une loi puissance pour décrire la viscosité, elle devient donc :

$$\bar{\eta} = K\left[\left(\frac{\partial \bar{V}_1}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{V}_3}{\partial x_2}\right)^2\right]^{\frac{n-1}{2}} \tag{1.20}$$

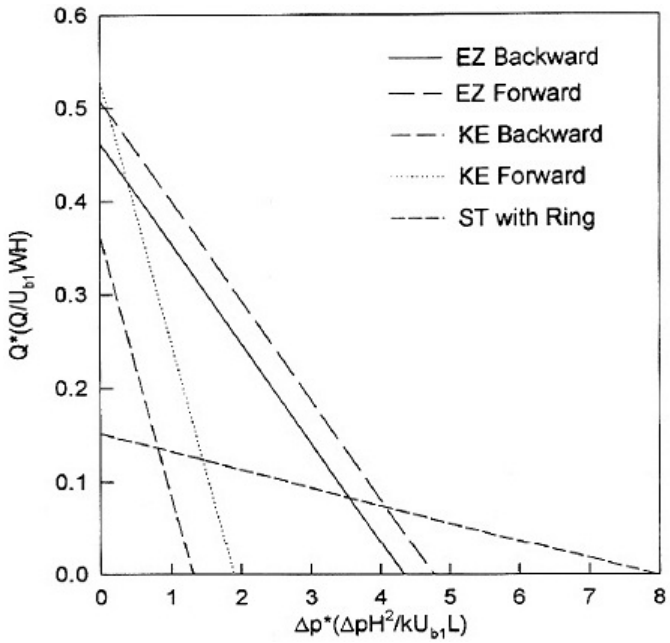


FIGURE 1.31 – Courbes caractéristiques adimensionnelles pour des éléments de transport (EZ), des éléments de mélange (KE) et des éléments bague de restriction (ST)(Lyu et White, 1995)

avec K, la consistance et n l'indice de pseudoplasticité.
Lyu et White (1996) fournissent des courbes caractéristiques pour des éléments standards de monovis (donc sans interruptions de filets) et des éléments de transport et de mélange pour des viscosités newtonienne et en loi puissance (Figures 1.32, 1.33, 1.34).

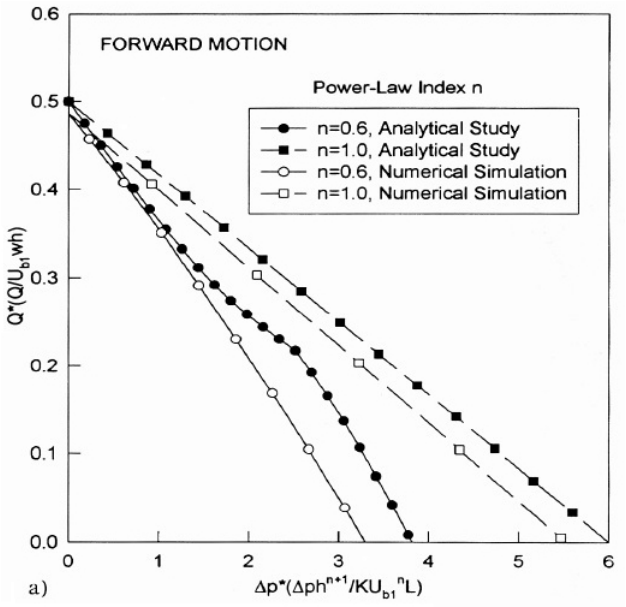


FIGURE 1.32 – Courbes caractéristiques adimensionnelles pour des éléments de type monovis (Lyu et White, 1996)

Les résultats étant similaires entre le mouvement d'avancée et de recul, nous n'en montrons qu'un seul pour alléger le texte. Dans les cas des éléments de type monovis et de transport, on note un épaulement sur la courbe débit en fonction de la contre-pression

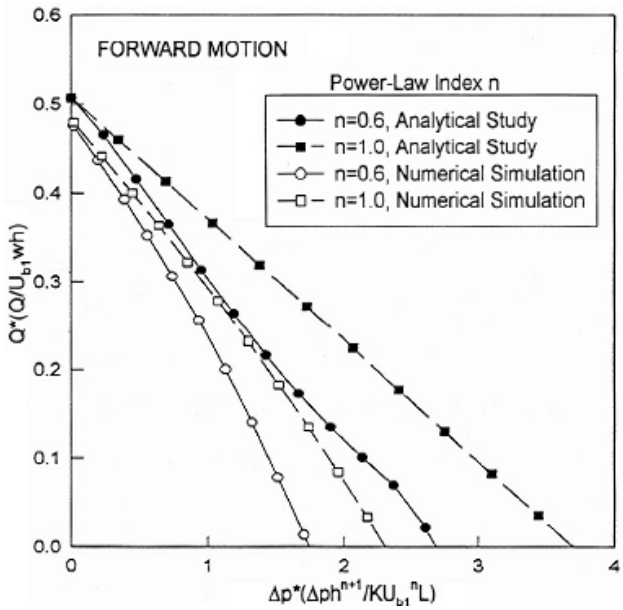


FIGURE 1.33 – Courbes caractéristiques adimensionnelles pour des éléments de transport (EZ) (Lyu et White, 1996)

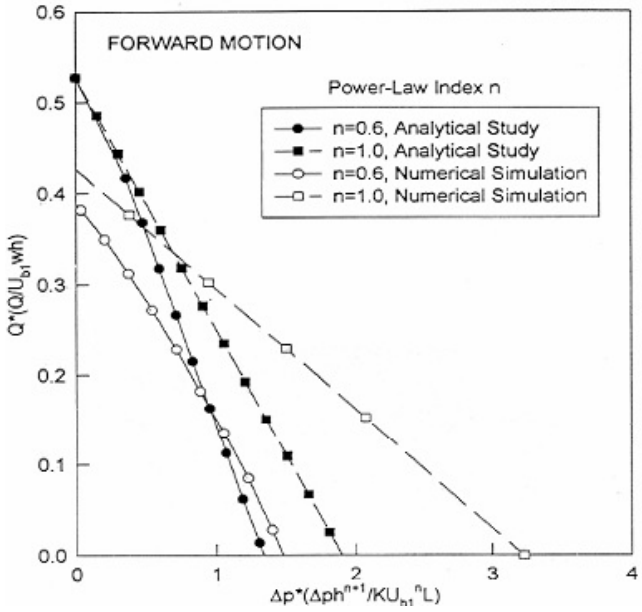


FIGURE 1.34 – Courbes caractéristiques adimensionnelles pour des éléments de mélange (KE) (Lyu et White, 1996)

pour l'étude analytique en loi puissance avec n = 0,6. Cet épaulement n'est pas visible sur les simulations numériques.

D'autres courbes montrent le débit aux travers des interruptions de filets en fonction de la contre-pression. Elles indiquent clairement que le débit recirculant est plus important dans les éléments de mélange (KE) que dans les éléments de transport (EZ) (Figure 1.35). Ceci est logique puisque les éléments de mélange disposent de trois interruptions de filets contre une pour les éléments de transport.

Les auteurs étudient aussi l'impact de l'oscillation sur la capacité de pompage des éléments : on note que l'oscillation réduit le pompage de l'élément de transport (EZ)

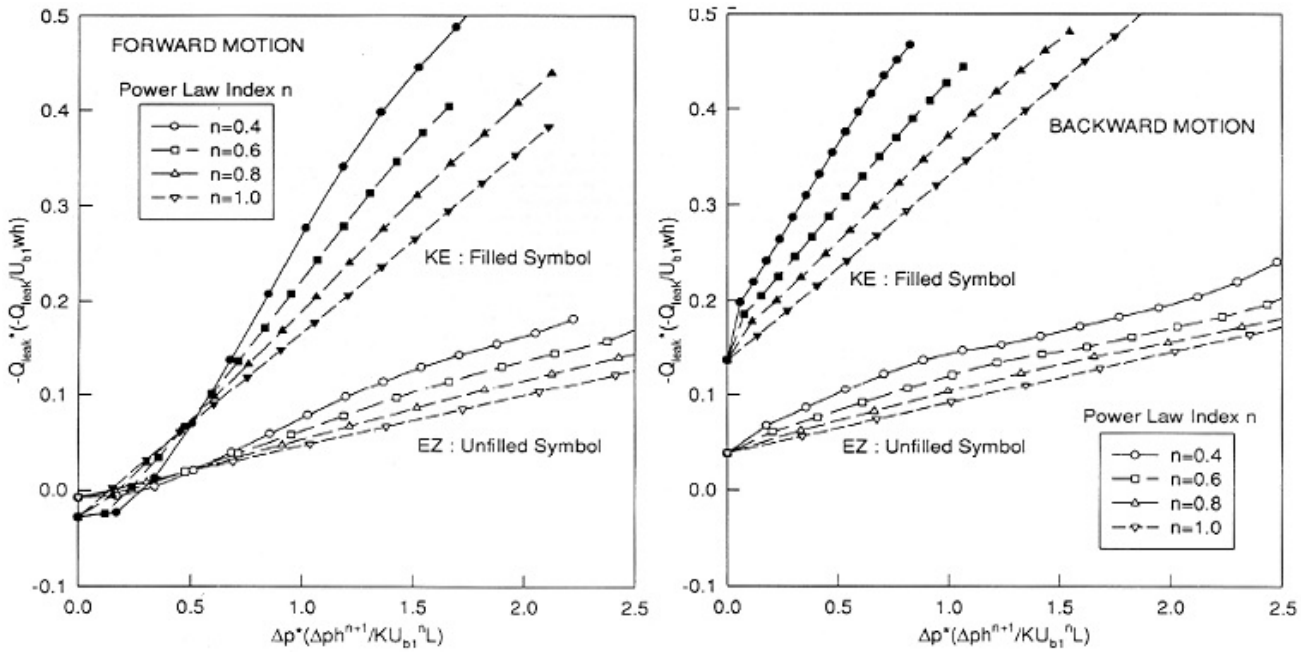
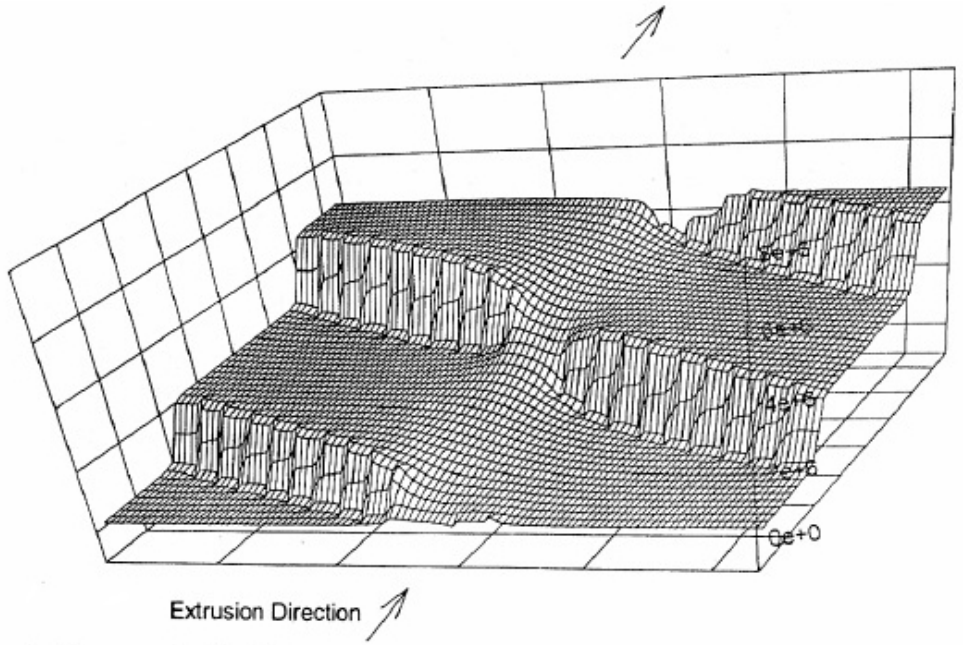
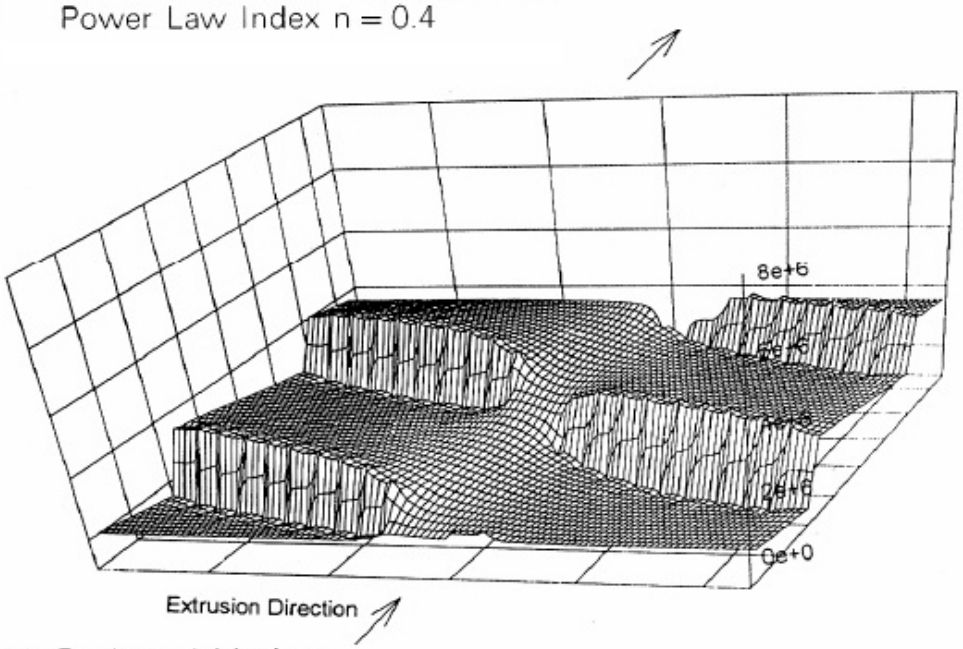


FIGURE 1.35 – Courbes adimensionnelles décrivant le débit au travers des interruptions de filets pour les éléments de transport (EZ) et de mélange (KE) (Lyu et White, 1996)

(Figure 1.36) mais elle inverse quasiment les gradients de pression dans les éléments de mélange(KE)(Figure 1.37).



a) Forward Motion
$\Delta p = 2.4$ MPa, $Q = 75{,}276$ cm^3/h
Power Law Index $n = 0.4$



b) Backward Motion
$\Delta p = 0.9$ MPa, $Q = 74{,}506$ cm^3/h
Power Law Index $n = 0.4$

FIGURE 1.36 – Carte de pression durant une oscillation pour un élément de transport (EZ) (Lyu et White, 1996)

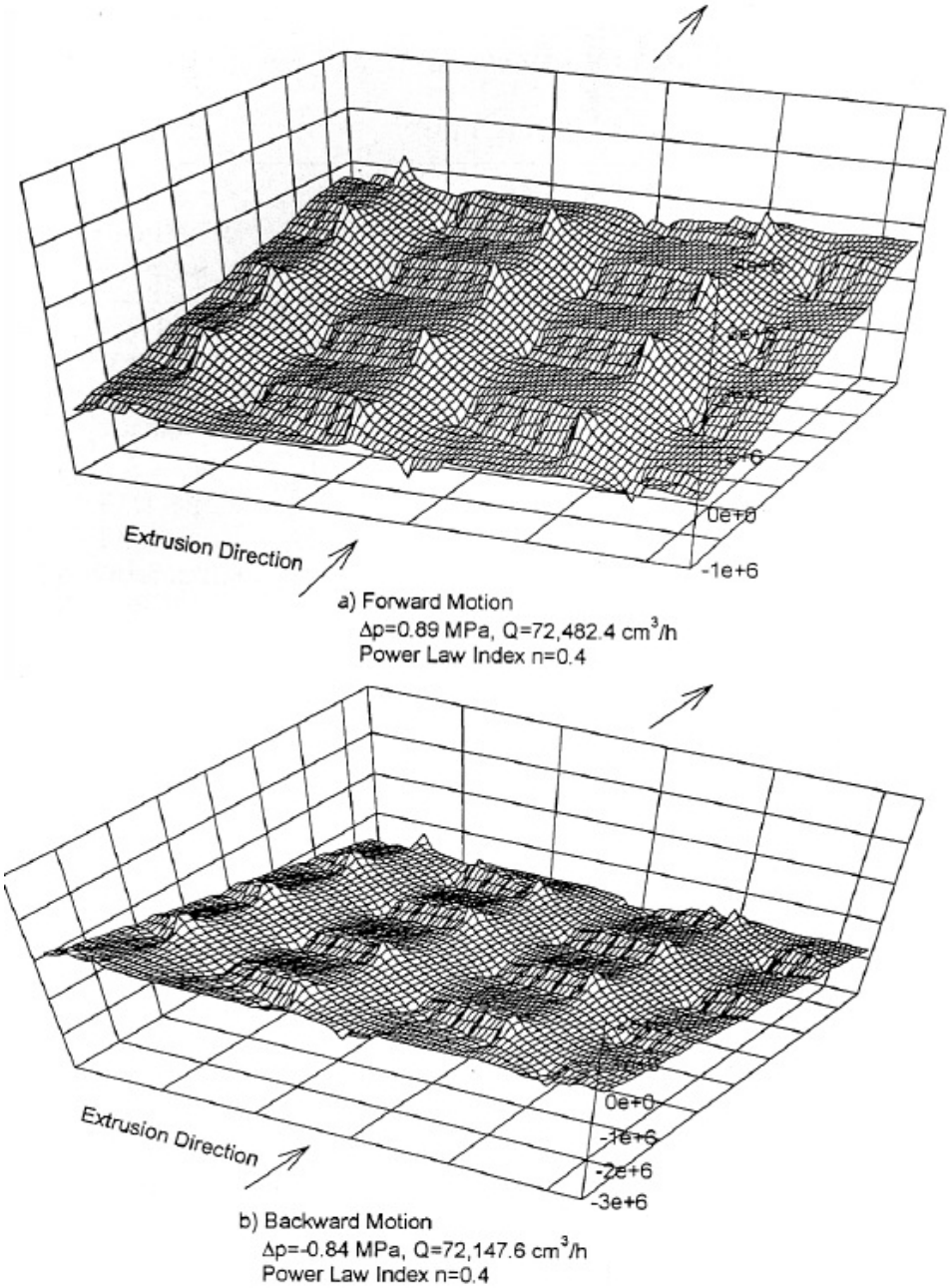


FIGURE 1.37 – Carte de pression durant une oscillation pour un élément de mélange (KE) (Lyu et White, 1996)

Les auteurs notent que le caractère non-newtonien de la viscosité ne change rien au fait que l'élément de transport a une meilleure capacité de pompage que l'élément de mélange. Ils réalisent également un calcul complet du co-malaxeur en prenant en compte le sous-remplissage de celui-ci, et comparent leur résultat numérique à des essais expérimentaux (Figure 1.38).

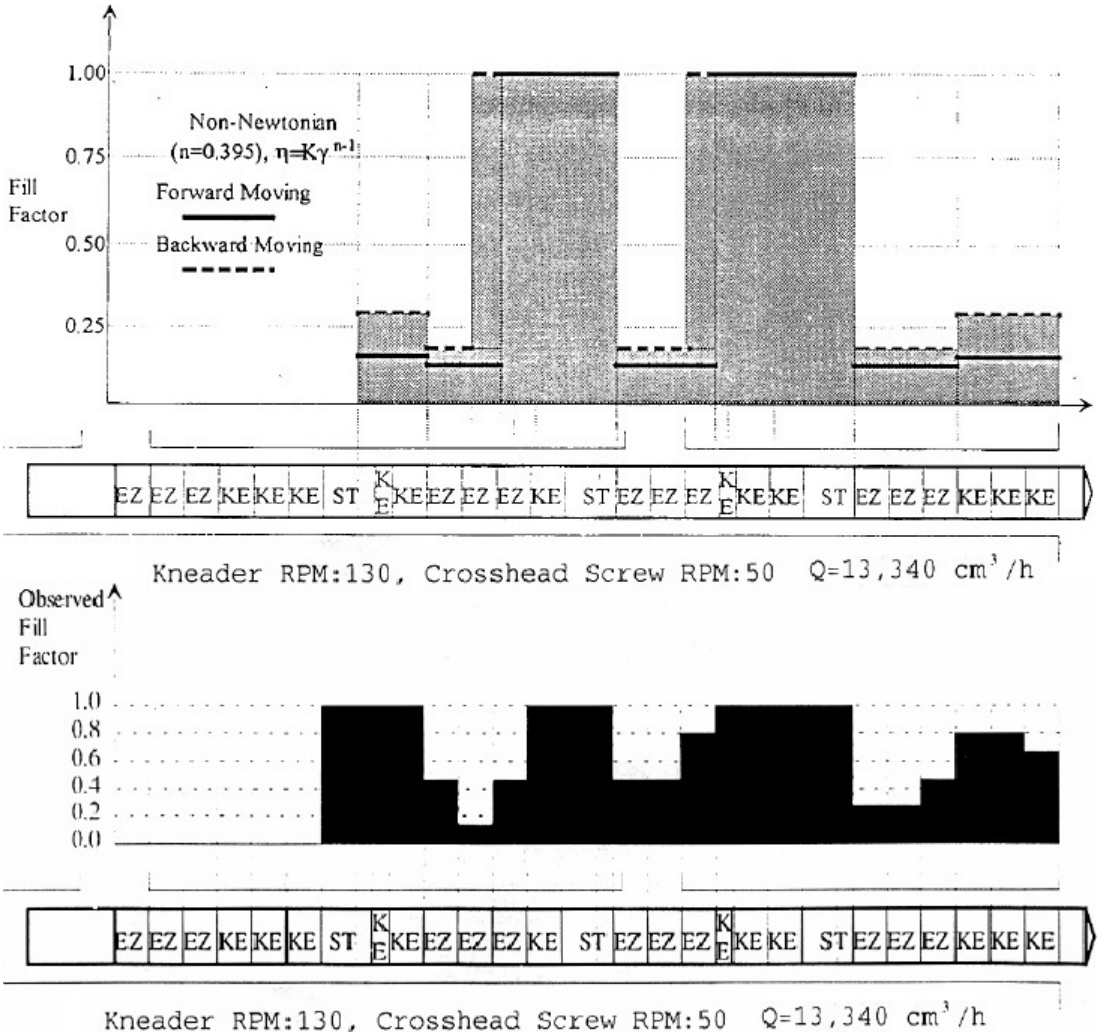


FIGURE 1.38 – Comparaison des taux de remplissage mesurés expérimentalement et calculés sur un BUSS PR46 (Lyu et White, 1996)

Lyu et White (1997c,a) ajoutent ensuite à leur modèle la prise en compte de la thermique. Pour cela, ils considèrent l'équation thermique (1.12) et la simplifient par rapport à leur écoulement 2D :

$$\rho c\left(\frac{\partial T}{\partial t}+V_1\frac{T}{x_1}+V_3\frac{T}{x_3}\right)=k\frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}+\left(\sigma_{12}\frac{\partial V_1}{\partial x_2}+\sigma_{32}\frac{\partial V_3}{\partial x_2}\right) \tag{1.21}$$

Ils ont également réalisé des expériences durant lesquelles ont été mesurées des températures et ils comparent les résultats de leur modélisation avec les données mesurées. Le profil et les températures de régulation utilisées ainsi que la position des capteurs de température sont indiqués Figure 1.39.

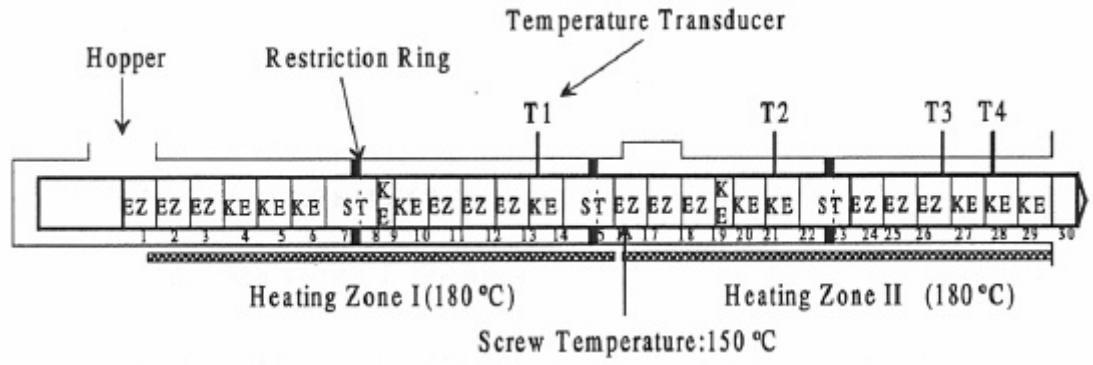


FIGURE 1.39 – Profil du co-malaxeur BUSS utilisé pour les études expérimentales (Lyu et White, 1997c)

Ils comparent ensuite leurs mesures expérimentales de la température et des taux de remplissage (Figure 1.40) avec les données calculées pour un débit de $5770\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{s}^{-3}$ soit $\approx 16{,}6\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$.
Le polymère est présumé fondu à partir de la première bague de restriction (ST). A partir de la deuxième bague de restriction, la température est plutôt stable voire décroissante excepté une légère augmentation à chaque bague de restriction ; ces résultats correspondent aux mesures expérimentales. Lyu et White (1997b, 2000) abordent ensuite la prise en compte de la viscoélasticité du polymère. En effet, à chaque rotation, le co-malaxeur effectue également une oscillation complète. Ceci se traduit par des vitesses d'oscillation importantes et la viscoélasticité du polymère peut donc intervenir. Dans un premier temps, ils se basent sur le modèle réduit de Maxwell :

$$\bar{\sigma}=-P\bar{I}+\bar{P} \tag{1.22}$$

avec $\bar{\sigma}$ le tenseur des contraintes, P la pression, $\bar{I}$ le tenseur isotrope et $\bar{P}$, le tenseur des extra-contraintes défini comme :

$$\bar{P}=2\eta\bar{D}-\tau\frac{D\bar{P}}{Dt} \tag{1.23}$$

avec η, la viscosité, τ le temps de relaxation et $\bar{D}$, le tenseur des vitesses de déformation. En plus du modèle de Maxwell, ils modélisent également l'écoulement avec un modèle intégral :

$$\bar{P}=2\int_{-\infty}^{t}G(t-s)\bar{d}ds \tag{1.24}$$

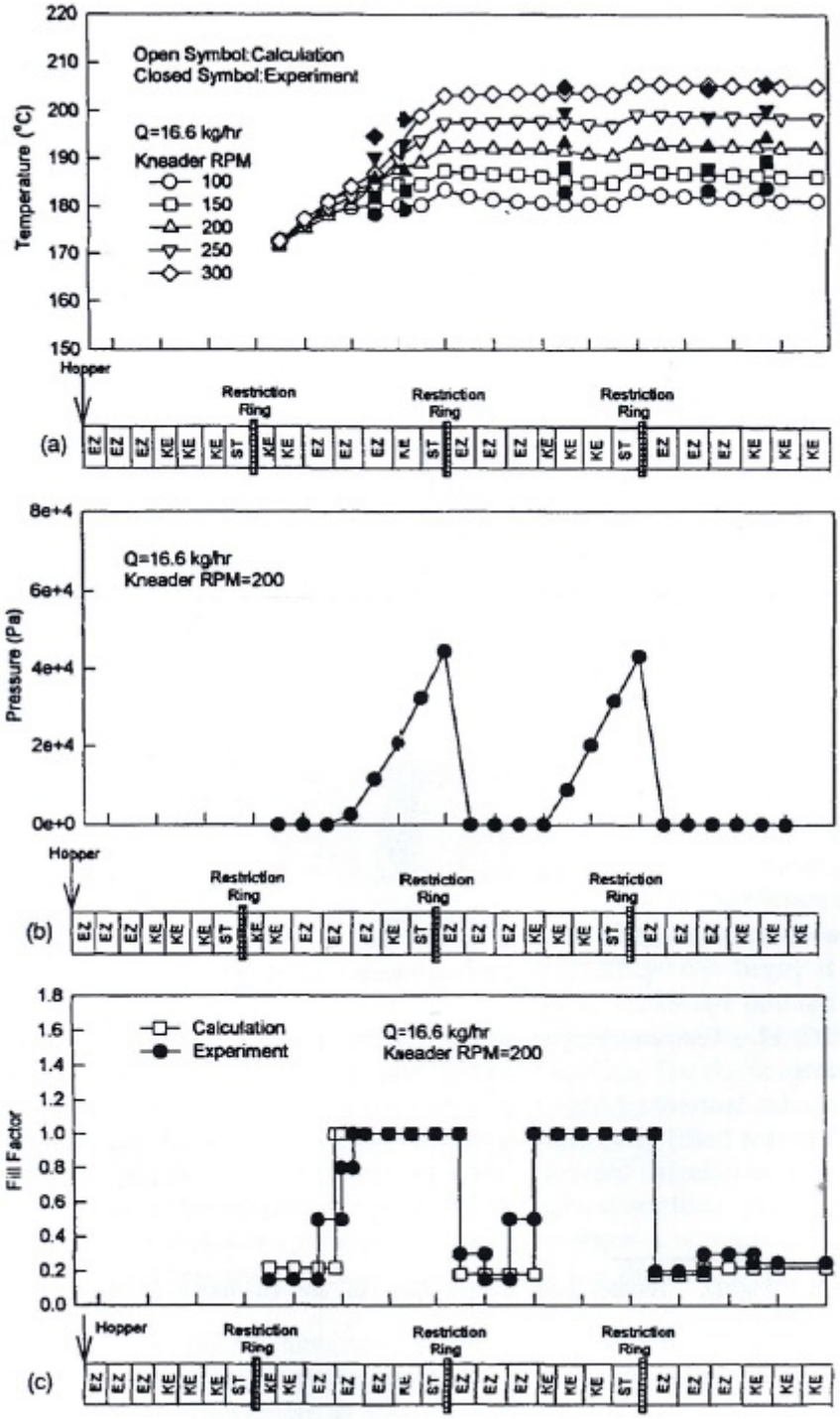


FIGURE 1.40 – a) Comparaison des températures expérimentales et calculées
b) Profil de pression simulé
c) Comparaison entre les taux de remplissage expérimentaux et simulés (Lyu et White, 1997c)

Après avoir intégré les deux modèles aux équations décrivant l'écoulement, ils en arrivent à la conclusion que le résultat est similaire. Ils tracent des courbes caractéristiques pour les éléments de transport (EZ) et de mélange (KE) et comparent le comportement newtonien à un comportement viscoélastique avec trois temps de relaxation différents, (τ = 0,1, 0,5, et 3 s). Malheureusement, la vitesse de rotation utilisée pour tracer les courbes caractéristiques n'est pas indiquée, on ne peut donc pas confronter le temps de relaxation

au temps d'oscillation. Plus le temps de relaxation est grand, plus la capacité de pompage des éléments est réduite lorsque la vis avance, et accrue lorsque la vis recule (Figures 1.41 et 1.42).

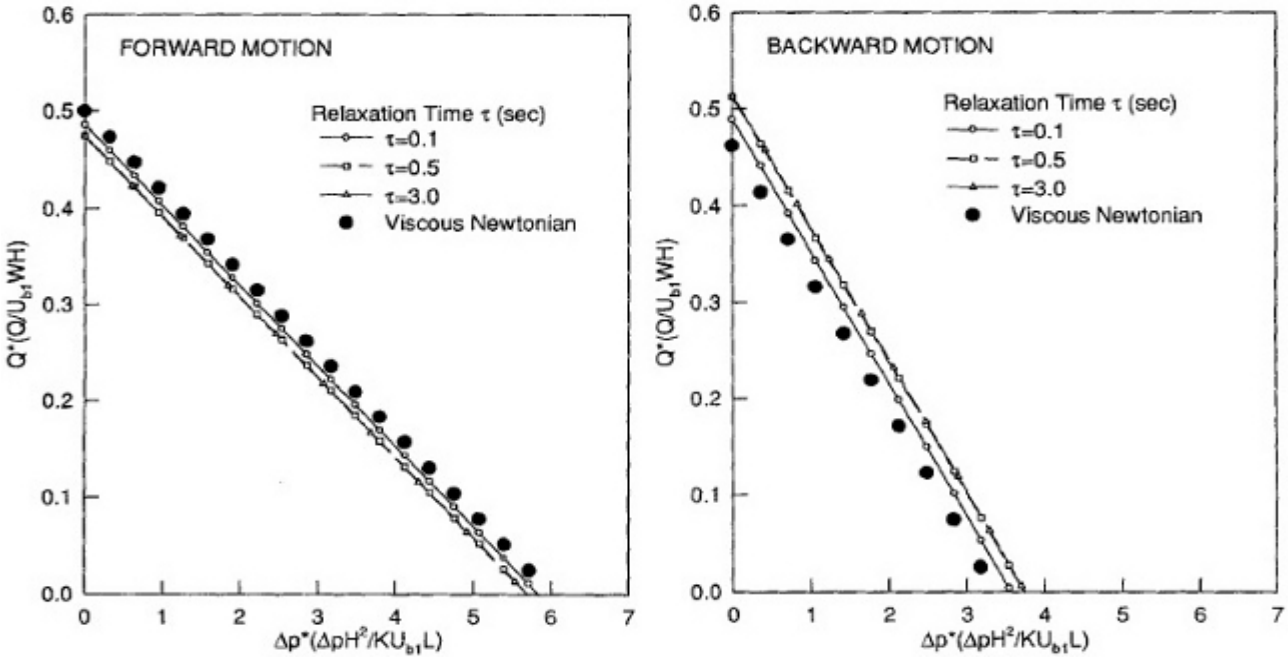


FIGURE 1.41 – Courbes caractéristiques sur des éléments EZ (Lyu et White, 1997b)

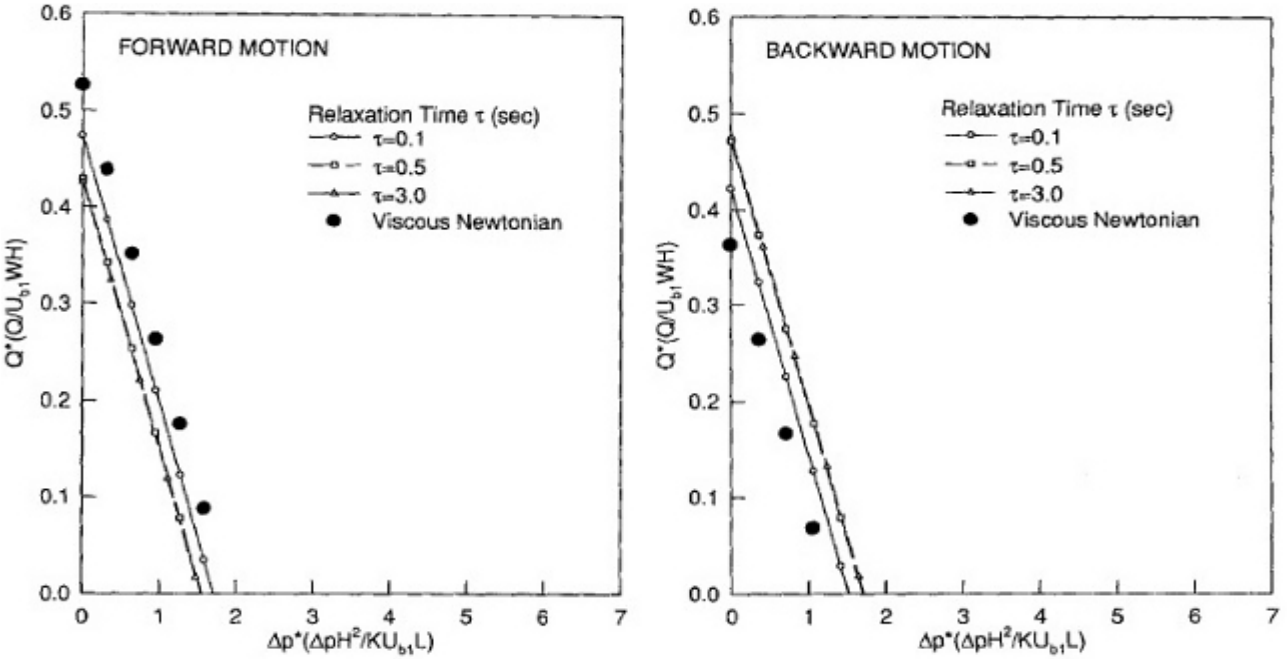


FIGURE 1.42 – Courbes caractéristiques sur des éléments KE (Lyu et White, 1997b)

Ils simulent ensuite un co-malaxeur complet (Figure 1.43). Ils remarquent que, pour un temps de relaxation de 3 sec, les pressions sont plutôt stables lors d'une oscillation comparées au comportement newtonien.

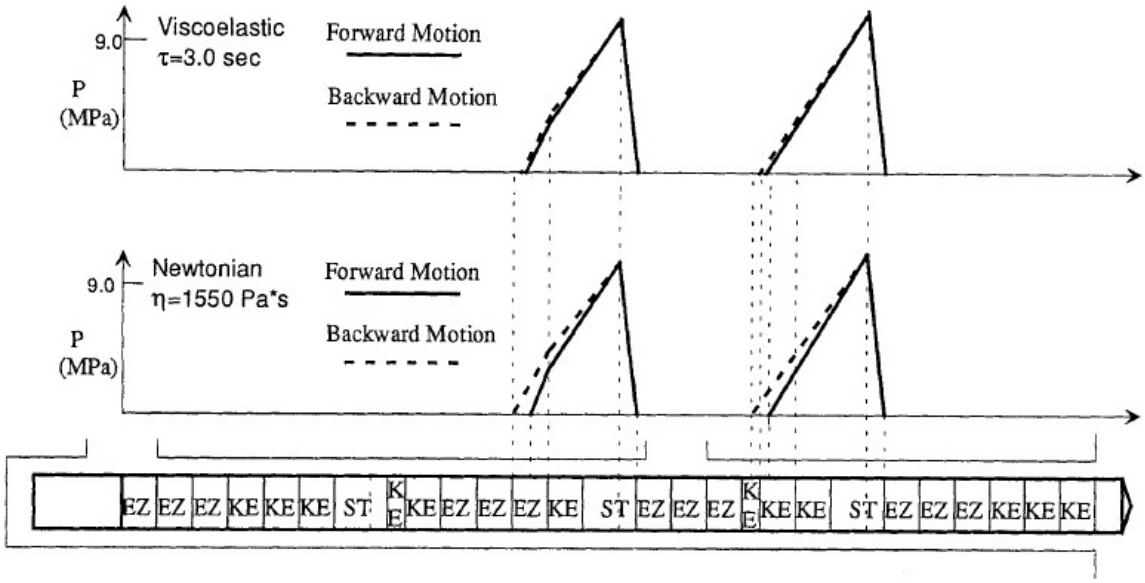


FIGURE 1.43 – Comparaison des taux de remplissage et calculés pour un comportement newtonien et viscoélastique sur un BUSS PR46 pour N = $130\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ (Lyu et White, 1997b)

Elemans (1989) puis Elemans et Meijer (1990) développent un modèle newtonien isotherme prenant en compte les interruptions de filets et les doigts de malaxage mais négligeant les oscillations de la vis. Les hypothèses simplificatrices habituelles sont faites (déroulement du chenal, fourreau mobile). Ils considèrent dans un premier temps uniquement le débit pur du chenal induit par le cisaillement

$$Q_d = f\frac{1}{2}Vcos(\phi)HWF_DF_{DC} \tag{1.25}$$

et celui induit par un gradient de pression

$$Q_{cp} = -\frac{1}{12\eta}H^3WF_PF_{PC}\frac{dP}{dz} \tag{1.26}$$

avec f, le taux de remplissage, V, la vitesse relative du fourreau, ϕ, l'angle du filet de la vis par rapport à un plan perpendiculaire à l'axe de la vis, H, la hauteur du chenal, η, la viscosité, F_D, F_{DC}, F_P, F_{PC}, des facteurs de correction et W, la largeur :

$$W = \pi Dsin(\phi)(1 - n_f e) \tag{1.27}$$

avec n_f, le nombre de filets et e, l'épaisseur relative du filet ($e = \frac{e_{filet}}{\pi Dsin(\phi)}$). Pour des éléments monofilet, cette formule décrit bien la largeur du chenal mais, pour des éléments avec plusieurs chenaux, la formule proposée par Agassant *et al.* (2014)

$$W = \frac{\pi Dsin(\phi)}{n_f} - e_{filet} \tag{1.28}$$

permet de considérer la largeur de chaque chenal, alors que l'équation (1.27) indique la somme des largeurs des chenaux pour des éléments avec plusieurs filets. Il est courant en extrusion d'utiliser des facteurs de forme pour tenir compte de la présence et de l'impact

des filets du chenal sur l'écoulement. Néanmoins ici, sans précisions dans l'article, deux facteurs de forme sont pris en compte, ce qui est inhabituel. Les auteurs ajoutent ensuite les pertes dues à l'écoulement induit par le cisaillement (1.29) et celui induit par la pression (1.30) au travers des interruptions de filets

$$Q_{l-cis} = \frac{1}{2} V cos(\phi) H (1-r) W F_D F_{DC} \tag{1.29}$$

et

$$Q_{l-cp} = -\frac{1}{12\eta} H^3 F_P^{'} F_{PC} \frac{\pi D (1-r)}{cos(\phi)} \frac{dP}{d(-x)} \tag{1.30}$$

avec r, la longueur relative du filet ininterrompu,

$$r = \frac{L_f - L_h}{L_f} \tag{1.31}$$

avec L_f et L_h tel que mesurés sur la Figure 1.44.

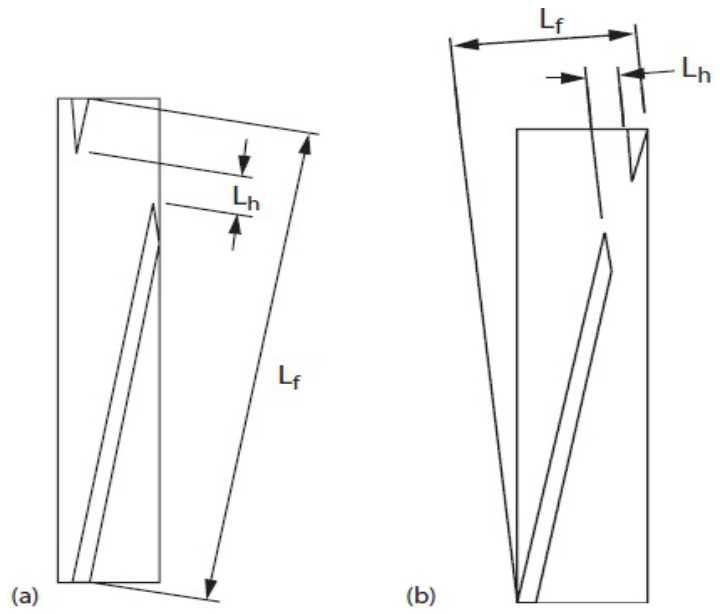


FIGURE 1.44 – Mesures de L_h et L_f définies par Elemans et Meijer (1990) comme mesures effectuées horizontalement (a) ou verticalement (b) pour calculer (1-r) (1.31)

Les pertes au travers du jeu entre la vis et le fourreau sont estimés par

$$Q_{of-cis} = \frac{1}{2} V cos(\phi) \delta r W F_D F_{DC} \tag{1.32}$$

Pour les équations (1.30) et (1.32), W représente la projection du filet équivalent à un tour de vis sur l'axe perpendiculaire à la vitesse principale d'écoulement du polymère dans le chenal. On peut s'étonner de ce choix, puisqu'une projection de la vitesse sur le plan perpendiculaire au filet aurait été plus simple. Ils ajoutent également la présence des doigts de malaxage et considèrent qu'un écoulement bouchon se crée juste en amont :

$$Q_{pin} = n_{pins} V H d_{pin} \tag{1.33}$$

avec n_{pins}, le nombre de doigts de malaxage et d_{pin} le diamètre des doigts de malaxage. Néanmoins, ils observent expérimentalement que la majorité de l'écoulement bouchon ne

s'ajoute pas au débit dans le sens du chenal et donc ajoutent pour le prendre en compte un facteur arbitraire ϵ :

$$Q_{pin-chenal} = \epsilon n_{pins} V H d_{pin} \tag{1.34}$$

La présence des doigts de malaxage réduit également le débit purement cisaillant :

$$\begin{cases} \alpha = \frac{d_{pin}^2}{L\ W} n_{pins} \\ Q_{d-pins} = (1-\alpha) Q_d \end{cases} \tag{1.35}$$

avec d_{pin}^2, la surface occupée par le doigts de malaxage approximée par un carré. Les paramètres α et r ont été calculés (Tableau 1.4)

Tableau 1.4 – Estimation géométrique des facteurs r, calculé à partir de (1.31), et α

	r (horizontal)	r (vertical)	α
Élément de transport (conveying)	0.92	0.8	0.005
Élément mixte (Figure 1.45) (c.c. kneading)	0.78	0.55	0.011
Élément de mélange (kneading)	0.71	0.2	0.011

L'équation totale du débit est donc :

$$Q = (1-\alpha) Q_d + \epsilon Q_{pin} + Q_{cp} + Q_{l-cp} - Q_{l-cis} - Q_{of-cis} \tag{1.36}$$

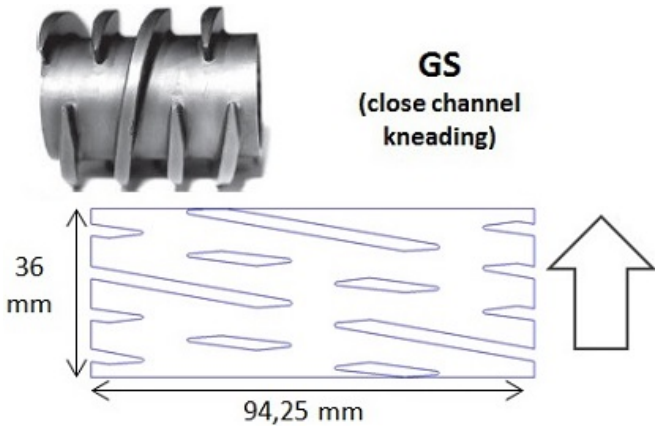


FIGURE 1.45 – Element mixte entre l'élément de transport et de mélange

Les auteurs reprennent l'analyse de mélange faite par Booy et Kafka (1987) pour la compléter en estimant le nombre de réorientations causées par le passage d'un doigt de malaxage dans un élément de mélange. Ils considèrent le temps de séjour moyen du polymère dans un élément de vis :

$$\bar{t} = \frac{\pi D L H (1-ne)}{Q} \tag{1.37}$$

avec L, la longueur de vis de l'élément et Q, le débit. L'élément de mélange ayant 3 interruptions de filets et des doigts de malaxage étant positionnés sur le fourreau tous les 120°, ils estiment le temps de passage du polymère entre 2 positions séparées de 120° :

$$\bar{t_{pass}} = \frac{1/3\pi D}{1/2\pi D N/60} = \frac{2}{3}\frac{60}{N} \tag{1.38}$$

avec $1/3\pi D$ représentant la distance entre les 2 positions séparées de 120° et $1/2\pi DN/60$ la vitesse moyenne d'écoulement du polymère induite par la rotation du fourreau. En combinant ces deux équations et en considérant que le passage d'un doigt de malaxage force la réorientation du polymère, ils obtiennent le nombre de réorientations n_r :

$$n_r = \frac{\bar{t}}{\bar{t}_{pass}} = \frac{3}{2}\pi DLH(1-ne)\frac{N}{60Q} \tag{1.39}$$

Dans le cas, réel, plusieurs doigts de malaxage sont présents. Ils modifient donc la formule en conséquence :

$$n_r = p\frac{3}{2}\pi DLH(1-ne)\frac{N}{60Q} \tag{1.40}$$

avec p, le nombre de doigts de malaxage dans l'élément considéré. Pour un co-malaxeur BUSS PR46, avec les données expérimentales suivantes, ils en arrivent à 128 réorientations dans un seul élément de mélange pour une déformation cumulée, $\gamma = \dot{\gamma}t$, entre chaque réorientation de 14.

— $\phi = 10{,}5°$
— $H = 7$ mm
— $D = 46$ mm
— $L = 27$ mm
— $n = 2$
— e=0.133
— $N = 4\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{s}^{-1}$ soit $240\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$
— $Q = 5500\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{s}^{-3}$ soit $\approx 20\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$

Afin de valider leur modèle, Elemans et Meijer (1990) utilisent un co-malaxeur BUSS modifié pour avoir une pression stable malgré l'oscillation (Figure 1.46) ainsi que des doigts de malaxage modifiés afin de connaître la pression en tout point du co-malaxeur. (Figure 1.47)

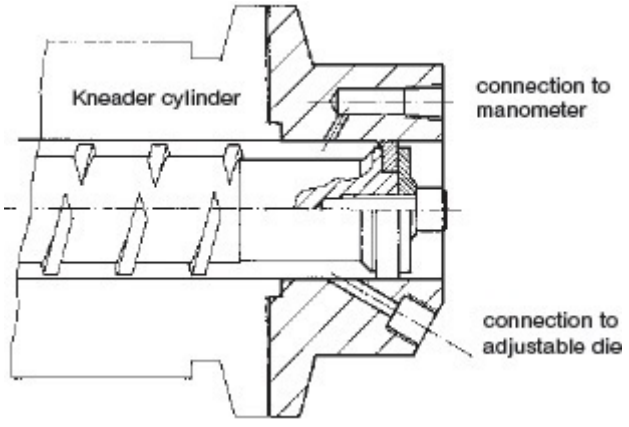


FIGURE 1.46 – Schéma de la filière modifiée pour neutraliser les oscillations de pression induite par le mouvement oscillatoire (Elemans, 2009)

Ils réalisent des essais sur les trois types d'éléments et ont analysé l'impact des doigts de malaxage sur l'écoulement total. Ils notent sur la Figure 1.48 que les doigts ont un impact négligeable sur l'élément de transport, mais visible sur les éléments bi-filets comme

FIGURE 1.47 – Photo du montage expérimental d'un co-malaxeur BUSS modifié pour observer les pressions en tout point (Elemans, 2009)

l'élément mixte et l'élément de mélange. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'un doigt de malaxge a une largeur environ égale à 1/5 de la largeur du chenal dans le cas d'un élément monofilet, comme l'élément de transport, et une largeur égale à 1/3 de la largeur du chenal dans le cas d'un élément bi-filet, comme les éléments de mélange et l'élément mixte. Il est à noter toutefois que les auteurs ont utilisé un fluide ayant une viscosité comprise entre 0.2 et 1 Pa · s. De ce fait, la gravité ainsi que l'inertie, surtout avec trois oscillations complètes par seconde, ne sont peut être plus négligeables.

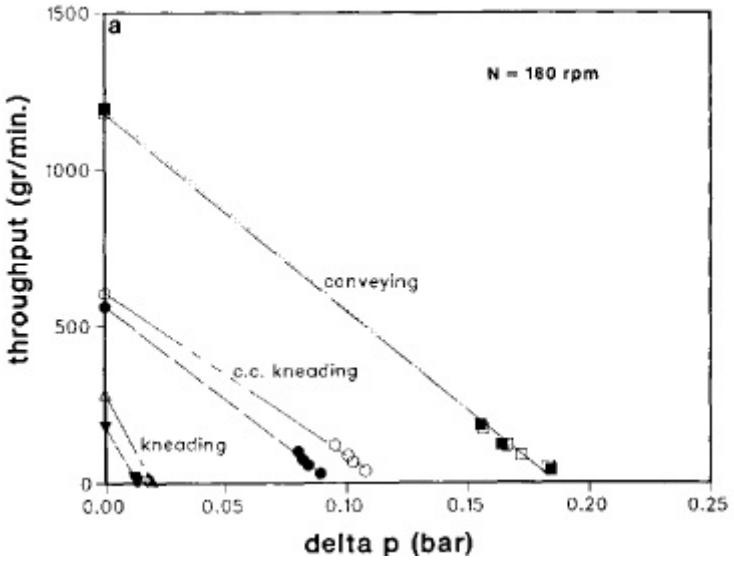


FIGURE 1.48 – Courbes caractéristiques expérimentales pour trois types d'éléments. Les symboles pleins et vides correspondent respectivement aux expériences sans et avec doigts de malaxage, le trait correspond au modèle (Elemans et Meijer, 1990)

A partir des données présentées sur la Figure 1.48, les auteurs recalculent les facteurs r et ϵ afin que leur modèle s'ajuste au mieux aux points expérimentaux (Tableau 1.5).

Tableau 1.5 – Estimation géométrique des facteurs r et ϵ

	r (horizontal)	r (vertical)	ϵ (horizontal)	ϵ (vertical)
Élément de transport	0.93	0.75	0.01	0.01
Élément mixte (Figure 1.45)	0.90	0.6	0.014	0.15
Élément de mélange	0.52	0.18	0.09	0.21

On peut s'interroger sur le fait que les auteurs considèrent deux valeurs différentes pour les facteurs r et ϵ, selon une lecture qui serait horizontale ou verticale. Ils comparent aussi des longueurs de remplissages mesurées avec des longueurs de remplissage calculées (Figure 1.49). Les longueurs de remplissages sont calculées avec les paramètres "horizontaux" présentés dans le Tableau 1.5.

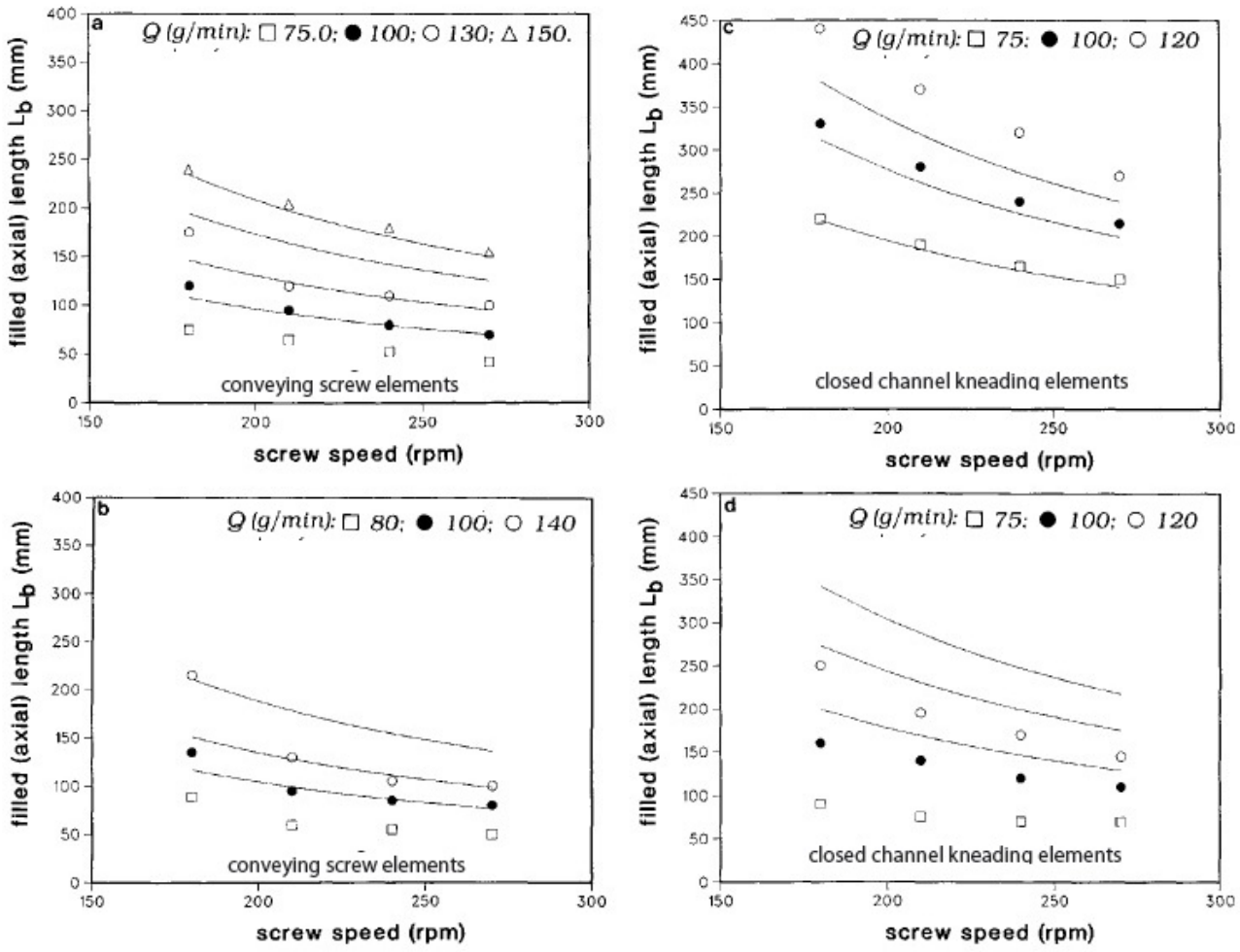


FIGURE 1.49 – Comparaison des longueurs de remplissage calculées et expérimentales pour les éléments de transport (EZ) et mixte (GS). a) et c) sont des expériences effectuées sans doigts de malaxage, b) et d) avec. (Elemans et Meijer, 1990)

Pour les éléments de transport, les expériences sans et avec doigts de malaxage montrent des longueurs de remplissage similaires à débit équivalent. Concernant les éléments mixtes, les différences de longueurs de remplissage entre les simulations sans et avec les doigts de malaxage sont nettement marquées (environ 40 % de perte de débit). Bien que les paramètres de leur modèle numérique soient ajustables et ajustés à partir des données

expérimentales, leur modèle n'arrive pas à prédire correctement les longueurs de remplissage. Toujours avec leur modèle complet, ils montrent que les longueurs de remplissage varient pour des profils et des vitesses de rotations différentes mais non précisées (Figure 1.50). Les auteurs ne commentent pas ces résultats, mais l'on peut noter que les mises en pression s'effectuent au niveau des bagues de restrictions et que les gradients de pression sont plus importants dans les éléments de transport par rapport aux éléments de mélange.

En se basant sur leurs travaux précédents concernant les extrudeuses bi-vis (Meijer et Elemans, 1988), les auteurs rendent leur modèle non newtonien et anisotherme. Leur modèle complet leur permet de produire des courbes de pression et des profils de température (Figure 1.51). Sur la Figure 1.51.a, ils proposent des courbes de pression à débit fixe mais pour différentes vitesses de rotation. Les écarts de pression sont logiquement imputables aux différentes vitesses de rotation. Sur la Figure 1.51.b, ils calculent l'évolution de la température dans le co-malaxeur pour différentes températures initiales. On note que la température finale est quasi identique mais ils ont effectué ces calculs sans préciser le coefficient de transfert thermique utilisé pour l'échange de la chaleur aux parois. Ils ne comparent pas les résultats numériques à des données expérimentales.

Nous venons de voir les modèles qui ont été développés par Elemans et Meijer et les équipes de White. Pour ces modèles, les auteurs ont fait respectivement le choix de négliger les oscillations de la vis ou les doigts de malaxage. Or, ces deux particularités sont des spécificités décrites par le constructeur comme essentielles pour les capacités de mélange des co-malaxeurs. Ces modèles n'abordent également que peu les capacités de mélange. Nous allons donc maintenant étudier les modélisations 3D réalisées sur le co-malaxeur. Ces modélisations devraient permettre d'apporter des précisions et informations à un niveau beaucoup plus local, notamment autour des doigts de malaxage et de préciser leur rôle sur l'écoulement.

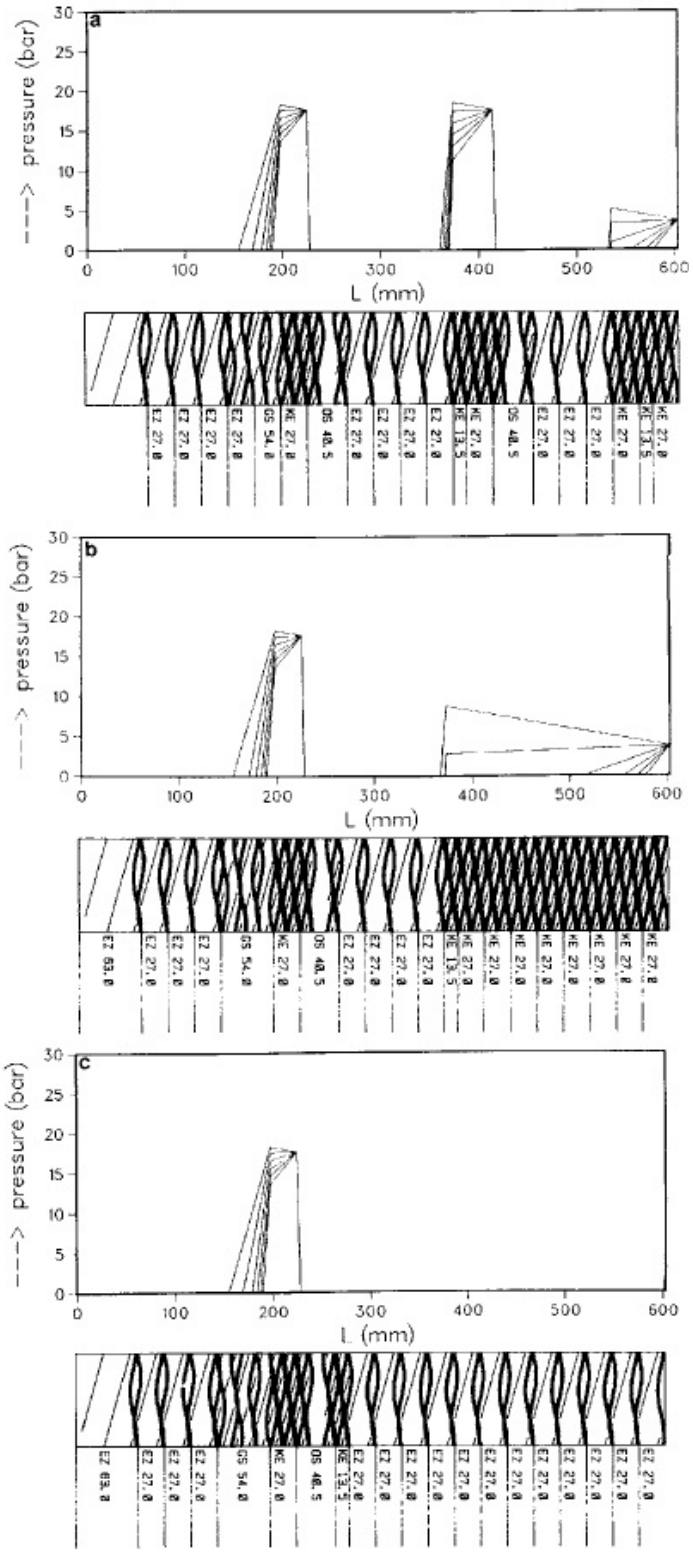


FIGURE 1.50 – Exemple de profil de pression pour un débit de $25\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$, différents profils et conditions expérimentales (Elemans et Meijer, 1990)

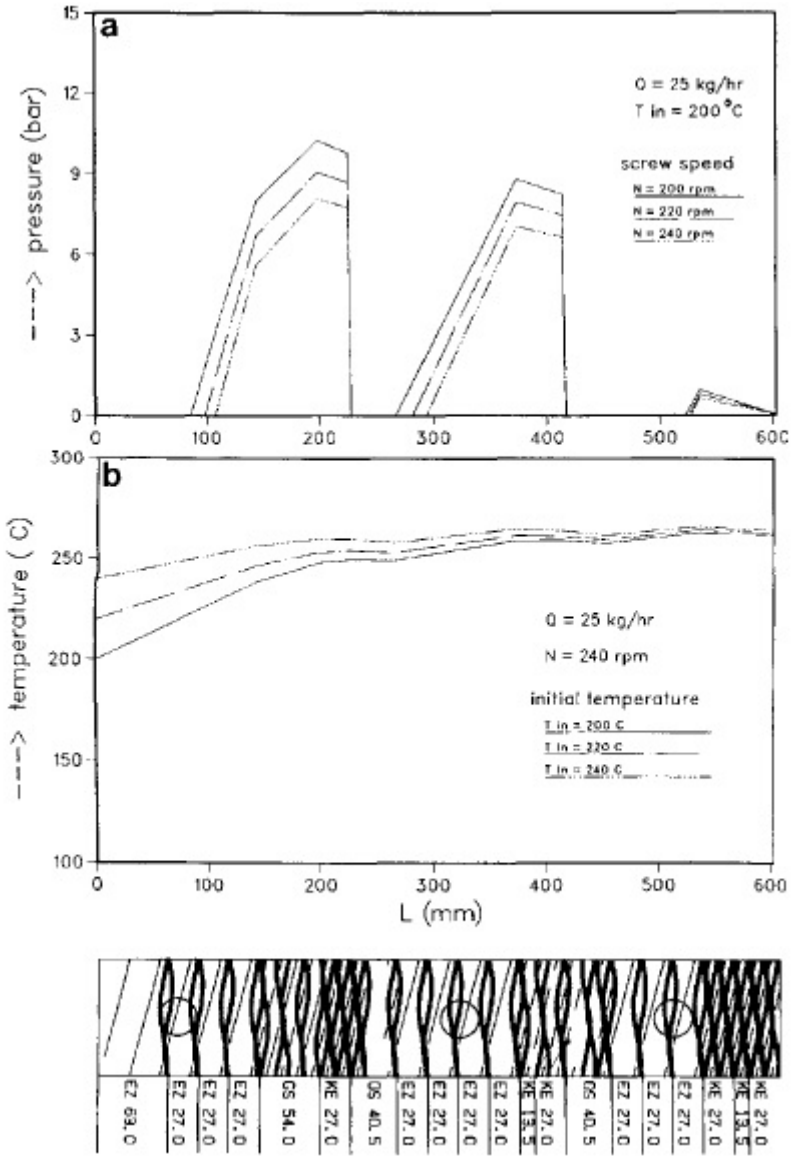


FIGURE 1.51 – Exemple de profil de pression et de température pour un débit de $25\,\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ et des vitesses de rotations de 200, 220 et $240\,\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$. (Elemans et Meijer, 1990)

1.5 Simulation 3D d'un co-malaxeur

Mehranpour *et al.* (2002a) proposent une simulation 3D de l'écoulement dans un élément de transport d'un co-malaxeur BUSS PR46 avec les hypothèses usuelles (chenal déroulé, fourreau tournant et gravité négligée) mais ils considèrent un contact collant au niveau des filets de vis. Cette simulation est réalisée grâce à la méthode des volumes finis, avec 43582 éléments, en résolvant les équations suivantes :

$$\begin{cases} \nabla.V = 0 \\ \tau = \eta \Delta V \\ \rho \frac{\partial V}{\partial t} + V.\nabla V = -\nabla P + \nabla \tau \end{cases} \tag{1.41}$$

Les doigts de malaxage sont négligés afin de simplifier l'écoulement. Ils réalisent des simulations 3D, obtiennent des coupes sur les vitesses et les taux de cisaillement et en concluent que l'oscillation de la vis n'impacte pas la vitesse dans le sens du chenal mais qu'elle impacte la vitesse transverse. Il en est de même pour les taux de cisaillement : le taux de cisaillement global n'est que très peu impacté par l'oscillation. Ils en concluent que l'oscillation de la vis améliore grandement les capacité de mélange de l'élément de transport.

Mehranpour *et al.* (2003a) réalisent ensuite les mêmes simulations sur un élément de mélange avec, cette fois-ci, 99344 éléments. Ils observent le même impact de la vitesse oscillatoire sur les vitesses et les taux de cisaillement. Ils concluent néanmoins que les taux de cisaillement dans les éléments de mélange ne sont pas suffisants pour expliquer les bonnes capacités du co-malaxeur pour mélanger. Ils montrent donc l'importance de la prise en compte des doigts de malaxage pour les mélanges.

Les mêmes auteurs, (Mehranpour *et al.*, 2002b), réalisent une étude théorique des distributions de temps de séjour dans un élément de transport et un élément de mélange du co-malaxeur BUSS. Pour cela, ils appliquent les approximations usuelles et se basent sur les géométries déroulées de Lyu et White (1995) (Figure 1.30). Ils calculent la fonction distribution des temps de sejour grâce à l'équation suivante

$$F(t)dt = \frac{dQ}{Q} = \frac{dQ(t)}{\bar{V}WH} \tag{1.42}$$

avec $\bar{V}$, la vitesse moyenne, Q, le débit, W, la largeur du chenal et H, la hauteur du chenal. En reprenant les équations des débits données par Lyu et White et en les intégrant à l'équation (1.42), ils obtiennent les distributions de temps de séjour cumulées pour les 2 éléments. Les distributions obtenues sont quasiment identiques pour les éléments de transport et de mélange. Les auteurs s'étonnent de cela et l'expliquent par le fait que la présence des doigts de malaxage est négligée. On peut aussi s'interroger sur le fait d'avoir négligé le contact collant du polymère sur les filets de vis, étant donné que la forme des chenaux dans les éléments de mélange est proche d'un carré (Figure 1.52).

Mehranpour *et al.* (2003b) continuent les études sur les distributions de temps de séjour en réalisant des lâchers de particules, à partir desquels ils reconstruisent une distribution

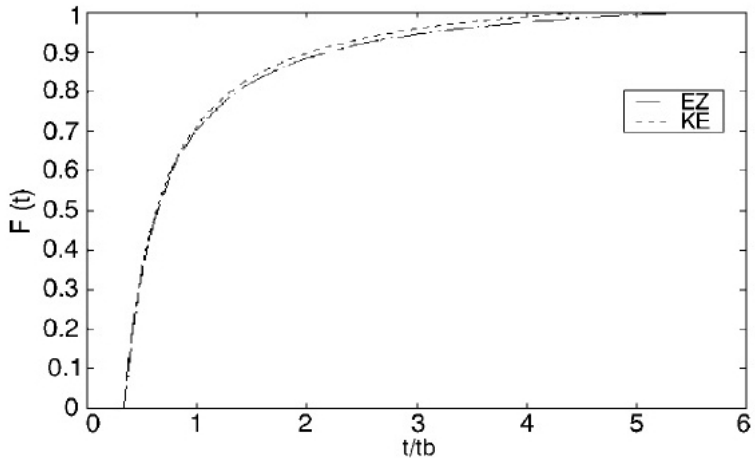


FIGURE 1.52 – Distribution cumulée des temps de séjour pour un élément de transport (EZ) et un élément de mélange (KE), obtenue à partir de l'équation 1.42 (Mehranpour *et al.*, 2002b)

cumulée des temps de séjour. Ils concluent des résultats obtenus que les éléments de mélange ont des temps de séjour minimum plus courts que l'élément de transport, mais que, du fait des nombreuses interruptions de filet, la distribution des temps de séjour pour un élément de mélange croît plus lentement (Figure 1.53).

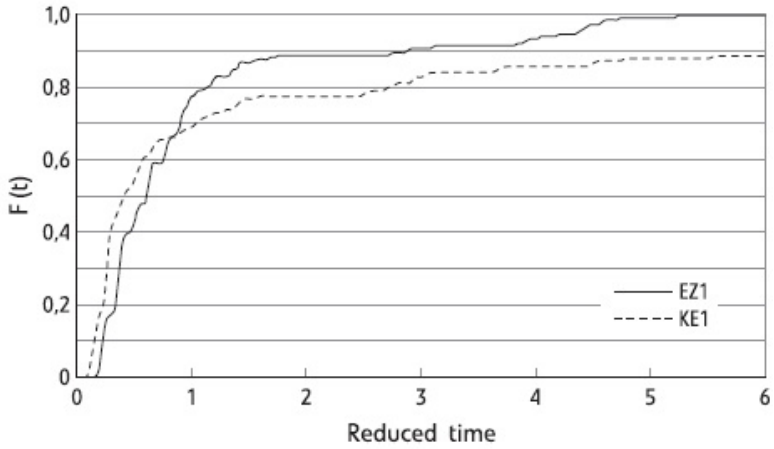


FIGURE 1.53 – Distribution des temps de séjour cumulée pour un élément de transport (EZ) et un élément de mélange (KE) obtenu par lâcher de particules (Mehranpour *et al.*, 2003b)

Ils réalisent les mêmes simulations pour des séries de 1, 2 et 3 éléments de transport (Figure 1.54) et de mélange (Figure 1.55). Ils observent que, plus on ajoute d'éléments, plus la distribution de temps de séjour est étalée, ce qui est un résultat attendu. Mais l'on note également que leurs distributions de temps de séjour n'arrivent presque jamais à la valeur asymptotique de 1. Ceci traduit donc des pertes des particules dans leur calcul.

Afin de pouvoir étendre leurs prédictions de DTS à des co-malaxeurs BUSS complets, à partir des résultats "unitaires" pour chaque type d'élément, Mehranpour *et al.* (2004) proposent un modèle en cluster. Comme ils le montrent sur la Figure 1.56, ceci revient à partir d'une concentration C_0 initiale, à calculer dans le cas présent la DTS pour le

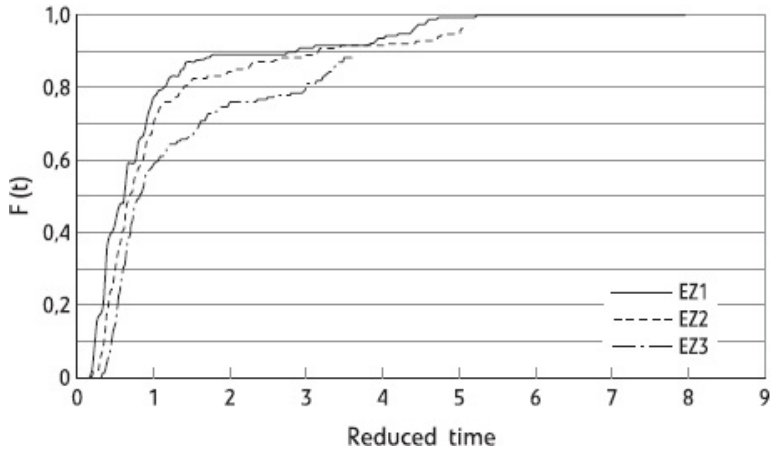


FIGURE 1.54 – Distribution des temps de séjour cumulée pour 1, 2 ou 3 éléments de transport (EZ) (Mehranpour *et al.*, 2003b)

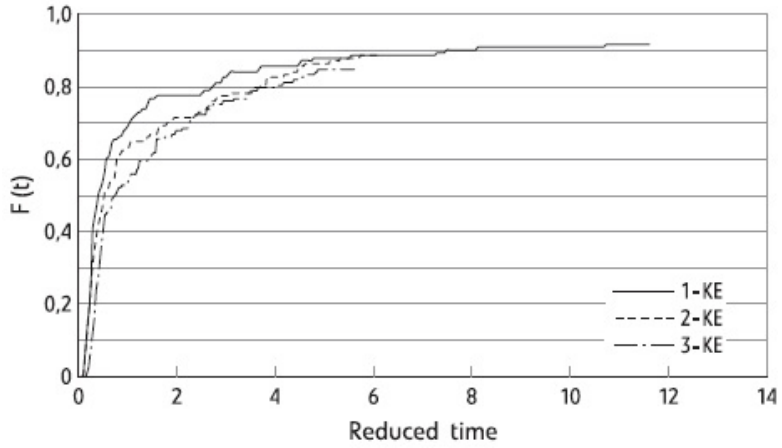


FIGURE 1.55 – Distribution des temps de séjour cumulée pour 1, 2 ou 3 éléments de mélange (KE) (Mehranpour *et al.*, 2003b)

premier élément, puis à donner comme paramètres d'entrée au deuxième élément les résultats du premier et ainsi de suite en appliquant une convolution.

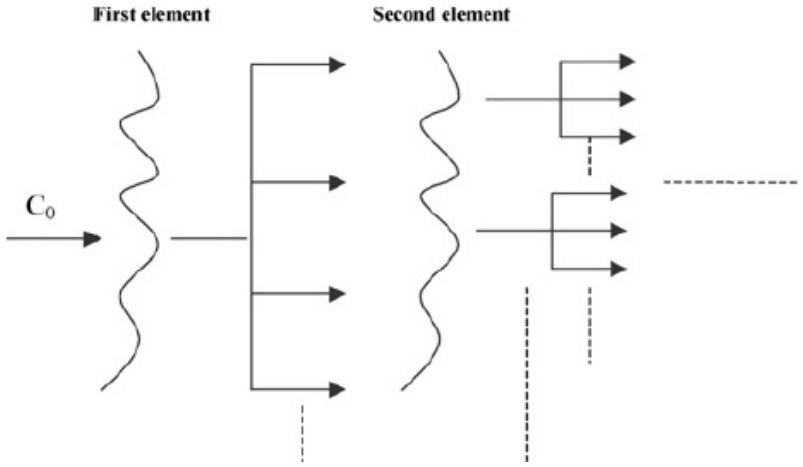


FIGURE 1.56 – Diagramme schématique du modèle en cluster (Mehranpour *et al.*, 2004)

Ils comparent cette méthode en "cluster" à leur précédente méthode.
Il y a plutôt un bon accord entre les 2 méthodes développées pour les éléments de trans-

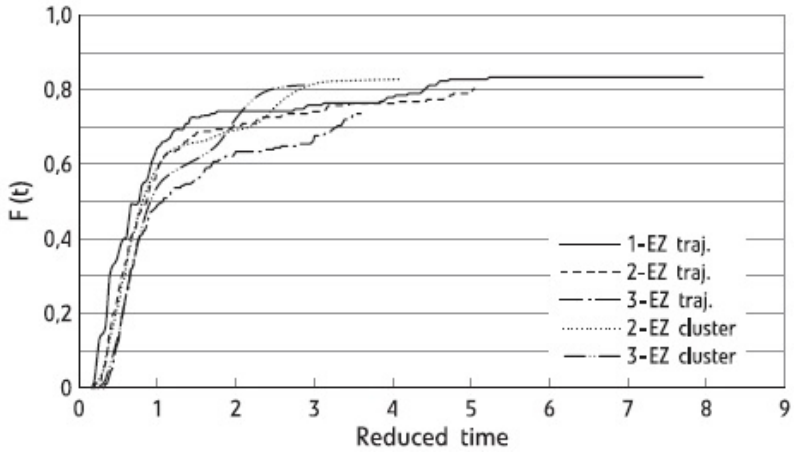


FIGURE 1.57 – Comparaison entre la méthode "Cluster" et la méthode de lâcher des particules sur des éléments de transport (EZ) (Mehranpour *et al.*, 2004)

port (EZ) comme on peut le voir sur la Figure 1.57. Plus d'écarts sont visibles sur les simulations concernant les éléments de mélange (Figure 1.58) mais les auteurs concluent que les résultats sont similaires pour les deux méthodes. Ils expliquent les différences par le fait que les interruptions de filets sur le premier filet du premier élément ne sont pas prises en compte. Sur les simulations, la distribution des temps de séjour n'atteint pas la valeur de 1, les auteurs n'évoquent pas l'influence des particules perdues sur le résultat final.

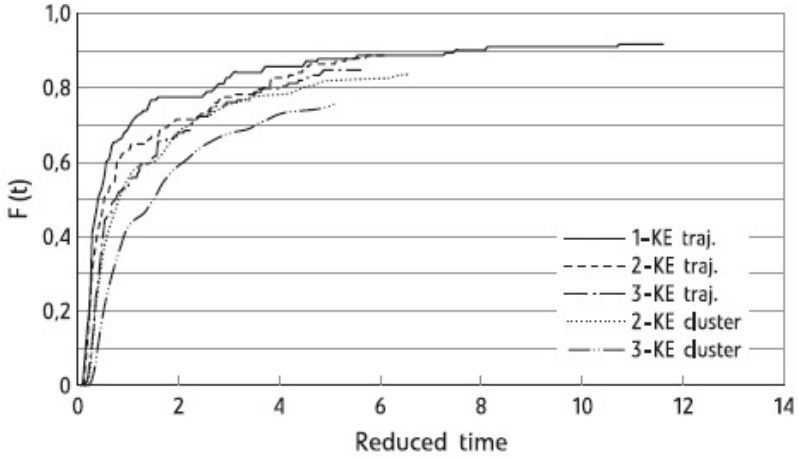


FIGURE 1.58 – Comparaison entre la méthode "Cluster" et la méthode de lâcher des particules sur des éléments de mélange (KE) (Mehranpour *et al.*, 2004)

Pour terminer, ils comparent leur modèle à des données expérimentales.
Le modèle en cluster étant plus ou moins en accord avec les données expérimentales (Figure 1.59), les auteurs valident ce modèle et l'approche utilisée. A partir de données de DTS obtenues pour chaque élément type d'une configuration, il est possible, via ce modèle, de prédire la DTS d'un profil complexe.

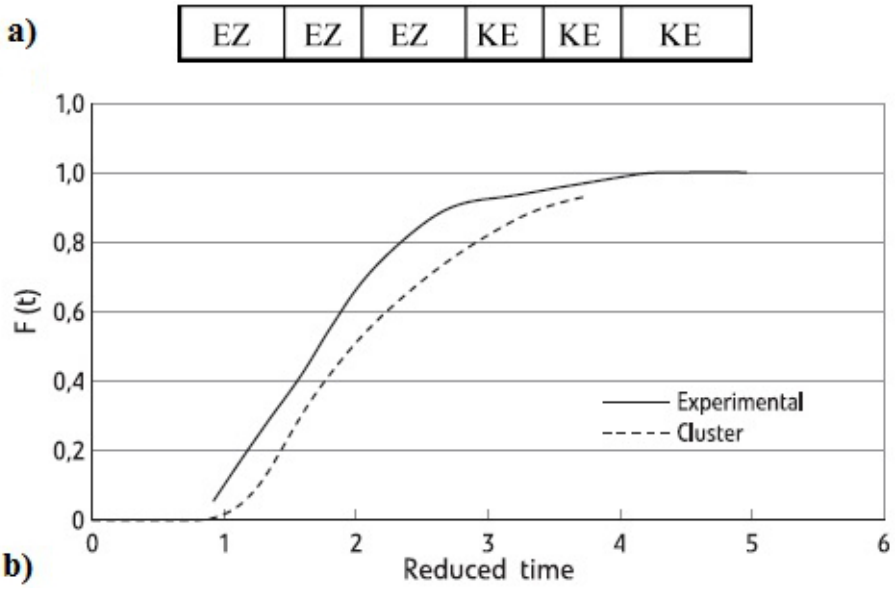


FIGURE 1.59 – a) profil de vis utilisé pour les simulations
b)comparaison entre les DTS observées expérimentalement et les DTS estimées grâce au modèle cluster

Brito Bazan (2011) a étudié les écoulements dans le co-malaxeur en réalisant des essais expérimentaux et en simulant l'écoulement dans un profil de vis complet. Les essais expérimentaux ont été réalisés sur un co-malaxeur BUSS D = 50 mm dont le profil est uniquement composé d'éléments de transport et de mélange et avec un fluide ayant une viscosité de $0{,}2\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}^{-1}$. Les simulations 3D prennent en compte les oscillations et les doigts de malaxage, mais négligent l'éventuel sous-remplissage. L'écoulement est résolu en 3 dimensions avec les équations de Navier-Stockes incompressibles et en utilisant la méthode des éléments finis avec des éléments P1+P1 (Vitesse + Pression). La simulation 3D est réalisée sans aucune approximation usuelle sur le modèle thermomécanique et prend donc en compte la géométrie réelle du co-malaxeur BUSS (Figure 1.60) et un contact collant du polymère au niveau des parois. La rotation est réalisée en 120 pas de temps.

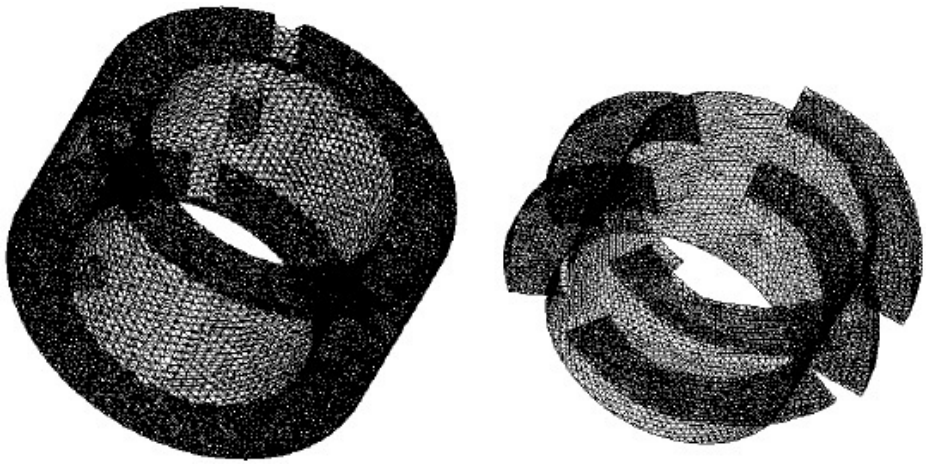


FIGURE 1.60 – Maillage obtenu pour un élément de mélange (KN) (Brito Bazan, 2011)

Les simulations sont réalisées avec le logiciel commercial Poly3D. Le nombre d'éléments tétraédriques est de 1 million pour 18 éléments de vis ce qui semble correspondre à une taille de maille de l'ordre de 1 mm. Brito Bazan (2011) observe que les résultats des simulations sont périodiques après 1 rotation. La modélisation 3D permet d'obtenir des cartes de résultats (Figure 1.61). La pression affichée est la pression à mi-hauteur dans le chenal pour une position au cours de l'oscillation non indiquée.
A partir des pressions obtenues, Brito Bazan (2011) calcule des courbes de pression le long de la vis (Figure 1.62) et observe que l'élément de transport crée plus de pression que l'élément de mélange ; il a donc une plus grande capacité de pompage.
Brito Bazan (2011) obtient des pressions négatives, car elle néglige le sous-remplissage. La simulation 3D permet d'obtenir des cartes de pressions ainsi que des champs de vitesses (Figure 1.63). Néanmoins, un champ vitesse avec des vecteurs et non en valeur absolue aurait été plus pertinent.
L'auteur note que sur la Figure 1.63.a, la position du doigt de malaxage entre les interruptions de filets conduit à une séparation des flux dans les chenaux adjacents, ce qui induit donc un mélange distributif. Dans le cas des figures 1.63.b et d, l' auteur conclut que l'écoulement continue simplement dans le chenal sans se faire perturber comme il se fait perturber dans la figure 1.63.c. Néanmoins, le cas décrit comme un écoulement "simple"

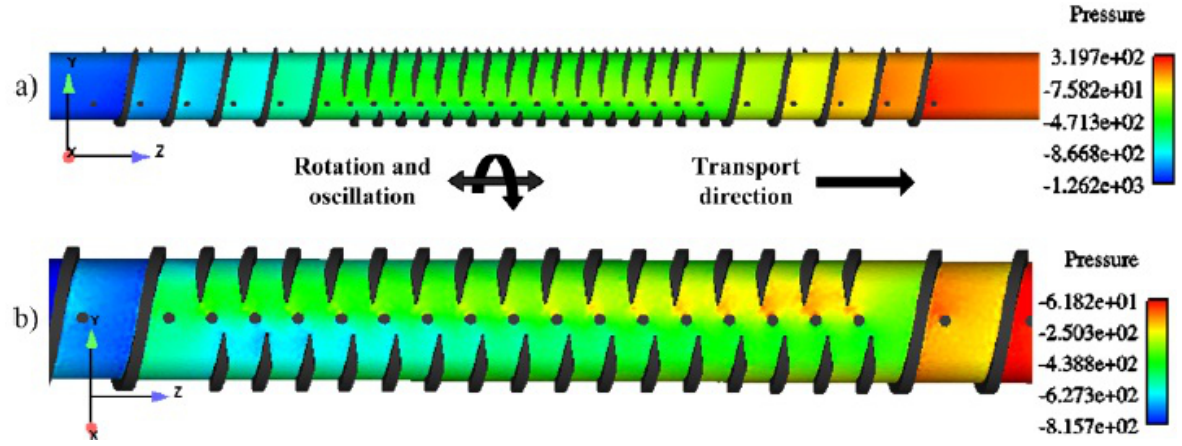


FIGURE 1.61 – Carte de pression (en Pa) obtenue pour le profil entier (a) ou pour une partie zoomée sur les éléments de mélange (b) (Brito Bazan, 2011)

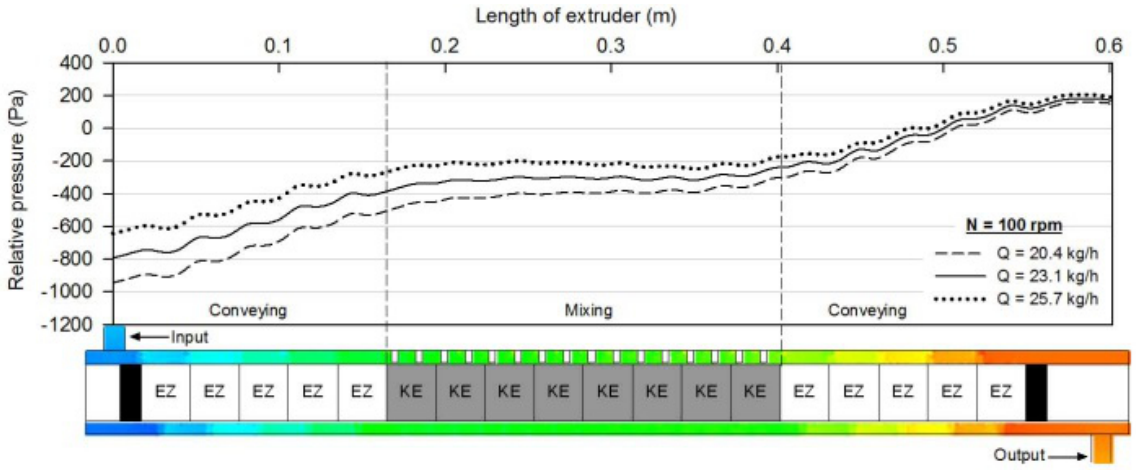


FIGURE 1.62 – Courbe de pression le long de la vis pour N = 100 tr · min^{-1} (Brito Bazan, 2011)

est impossible à obtenir si l'ensemble des doigts de malaxage est présent, puisqu'il y a 3 doigts de malaxage et 3 "chenaux" par rotation dans les éléments de mélange.

Afin d'étudier les capacités de mélange du co-malaxeur, Brito Bazan (2011) réalise des lâchers de particules en les injectant sur un plan initial, résolus par une approche élément par élément combinée à une prédiction-correction d'erreur. Malgré cette approche, dans la section d'élément de mélange, entre 70 et 90 % des particules n'atteignent jamais la sortie. L'essentiel de la perte serait dû, selon les auteurs, à la géométrie complexe et non à des particules restant collées au filet, zones dans lesquelles la vitesse tend vers zéro. Les DTS numériques sont obtenues par des convolutions : dans le cas présent, la DTS totale est calculée en convoluant la DTS de la première section de transport, celle de la section de mélange et celle de la deuxième section de transport

$$E(t) = E_{EZ-1}(t) * E_{KE}(t) * E_{EZ-2}(t) \tag{1.43}$$

Brito Bazan (2011) compare (Figure 1.64) les résultats numériques obtenus avec des résultats expérimentaux (Brito-Bazan *et al.* (2012)) avec

$$\theta = \frac{t}{t_m} \tag{1.44}$$

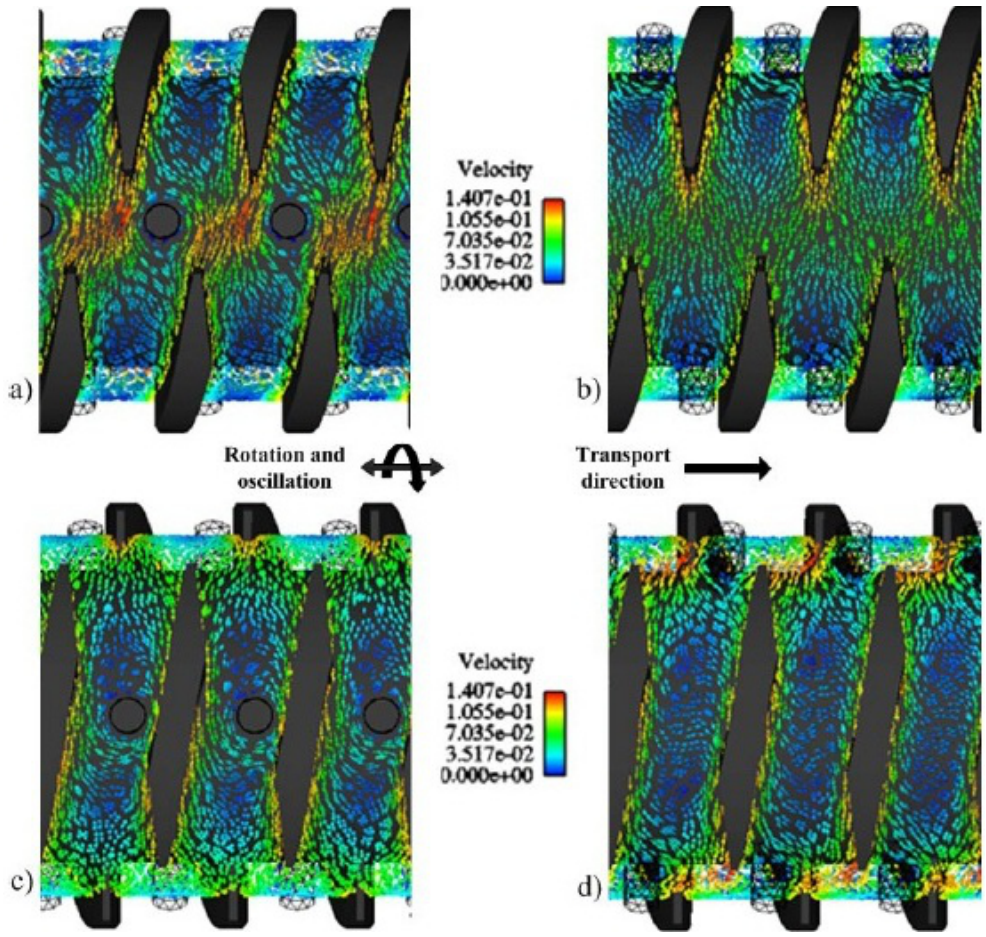


FIGURE 1.63 – Norme des vitesses dans un élément de mélange pour $N = 50\,tr \cdot min^{-1}$ et $Q = 10{,}3\,kg \cdot h^{-1}$ pour différentes positions de l'oscillation (Brito Bazan, 2011)

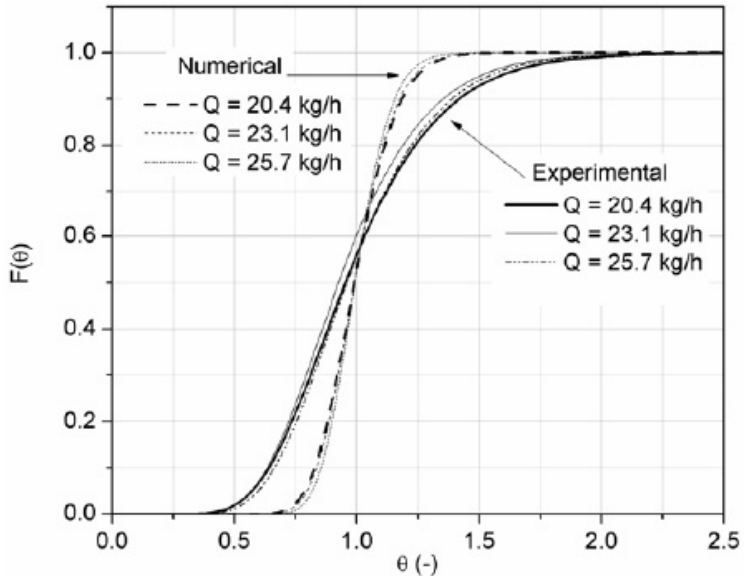


FIGURE 1.64 – Comparaison des DTS cumulées pour les essais expérimentaux et les résultats numériques pour $N = 100\,tr \cdot min^{-1}$ (Brito Bazan, 2011)

et

$$t_m = \frac{V}{Q} \tag{1.45}$$

avec V, le volume et Q, le débit. Les auteurs expliquent ces différences de résultats par

le fait qu'expérimentalement et numériquement les DTS ne sont pas mesurées au même endroit : les DTS expérimentales sont mesurées du puits d'entrée "tracer" au milieu de la sortie (Figure 1.65), alors que numériquement, les particules sont introduites sur le premier élément et récupérées juste à la fin du dernier élément. En plus, la convolution réalisée (1.43) ne prend pas en compte la position exacte de l'oscillation de la vis au moment de la convolution. Ils ne font aucune référence au fait que le co-malaxeur fonctionne en sous-remplissage et que celui-ci n'est pas pris en compte par leur modèle.

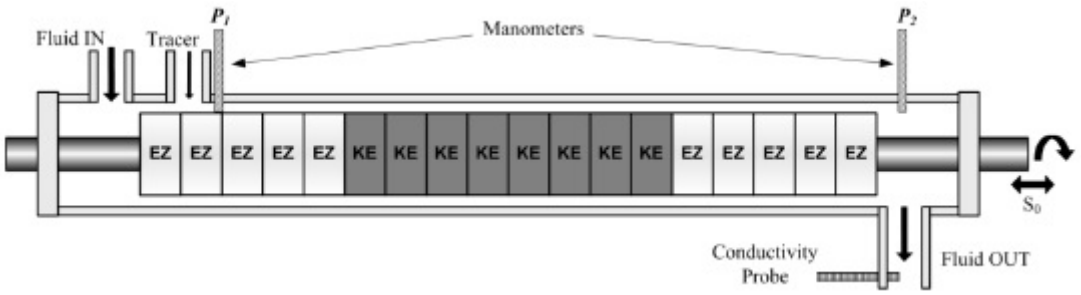


FIGURE 1.65 – Schéma des puits d'entrée et de sortie du co-malaxeur utilisé pour les mesures de DTS (Brito Bazan, 2011)

Après cette analyse globale, une analyse plus détaillée de chaque type d'élément(transport et mélange) est proposée. Des courbes caractéristiques sont réalisées (Figure 1.66). On observe que les débits maximaux de pompage pour l'élément de transport (EZ) et l'élément de mélange semblent être identiques. L'élément de transport n'ayant qu'une interruption de filet, il devrait avoir une débit supérieur à celui de l'élément de mélange.

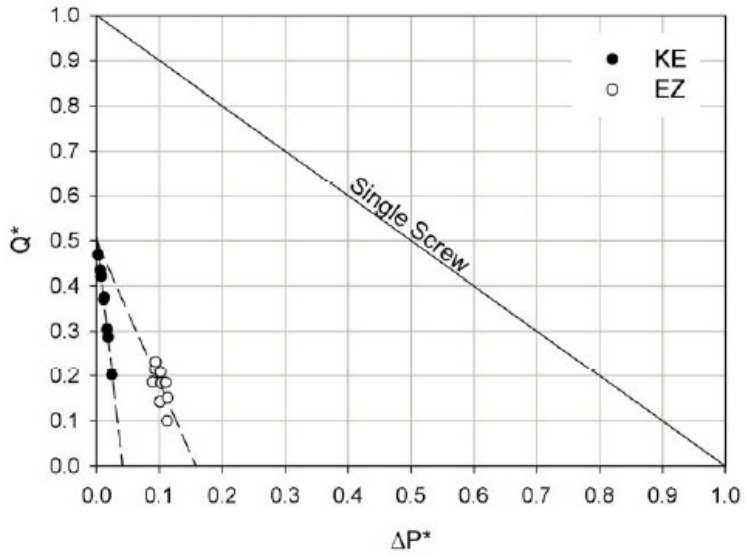


FIGURE 1.66 – Courbe caractéristiques adimensionnelles pour des éléments de monovis classique, de transport (EZ) et de mélange (KE) (Brito Bazan, 2011)

Grâce aux calculs 3D, le coefficient extensionnel α, (eq 1.3), défini par Manas-Zloczower (1994) et permettant d'estimer l'effet dispersif du mélange, peut être calculé en tout point du domaine (Figure 1.67).

A partir de la simulation 3D, Brito Bazan calcule des moyennes pour le facteur α pour chaque élément.

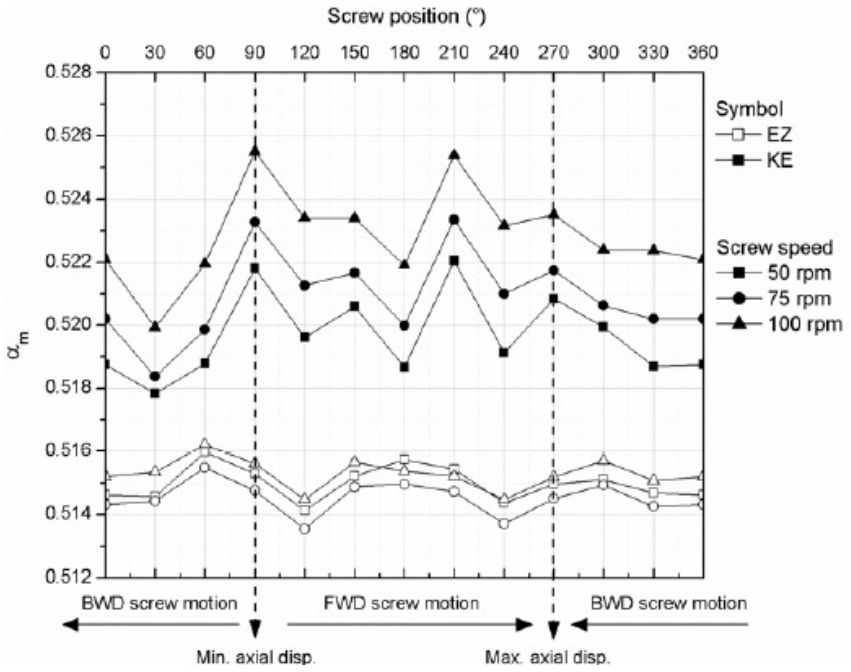


FIGURE 1.67 – Calcul du coefficient α moyen en fonction de la position de la vis dans des éléments de transport (EZ) et de mélange (KE) (Brito Bazan, 2011)

Elle remarque que l'élément de malaxage a un coefficient α_m légèrement supérieur à l'élément de transport et également que le coefficient varie davantage au cours d'une oscillation dans l'élément de mélange (Figure 1.67). Sur les cartes 3D (Figures 1.68 et 1.69), le rôle local des doigts de malaxage est clairement mis en évidence : le coefficient α ainsi que les taux de cisaillement sont nettement plus élevés à proximité du doigt de malaxage que dans le reste de l'élément.

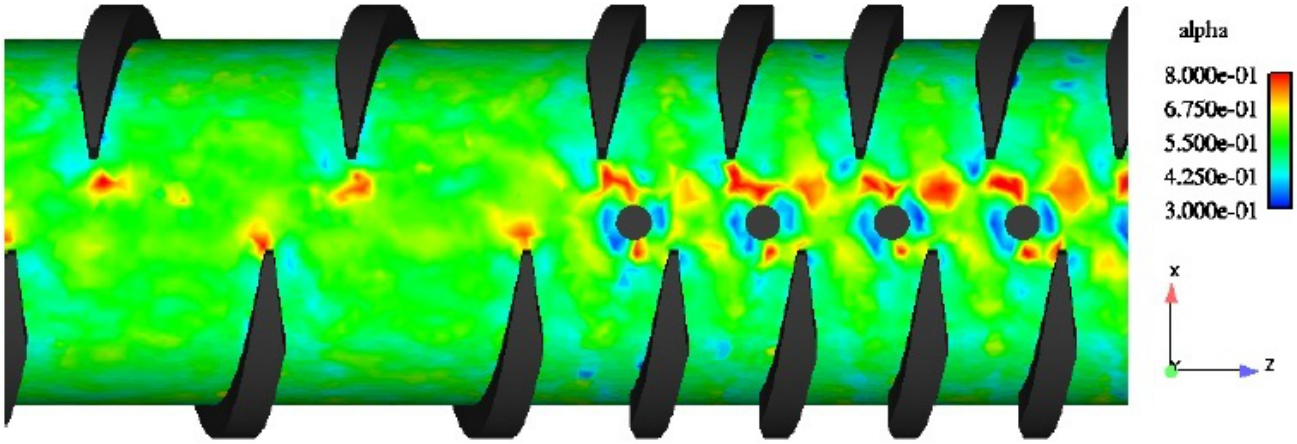


FIGURE 1.68 – Carte de valeur du coefficient α pour $N = 100\,tr \cdot min^{-1}$ et $Q = 23{,}1\,kg \cdot h^{-1}$ (Brito Bazan, 2011)

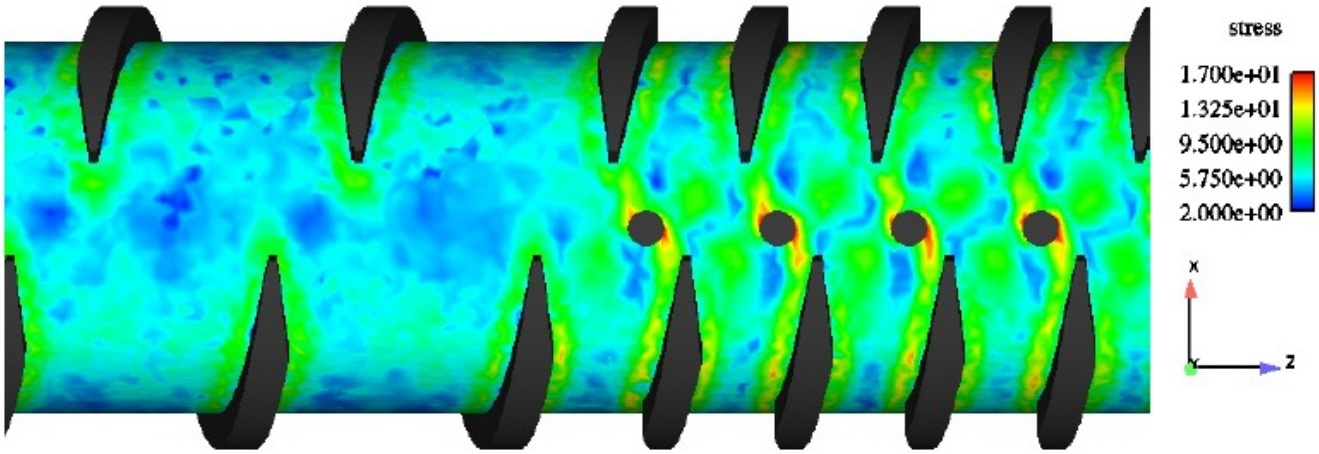


FIGURE 1.69 – Carte des taux de cisaillement pour $N = 100\,tr \cdot min^{-1}$ et $Q = 23{,}1\,kg \cdot h^{-1}$) (Brito Bazan, 2011)

1.6 Conclusion : Objectif d'une modélisation, les apports et les questions

Les modélisations et les simulations sont de plus en plus utilisées de nos jours dans le but de réduire la durée de mise au point d'un procédé de compoundage ou de mise en forme. En effet, la modélisation permet d'obtenir rapidement, à moindre coût comparé à une campagne d'essais, des résultats complets ou locaux sur un procédé avec divers paramètres que l'on peut faire varier sans limite. Les résultats globaux ou locaux peuvent permettre de détecter des pics de température qui peuvent entrainer la dégradation rapide du polymère et affecter la qualité ou l'aspect final du produit. Ils peuvent également servir à comprendre et à adapter localement des zones de mélange afin de mieux disperser ou distribuer des charges. Par exemple, dans le cas du co-malaxeur, étudier l'impact précis des doigts de malaxage sur le mélange dispersif ainsi que sur l'échauffement global du système.

Les simulations fournissent donc une multitude de résultats. Néanmoins, il faut se poser des questions sur la pertinence de ces résultats et comment les analyser.

En effet, les résultats de chaque modélisation et chaque simulation sont dépendants de plusieurs points. En premier lieu, la taille de maille utilisée pour modéliser le système. Il faut garder à l'esprit que la taille de maille choisie impacte fortement le temps de calcul. On pourrait donc être tenté de choisir une taille de maille élevée, mais ceci engendrera des approximations sur le résultat final. Il faudra donc choisir, après avoir trouvé le rapport temps/précision souhaité, la taille de maille voulue et garder à l'esprit les erreurs à la solution qui en découlent. Il faudra également, dans un deuxième temps, considérer les approximations qui ont été faites dans le modèle. Comme nous l'avons vu dans ce chapitre, de nombreuses approximations sont réalisées, surtout pour les modélisations 1,5D et 2D. Il faudra donc évaluer l'impact de ces approximations et en tenir compte dans le dépouillement des résultats. Les résultats des simulations dépendent aussi fortement des paramètres choisis. Certains paramètres sont connus ou peuvent facilement être mesurés, comme les débits, les vitesses de rotation, la densité et la viscosité du polymère, mais d'autres paramètres comme le glissement à la paroi ou les coefficient de transfert thermique sont plus difficiles à estimer.

Dans la suite de ce manuscrit, nous présenterons le modèle que nous avons développé pour modéliser les écoulements dans le co-malaxeur. Ce modèle se basera sur les approximations couramment réalisées dans le cas de la modélisation des écoulements dans les extrudeuses monovis (§1.3). Contrairement aux modélisations présentées précédemment (§1.4), notre modèle prendra en compte à la fois les doigts de malaxage et les oscillations de la vis. La résolution de ce modèle s'appuiera sur une méthode éléments finis, qui apportera des résultats, localement plus précis que les méthodes de type FAN mise en place précédemment. Nous verrons également les problèmes que peuvent amener la résolution d'équations de transport par éléments finis et proposerons des solutions pour limiter ce phénomène. Grâce à ce modèle et aux résultats que nous obtiendrons des simulations,

nous étudierons également l'impact de chaque spécificité du co-malaxeur sur l'écoulement et quantifierons les qualités de mélange des éléments du co-malaxeur.

Chapitre 2

Modèle mécanique et résolution numérique de l'écoulement dans le co-malaxeur

Sommaire

2.1 Les hypothèses simplificatrices 58
2.2 Le modèle mécanique 59
2.3 Implémentation 66
2.3.1 Formulation faible 66
2.3.2 Conditions aux limites 68
2.3.3 Organigramme du code 70
2.4 Validation du modèle 72
2.4.1 Écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles 72
2.4.2 Ecoulement avec hauteur variant dans le chenal 72
2.4.3 Ecoulement de Poiseuille avec continuité droite-gauche 72
2.4.4 Convergence du code 74
2.4.5 Comparaison 2D-3D au niveau des bagues de restrictions . . . 76
2.5 Prise en compte des oscillations et des doigts de malaxage . 77
2.5.1 La vitesse d'oscillation 77
2.5.2 La prise en compte des doigts de malaxage 89
2.5.3 Influence des doigts de malaxage sur l'écoulement 91
2.5.4 Conclusion 93

Dans ce chapitre, nous présenterons le modèle mécanique développé pour l'écoulement dans le co-malaxeur ainsi que les approximations réalisées et nous tenterons d'évaluer leur pertinence.

2.1 Les hypothèses simplificatrices

Comme nous l'avons vu dans la partie consacrée à la modélisation dans le chapitre Bibliographie, les écoulements dans les systèmes d'extrudeuses, en raison de leur géométrie, sont compliqués à modéliser. Pour cela, nous simplifierons également la géométrie du co-malaxeur et la présentons ici. La première simplification est le déroulement du chenal. La géométrie des chenaux déroulés pour chaque élément étant déjà proposée par le constructeur comme nous l'avons vu précédemment (§1.2.1), nous nous appuyerons sur celle-ci. Dans le cas des extrudeuses monovis classiques, le chenal obtenu est rectangulaire et rectiligne. Cette approximation, qui dépend du rayon utilisé pour dérouler la géométrie, modifie la géométrie du chenal dans le cas où sa hauteur est non négligeable devant le rayon. Dans le cas du co-malaxeur MK30 du projet, la hauteur du chenal est de 5 mm et le rayon externe de 15 mm. Nous choisissons de dérouler la géométrie au niveau du diamètre externe, la géométrie du chenal est donc étirée au niveau du diamètre intérieur. Par exemple, pour un élément de mélange, dérouler le chenal de cette manière conduit à obtenir des chenaux avec de multiples interruptions de filets (Figure 2.1).

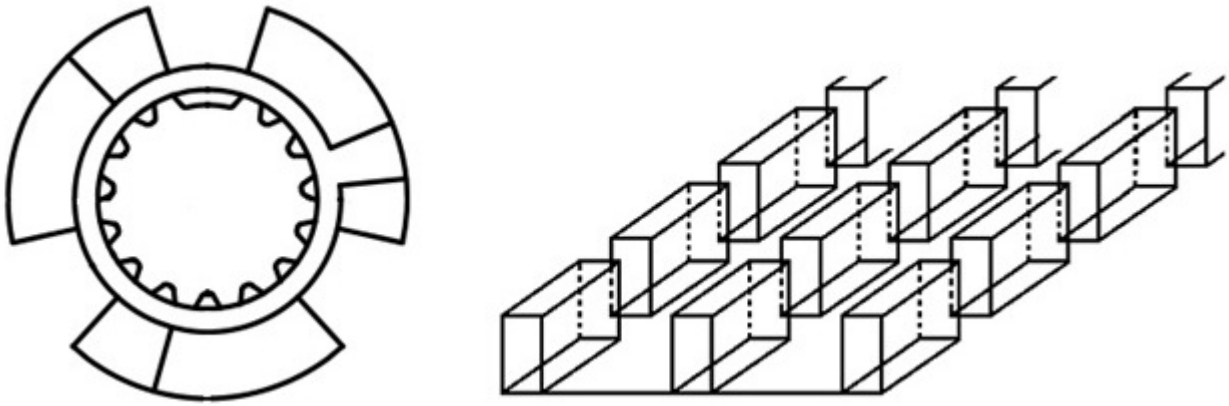


FIGURE 2.1 – Exemple de chenal déroulé pour un élément de mélange

De plus, comme nous l'avons vu (§1.2.1), les angles de filets des éléments peuvent être différents. Il n'est, par conséquent, pas possible d'obtenir un chenal rectiligne en déroulant la géométrie du co-malaxeur. Nous faisons donc le choix de considérer la géométrie de la vis telle qu'elle est et de la dérouler en "ouvrant" le cylindre extérieur le long d'une génératrice (Figure 2.2).
Dans notre configuration, le polymère sortant sur le côté gauche du maillage est rentrant sur le côté droit.

Le chenal ayant des angles de filet différents selon le type d'éléments, le repère choisi n'est pas aligné sur les filets de vis. La vitesse du fourreau est donc conservée telle quelle sur le repère ; nous avons donc la vitesse selon l'axe z, qui est la vitesse de rotation,

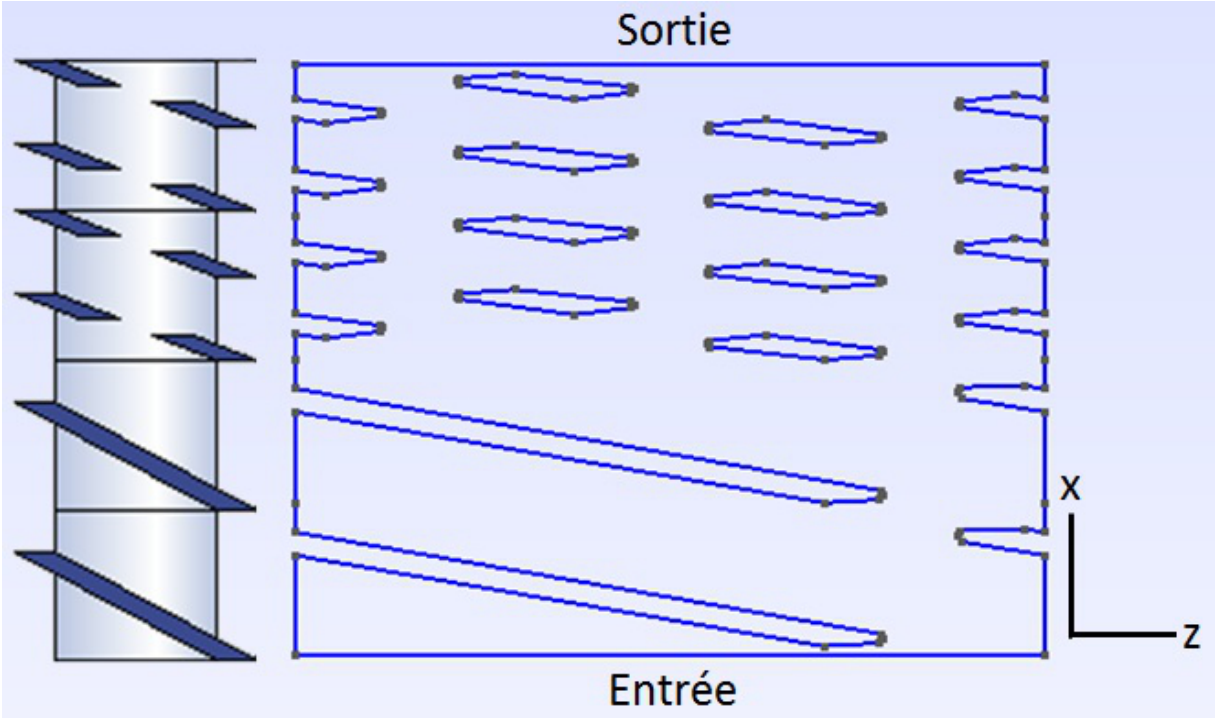


FIGURE 2.2 – Géométrie déroulée pour 2 éléments de transport et 2 éléments de mélange

constante, et la vitesse selon l'axe x, qui est la vitesse décrivant l'oscillation de la vis. La vitesse relative du fourreau par rapport à la vis est donc :

$$\vec{V_F} = \vec{V_{Fx}} + \vec{V_{Fz}} = A\omega sin(\omega t)\vec{e_x} + \frac{N}{60}\pi D\vec{e_z} \tag{2.1}$$

avec A, l'amplitude de l'oscillation, N, la vitesse de rotation en tr/min, ω, la fréquence, $\omega = 2\pi\ N/60$, t, le temps et D, le diamètre extérieur. Sur le Buss MK30 du projet, $A \approx 3{,}73\,\text{mm}$ et $D = 30\,\text{mm}$.

2.2 Le modèle mécanique

Comme nous l'avons vu précédemment, la hauteur du chenal du co-malaxeur ne varie qu'au niveau des bagues de restriction. La majorité de l'écoulement modélisé est donc un écoulement où la vitesse verticale, V_y, est nulle. Les gradients de vitesse sont au premier ordre en y puis le reste de l'écoulement dans le co-malaxeur varie dans les directions x et z. Comme on l'a vu précédemment, les doigts de malaxage se déplacent le long des chenaux déroulés, induisant une géométrie instationnaire. La modélisation 2D a été retenue afin de prendre en compte le maximum de ces caractéristiques dans le modèle. L'écoulement du polymère pouvant s'effectuer dans le sens du chenal et au travers des interruptions de filets, les deux dimensions retenues sont celles indiquées sur la Figure 2.2. Les valeurs physiques sont donc considérées comme constantes dans la hauteur.

L'approximation de la lubrification hydrodynamique en couche mince (approximation de Hele-Shaw) est donc réalisée. De manière très générale, un modèle mécanique d'écou-

lement se fonde sur les équations de Navier-Stokes :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial v_x}{\partial t}+v_x\dfrac{\partial v_x}{\partial x}+v_y\dfrac{\partial v_x}{\partial y}+v_z\dfrac{\partial v_x}{\partial z} & = & \dfrac{-1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial x}+\dfrac{\eta}{\rho}\left(\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial z^2}\right)+f_x \\ \dfrac{\partial v_y}{\partial t}+v_x\dfrac{\partial v_y}{\partial x}+v_y\dfrac{\partial v_y}{\partial y}+v_z\dfrac{\partial v_y}{\partial z} & = & \dfrac{-1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial y}+\dfrac{\eta}{\rho}\left(\dfrac{\partial^2 v_y}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 v_y}{\partial z^2}\right)+f_y \\ \dfrac{\partial v_z}{\partial t}+v_x\dfrac{\partial v_z}{\partial x}+v_y\dfrac{\partial v_z}{\partial y}+v_z\dfrac{\partial v_z}{\partial z} & = & \dfrac{-1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial z}+\dfrac{\eta}{\rho}\left(\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}\right)+f_z \end{array}\right. \tag{2.2}$$

Du fait de la forte viscosité des polymères fondus, les termes d'inertie et de gravité sont souvent négligés. Nous allons tout de même vérifier qu'ils sont négligeables dans notre cas. Le nombre de Reynolds permet d'estimer l'importance des forces d'inertie par rapport aux forces visqueuses. Dans le cas des co-malaxeurs, les pressions et les gradients de pression sont faibles, l'écoulement est donc majoritairement induit par la rotation de la vis. En considérant le co-malaxeur MK30 du projet, $H = 5 \times 10^{-3}\,\mathrm{m}$, une densité $\rho = 900\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$, une viscosité $\eta = 100\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$ et un cas défavorable, soit pour la vitesse de rotation maximale, la vitesse moyenne obtenue est $\bar{V} = 0{,}393\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$. On obtient :

$$Re = \frac{\rho \bar{V} H}{\eta} \approx 0,02 \tag{2.3}$$

Nous négligerons donc les forces inertielles. Concernant les forces gravitationnelles, le nombre de Froude permet d'évaluer leur importance par rapport aux termes d'inertie. En prenant des valeurs identiques aux précédentes, nous obtenons :

$$Fr = \frac{\bar{V}}{\sqrt{g\ H}} \approx 1,8 \tag{2.4}$$

Nous voyons donc que les termes de gravité sont du même ordre de grandeur que les termes d'inertie. Les termes d'inertie ayant été négligés devant les termes de viscosité, nous négligerons aussi les termes de gravité. Suite à ces approximations, nous obtenons les équations de Stokes :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\dfrac{\partial P}{\partial x}+\eta\left(\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial z^2}\right) & = & 0 \\ -\dfrac{\partial P}{\partial y}+\eta\left(\dfrac{\partial^2 v_y}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 v_y}{\partial z^2}\right) & = & 0 \\ -\dfrac{\partial P}{\partial z}+\eta\left(\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}\right) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.5}$$

L'écoulement dans le co-malaxeur peut être assimilé à un écoulement en couche mince. En effet, les variations de hauteur sont limitées aux bagues de restriction, la courbure des surfaces également, nous utilisons donc les approximations de Hele-Shaw pour décrire l'écoulement.

Ces approximations conduisent donc à ne tenir compte que des termes de cisaillement et à négliger les termes élongationnels. Elles conduiront à quelques imprécisions sur les profils de pression dans les zones à forte variation de hauteur, typiquement au niveau des bagues de restriction, ainsi que dans les zones où les termes élongationnels sont présents,

typiquement au niveau des interruptions de filets dans lesquelles le polymère est renvoyé dans un chenal voisin.

Dans le cas des co-malaxeurs, la variation de la hauteur du chenal est nulle, sauf au niveau des bagues de restriction. Dans le cas du BUSS MK 30, deux hauteurs sont disponibles pour les bagues de restriction. La première réduit la hauteur de 5 à 2 mm et la deuxième de 5 à 1 mm. Comme on peut le voir sur la Figure 2.3, la variation de hauteur est brutale, conduisant à un gradient sur la hauteur de l'ordre de 1, ce qui est nettement plus que ce qui est admis pour les approximations de Hele-Shaw. Ceci pourra donc induire une erreur sur le calcul des pressions aux abords de la zone.

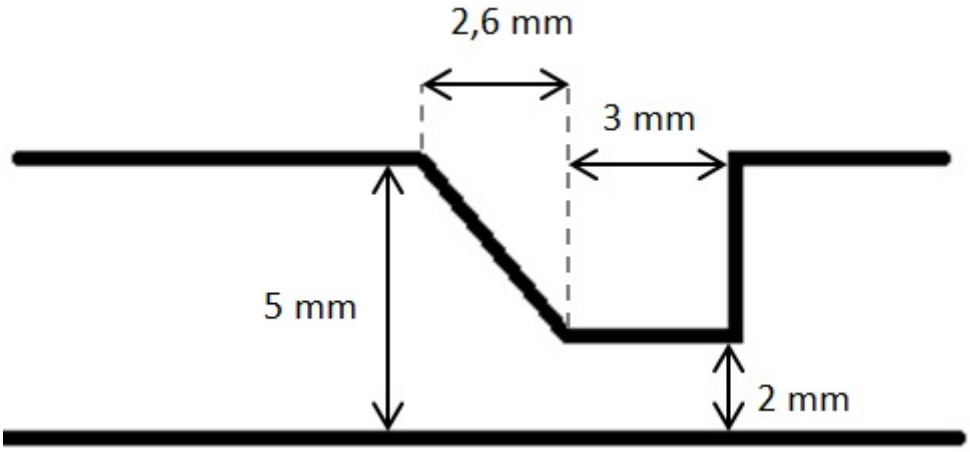


FIGURE 2.3 – Schéma d'une bague de restriction d'un MK30 avec une restriction de hauteur du chenal à 2 mm

L'erreur entre la solution exacte des équations de Stokes en se basant dans un repère cylindrique et la solution analytique obtenue grâce aux équations issues des approximations d'Hele-Shaw a été quantifée par Agassant *et al.* (2014) dans le cas d'un dièdre. Dans notre cas, la bague de restriction peut être assimilé à un demi-dièdre. Sur le BUSS MK 30, les bagues de restriction de 1 et 2 mm font respectivement un angle 56° et 49° par rapport à l'horizontale. Agassant *et al.* (2014) proposent une formule permettant de calculer l'erreur entre la solution exacte sur la pression en entrée dans un dièdre en résolvant les équation de Navier-Stokes dans un repère cylindrique et la solution calculée par les approximations d'Hele-Shaw grace à la formule suivante :

$$\frac{\Delta P}{\Delta P_{HS}} = \frac{4 \times tan(\alpha)^3}{3(0.5 \times sin(2\alpha) - \alpha cos(2\alpha))} \tag{2.6}$$

avec α, le demi-angle du dièdre, ΔP, le gradient de pression obtenu en résolvant les équations de stokes et ΔP_{HS}, le gradient de pression obtenu avec les approximations d'Hele-Shaw. Ce calcul conduit donc à une erreur de 41% sur le gradient de pression pour la bague de restriction de 1 mm et 30% pour la bague de 2 mm Ces erreurs étant localisées au niveau des bagues de restriction, nous ferons l'approximation de les négliger. De manière générale, on ne considère que deux composantes locales de la vitesse, en néligeant la composante verticale v_y :

$$\vec{v} = v_x(y)\vec{e_x} + v_z(y)\vec{e_z} \tag{2.7}$$

Les équations de Stokes (2.5) deviennent

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -\dfrac{\partial P}{\partial x} + \eta \left(\dfrac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) & = & 0 \\ -\dfrac{\partial P}{\partial z} + \eta \left(\dfrac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} \right) & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.8}$$

A partir des équations 2.8, il est possible de calculer le champ de vitesses dans le domaine. Dans notre cas, nous avons fait l'approximation du fourreau tournant et de la vis fixe. Les conditions aux limites sur la vitesse sont donc $\vec{v}(y = 0) = 0$ sur la vis, et $\vec{v}(y = H) = V_F$ au niveau du fourreau. En considérant que le polymère est newtonien, avec l'additivité des débits, nous obtenons les vitesses suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} v_x & = & \dfrac{1}{2\eta} \dfrac{\partial P}{\partial x} (y^2 - Hy) + \dfrac{V_{Fx} y}{H} \\ v_z & = & \dfrac{1}{2\eta} \dfrac{\partial P}{\partial z} (y^2 - Hy) + \dfrac{V_{Fz} y}{H} \end{array} \right. \tag{2.9}$$

ce qui nous permet d'obtenir, en intégrant les vitesses sur la hauteur, les débits par unité de largeur :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} q_x & = & -\dfrac{1}{12\eta} \dfrac{\partial P}{\partial x} H^3 + \dfrac{V_{Fx} H}{2} \\ q_z & = & -\dfrac{1}{12\eta} \dfrac{\partial P}{\partial z} H^3 + \dfrac{V_{Fz} H}{2} \end{array} \right. \tag{2.10}$$

Nous obtenons ainsi le vecteur débit :

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} q_x \\ q_z \end{pmatrix} \tag{2.11}$$

dont on prend la divergence pour obtenir l'équation de continuité :

$$\nabla.(\vec{Q}) = \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0 \tag{2.12}$$

On obtient l'équation de Hele-Shaw, avec un terme d'écoulement induit par la vitesse de rotation :

$$\frac{\partial \left(\dfrac{1}{12\eta} \dfrac{\partial P}{\partial x} H^3 \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\dfrac{1}{12\eta} \dfrac{\partial P}{\partial z} H^3 \right)}{\partial z} - \frac{\partial \left(\dfrac{V_{Fx} H}{2} \right)}{\partial x} - \frac{\partial \left(\dfrac{V_{Fz} H}{2} \right)}{\partial z} = 0 \tag{2.13}$$

Du fait de la géométrie choisie, la hauteur du chenal est forcément constante selon l'axe z, le terme $\dfrac{\partial \left(\dfrac{V_{Fz} H}{2} \right)}{\partial z}$ est donc toujours nul. L'équation que nous résoudrons pour obtenir l'écoulement dans le domaine est donc :

$$\frac{\partial \left(\dfrac{1}{12\eta} \dfrac{\partial P}{\partial x} H^3 \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\dfrac{1}{12\eta} \dfrac{\partial P}{\partial z} H^3 \right)}{\partial z} - \frac{\partial \left(\dfrac{V_{Fx} H}{2} \right)}{\partial x} = 0 \tag{2.14}$$

La résolution de cette équation nous permet de connaitre la pression dans tout le domaine. A partir de ce champ de pression, on peut calculer le gradient de pression et, avec celui-ci,

nous recalculerons les autres variables, telles que la vitesse moyenne dans la hauteur :

$$\begin{cases} \bar{v}_x &= -\dfrac{1}{12\eta}\dfrac{\partial P}{\partial x}H^2 + \dfrac{V_{Fx}}{2} \\ \bar{v}_z &= -\dfrac{1}{12\eta}\dfrac{\partial P}{\partial z}H^2 + \dfrac{V_{Fz}}{2} \end{cases} \tag{2.15}$$

et les vitesses de cisaillement. Les équations permettant de connaître les vitesses de cisaillement se déterminent à partir des équations (2.9) :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_{xy} &= \dfrac{\partial v_x}{\partial y} &= \dfrac{1}{\eta}\dfrac{\partial P}{\partial x}(y - \dfrac{H}{2}) + \dfrac{V_{Fx}}{H} \\ \dot{\gamma}_{zy} &= \dfrac{\partial v_z}{\partial y} &= \dfrac{1}{\eta}\dfrac{\partial P}{\partial z}(y - \dfrac{H}{2}) + \dfrac{V_{Fz}}{H} \end{cases} \tag{2.16}$$

Ces équations nous permettent de connaitre les vitesses de cisaillement dans les deux directions de l'écoulement. Du fait des approximations du modèle, les vitesses de cisaillement dans les autres directions sont négligées. Afin de définir la vitesse de cisaillement moyenne, nous calculons la vitesse de cisaillement généralisée à partir du tenseur des vitesses de déformations :

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}_{xy} & 0 \\ \dot{\gamma}_{xy} & 0 & \dot{\gamma}_{zy} \\ 0 & \dot{\gamma}_{zy} & 0 \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

La vitesse de cisaillement généralisée s'écrit donc :

$$\bar{\dot{\gamma}}(y) = \sqrt{2\epsilon : \epsilon} = \sqrt{2\left[2(\frac{1}{4}\dot{\gamma}^2_{xy}) + 2(\frac{1}{4}\dot{\gamma}^2_{zy})\right]} = \sqrt{\dot{\gamma}^2_{xy}(y) + \dot{\gamma}^2_{zy}(y)} \tag{2.18}$$

Pour obtenir la vitesse de cisaillement moyenne dans la hauteur du chenal, nous calculons l'intégrale sur la hauteur du taux de cisaillement généralisé :

$$\bar{\dot{\gamma}} = \sqrt{\frac{1}{H}\int_0^H \bar{\dot{\gamma}}^2(y)dy} \tag{2.19}$$

Un des phénomènes négligés dans le modèle est également la recirculation du polymère en travers du chenal. En effet, comme nous l'avons vu précédemment, les filets des éléments de vis forment un angle par rapport à la vitesse de rotation de la vis (Figure 2.4). Une composante de la vitesse induit donc une vitesse sur la partie supérieure du chenal qui tend à pousser le polymère sur la partie arrière du filet de la vis.
Ceci induit une vitesse de recirculation car la vitesse normale aux parois des filets est nulle. Dans la partie supérieure du chenal, le polymère se déplace du filet avant vers le filet arrière et, dans la partie inférieure du chenal, dans le sens opposé (Figure 2.5).
Dans le cas du modèle développé, la vitesse v_y est négligée, il ne peut donc pas y avoir de recirculation ce qui conduit donc à la négliger.

Le modèle présenté induit également que le polymère à un contact non-collant au niveau des parois latérales, ce qui implique une vitesse non nulle au niveau des filets de vis. En effet, lorsque le polymère s'écoule dans un chenal, il colle aux deux parois du chenal et le débit induit par la rotation de la vis ou la contre-pression est ainsi réduit. L'impact

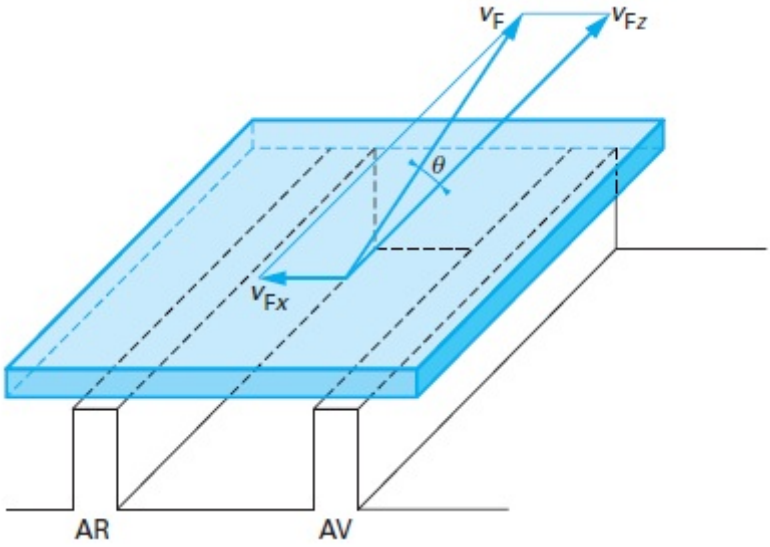


FIGURE 2.4 – Vitesse du fourreau dans le repère de la vis (Vergnes et Puissant, 2002)

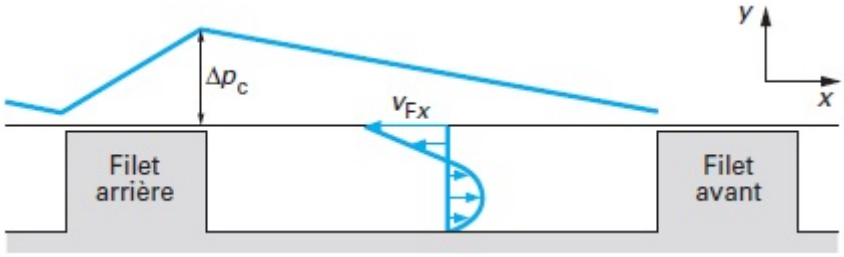


FIGURE 2.5 – Vitesse de recirculation dans un chenal (Vergnes et Puissant, 2002)

des parois sur les débits induits par la vitesse de rotation de la vis ou la contre-pression peut être estimé par les facteurs de corrections (Figure 1.19). Pour les deux éléments de co-malaxeur les plus utilisés et présentés au chapitre précédent (§1.2.1), le calcul des facteurs de corrections est présenté Tableau 2.1. Ce calcul a été effectué pour les éléments du BUSS MK30 mais les autres co-malaxeurs ont des éléments avec des rapports de forme similaires.

Tableau 2.1 – Facteurs de corrections calculés pour un élément de transport (EZ) et de mélange (KN)

Facteur de forme	Élément de transport (EZ)	Élément de mélange (KN)
F_d	0.8226	0.5972
F_p	0.7941	0.5330

Suite aux calculs de ces facteurs, on note l'impact non négligeable des filets sur le débit total, notamment dans les éléments de mélange.

Toutefois, dans le cas du modèle présenté, la prise en compte de ces facteurs de corrections n'est pas triviale. Ils ne seront donc pas intégrés.

Le modèle actuel est newtonien. Néanmoins, la vitesse de cisaillement est amenée à varier selon le type d'élément et les oscillations. La viscosité variera également avec l'évolution de la température le long de la vis. Afin de modéliser le comportement réel

du polymère, il est important de prendre en compte la variation de viscosité. Pour cela, nous allons calculer des viscosités locales dans le plan (x,z). Localement, la viscosité du polymère sera considérée comme constante, mais calculée à partir du taux de cisaillement local moyen et de la température locale moyenne. Pour une température locale moyennée et une vitesse de cisaillement locale moyennée, nous allons déterminer la viscosité locale correspondante :

$$\eta_{locale} = \eta(\bar{\dot{\gamma}}, \bar{T}) \tag{2.20}$$

Le modèle développé considère également le polymère comme visqueux mais la vis du co-malaxeur oscille avec une vitesse non négligeable. En effet, elle effectue une oscillation complète à chaque rotation. Dans le cas du co-malaxeur MK30, pour une vitesse de rotation de $250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, soit la moitié de la vitesse maximale, la vitesse axiale varie sinusoïdalement de $-88{,}2\times10^{-3}\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$ à $88{,}2\times10^{-3}\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$ en une demi-période, soit $0{,}12\,\mathrm{s}$ (Figure 2.6)

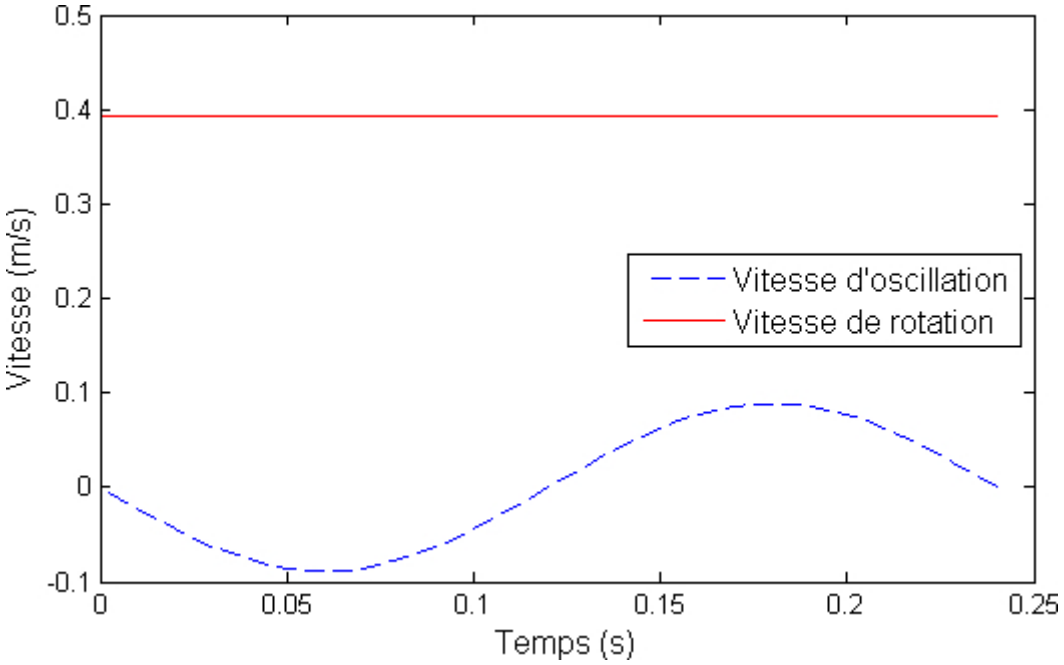


FIGURE 2.6 – Evolution de la vitesse axiale au cours d'une oscillation pour $N = 250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

La période d'oscillation de la vis peut donc être inférieure au temps de relaxation du polymère. Néanmoins, lorsqu'un polymère est fortement cisaillé, le temps de relaxation diminue du même ordre de grandeur que la viscosité. Pour une vitesse de rotation de $250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, la vitesse de cisaillement induite par la rotation de la vis est $78{,}5\,\mathrm{s}^{-1}$, ce qui, pour notre polymère de référence, conduit à abaisser la viscosité d'un facteur 20 par rapport à la viscosité au plateau. Son temps de relaxation sera donc également divisé par 20. Dans le cas du polymère de référence, le temps de relaxation, λ, est de l'ordre de $0{,}05\,\mathrm{s}$. En considérant que le temps de l'écoulement, t, est la demi-période d'une oscillation, soit $0{,}12\,\mathrm{s}$, un calcul du nombre de Deborah nous donne

$$De = \frac{\lambda}{t} = \frac{0,05}{0,12} = 0,42 \tag{2.21}$$

Ce nombre montre que les forces élastiques, bien que plus faible, ne sont pas négligeables devant les forces visqueuses. Bien que la viscoélasticité ne soit pas complètement négligeable dans notre modèle, nous ferons le choix de la négliger car la prendre en compte complexifierait beaucoup le modèle mécanique. De plus, comme nous l'avons vu dans le chapitre bibliographique, prendre en compte la viscoélasticité ne modifie pas beaucoup les résultats moyennés sur une rotation.

2.3 Implémentation

Afin de résoudre dans le domaine du co-malaxeur BUSS le modèle ci-dessus, il faut l'implémenter dans une méthode de résolution numérique. Cette implémentation a été réalisée sur le logiciel Matlab®. Les méthodes numériques les plus utilisées pour ce type d'implémentation sont les différences finies, les volumes finis et les éléments finis. La géométrie du co-malaxeur étant composée de différents éléments avec des angles de filets différents, la géométrie du domaine n'est pas régulière et les différences finies ne sont pas adaptées. Le co-malaxeur ayant également beaucoup d'interruptions de filets, des recirculations de polymère entre les différents chenaux et une vis qui oscille, il n'était pas aisé de déterminer les flux de polymère. Ceci aurait compliqué la mise en place de la méthode des volumes finis. Nous nous sommes donc orientés vers la méthode des éléments finis.

Comme pour le modèle présenté ci-dessus, nous commencerons par implémenter le calcul sans toutes les spécificités du co-malaxeur puis, par la suite, nous ajouterons les oscillations de la vis et les doigts de malaxage.

La méthode choisie pour l'implémentation numérique du problème est donc la méthode des éléments finis. Pour plus de détails, nous renvoyons à la lecture de l'ouvrage de Ern et Guermond (2002). Lors de cette implémentation, nous nous appuyons sur la géométrie déroulée présentée précédemment (§2.1). Cette géométrie est maillée avec des éléments triangulaires (Figure 2.7). Le maillage est réalisé avec le mailleur Gmsh (Geuzaine et Remacle, 2009).
Sur l'ensemble de ce domaine, nous allons résoudre les équations décrivant l'écoulement.

2.3.1 Formulation faible

L'équation à résoudre afin d'obtenir la pression en tout point du domaine est l'équation (2.14) présentée au paragraphe précédent et ici réécrite de manière plus compacte :

$$\nabla.\left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P\right) - \nabla.\left(\frac{V_F H}{2}\right) = 0 \tag{2.22}$$

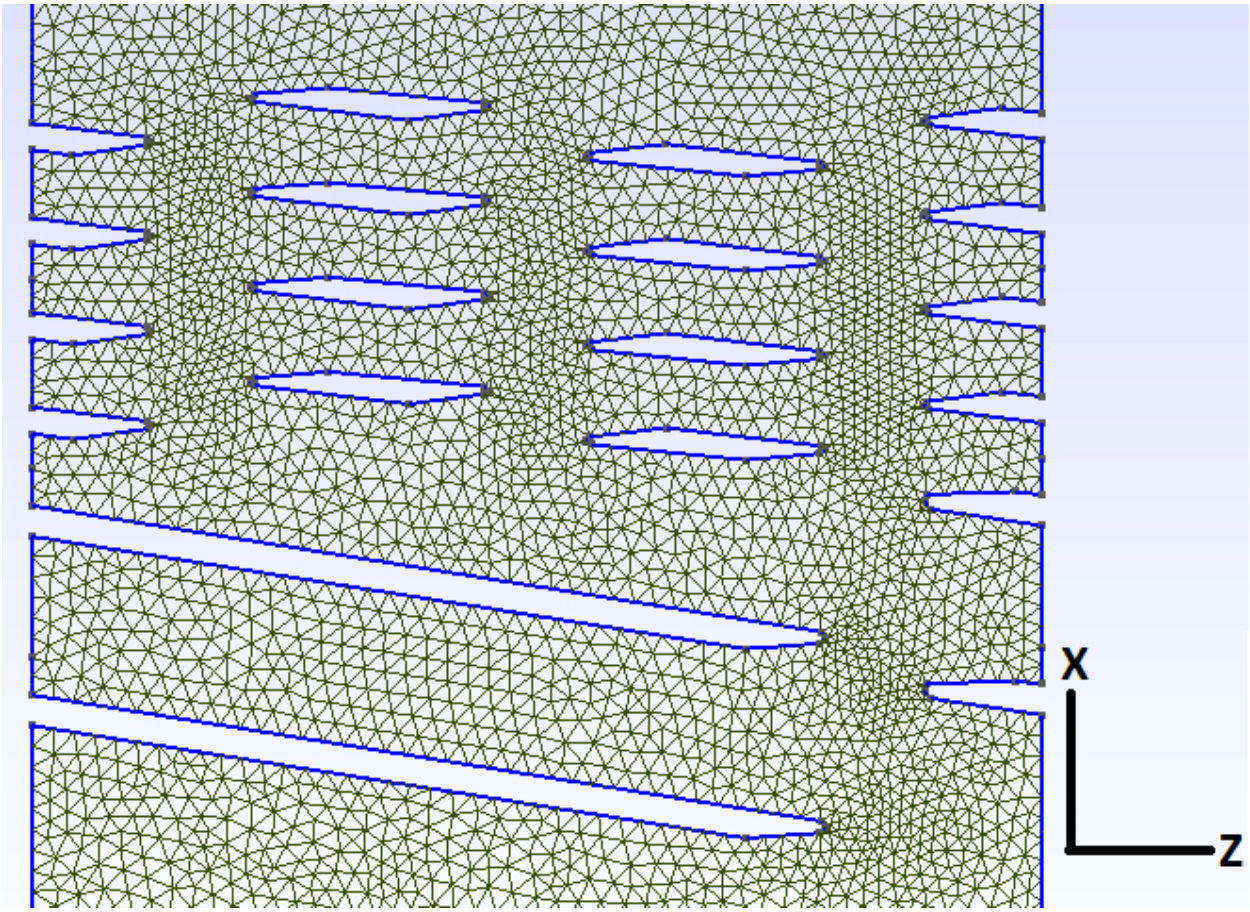


FIGURE 2.7 – Exemple de maillage avec des mailles de 2 mm en moyenne pour deux éléments de transport et deux éléments de mélange

Afin de résoudre cette équation dans le domaine éléments finis, elle doit être écrite sous sa formulation faible, le problème initial étant le suivant :

$$\begin{cases} \nabla.\left(\dfrac{H^3}{12\eta}\nabla P\right) + \nabla.\left(\dfrac{V_F H}{2}\right) = 0 & \text{dans } \Omega \\ P = P_{impose} & \text{sur } \partial\Omega = \partial\Omega_s \\ \nabla P \text{ calculé à partir de } V_F & \text{sur } \partial\Omega = \partial\Omega_f \\ \nabla P \text{ calculé à partir de } Q & \text{sur } \partial\Omega = \partial\Omega_e \end{cases} \tag{2.23}$$

avec Ω_s, le(s) bord(s) où l'on impose la pression, généralement en sortie, Ω_e, le bord où l'on impose le débit, généralement en entrée et Ω_f, les bords sur les filets de vis où l'on impose la non-pénétration du polymère. Sa formulation faible est obtenue en multipliant l'équation par la fonction test P^* :

$$\int_\Omega \left[\nabla.\left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P\right) + \nabla.\left(\frac{V_F H}{2}\right)\right] P^* \, d\Omega = 0 \tag{2.24}$$

Grâce au théorème de Green-Ostrogradski, nous avons l'égalité suivante :

$$\int_\Omega \nabla.\left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P\right) P^* \, d\Omega = -\int_\Omega \left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P\right) \nabla P^* \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P.\vec{n}\right) P^* \, d\partial\Omega \tag{2.25}$$

ce qui conduit à la formulation faible suivante :

$$\int_\Omega \left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P\right) \nabla P^* \, d\Omega - \int_{\partial\Omega} \left(\frac{H^3}{12\eta}\nabla P.\vec{n}\right) P^* \, d\partial\Omega = \int_\Omega \nabla.\left(\frac{V_F H}{2}\right) P^* \, d\Omega \tag{2.26}$$

Cette formulation est discrétisée par éléments finis linéaires.

2.3.2 Conditions aux limites

Notre système est résolu en pression dans tout le domaine. Dans le cas du co-malaxeur, les paramètres contrôlés expérimentalement sont le débit et la vitesse de rotation. Comme conditions aux limites, nous pouvons donc imposer une pression, par exemple la pression atmosphérique après la filière, et imposer un débit, ce qui revient à imposer un gradient de pression en entrée (2.10) dans le cas d'une oscillation nulle et sans doigts de malaxage. Le cas général sera discuté en §2.5.

2.3.2.1 Condition de Dirichlet

La condition de Dirichlet est utilisée pour imposer la pression aux endroits où elle est connue. Généralement cette condition est utilisée pour imposer la pression en sortie du domaine.

2.3.2.2 Condition de Neumann

2.3.2.2.1 Imposer un débit

La condition de Neumann est utilisée pour imposer le vecteur débit du polymère sur la maille au bord car, comme nous l'avons vu précédemment (2.10), imposer le débit revient à imposer le gradient de pression correspondant. Pour notre domaine, l'entrée du polymère se fait par la ligne basse de notre système, selon la direction $\vec{e_x}$. Pour le vecteur débit Q_i que nous souhaitons imposer, il faut calculer le gradient de pression correspondant :

$$Q_i = -\frac{1}{12\eta}\frac{\partial P}{\partial x}H^3W + \frac{V_{Fx}H}{2}W \tag{2.27}$$

avec W, la largeur. Ici, le débit étant imposé en entrée, il s'agit de la largeur du domaine au niveau de l'entrée. Pour le moment, n'ayant pas encore pris en compte les oscillations du co-malaxeur, le débit est constant et la vitesse axiale, V_{FX}, est nulle. L'équation (2.27) se simplifie donc. Nous obtenons ainsi le gradient de pression :

$$\frac{\partial P}{\partial x} = -Q_i\frac{12\ \eta}{H^3\ W} \tag{2.28}$$

2.3.2.2.2 Imposer la non-pénétration du polymère

La résolution de notre problème amène à un gradient de pression nul au niveau des parois et donc, pour un écoulement induit par des différences de pression, à une condition de non-pénétration du polymère à la paroi. Or, le débit (2.10) et (2.11) dispose également d'une composante induite par la vitesse du fourreau, il faut donc l'annuler. Ceci s'obtient en imposant le gradient de pression suivant au niveau des parois des filets :

$$\vec{\nabla P}.\vec{n} = -\vec{V_F}.\vec{n}\frac{6\eta}{H^2} \tag{2.29}$$

2.3.2.3 Conditions de périodicité

Comme nous pouvons le voir sur la Figure 2.7, dans la géométrie déroulée, le domaine est "ouvert" sur son côté droit et sur son côté gauche. A la construction, le maillage est conforme sur la périodicité droite-gauche, c'est à dire que les nœuds sur le bord gauche ont exactement la même ordonnée x que les nœuds sur le bord droit du maillage car, lorsque la géométrie est enroulée, ces nœuds sont identiques ; ils doivent donc avoir les mêmes valeurs (Figure 2.8).

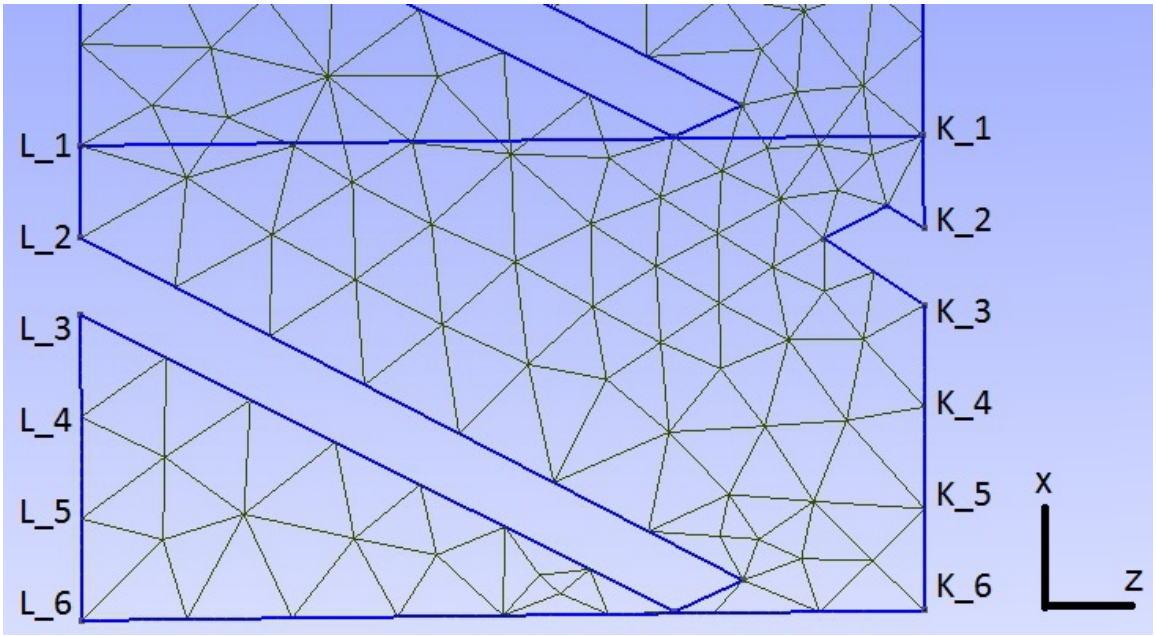


FIGURE 2.8 – Schéma d'un maillage conforme de co-malaxeur (pas à l'échelle)

Pour ce faire, après avoir réalisé l'assemblage de la matrice globale, M_{glob}, pour ces nœuds identiques, nous regroupons les contributions locales aux nœuds correspondants et nous imposons par la suite l'égalité entre les deux nœuds. Les contributions locales du nœud L_i sont ajoutées à celles du nœud K_i, ajoutant au niveau de la matrice et du vecteur global la ligne du nœud L_i au nœud K_i.

$$\begin{array}{lcll} M_{glob}(K_i, j) & = & M_{glob}(K_i, j) + M_{glob}(L_i, j) & \forall j \\ V_{glob}(K_i) & = & V_{glob}(K_i) + V_{glob}(L_i) & \end{array} \tag{2.30}$$

La matrice M_{glob} et le vecteur V_{glob} sont mis à zéro sur la ligne correspondant au nœud L_i. L'égalité entre ces deux nœuds est ensuite imposée par une condition de Dirichlet.

$$\begin{array}{lcl} M_{glob}(L_i, K_i) & = & 1 \\ M_{glob}(L_i, L_i) & = & -1 \\ V_{glob}(L_i) & = & 0 \end{array} \tag{2.31}$$

Ceci permet d'imposer de manière numérique la continuité de la solution en pression aux bords droit et gauche du domaine.

2.3.3 Organigramme du code

Dans le cas d'un problème de Stokes, le système résolu est linéaire et donc la solution approchée du problème est obtenue en résolvant directement le système. Dans le cas d'un polymère non-newtonien, le système devient non-linéaire, ce qui implique de faire plusieurs itérations afin de converger sur la viscosité. Comme indiqué sur la Figure 2.9, nous initialisons alors la viscosité du polymère. La majorité des écoulements dans le co-malaxeur étant essentiellement due à la rotation de la vis, le taux de cisaillement choisi pour initialiser la viscosité est le taux de cisaillement induit par la vitesse relative du fourreau par rapport à la vis soit :

$$\dot{\gamma} = \frac{V_F}{H} \tag{2.32}$$

Puis, le calcul mécanique est réalisé avec la viscosité estimée lors de l'initialisation. A la suite de ce calcul mécanique, à partir de la pression aux nœuds (P1) nous calculons les gradients de pression dans les éléments (P0). Grâce à ce gradient de pression, nous recalculons les taux de cisaillement, les viscosités ainsi que les vitesses moyennes. Nous effectuons de nouveau toutes ces étapes de calcul tant que la viscosité de l'incrément $n-1$ n'est pas suffisamment proche de la viscosité de l'incrément n. Le critère de convergence est fixé à une variation de viscosité moyenne inférieure à $0{,}3\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$, ce qui représente environ un millième de la viscosité du polymère lorsqu'il est soumis à un cisaillement de $100\,\mathrm{s}^{-1}$, soit le cisaillement moyen obtenu pour la vitesse de rotation maximale, $500\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$. Une fois cette convergence sur la viscosité atteinte, le calcul est terminé. Nous verrons plus loin comment sont gérés les oscillations ainsi que les doigts de malaxage.

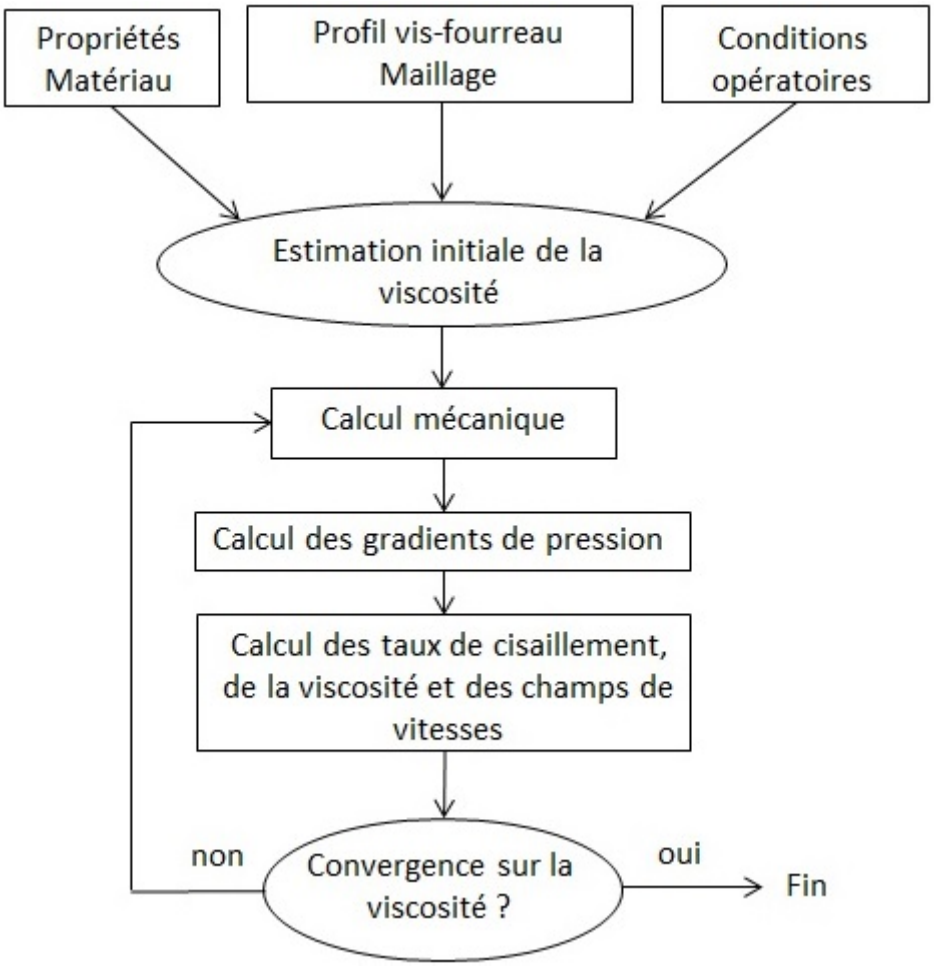


FIGURE 2.9 – Organigramme du code développé pour un calcul stationnaire non newtonien

2.4 Validation du modèle

Afin de valider le modèle développé précédemment, nous résoudrons plusieurs écoulements dans des cas pour lesquels une solution analytique au problème approximé existe. Parmi ces cas tests nous avons :

— Écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles
— Écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles avec une variation de hauteur
— Écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles avec un chenal découpé en 5

Les simulations ont été réalisées pour des tailles de maille de 1 mm.

2.4.1 Écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles

Pour ce cas test, nous imposons un débit en entrée et nous comparons le champ de pression obtenu avec la solution analytique. Dans le cas testé, le débit imposé en entrée est de $30\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ soit , pour une densité de $900\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$, un débit volumique de $9259\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$, la viscosité du polymère est de $1000\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$, la largeur du chenal de 80 mm, la hauteur de 5 mm et la longueur de 750 mm. Nous imposons une pression nulle en sortie et observons la pression en entrée correspondante. En résolvant analytiquement, nous obtenons une pression solution en entrée de 8,333 MPa et le résultat numérique est de 8,334 MPa. Notre modèle et son implémentation numérique sont validés pour ce cas précis.

2.4.2 Ecoulement avec hauteur variant dans le chenal

Afin de vérifier que notre code 2D prend correctement en compte la variation de hauteur, nous considérons un chenal rectiligne de largeur 94,25 mm, de longueur 36 mm et avec une variation de hauteur typique d'une bague de restriction (Figure 2.10).
Nous imposons une pression nulle en sortie et le débit en entrée. Le débit et la viscosité sont les mêmes que dans les simulations précédentes. Sur la Figure 2.11, nous pouvons voir que le profil de pression du modèle 2D et le profil théorique se superposent tout au long du chenal. La valeur en entrée pour le calcul théorique est de 0,836 MPa et la valeur obtenue avec la simulation est de 0,830 MPa. La variation de hauteur est donc correctement gérée.

2.4.3 Ecoulement de Poiseuille avec continuité droite-gauche

Afin de tester maintenant que les conditions de continuité entre la droite et la gauche du chenal sont correctes, nous allons réaliser un test de validation dans ce cas. Pour ce faire, nous reproduirons de nouveau un écoulement de Poiseuille entre plaques parallèles, mais cette fois-ci avec un chenal rectiligne coupé en plusieurs chenaux, avec une continuité entre la gauche et la droite du maillage semblable aux maillages des co-malaxeurs. La géométrie obtenue est celle présentée en résultat sur la Figure 2.12.

Cette géométrie, découpée en cinq, équivaut à un chenal de longueur de 479,76 mm, de largeur de chenal de 14,82 mm et de hauteur de chenal de 5 mm. Pour un débit imposé

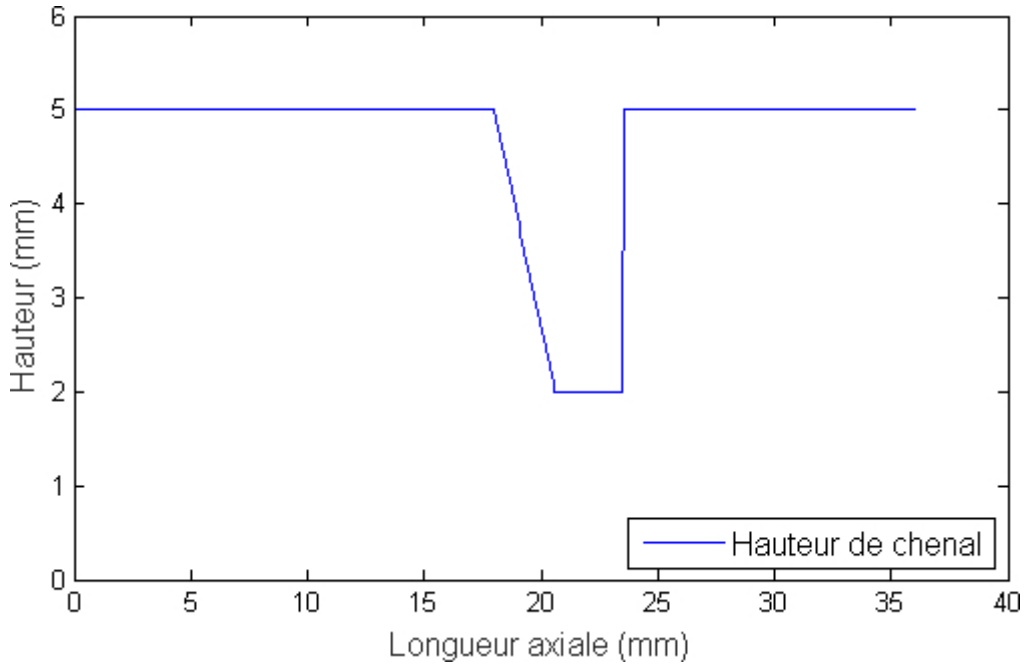


FIGURE 2.10 – Hauteur dans le chenal composé uniquement d'une bague de restriction

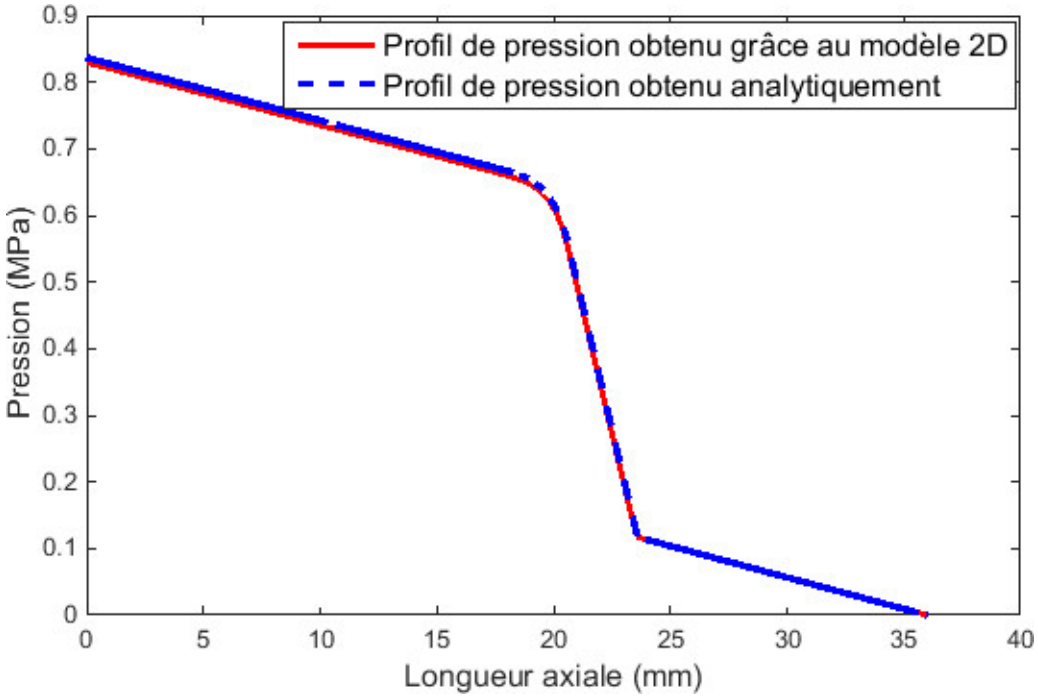


FIGURE 2.11 – Comparaison entre le profil de pression obtenu analytiquement et avec la simulation 2D

en entrée de $9259\,\mathrm{mm}^3 \cdot \mathrm{s}^{-1}$ et une pression imposée nulle en sortie, nous obtenons, analytiquement une pression solution en entrée de 28,77 MPa et numériquement de 28,78 MPa. Les pressions sur les parties droites du chenal sont identiques à celles sur la partie gauche. Le découpage du chenal avec une continuité droite-gauche du chenal est donc validé.

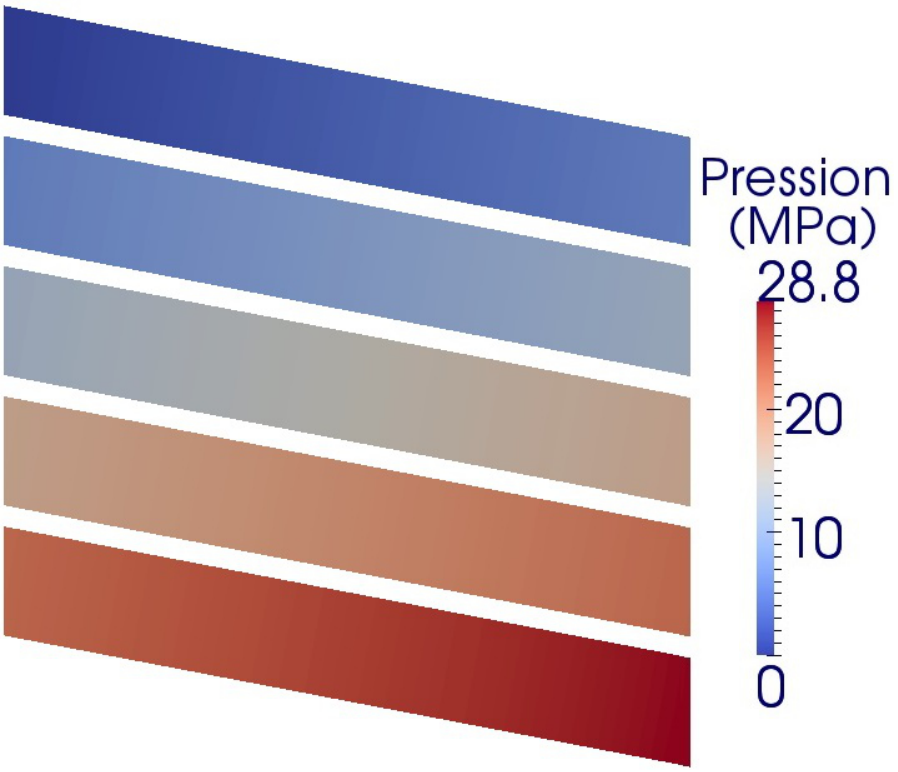


FIGURE 2.12 – Carte de pression sur un calcul réalisé dans un chenal découpé en 5

2.4.4 Convergence du code

Nous allons étudier cette convergence sur un profil de vis avec des éléments de transports et de mélange (celui présenté en figure 2.7). Nous réaliserons différentes simulations avec différentes tailles de maille et nous calculerons la norme L2 pondérée par la surface sur la solution en pression (P1) ainsi que sur les gradients de pression dans les éléments (P0) ;

$$||X||_{L2h} = \frac{\sum_{i=1}^{nb_elmt} \sqrt{\int_S X_i^2 dS_i}}{\sum_{i=1}^{nb_elmt} \sqrt{\int_S P_i^2 dS_i}} \tag{2.33}$$

avec $X = P_h - P_{sol}$ la différence entre la pression obtenue sur le maillage de taille de maille h et la pression "solution" qui est celle obtenue sur le maillage le plus fin, i, le numéro de l'élément et S_i la surface de cet élément. Tous les champs de pression ont été projetés linéairement sur le maillage le plus fin. Les normes L2h sur la pression ainsi que le gradient de pression sont tracés sur la Figure 2.13. La norme L2h décroit avec une pente -0.99 pour le gradient de pression et avec la pente -1.73 pour la pression. La norme L2h d'un laplacien doit converger avec une pente de -2 et son gradient, avec une pente de -1 (Babuska et Szabo, 1982).
Nous calculons également la norme L∞h pondérée par la surface. Nous obtenons les évolutions tracées sur la Figure 2.14.

$$||X||_{\infty h} = \frac{max(\sqrt{X_i^2 dS_i})}{\sum_{i=1}^{nb_elmt} \sqrt{P_i^2 dS_i}} \tag{2.34}$$

La pente de la norme infini sur le gradient de pression est de 0.5 et celle de la pression,

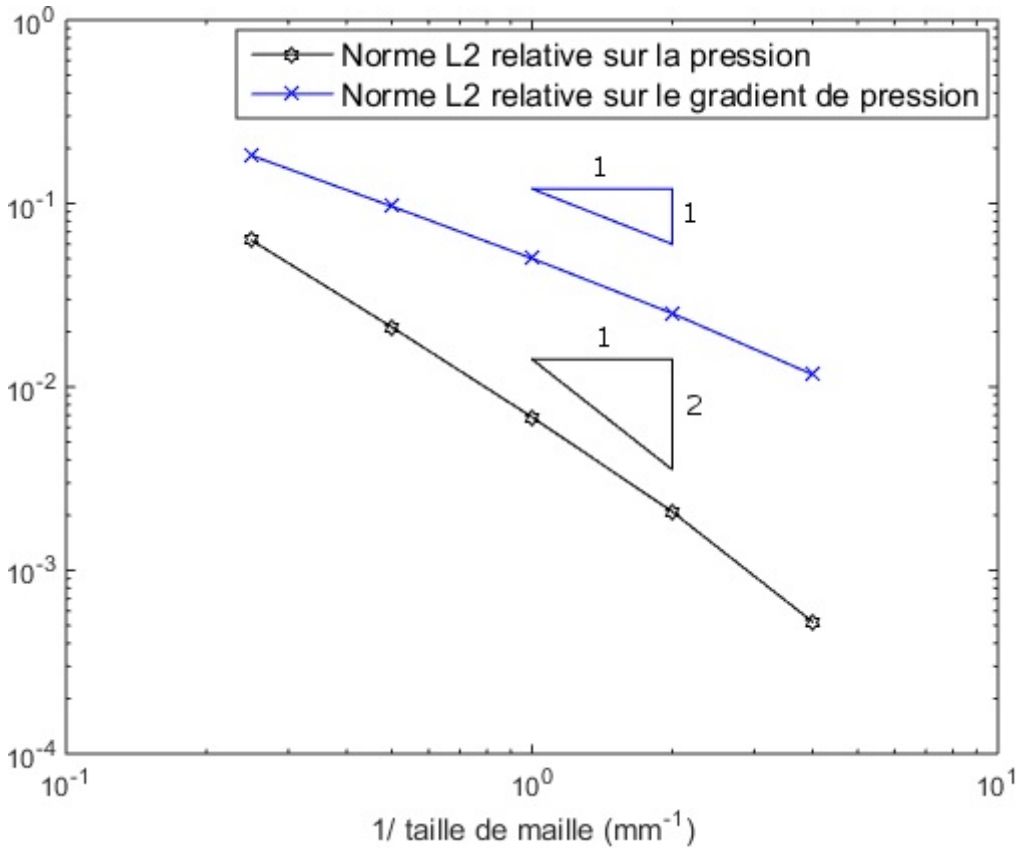


FIGURE 2.13 – Norme L2 calculée pour vérifier la convergence du code

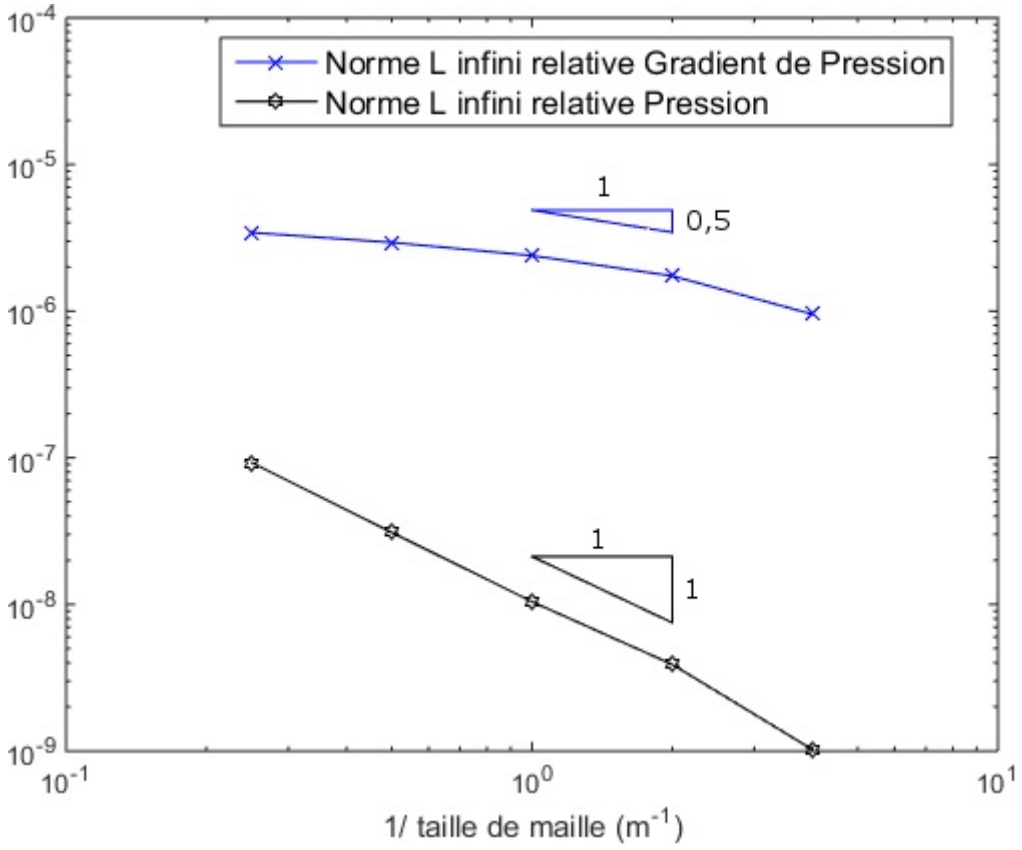


FIGURE 2.14 – Norme L infini calculée pour vérifier la convergence du code

de 1.6. L'erreur maximale sur la norme infini se situe au bord du domaine, ceci est un résultat attendu. Le code converge normalement.

2.4.5 Comparaison 2D-3D au niveau des bagues de restrictions

Comme nous l'avons vu précédemment lors de l'établissement du modèle, les bagues de restriction présentent de fortes variation de hauteur qui sont supérieures aux variations pour lesquelles le modèle d'Hele-Shaw reste applicable. Afin d'évaluer l'erreur induite par le modèle, nous avons réalisé un calcul avec notre modèle 2D et un calcul 3D avec la librairie Cimlib développée au Cemef. Les simulations sont effectuées sur un profil composé uniquement d'une variation de hauteur identique à celle que l'on peut rencontrer au niveau des bagues de restrictions. Le profil considéré est un chenal rectiligne avec une bague de restriction, bague avec une hauteur minimale de 2 mm et des zones tampons pour atténuer les effets d'entrée et de sortie (Figure 2.10). Les simulations ont été réalisées sans mouvement de rotation et pour un débit de $30\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ avec une viscosité newtonienne de $1000\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$. Le profil de pression présenté en Figure 2.15 montre que le modèle 2D sous estime la mise en pression due à la bague de restriction. En effet, la pression, sous la bague de restriction, augmente de 0,59 MPa avec le modèle 2D alors qu'elle augmente de 0,84 MPa avec la simulation 3D.

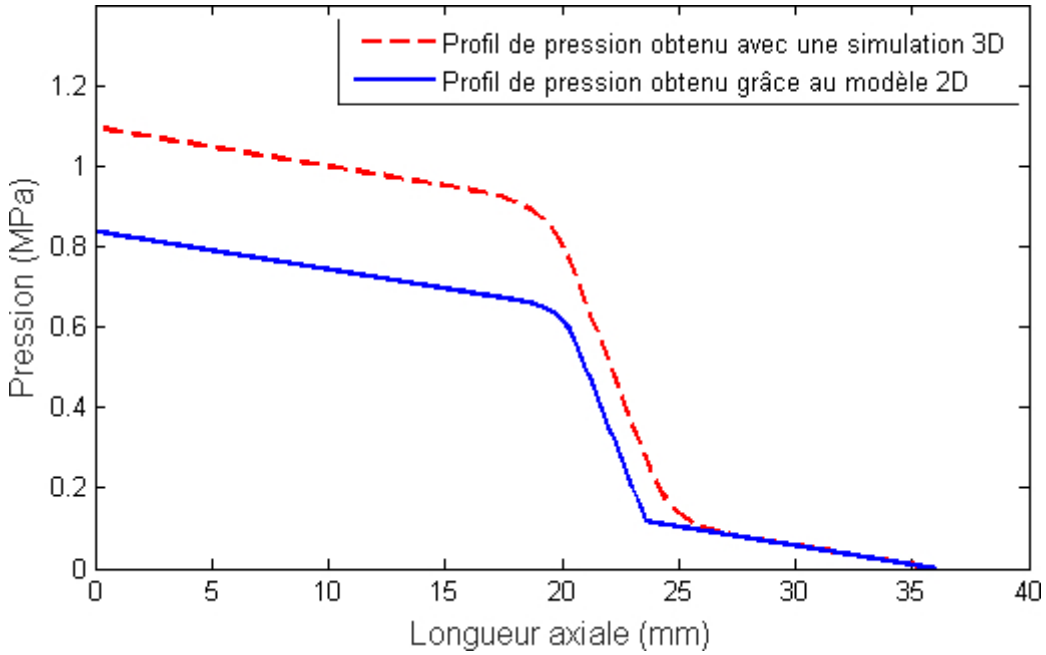


FIGURE 2.15 – Profil de pression obtenus grâce au modèle 2D et à une simulation en 3D

La mise en pression observée grâce au modèle 3D est 48 % supérieure à celle observée sur le calcul 2D réalisé avec les approximations d'Hele-Shaw. Pour rappel, nous avions estimé grâce à l'équation (2.6) à 30 % l'erreur induite par les approximations d'Hele-Shaw dans cette zone, mais en négligeant les effets d'entrée et de sortie. Nous réalisons la même simulation avec le polymère de référence utilisé dans ce projet, un polypropylène ayant un comportement non-newtonien. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 2.16, la mise en pression au niveau de la bague de restriction mesurée sur le modèle 2D est de 0,48 MPa

et sur le modèle 3D de 0,61 MPa, ce qui fait une différence de 21 %. La caractère non-newtonien du polymère atténue donc la différence de mise en pression.

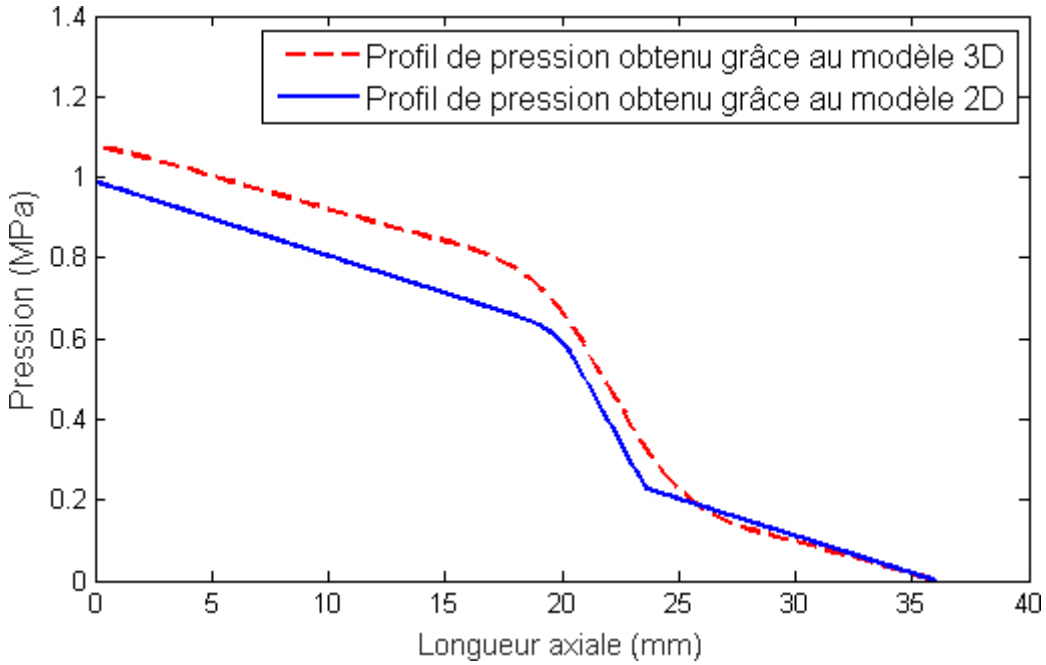


FIGURE 2.16 – Profil de pression obtenus grâce au modèle 2D et à une simulation en 3D avec un comportement non-newtonien

Les bagues de restriction n'étant présente que 1 à 2 fois sur des profils usuels de co-malaxeur, l'erreur induite sur le calcul total est faible et nous la négligerons.

2.5 Prise en compte des oscillations et des doigts de malaxage

Parmi les spécificités des co-malaxeurs, l'on retrouve les oscillations de la vis ainsi que les doigts de malaxage. Nous verrons ici comment sont prises en compte ces spécificités et nous étudierons leur impact sur l'écoulement.

2.5.1 La vitesse d'oscillation

La vitesse du co-malaxeur a été décrite dans le modèle mécanique présenté en début de chapitre (§2.1) ; la vitesse d'oscillation est la composante suivant $\vec{e_x}$ de cette vitesse. Pour chaque incrément de calcul, la vitesse d'oscillation de la vis impacte le débit du co-malaxeur ainsi que le vecteur vitesse du fourreau $\vec{V_F}$, qu'il faut donc recalculer (2.1). Nous verrons donc comment la vitesse d'oscillation est prise en compte, son impact sur le débit, puis, proposerons une gestion du débit instantané au cours de l'oscillation.

2.5.1.1 Prise en compte de la vitesse d'oscillation

La vitesse d'oscillation n'apparait pas directement dans la formulation de notre problème, mais dans la condition de non-pénétration du polymère à la paroi (§2.3.2.2.2). La

vitesse du fourreau est également reprise dans les équations permettant de calculer les taux de cisaillement et les champs de vitesses. L'organigramme de notre code n'en est que légèrement modifié (Figure 2.17)

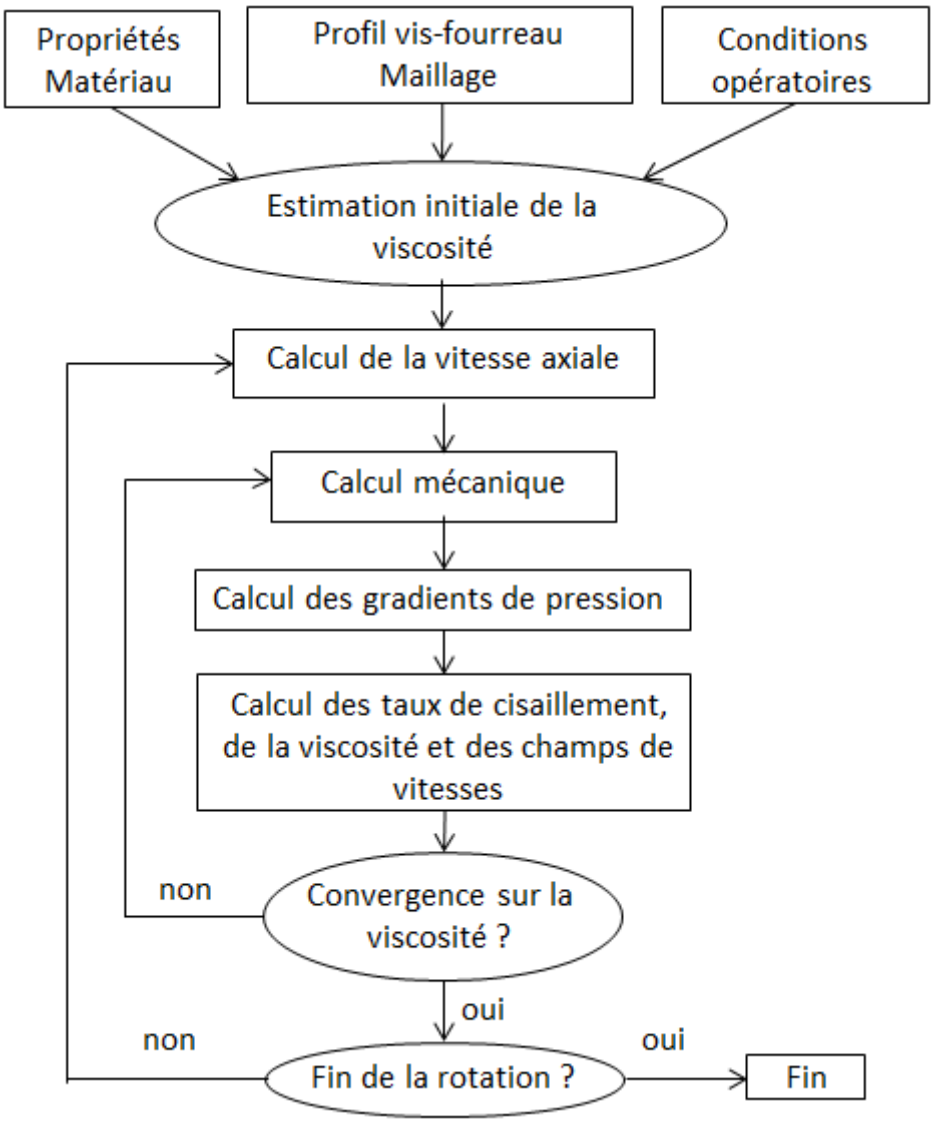


FIGURE 2.17 – Organigramme du code gérant les oscillations de la vis

2.5.1.2 Impact de la vitesse d'oscillation sur le débit

Afin d'évaluer l'impact des oscillations sur l'écoulement dans le co-malaxeur, nous réalisons des simulations sur une portion d'un profil de vis réaliste utilisé en industrie, que nous appellerons par la suite "profil de référence" (Figure 2.18), en imposant une pression nulle en entrée et en sortie. Nous considérerons également cette portion de vis comme entièrement remplie. Ce profil est composé, de l'amont vers l'aval, de trois éléments de transport, de trois éléments et demi de mélange et d'un élément bague de restriction de diamètre 22 mm. Nous considérerons la bague de restriction et le domaine de calcul comme fixe. La hauteur du chenal est de 5 mm dans la majorité du chenal et diminue à 1 mm au niveau de la bague de restriction comme on peut le voir sur la Figure 2.18.

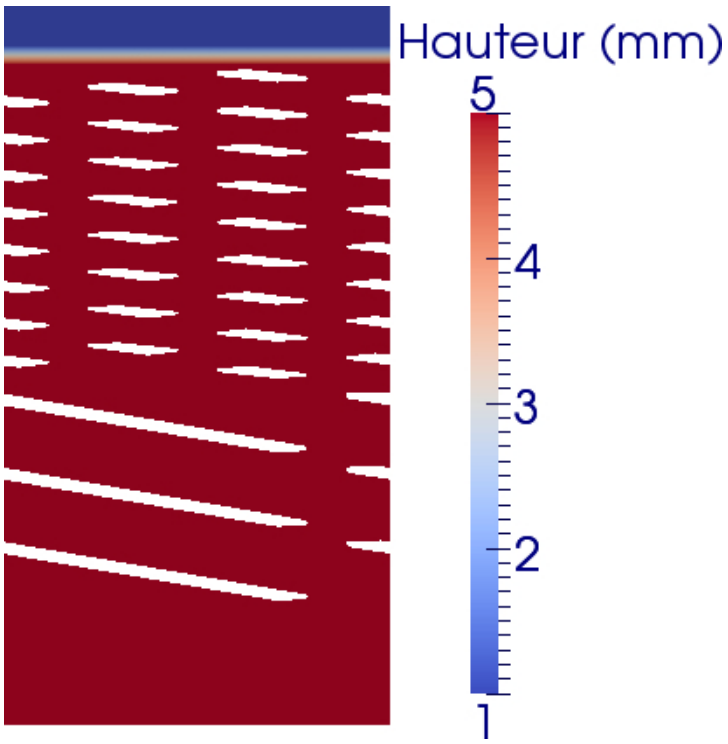


FIGURE 2.18 – Profil de vis réaliste utilisé en industrie comportant une zone de transport suivie d'une zone de mélange avec une bague de restriction

Dans le cas présent, nous fixons la vitesse de rotation à $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, soit une oscillation toutes les 0,2 s, et nous étudions l'évolution du débit total du système en imposant une pression nulle en entrée et en sortie. Comme nous pouvons le voir (Figure 2.19), et comme l'oscillation de la vis le laissait supposer, le débit oscille de manière importante. Le débit moyen est de $4530\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$ et oscille de -2260 à $11\,200\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$

2.5.1.3 Imposer un débit au cours de l'oscillation

Dès lors que le débit oscille au cours d'une oscillation de la vitesse, il va falloir adapter le modèle pour le prendre en compte, car expérimentalement, nous imposons plutôt un débit moyen qui est constant, mais la vis du co-malaxeur oscillant, ce débit n'est pas forcément constant localement. Comme nous l'avons vu ci-dessus (eq. 2.27), le débit dépend du gradient de pression et de la vitesse. Maintenant que le co-malaxeur oscille, la vitesse axiale varie, deux choix relativement évidents s'offrent à nous. Le premier consiste à imposer un débit fixe à chaque incrément de la rotation et le deuxième consiste à calculer un gradient de pression moyen de manière à obtenir un débit moyen égal au débit imposé.

2.5.1.3.1 Imposer un débit fixe

Imposer un débit fixe au cours de la rotation conduit à résoudre, à chaque pas de temps, l'équation suivante afin d'imposer en entrée un débit constant :

$$\frac{\partial P(t)}{\partial x} = \frac{V_{Fx}(t)\ 6\ \eta}{H^2} - Q_i(t)\frac{12\ \eta}{H^3\ W} \tag{2.35}$$

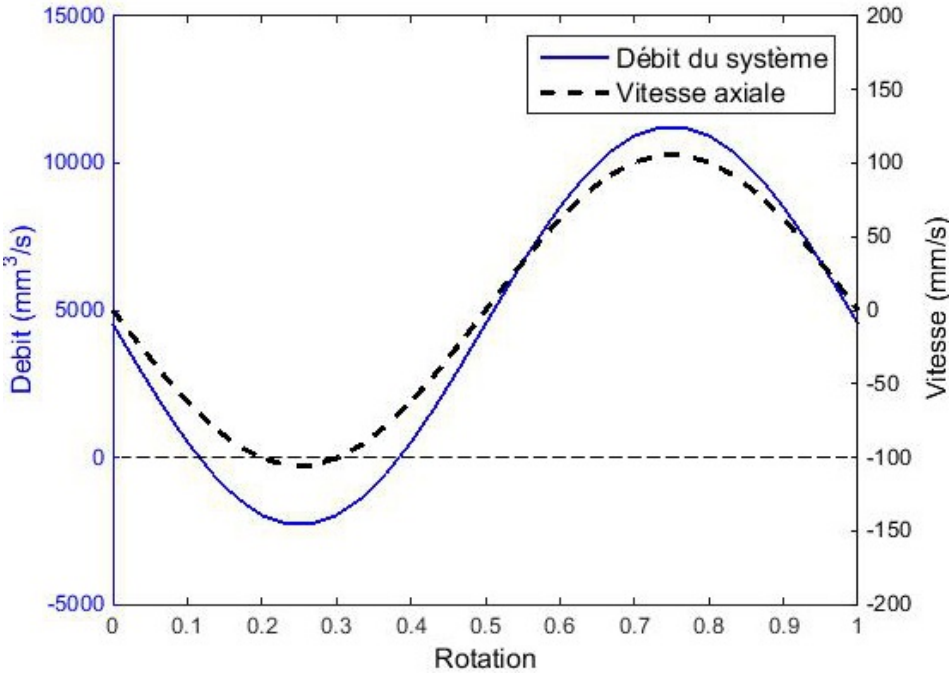


FIGURE 2.19 – Oscillation du débit avec la vitesse d'oscillation pour le profil de référence en fonction de l'avancement de la rotation. 1 correspondant à la fin d'une rotation de vis

avec $Q_i(t)$, la valeur du débit, ici constant, puisque nous souhaitons l'imposer constant.

2.5.1.3.2 Imposer un débit moyen sur une rotation

Imposer un débit moyen mais oscillant consiste à calculer un gradient de pression moyen de manière à obtenir un débit moyen égal au débit imposé. A partir de l'équation 2.27, si l'on effectue la moyenne sur une rotation, la composante de la vitesse axiale, décrite par un sinus, s'annule et nous retrouvons le gradient de pression, constant, calculé à l'équation 2.28 :

$$\frac{\partial P}{\partial x} = -Q_i \frac{12\ \eta}{H^3\ W} \tag{2.36}$$

Le débit obtenu avec cette méthode sera oscillant et suivra l'équation suivante :

$$Q(t) = Q_i + \frac{V_{Fx}(t) H}{2} W \tag{2.37}$$

Ce débit est la somme du débit induit par la pression, débit statique et du débit de convoyage. Ce débit suppose que la zone considérée est entièrement remplie.

2.5.1.3.3 Évaluation de ces deux méthodes

En considérant le profil de référence avec une bague de restriction, fixe par rapport à la vis dans notre modèle alors qu'elle est mobile en réalité, les pressions observées pour un débit imposé fixe entre les 2 extrema de la rotation sont irréalistes (Figure 2.20).
Comme on peut le voir sur la Figure 2.20, imposer un débit fixe constant au cours d'une

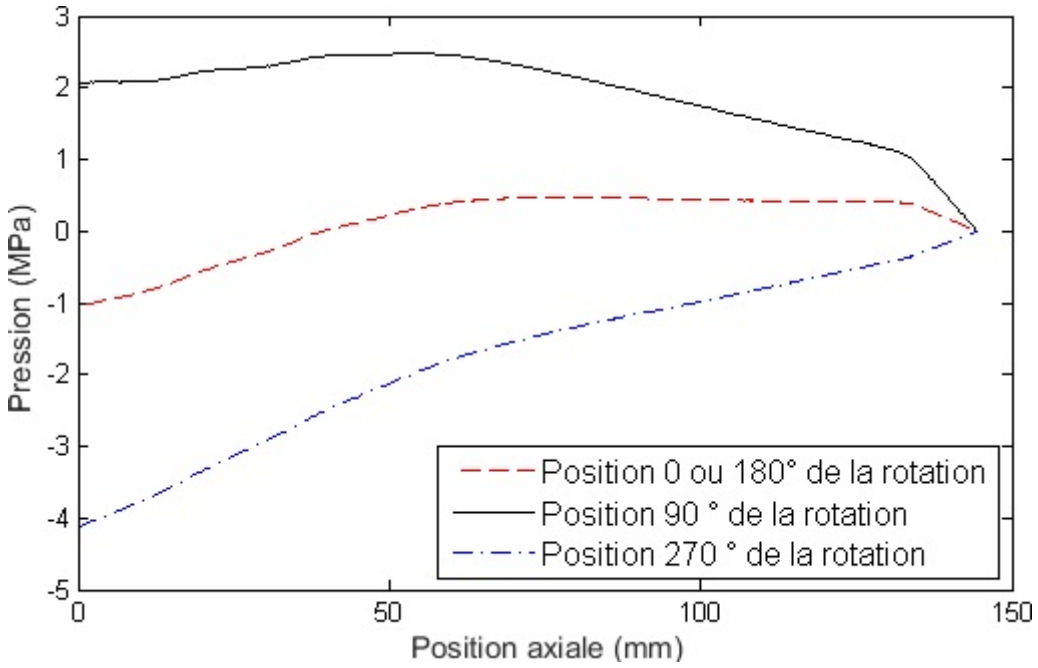


FIGURE 2.20 – Profils de pression obtenus lors d'une oscillation en imposant un débit fixe pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

rotation conduit à de très fortes oscillations de pression de l'ordre de plusieurs MPa et également à passer d'une pression positive dans tout le profil considéré pour une position de 90°, ce qui correspond à une vitesse axiale positive, à une pression entièrement négative en cas de vitesse axiale négative, soit une position de 270° au cours de la rotation. L'on observe également que la bague de restriction ne met pas le polymère en pression dans le cas du recul de la vis. Afin d'étudier si c'est la bague de restriction qui est la cause de ceci, nous l'avons supprimée et avons imposé en sortie une pression de 0,5 MPa, ce qui correspond à la mise en pression de la bague sans oscillation de la vis (Figure 2.21). Les profils de pression restent essentiellement négatifs dans la majorité du co-malaxeur. Afin d'étudier la longueur de remplissage, nous traçons l'isobare P=0, que nous considérons être la limite entre les zones remplies et les zones sous-remplies (Figure 2.22).

Comme nous le voyons sur la Figure 2.22, la longueur remplie du profil varie d'environ 6 éléments au cours d'une demi-oscillation. Une oscillation durant, à $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, 0,2 s, il est irréaliste qu'environ 6 éléments deviennent remplis ou sous-remplis avec de tels écarts de pression en une demi-oscillation.

Les résultats obtenus avec la méthode imposant un débit moyen sur une rotation proposent un débit encore plus éloigné du débit de convoyage du profil de référence (Figure 2.23). Les gradients de pression sont encore plus importants que ceux présentés précédemment. Les résultats étant tout aussi irréalistes et les conclusions étant similaires au cas précédent, nous ne les présenterons pas.

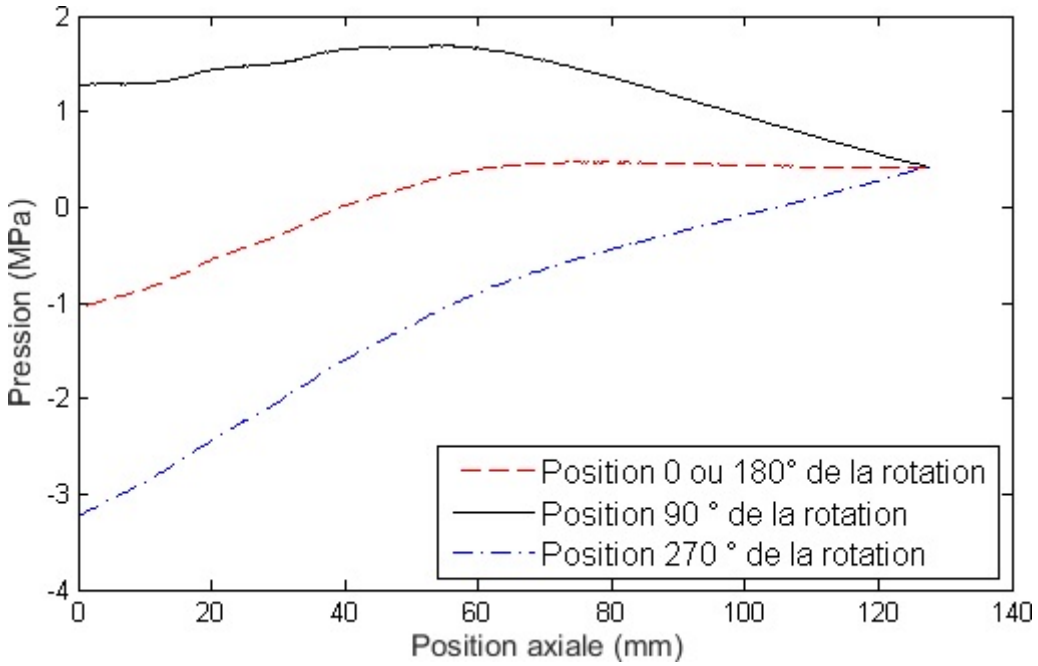


FIGURE 2.21 – Profils de pression obtenus lors d'une oscillation en imposant un débit fixe sans bague de restriction pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

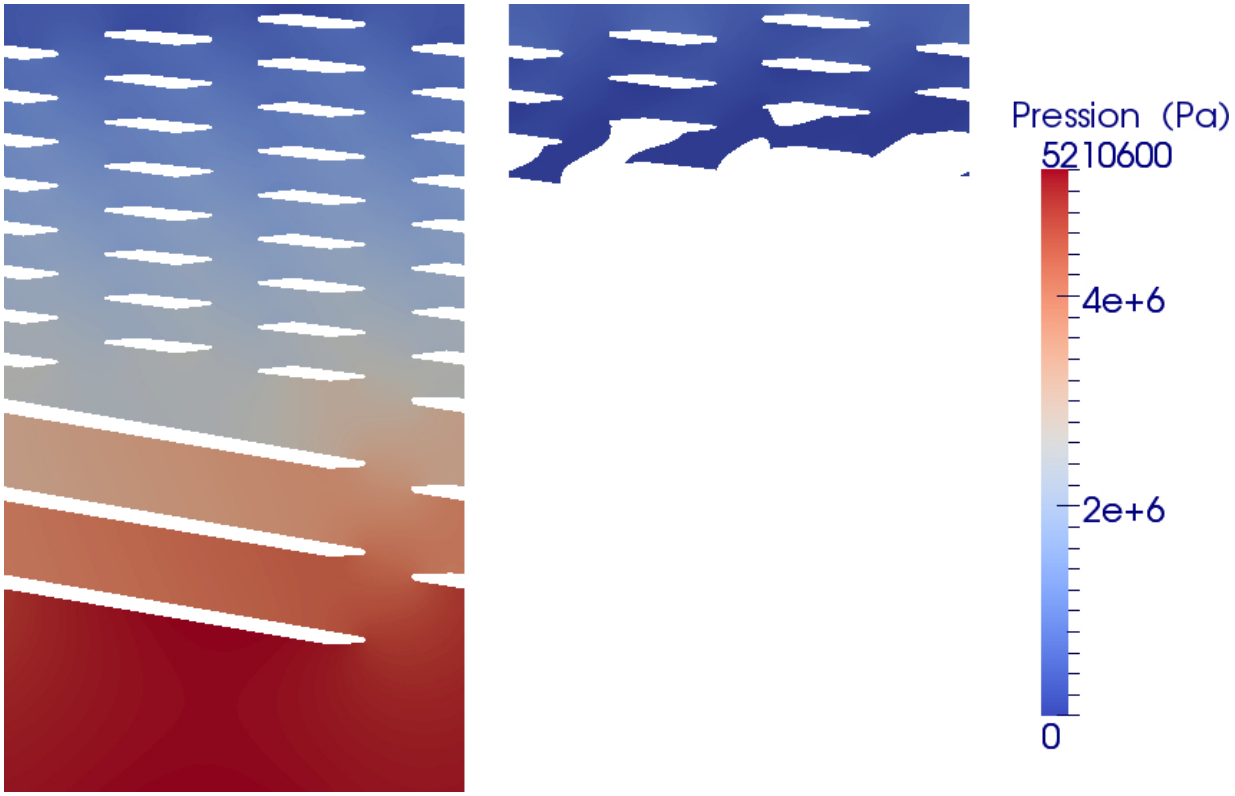


FIGURE 2.22 – Zones remplies lorsque la vis avance (gauche) et lorsque la vis recule (droite)

2.5.1.3.4 Imposer un débit basé sur un type d'élément

Deux éléments de vis composent principalement les profils de vis dans les co-malaxeurs, les éléments de transport et les éléments de mélange ; nous allons donc étudier, en impo-

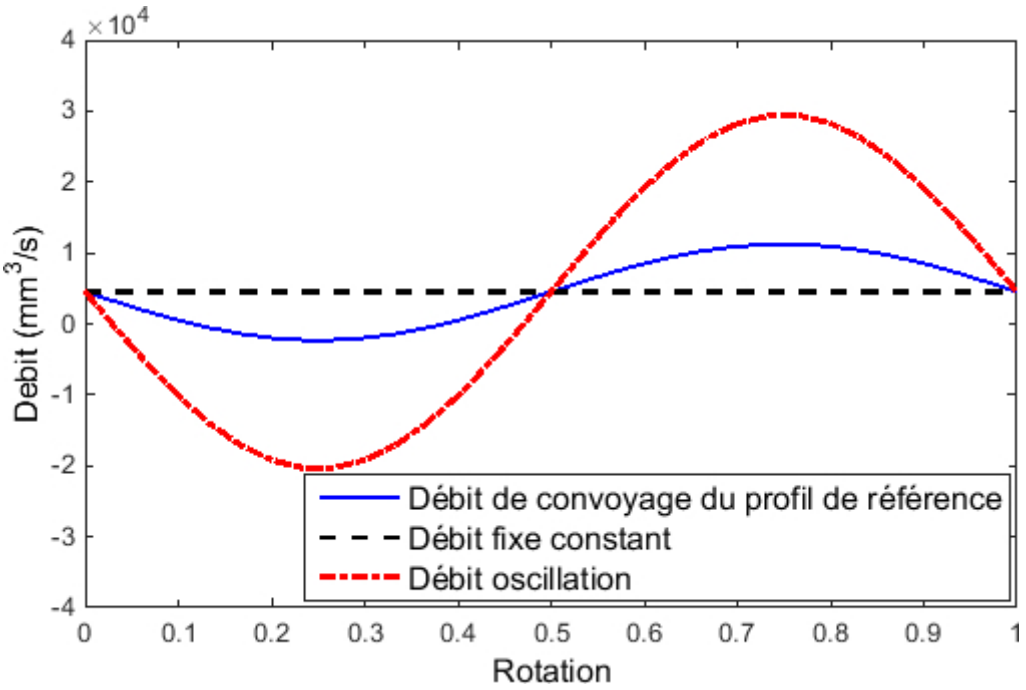


FIGURE 2.23 – Comparaison entre le débit obtenu et les différents débits estimés pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

sant des pressions nulles en entrée et en sortie et une vitesse de rotation, leur débit de convoyage au cours d'une oscillation, afin de voir si les oscillations du débit de convoyage correspondent aux oscillations du débit d'un profil tel que le profil de référence défini précédemment (Figure 2.18).

L'élément de transport

Nous obtenons un débit moyen pour l'élément de transport (EZ) de $11\,700\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$ et qui oscille de 5950 à $17\,400\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$ en suivant la vitesse de rotation comme attendu (Figure 2.24).

Afin de déterminer dans quelle partie du chenal les flux varient, nous étudierons, en plus du débit total de l'élément, le débit de polymère convoyé par la partie fermée du chenal (le débit traversant les traits noirs) et le flux traversant les interruptions de filet (traits rouges) afin d'évaluer l'impact des oscillations sur ces débits (Figure 2.25).

Ces résultats nous permettent de noter que le débit dans la partie fermée du chenal est plutôt constant et que le débit de recirculation traversant les interruptions de filets est fortement impacté au cours des oscillations (Figure 2.26).

On note que la quantité de polymère recirculant au niveau de l'interruption de filet varie nettement au cours de l'oscillation. C'est donc ce flux retour qui réduit fortement le débit de pompage de l'élément.

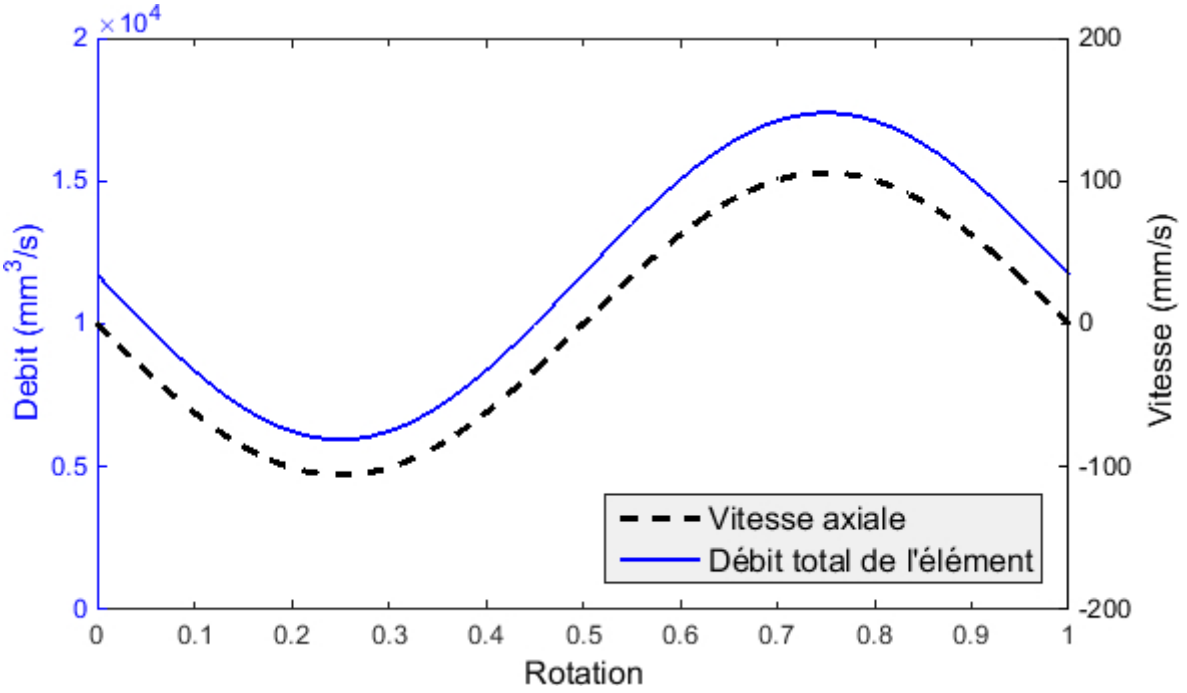


FIGURE 2.24 – Évolution du débit de convoyage de l'élément de transport (EZ) au cours d'une oscillation pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$. 0 représentant le début et 1 la fin d'une rotation de la vis

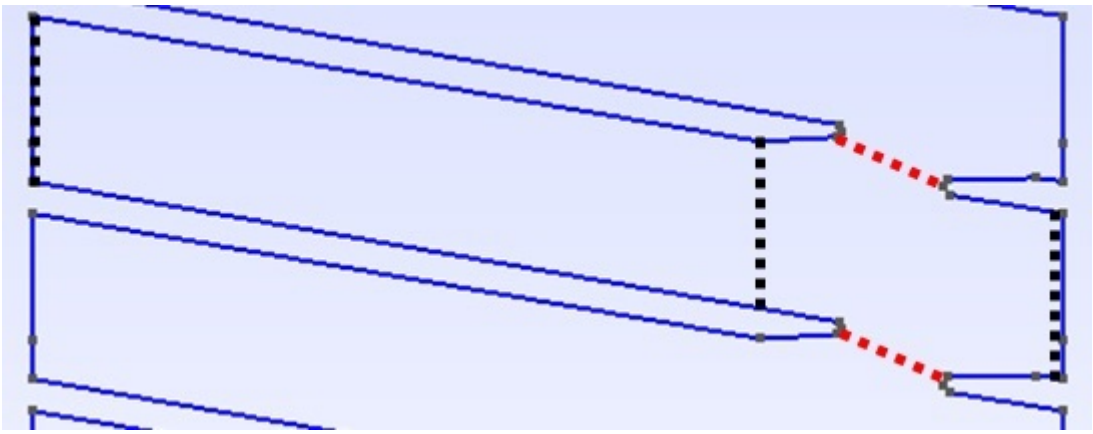


FIGURE 2.25 – Découpage du chenal de l'élément de transport

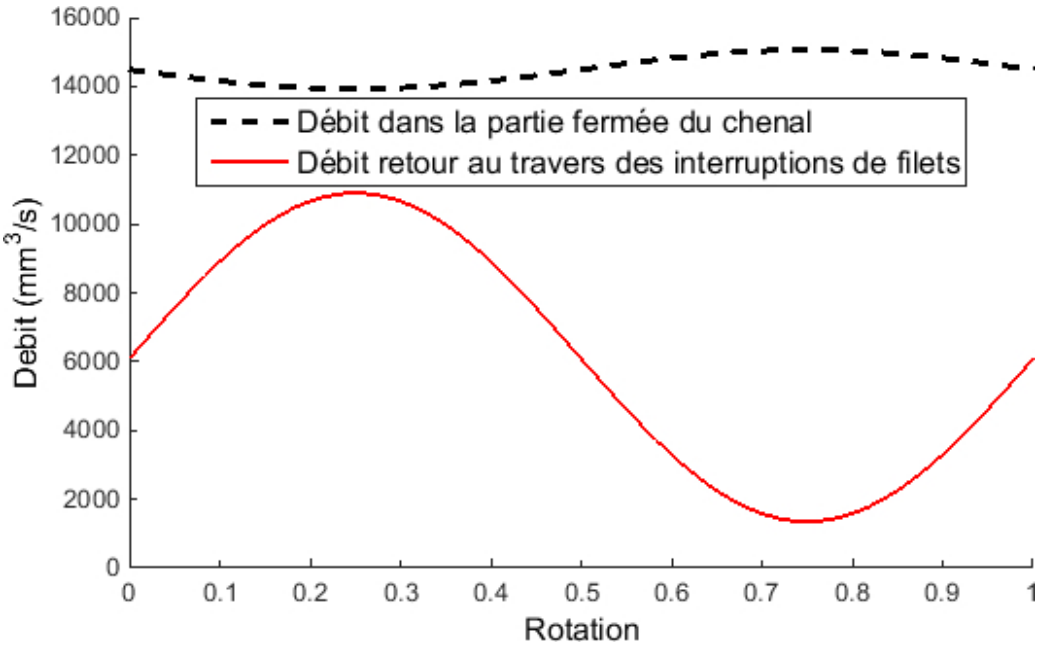


FIGURE 2.26 – Évolution des débits dans les différentes zones de l'élément de transport (EZ) au cours d'une rotation pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$.

L'élément de mélange

Nous réalisons les mêmes analyses pour les éléments de mélange. Les débits présentés Figure 2.27, représentent le débit d'un chenal et d'une interruption de filet. Pour rappel, l'élément de mélange est un élément bi-filet avec 3 interruptions de filets par chenal. Le débit total de l'élément est plus faible, il est en moyenne de $2750\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$, mais également nettement plus impacté par les oscillations puisqu'il oscille de -9250 à $14\,720\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$. Nous notons que le débit de convoyage des éléments de mélange est négatif au cours d'une partie de l'oscillation.
Comme pour l'élément de transport, le débit est plutôt stable dans la zone fermée du chenal et fortement affecté au niveau des interruptions de filets (Figure 2.28). Le débit total de l'élément de mélange est beaucoup plus affecté que celui de transport car c'est un élément avec trois interruptions de filet contre une seule pour l'élément de transport. Il y a donc 3 fois plus de polymère qui recircule au travers des interruptions de filet.

Comparaison entre les débits de convoyage des éléments et celui du profil de référence

Maintenant que nous avons obtenu les courbes de convoyage à chaque instant de la rotation des deux éléments composant notre profil, nous allons comparer leurs oscillations de débit de convoyage sur une période avec l'oscillation de débit obtenue pour le profil de référence. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 2.29, les oscillations du débit de notre profil de référence s'approchent plus des oscillations du débit de l'élément de transport que de celles de l'élément de mélange. Ceci n'est pas étonnant puisque c'est l'élément de transport qui a la plus forte capacité de pompage et qui est le moins sensible aux

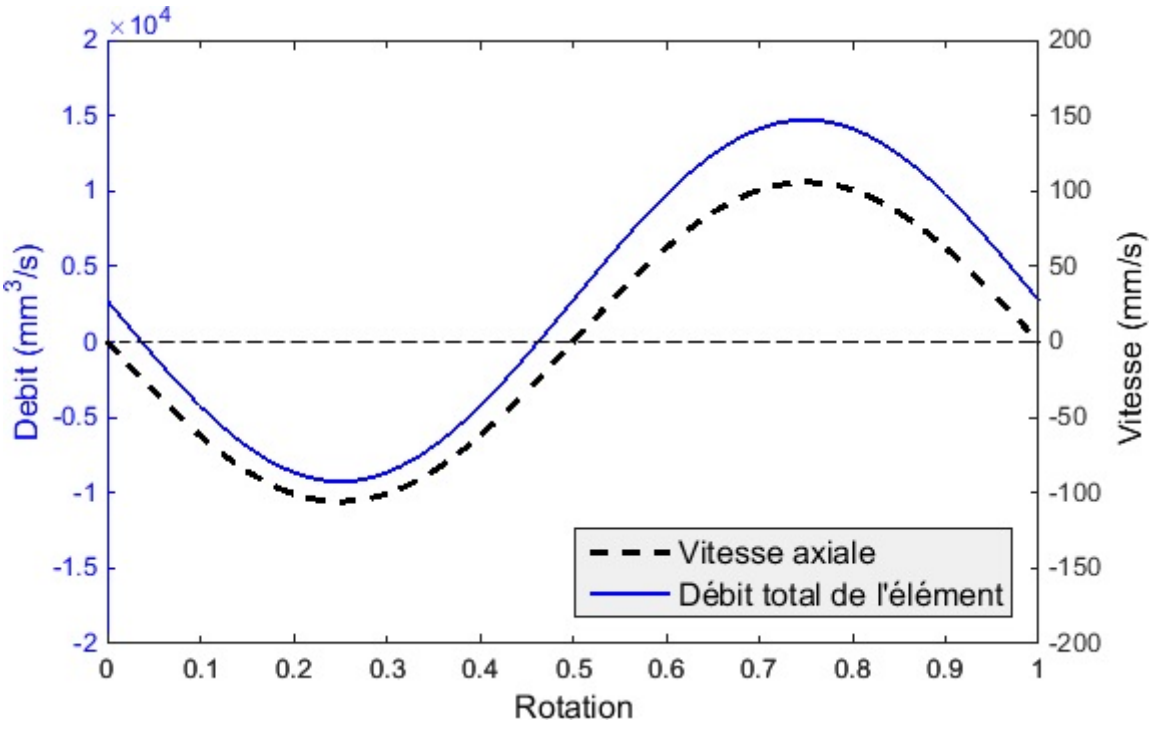


FIGURE 2.27 – Débit caractéristique de l'élément de mélange (KN) au cours d'une rotation de la vis pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

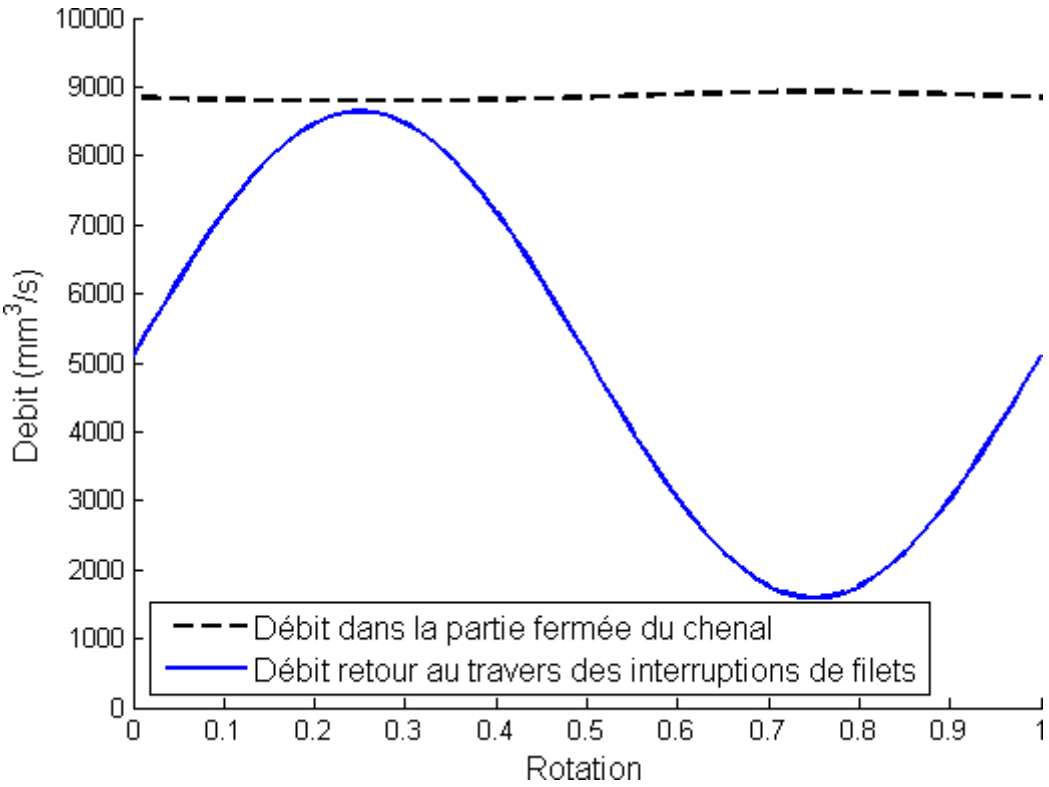


FIGURE 2.28 – Évolution des débits dans les différentes zones de l'élément de mélange (KN) au cours d'une rotation de la vis pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

gradients de pression. Pour ce cas précis, l'on note que l'oscillation de débit de l'élément de transport correspond plutôt bien à l'oscillation de débit de notre profil de référence. Bien que ce profil soit un profil plutôt standard pour une zone de mélange, il existe quelques variantes, notamment avec une bague de restriction moins restrictive avec une

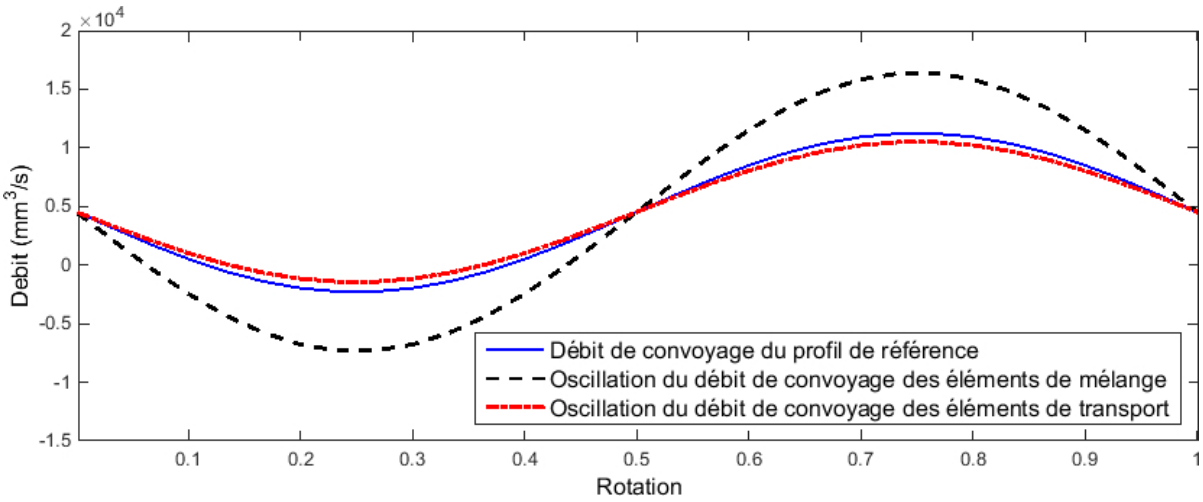


FIGURE 2.29 – Comparaison entre le débit caractéristique du profil de référence et celui des éléments de transports et de mélange au cours d'une rotation de la vis pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

hauteur de chenal minimale de 2 mm ou une absence totale de bague de restriction. Nous allons donc réaliser des courbes caractéristiques pour ces deux nouveaux profils et voir si l'oscillation de débit représentée sur la courbe caractéristique de l'élément de transport peut s'appliquer également à leurs cas.

Pour le profil avec une bague de restriction réduisant la hauteur du chenal à 2 mm, l'on peut noter que les oscillations de débit caractéristique des éléments de transport ne conviennent plus parfaitement pour imposer le débit (Figure 2.30).

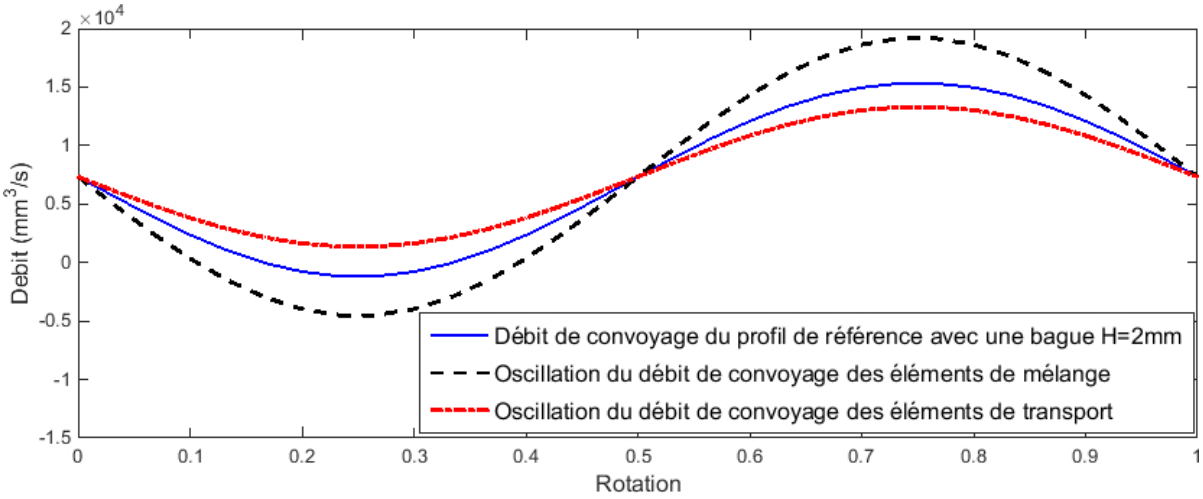


FIGURE 2.30 – Comparaison entre le débit caractéristique du profil complet H=2 et celui des éléments de transport et de mélange au cours d'une rotation de la vis pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

Le résultat est similaire pour un profil sans aucune bague de restriction

Comme nous venons de le voir pour les deux profils ayant une bague de restriction de 2 mm et aucune bague de restriction, imposer les oscillations du débit à partir des caractéristiques de l'élément de transport n'est plus aussi satisfaisant. Déterminer le débit à imposer à chaque pas de temps de la rotation est donc relativement compliqué. Néan-

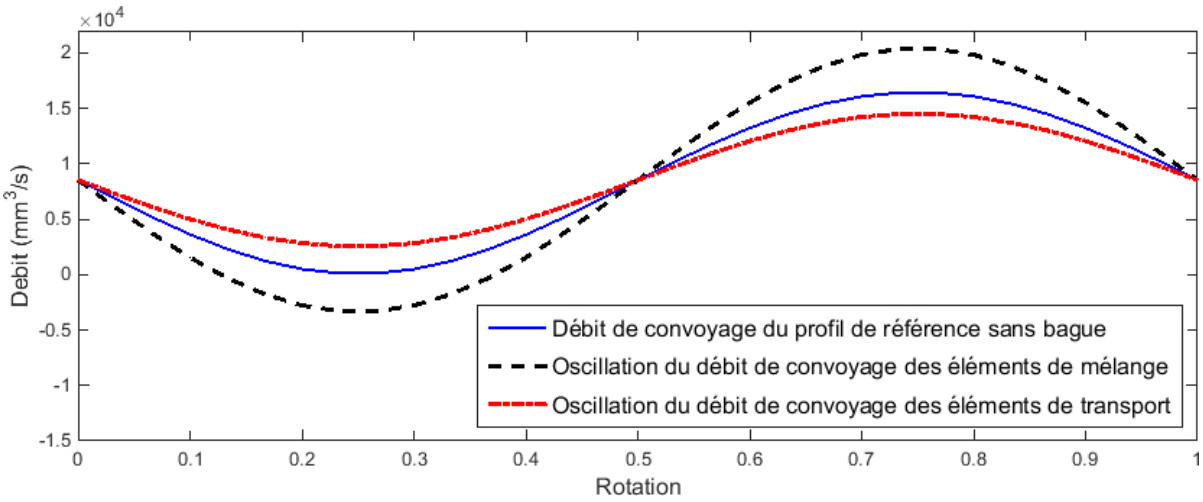


FIGURE 2.31 – Comparaison entre le débit caractéristique du profil complet H=5 et celui des éléments de transport et de mélange au cours d'une rotation de la vis pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

moins, imposer les oscillations de débits en se basant sur celles observées pour les éléments de transport est la méthode la plus aisée à mettre en place. De plus, ces oscillations varient linéairement avec le débit. Cette méthode est donc valide pour différentes vitesses de rotation. Elle donne également de bons résultats comme nous pouvons le voir sur la Figure 2.32. Avant, la longueur de remplissage variait d'environ 6 éléments au cours d'une oscillation, maintenant elle est limité à 1 élément environ, ce qui est beaucoup plus réaliste.

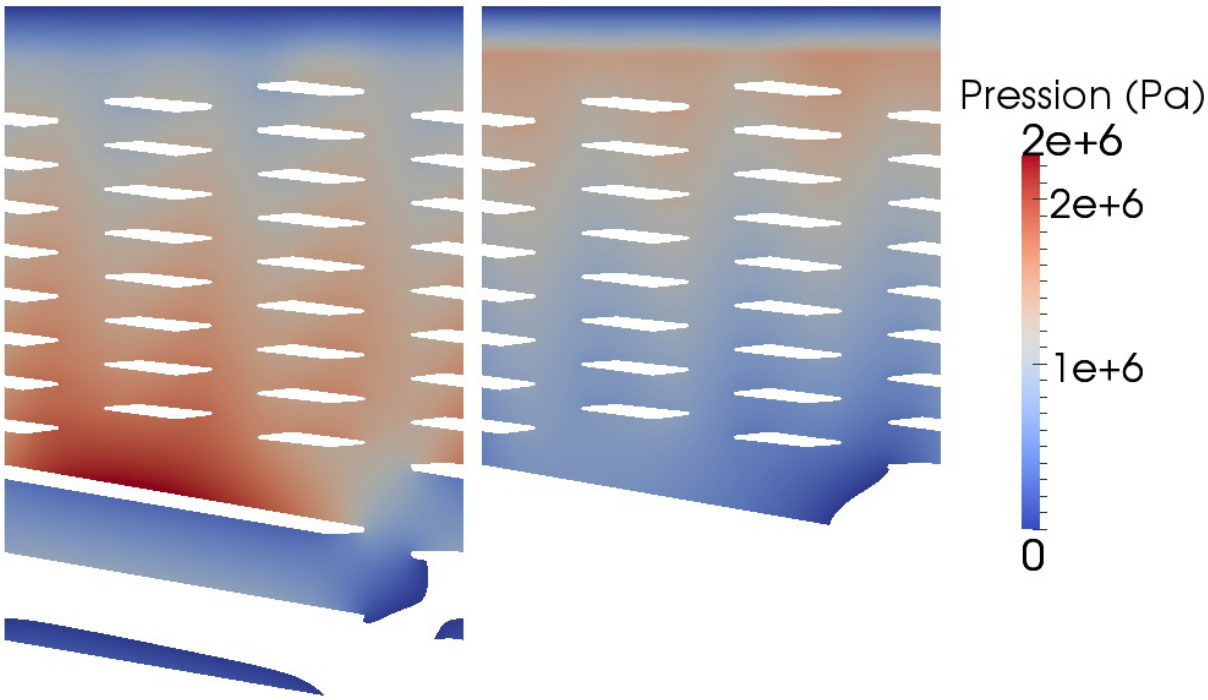


FIGURE 2.32 – Isobare P=0 représentant les zones remplies du co-malaxeur au cours d'une oscillation. A gauche, lorsque la vis recule et à droite, lorsqu'elle avance

Par la suite, nous procéderons ainsi, bien qu'il faille garder à l'esprit que cette méthode s'applique bien ici dans le cas d'un profil de co-malaxeur entièrement rempli et qu'en

réalité, les profils de vis des co-malaxeurs sont généralement sous-remplis dans les zones de transport. Cette question sera donc à étudier de nouveau quand le code mécanique gèrera le sous-remplissage.

2.5.2 La prise en compte des doigts de malaxage

Les doigts de malaxage sont une des autres particularités du co-malaxeur que nous ajoutons maintenant à notre modèle. Le rôle des doigts de malaxage, d'après la société BUSS, est d'apporter de très forts taux de cisaillement localement afin d'obtenir un mélange dispersif.

Afin de prendre en compte les doigts de malaxage dans notre modèle, il faudra dans un premier temps déterminer la trajectoire des doigts de malaxage, leur position à chaque instant t et l'intégrer dans notre maillage. Dans un second temps, déterminer à chaque pas de temps les nœuds et les éléments concernés par le doigt de malaxage. Puis imposer au doigt de malaxage la vitesse du fourreau ainsi qu'une condition de non pénétration pour le polymère.

2.5.2.1 Ajout des doigts de malaxage au maillage

Les doigts de malaxage sont fixés sur le fourreau, leur trajectoire par rapport à la vis suit donc les oscillations de celle-ci. Après avoir identifié la position des doigts de malaxage, ceux-ci étant répartis tous les 120 ° mais à différentes positions le long de la vis, nous intégrons leur course dans le maillage. Intégrer leur course dans le maillage nous permet :

— d'intégrer leur position au cours du temps en fonction du nombre de positions considérées par tour ;
— de raffiner le maillage aux positions choisies afin de mieux prendre en compte leur géométrie et améliorer la précision du calcul. Raffiner localement permet d'éviter d'avoir un maillage trop lourd et donc un calcul trop long.

Nous obtenons donc le maillage de la Figure 2.33 sur lequel l'on distingue bien leur trajectoire, ainsi que la position centrale de chaque doigt de malaxage intégrée dans le maillage.

2.5.2.2 Imposer la forme des doigts de malaxage

Il existe différentes formes de doigts de malaxage. Les deux principales sont circulaire et en forme de losange. Afin de simplifier notre modèle, nous envisageons de les prendre de forme parallélépipédique. Nous avons donc réalisé des simulations 3D grâce à la librairie Cimlib développée au Cemef afin de vérifier que la forme parallélépipédique donnait des résultats similaires. Les simulations ont été réalisées à la vitesse maximale, soit $500\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, en imposant une pression nulle en entrée et en sortie et en considérant un polypropylène non newtonien. Les doigts de malaxage se déplacent dans le chenal à la vitesse du fourreau. Trois formes ont été considérées (Figure 2.34), elles ont toutes une largeur face à l'écoulement identique :

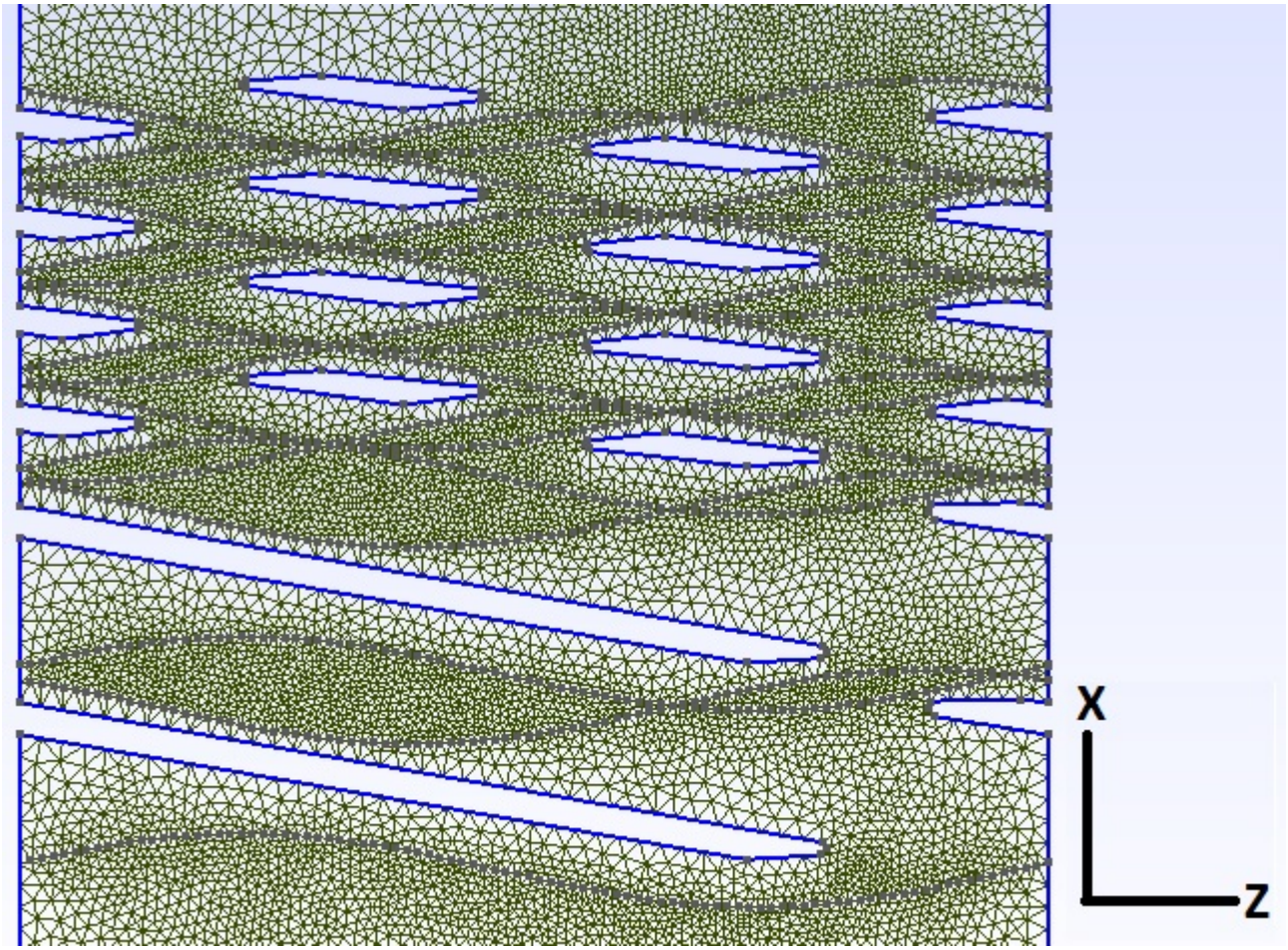


FIGURE 2.33 – Exemple de maillage avec des mailles de 2 mm pour deux éléments de transport et deux éléments de mélange avec les trajectoires des doigts de malaxage

— Un "losange" basé sur la forme réelle de 3 mm de large et 4 mm de long
— Un parallélépipède avec une base rectangulaire de 3 mm de large et 4 mm de long
— Un cylindre de diamètre 3 mm

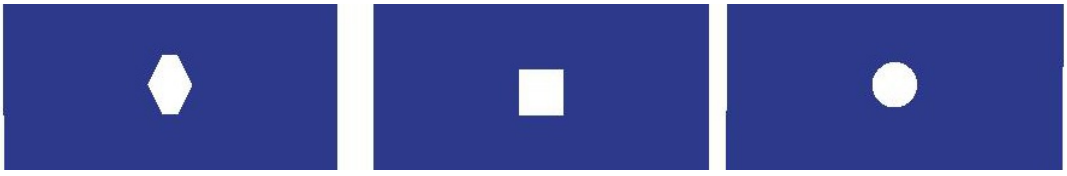


FIGURE 2.34 – Forme des doigts de malaxage comparés

Nous calculons, à partir du fichier résultat, sur un domaine parallélépipédique centré sur le doigt de malaxage et de base carrée de 6 mm de côté et de hauteur 5 mm la puissance dissipée.

Tableau 2.2 – Puissance dissipée par mm^3 de polymère pour les différentes formes de doigt de malaxage

Forme en losange	Forme à base rectangulaire	Forme cylindrique
$5{,}37 \times 10^{-4}\,W \cdot mm^{-3}$	$5{,}49 \times 10^{-4}\,W \cdot mm^{-3}$	$5{,}27 \times 10^{-4}\,W \cdot mm^{-3}$

Les résultats étant similaires ; nous utiliserons un doigt de malaxage de forme rectangulaire

par la suite. A chaque pas de temps, après avoir identifié la position centrale du doigt de malaxage, nous déterminons les nœuds et les éléments considérés comme à l'intérieur du doigt de malaxage, ainsi que les nœuds frontières. Nous obtenons donc pour chaque doigt une forme plutôt parallélépipédique, forme qui dépend du maillage et donc de son raffinement (Figure 2.35).

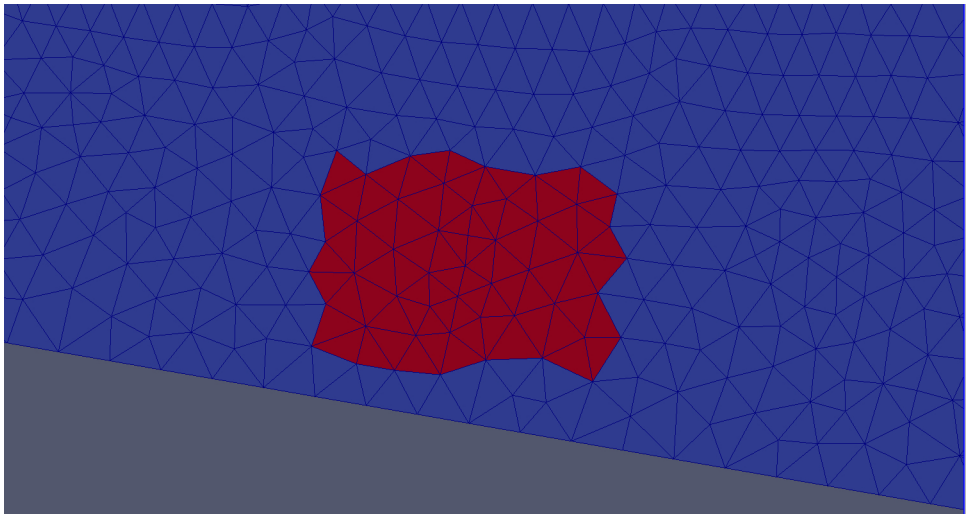


FIGURE 2.35 – Exemple de forme de doigts de malaxage (en rouge) après prise en compte dans le maillage

2.5.2.3 Imposer la non-pénétration du polymère

La deuxième étape consiste à retirer du calcul mécanique les éléments ainsi que les nœuds à l'intérieur du doigt de malaxage et à imposer la non pénétration du polymère. Cette condition est imposée de la même manière que pour les filets de vis. Néanmoins, contrairement aux filets de vis qui, dans la simulation, sont immobiles, les doigts de malaxage se déplacent à la vitesse du fourreau. Il faut donc résoudre l'équation (2.11) de manière à obtenir une vitesse égale à la vitesse du fourreau. Ce qui donne la relation suivante :

$$\vec{V} = \vec{\nabla P}\frac{H^2}{12\ \eta} + \vec{V_F} \tag{2.38}$$

ce qui revient à imposer, aux nœuds frontières des doigts de malaxage, le gradient de pression suivant :

$$\vec{\nabla P}.\vec{n} = -\vec{V_F}.\vec{n}\frac{12\eta}{H^2} \tag{2.39}$$

2.5.3 Influence des doigts de malaxage sur l'écoulement

Après avoir implémenté les doigts de malaxage, nous allons étudier leur influence sur l'écoulement. Pour cela, nous allons réaliser des courbes caractéristiques en imposant une pression nulle en entrée et en sortie et en fixant une vitesse de rotation à $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ afin de vérifier si les doigts de malaxage influent sur le débit total. Les simulations ont été réalisées sur un profil typique d'un co-malaxeur, c'est à dire une zone de transport

suivie d'une zone de mélange, le même que précédemment (Figure 2.18). Comme nous pouvons le voir sur la Figure 2.36, l'impact des doigts de malaxage sur le débit total est quasi insignifiant.

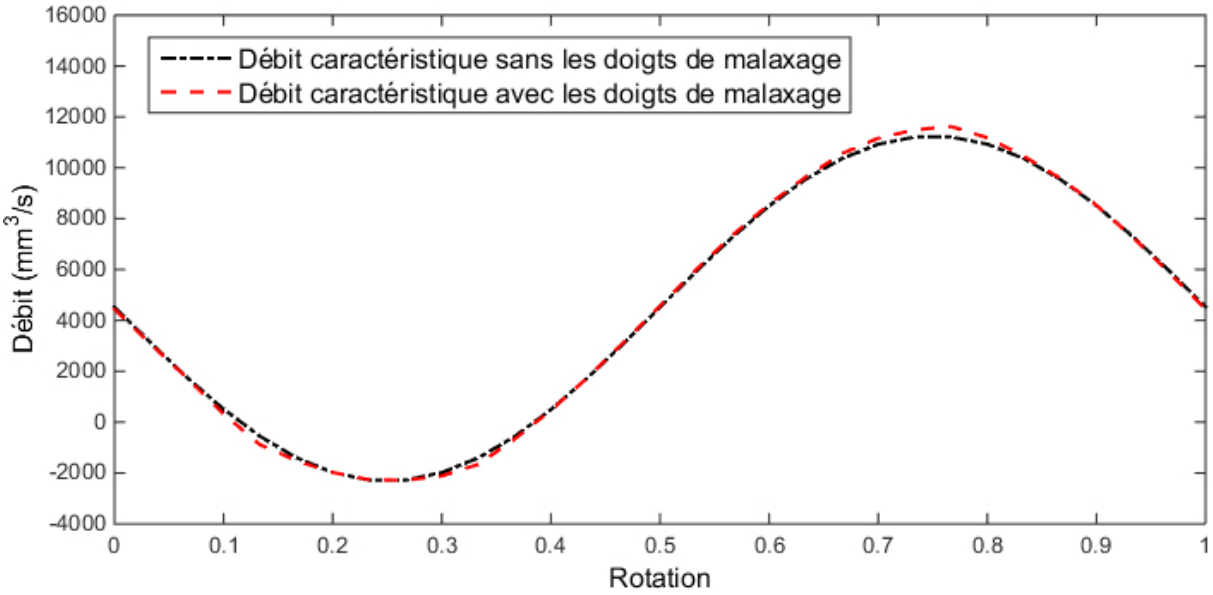


FIGURE 2.36 – Comparaison des débits caractéristiques sur le même profil avec et sans doigts de malaxage pour une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

La société BUSS indique que le rôle principal des doigts de malaxage est d'apporter de très fortes vitesses de cisaillement lorsque les doigts sont très proches des filets de la vis. Nous nous focalisons donc sur cette zone et regardons les taux de cisaillement (Figure 2.37).

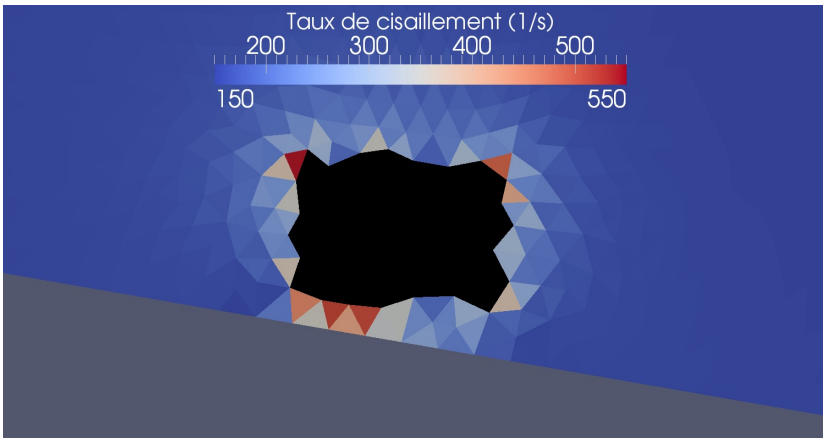


FIGURE 2.37 – Vitesse de cisaillement pour un doigt de malaxage (noir) à proximité d'un filet de vis pour une vitesse de rotation de $500\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

Comme nous le voyons, les vitesse de cisaillements calculées à partir des équations basées sur les approximations d'Hele-Shaw (eq. (2.18)) entre le doigts de malaxage et le filet de vis ne sont pas très nettement supérieures à celles dans le chenal. Ceci vient du fait que les approximations d'Hele-Shaw ne tiennent compte que des cisaillements selon la hauteur du chenal (2.16) et négligent tous les autres termes. Néanmoins, le doigt de malaxage ici implique de fortes variations de vitesse dans les directions x et z. En considérant un

champ de vitesse de la forme :

$$\vec{V} = V_x(x,y,z)\vec{e_x} + V_z(x,y,z)\vec{e_z} \tag{2.40}$$

et en considérant tous les termes de cisaillement, nous obtenons le tenseur des vitesses de déformation :

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2\dot{\gamma}_{xx} & \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\gamma}_{xz}+\dot{\gamma}_{zx} \\ \dot{\gamma}_{xy} & 0 & \dot{\gamma}_{zy} \\ \dot{\gamma}_{xz}+\dot{\gamma}_{zx} & \dot{\gamma}_{zy} & 2\dot{\gamma}_{zz} \end{pmatrix} \tag{2.41}$$

et le tenseur des vitesses de déformation généralisé suivant

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_y &= \sqrt{2\epsilon : \epsilon} \\ &= \sqrt{2\left[2\left(\frac{1}{4}\dot{\gamma}_{xy}^2\right)+2\left(\frac{1}{4}\dot{\gamma}_{zy}^2\right)+2\left(\frac{1}{4}\dot{\gamma}_{zx}^2\right)+2\left(\frac{1}{4}\dot{\gamma}_{xz}^2+\dot{\gamma}_{xx}^2+\dot{\gamma}_{zz}^2\right)\right]} \\ &= \sqrt{\dot{\gamma}_{xy}^2+\dot{\gamma}_{zy}^2+\dot{\gamma}_{zx}^2+\dot{\gamma}_{xz}^2+2\dot{\gamma}_{xx}^2+2\dot{\gamma}_{zz}^2} \end{aligned} \tag{2.42}$$

Afin de calculer les termes de cisaillement ajoutés, à partir de la vitesse en P0, nous reconstruisons une vitesse P1 et calculons les gradients de vitesses dans les éléments.

Avec cette formulation complète, prenant en compte tous les termes de cisaillement induits par le déplacement du doigt de malaxage, nous obtenons des taux de cisaillement plus élevés que ceux obtenus avec les approximations d'Hele-Shaw (Figure 2.38).

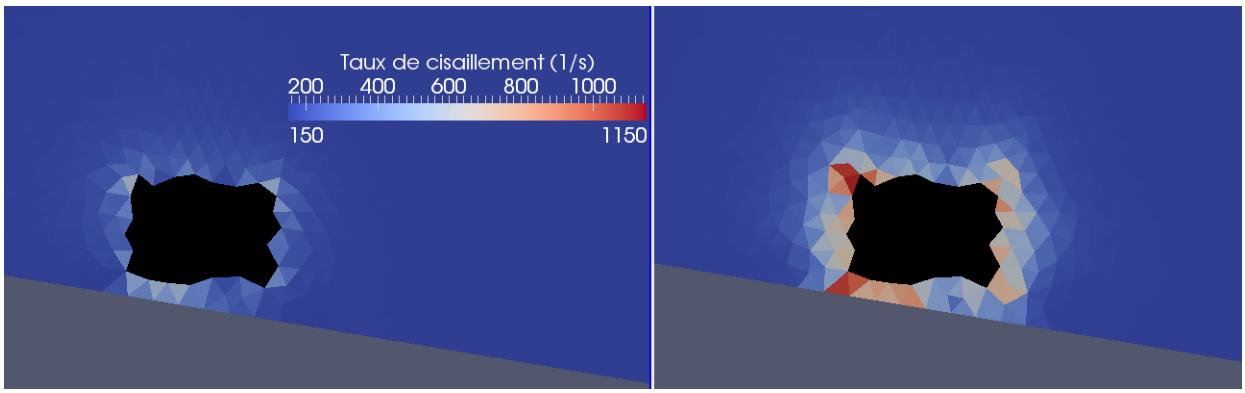


FIGURE 2.38 – Comparaison entre les deux méthodes de calcul des vitesses de cisaillement, à gauche, avec les approximations d'Hele-Shaw et à droite avec la formule complète permettant de calculer les vitesses de cisaillement

Ce calcul prenant en compte tous les termes de cisaillement semble déjà plus réaliste par rapport à ce qu'indique le constructeur. Néanmoins, si des différences persistent toujours, ceci peut être dû au fait que, dans le modèle, le polymère a un contact glissant avec la paroi alors que, expérimentalement, il a un contact collant.

2.5.4 Conclusion

Le modèle mécanique développé est donc basé sur les approximations d'Hele-Shaw et inclut les spécificités des co-malaxeurs, à savoir les bagues de restriction, les oscillations

de la vis ainsi que les doigts de malaxage. Les doigts de malaxage ayant, dans notre simulation, un rôle quasi insignifiant sur les débits et n'apportant que très localement de forts taux de cisaillement, utiles pour améliorer le mélange dispersif, nous ferons le choix de les négliger pour le moment car ils alourdissent le calcul. Il faudra néanmoins les prendre en compte pour estimer le mélange dispersif ultérieurement. Nous avons vu également l'impact des oscillations sur les débits et les pressions ainsi que la difficulté d'imposer un débit donnant des résultats cohérents. Nous avons proposé d'utiliser les oscillations de débit observées sur le débit de convoyage des éléments de transport. Ceci donne des résultats satisfaisants et nous utiliserons cette méthode par la suite. Néanmoins, il restera à faire valider ce choix par des comparatifs entre des simulations et des essais expérimentaux.

Maintenant que le modèle mécanique du co-malaxeur est développé, validé et implémenté numériquement, il nous reste à aborder le modèle thermique, la température et son évolution jouant un rôle important dans les écoulements des polymères, ainsi que les calculs d'indices de mélange et le sous-remplissage.

Chapitre 3

Équation de transport, thermique, gestion du remplissage, indice de mélange et résolution numérique

Sommaire

3.1 Le modèle thermique 98
3.2 Implémentation numérique d'une équation de transport . . . 100
3.2.1 Prise en compte du sous-remplissage 100
3.2.2 Gestion du sous-remplissage par éléments finis - La méthode level set 102
3.2.3 Redistanciation de l'interface 107
3.2.4 Filtrer la fonction level set 108
3.3 Implémentation numérique du modèle thermique 109
3.3.1 Formulation faible de l'équation de la thermique 109
3.3.2 Conditions aux limites 110
3.3.3 Organigramme du code - Couplage thermo-mécanique 111
3.3.4 Validation du modèle thermique 111
3.3.5 Exemple de résultats 113
3.4 Suivi de déformation 114
3.5 Conclusion 118

Nous avons vu précédemment comment était géré le calcul mécanique dans le comalaxeur. Dans les procédés d'extrusion de polymères, la thermique joue un rôle important étant donné que la viscosité dépend fortement de la température et que, les polymères étant très visqueux, leur écoulement crée beaucoup de chaleur par dissipation visqueuse ce qui modifie la viscosité le long de l'écoulement. C'est pourquoi nous allons exposer dans ce chapitre le modèle thermique retenu ainsi que son implémentation numérique.

3.1 Le modèle thermique

Afin de prendre en compte la thermique, le modèle se base sur l'équation globale de l'énergie pour un matériau incompressible :

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = -div\ q + \sigma : \dot{\epsilon} \tag{3.1}$$

avec ρ, la densité, c_p, la capacité calorifique q, le flux de chaleur et $\sigma : \dot{\epsilon}$, la puissance dissipée. Le modèle mécanique étant un modèle 2D, le modèle thermique le sera également. Nous avons donc un champ de température $\bar{T} = T(x, z)$, la température étant considérée comme constante dans la hauteur. Le flux de chaleur est souvent considéré comme proportionnel au gradient de température (loi de Fourier) :

$$q = -k\nabla T \tag{3.2}$$

avec k, la conductivité thermique. Nous considèrerons que la conductivité thermique est constante. Au niveau des parois de la vis et du fourreau, une condition de flux de chaleur imposé par résistance d'interface est appliquée pour les échanges thermiques. Nous avons donc au niveau des parois considérées le flux de chaleur suivant :

$$q = \sum_{i=1}^{n} h_{Ti}(T_{pi} - \bar{T}) \tag{3.3}$$

avec n, le nombre de parois considérées, h_{Ti}, le coefficient de transfert thermique à la paroi considérée, T_p, la température de la paroi considérée et $\bar{T}$, la température moyenne dans la hauteur, puisque notre modèle est un modèle 2D et que nous considérons la température comme uniforme dans la hauteur. La dissipation visqueuse se calcule à partir de la viscosité et du taux de cisaillement généralisé :

$$\sigma : \dot{\epsilon} = \eta \bar{\dot{\gamma}}^2 \tag{3.4}$$

L'équation de la thermique devient donc :

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = k\Delta T + \eta \bar{\dot{\gamma}}^2 \tag{3.5}$$

Afin d'évaluer la nécessité de la prise en compte de la conduction, nous allons calculer le nombre de Peclet, nombre qui permet d'évaluer l'importance du terme de convection dans le sens de l'écoulement devant le terme de conduction. En considérant une longueur de vis de L/D = 7 soit environ $n = 11$ éléments de vis, nous allons donc calculer le

nombre de Peclet pour cette longueur, en prenant le reste des données du co-malaxeur MK30 : nous prenons la vitesse de rotation moyenne de la plage de fonctionnement soit $\mathrm{N} = 250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ ce qui donne une vitesse moyenne d'écoulement de $\bar{V} \approx 0{,}196\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$, $L = n\ \pi\ D$ et n= 11 soit 1,037 m et $\alpha = \frac{k}{\rho c} = 10^{-7}\,\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$, la diffusivité thermique. Le nombre de Peclet est donc de

$$Pe = \frac{\bar{V}L}{\alpha} = \frac{0.196 \times 1,037}{10^{-7}} \approx 2.03 \times 10^6 \tag{3.6}$$

La conduction dans le polymère est donc négligeable devant la convection et nous la négligerons.

Afin d'évaluer la nécessité de la prise en compte des échanges de chaleur à la paroi, nous allons calculer le nombre de Cameron, nombre qui évalue la conduction thermique à la paroi par rapport à la convection dans le sens de l'écoulement. Parmi les co-malaxeurs existants, ceux ayant les vis les plus courtes ont des longueurs de vis de L/D = 7, les longueurs dans lesquelles le polymère est fondu est donc L/D ≈ 7, soit environ 11 éléments. Nous allons donc calculer le nombre de Cameron pour cette longueur, en prenant le reste des données du co-malaxeur du projet, le MK30 : nous avons H=5 mm soit une demi-hauteur de 2,5 mm, $\bar{V} \approx 0{,}196\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$, L = 1,037 m et n= 11 et $\alpha \approx 10^{-7}\,\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$.

$$Ca = \frac{\alpha\ L}{\bar{V}H^2} = \frac{10^-7 \times 1.02}{0.192 \times (2.5\ 10^{-3})^2} \approx 0.085 \tag{3.7}$$

La valeur pour le nombre de Cameron est intermédiaire, c'est à dire que la température du système est bien influencée et régulée par les échanges thermiques à la paroi, mais pas totalement : la dissipation visqueuse joue quand même un rôle important aussi. C'est le régime transitoire.

Calculons le nombre de Brinkman avec les mêmes valeurs que ci-dessus, une viscosité, η, de $1000\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$, une conductivité, k, de $0{,}3\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{K}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-1}$ et une température en paroi T_p de 20 K inférieure à la température du polymère. La dissipation visqueuse reste légèrement domimante dans ce cas ci. Si la température de la paroi se rapproche de la température du polymère, alors, la dissipation visqueuse sera dominante :

$$Br = \frac{\eta\bar{V}^2}{k(T_p - \bar{T})} = \frac{1000 \times 0.192}{0,3 \times 20} = 2.46 \tag{3.8}$$

Maintenant que le modèle thermique a été détaillé, nous allons aborder la résolution de l'équation (3.5), en négligeant la conduction dans le polymère, dans notre code éléments finis.

3.2 Implémentation numérique d'une équation de transport

Le modèle thermique ci-dessus est une équation de transport avec des termes sources. Nous verrons plus loin que prendre en compte le sous-remplissage du co-malaxeur ou calculer des indices de mélange font aussi intervenir des équations de transport. La gestion des équations de transport peut rapidement mener à des problèmes de diffusion numérique (Ern et Guermond, 2002). Il faudra donc se concentrer sur la gestion du problème de diffusion. La prise en compte du remplissage se fait avec une équation de transport sans terme source. Il sera donc plus aisé de quantifier la diffusion numérique dans ce cas et nous commencerons par celui-ci.

3.2.1 Prise en compte du sous-remplissage

Numériquement, le code mécanique est basé sur des éléments finis. Nous avons donc le choix de continuer la modélisation avec des éléments finis ou d'utiliser des volumes finis. La méthode des volumes finis est connue pour être conservative. Nous commencerons donc par cette méthode.

3.2.1.1 Gestion du sous-remplissage par volumes finis

La méthode des volumes finis pour cette application a été introduite par Hirt et Nichols (1981) qui proposent une approche monolithique, c'est à dire que le modèle mécanique reste identique. Dans notre cas, il est donc incompressible et la seule différence se situe au niveau de la viscosité. Nous considèrerons que l'air a une viscosité 100 fois inférieure à celle du polymère et nous utiliserons la loi de mélange suivante :

$$\eta = \eta_{polymère} F + (1 - F)\eta_{air} \tag{3.9}$$

où la fonction volumique F est une fonction qui définit pour chaque point du domaine si le fluide est présent ou non. Les zones où le fluide est présent ont une valeur de 1, tandis que les zones vides une valeur de 0. Cette fonction est transportée avec le champ de vitesse de l'écoulement :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{v}.\nabla F = 0 \tag{3.10}$$

L'interface fluide-air se situe dans les zones où la fonction F est comprise entre 0 et 1. Pour chaque élément, il est effectué un bilan de flux entrants et sortants. Afin de limiter la diffusion, Hirt et Nichols (1981) proposent un schéma de donneur-accepteur. Les cellules doivent contenir du fluide avant d'en donner à leurs voisins et ceci inclut également une correction des taux de remplissage. Si une cellule a un taux de remplissage négatif, il est ramené à 0 et si il est supérieur à 1, il est également ramené à 1, ce qui revient à appliquer un seuillage. Dans notre cas, nous préférons appliquer un seuillage permettant de conserver le volume total. Pour ce faire, nous calculons la quantité de polymère qui doit être présente dans notre système à chaque pas de temps en fonction des flux entrants et sortants puis

nous déterminons la valeur seuil de manière à obtenir le même volume. Le seuillage est effectué à intervalles réguliers, mais pas à tous les pas de temps. Dans notre cas, la vitesse issue du modèle newtonien est une vitesse P0 et nous transporterons l'équation avec ces vitesses. Cette méthode est appliquée sur un co-malaxeur sans oscillation, avec un débit entrant de $7{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ pour une vitesse de rotation de $250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$. Nous considérons également l'entrée du domaine comme toujours remplie de polymère. Ceci conduit au résultat présenté Figure 3.1.

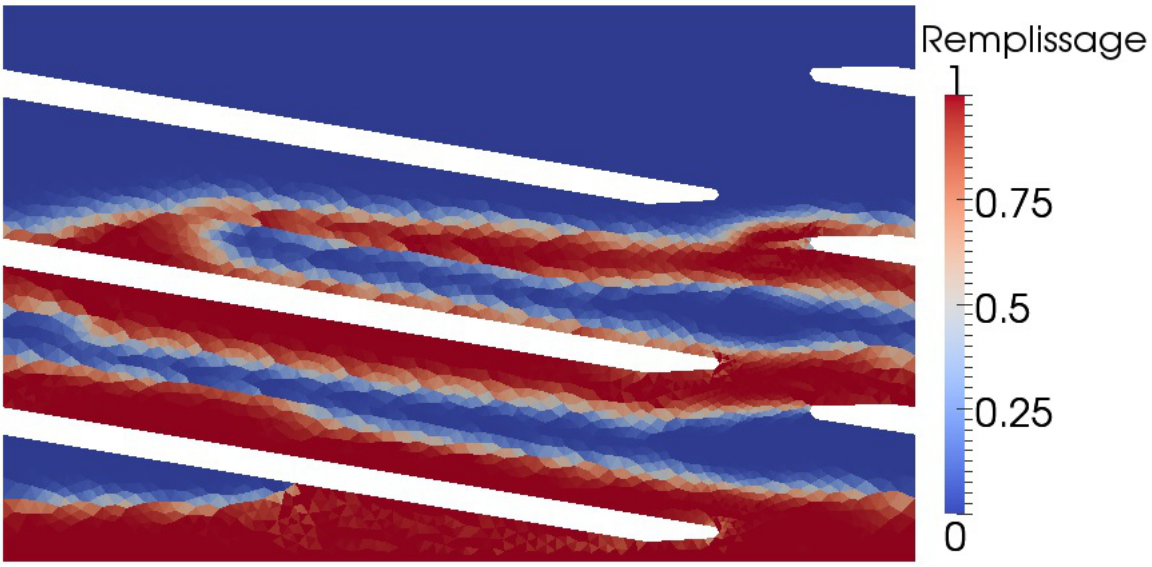


FIGURE 3.1 – Remplissage d'éléments de transport sur un co-malaxeur

Sur cet exemple nous voyons, logiquement, que la diffusion est fortement limitée et nous voyons également que de l'air, en bleu, est emprisonné entre deux couches de polymère, en rouge. En effet, le polymère sortant sur la partie gauche du domaine revient sur la partie droite dans le chenal supérieur, et du fait de l'interruption de filet, elle recircule dans le chenal inférieur en emprisonnant donc l'air entre deux couches de polymère. Ceci n'est pas réaliste et est dû au fait que le modèle choisi est un modèle monolithique incompressible. Afin de palier ce problème, nous aurions pu rendre le modèle incompressible-compressible, c'est à dire compressible pour l'air mais ceci aurait alourdi le calcul. Nous avons donc préféré rendre les parois perméables à l'air (Codina *et al.*, 1994). Comme nous pouvons le voir sur la Figure 3.2, le polymère est bien plaqué sur la paroi arrière du chenal et il n'y a quasiment plus de bulles d'air emprisonnées dans du polymère.
Cette méthode, avec le seuillage, décrit correctement l'écoulement et est conservative puisque notre méthode pour seuiller l'est. Néanmoins, cette solution ne peut pas être retenue pour le transport de l'équation de la thermique (ou celle des indices de mélange) qui ne peuvent pas être seuillées sans perte d'information.

Lesaint et Raviart (1974) ont introduit la méthode de Galerkin Discontinue. Cette méthode leur a permis de résoudre l'équation de transport de neutrons. Afin de limiter la diffusion, cette méthode se base sur les discontinuités de la fonction transportée entre chaque élément. Il y a donc autant de discontinuités que d'arêtes dans notre maillage. Cette méthode nécessite donc de calculer beaucoup de discontinuités et également de

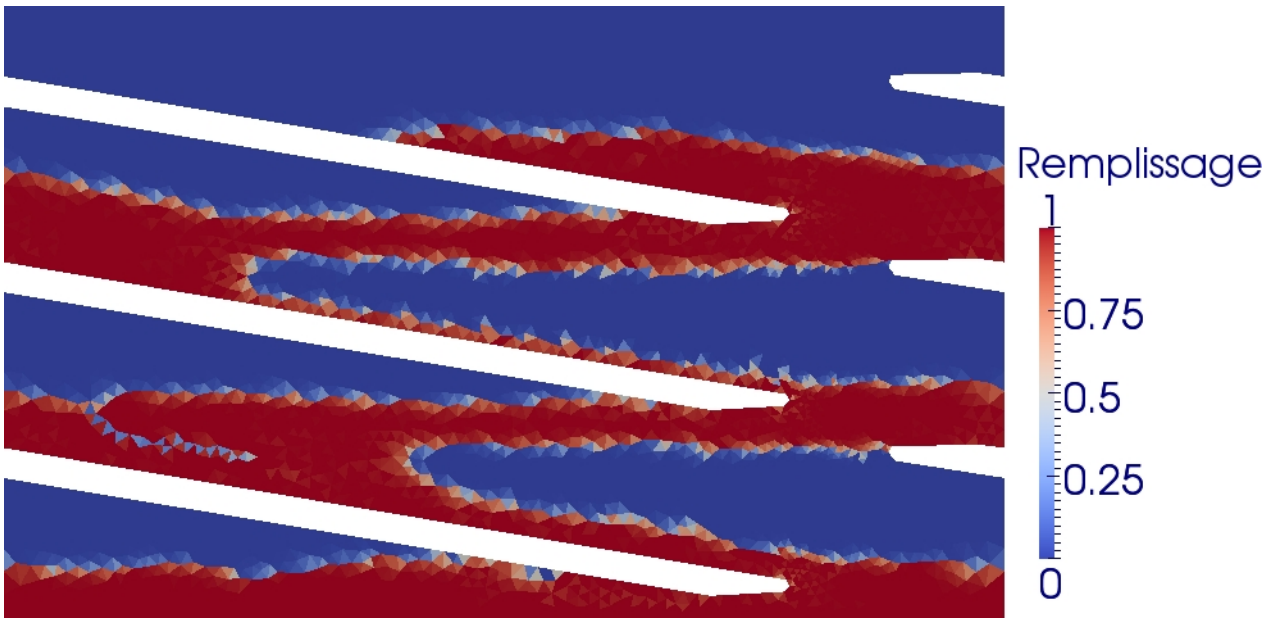


FIGURE 3.2 – Remplissage d'éléments de transport de co-malaxeur pour une vitesse de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ et un débit de $5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$

connaître l'ordre dans lesquels les éléments sont traversés par l'équation de transport. Dans le cas du remplissage du co-malaxeur, ceci reviendrait à connaitre l'ordre dans lequel les éléments sont remplis et quels sont les éléments donneurs à chaque pas de temps. Or, le co-malaxeur ayant de multiples interruptions de filets ainsi qu'une vitesse de vis oscillatoire, les éléments donneurs-receveurs sont susceptibles de changer à chaque pas de temps et ceci complexifie la méthode. Nous choisirons donc de ne pas utiliser cette méthode et irons plutôt vers une méthode level set en éléments finis.

3.2.2 Gestion du sous-remplissage par éléments finis - La méthode level set

Pour cette prise en compte, différentes méthodes existent comme la level set proposée par Osher et Sethian (1988) et qui est une équation de transport applicable aux éléments finis. Initialement, les auteurs proposaient d'utiliser comme level set la fonction

$$\phi = 1 \pm d^2 \tag{3.11}$$

avec d, la fonction distance qui définit la distance entre chaque point du maillage et l'interface et le signe plus ou moins, selon que l'on se situe dans ou hors du fluide. Mulder *et al.* (1992) conseillent d'utiliser pour la level set une fonction distance, ainsi le gradient transporté de la level set sera constant et égal à 1 dans le domaine. Nous étudierons les problèmes numériques inhérents au traitement des équations de transport par éléments finis sur l'équation de transport de la level set, qui est une équation de transport sans terme source.

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \vec{v}\nabla\phi = 0 \tag{3.12}$$

avec ϕ la fonction level set et $\vec{v}$, le champ de vitesse du domaine. On considère

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \frac{\phi(t+dt) - \phi(t)}{dt} \tag{3.13}$$

d'où l'équation de transport suivante pour la level set

$$\phi(t+dt) + v.\nabla\phi dt = \phi(t) \tag{3.14}$$

3.2.2.1 Formulation faible de la level set

L'implémentation de la level set en élément finis est la suivante :

$$\begin{cases} \phi(t+dt) + v.\nabla\phi dt = \phi(t) \\ \phi = \phi(t)_{impose} & \text{sur } \partial\Omega \ = \ \partial\Omega_e \\ \phi(t=0) = \phi_0 \end{cases} \tag{3.15}$$

avec $\partial\Omega_e$, l'entrée. A l'entrée, nous imposerons une valeur "exacte" calculée à partir du débit ainsi que du temps écoulé. Dans les cas des maillages de co-malaxeur, la face entrante est selon la normale x et nous estimons la fonction ϕ en entrée avec la formule suivante :

$$\phi(t+dt) = \phi(t) + v_x \times dt \times (-1) \tag{3.16}$$

où v_x représente la vitesse au bord d'entrée, et nous multiplions par -1 car nous considérons la level set négative dans le fluide.

La formulation faible est obtenue en multipliant l'équation par la fonction test ϕ^*.

$$\phi(t+dt)\phi^* + v.\nabla\phi dt\phi^* = \phi(t)\phi^* \tag{3.17}$$

$$\int_\Omega \phi(t+dt)\phi^* dV + \int_\Omega v.\nabla\phi dt\phi^* dV = \int_\Omega \phi(t)\phi^* dV \tag{3.18}$$

3.2.2.1.1 Validation et tests de Zalesak

Le test le plus courant pour vérifier la précision de cette méthode est de réaliser le test proposé par Zalesak (1979). Ce test consiste à initialiser un domaine avec la forme définie à la Figure 3.3 et à la faire se déplacer dans un champ de vitesse rotationnel (Figure 3.4). Les dimensions de la forme, la taille du domaine ainsi que le champ de vitesse sont proportionnels à la taille de maille. Ce test est donc indépendant de la taille de maille. Dans notre cas, nous avons choisi arbitrairement une taille de maille de 1 mm.

Après avoir effectué un tour complet, afin d'évaluer la conservativité de l'équation de transport, nous mesurons la différence entre la forme initiale et la forme finale.
Comme nous pouvons le voir sur la Figure 3.5, la forme initiale a été déformée et plus particulièrement au niveau du rectangle central qui a quasiment disparu. Des techniques de stabilisation existent pour limiter cette diffusivité. Nous allons étudier l'une d'entre elle, la stabilisation SUPG (Streamline Upwind Petrov-Galerkin)

FIGURE 3.3 – Forme initiale du test de Zalesak

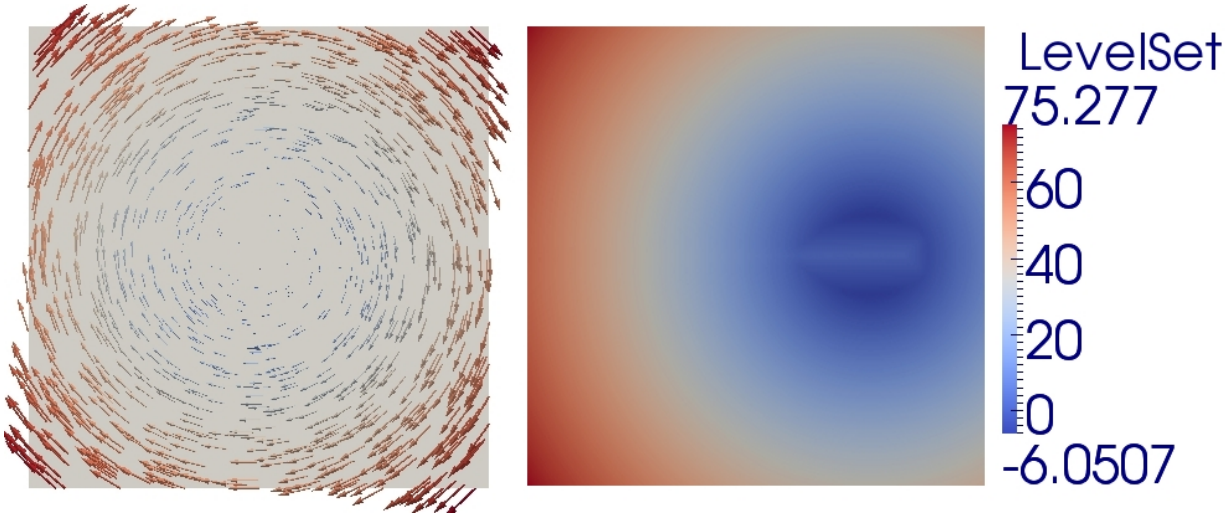


FIGURE 3.4 – Champ de vitesse pour le test de Zalesak et fonction LevelSet initialisée

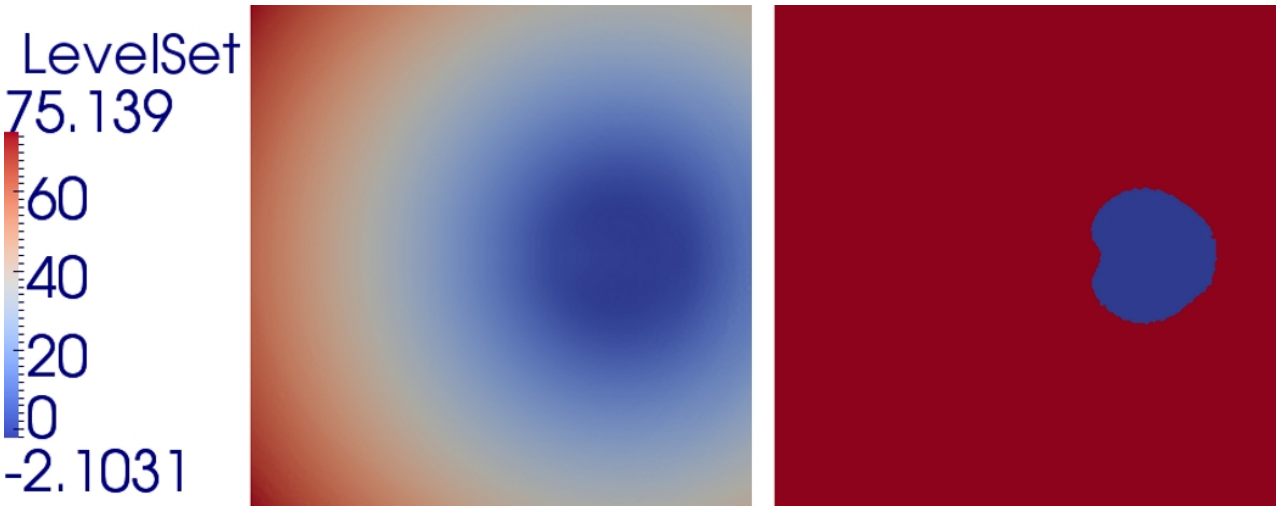


FIGURE 3.5 – Test de Zalesak, forme finale après une rotation

3.2.2.1.2 Stabilisation avec la méthode SUPG

Parmi les méthodes proposées pour les équations convectives est SUPG (Streamline

Upwind Petrov-Galerkin). Cette méthode consiste à modifier la fonction test afin de décentrer le schéma (Figure 3.6), où la fonction test, la fonction ϕ^*, est remplacée par $\phi^* + \tau\vec{v}\nabla\phi^*$. La formulation faible (3.15) s'en trouve donc modifiée :

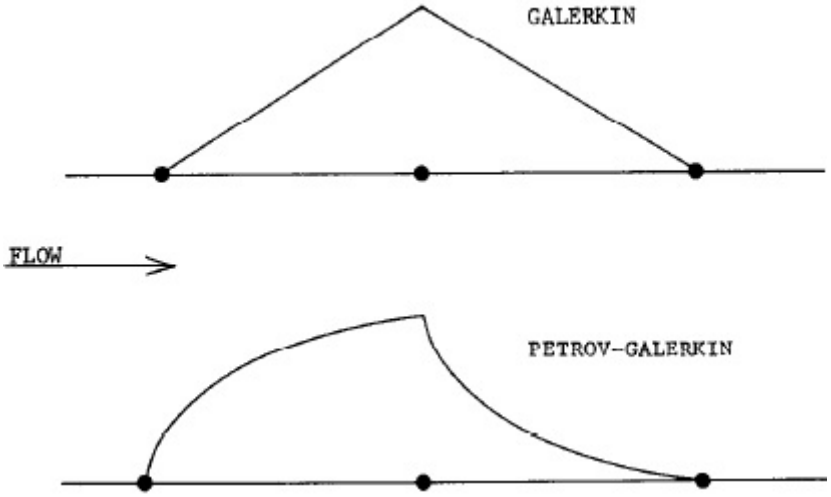


FIGURE 3.6 – Comparaison entre la fonction test linéaire et celle utilisée pour SUPG (Brooks et Hughes, 1982)

$$\phi(t+dt)\phi^* + \phi(t+dt)\tau\vec{v}\nabla\phi^* + v.\nabla\phi dt\phi^* + v.\nabla\phi dt\tau\vec{v}\nabla\phi^* = \phi(t)\phi^* + \phi(t)\tau\vec{v}\nabla\phi^* \quad (3.19)$$

$$\int_\Omega \phi(t+dt)\phi^* dV + \int_\Omega \phi(t+dt)\tau\vec{v}\nabla\phi^* dV + \int_\Omega v.\nabla\phi dt\phi^* dV + \int_\Omega v.\nabla\phi dt\tau\vec{v}\nabla\phi^* dV =$$

$$\int_\Omega \phi(t)\phi^* dV + \int_\Omega \phi(t)\tau\vec{v}\nabla\phi^* dV \quad (3.20)$$

Comme l'indiquent Hughes et Mallet (1986), le facteur τ correspond dimensionnellement à un temps. Dans les équations de transport dominées par la convection, comme la level set ou l'équation thermique, ce temps correspond idéalement au transport de l'information sur une distance égale à une demi-taille de maille. Avoir une valeur de τ inférieure peut conduire à observer des oscillations numériques et une valeur supérieure conduirait à accentuer la diffusion. Le facteur τ couramment utilisé dans le cas d'équations majoritairement convectives est :

$$\tau = \frac{h}{2 \mid \vec{v} \mid} \quad (3.21)$$

La vitesse de transport de notre équation étant hétérogène, dans notre domaine de calcul, il convient donc de calculer pour chaque élément une valeur de τ. En réalisant à nouveau le test de Zalesak sur un maillage créé avec une taille de maille de h =1 mm, en calculant le facteur τ grâce à l'équation (3.21), nous obtenons un résultat peu satisfaisant (Figure 3.7). Afin d'évaluer l'impact de la stabilisation SUPG sur le transport de cette équation, nous allons comparer la différence de domaines entre la forme initiale et la forme finale. Pour ce faire, nous allons calculer la norme L2 pondérée avec la formule suivante.

$$||X||_{L2} = \frac{\sum_{i=1}^{nb-element} \sqrt{X_i^2 dS_i}}{\sum_{i=1}^{nb-element} \sqrt{LS_{init}^2 dS_i}} \quad (3.22)$$

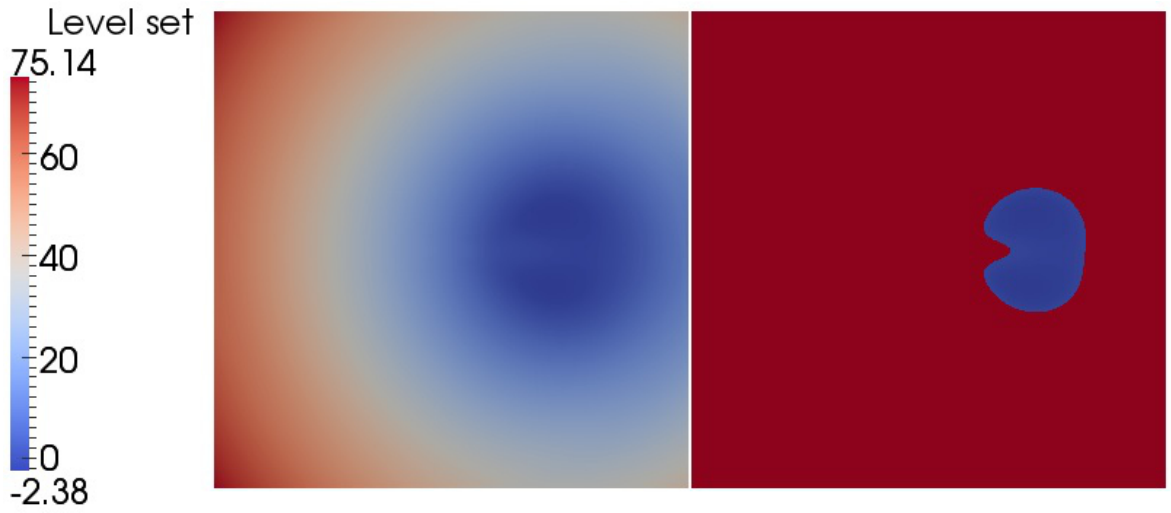


FIGURE 3.7 – Test de Zalesak stabilisé SUPG et taille de maille de 1 mm, forme finale après une rotation

avec $X_i = LS_f - LS_{init}$ et LS_f, la level set finale, soit après une rotation et LS_{init} la level set à l'instant initial, i, le numéro de l'élément et S_i la surface de cet élément. Dans le cas présent, l'équation de transport est codée de manière implicite, ce qui se traduit par une forme finale plus proche du centre que la forme initiale. Nous recentrerons la forme finale sur la forme initiale avant de calculer la norme L2. Le calcul de la norme L2 dans le cas du transport sans stabilisation SUPG est de 0,0520 alors que dans le cas du transport avec la stabilisation SUPG, elle est de 0,0539. Ceci s'explique par le fait que l'on voit sur la Figure 3.7 que la forme arrondie est plutôt devenu ovoïde. Tezduyar et Park (1986) calculent le facteur τ en prenant en compte la taille de maille dans le sens de l'écoulement. La taille de maille dans le sens de l'écoulement peut être déterminée comme suit :

$$h = \frac{2}{\sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} . \vec{\nabla \phi_i} \right|} \tag{3.23}$$

Afin de valider cette méthode, nous réalisons un nouveau test de Zalesak en ayant calculé le facteur τ grâce aux équations (3.21) et (3.23). L'on observe déjà sur la Figure 3.8 que la forme finale ressemble déjà beaucoup plus à la forme initiale. Nous recalculons la norme L2 grâce à l'équation (3.22) et nous obtenons un résultat de 0,0443 ce qui est 15% inférieur à la norme L2 calculée sans stabilisation SUPG. Cette méthode donnant de meilleurs résultats, nous utiliserons la stabilisation SUPG en déterminant ainsi le facteur τ par la suite.

3.2.2.1.3 Tests de remplissage

Nous réalisons donc un test de remplissage d'un co-malaxeur en utilisant la Level-set toujours en négligeant les oscillations de la vis ainsi que les doigts de malaxage. Comme nous le voyons sur la Figure 3.9, au niveau des recirculations de polymère au travers des interruptions de filets et au fil de l'écoulement, de la diffusion et des champs de vitesses singuliers au niveau des angles de filets peuvent amener à des gradients susceptibles de

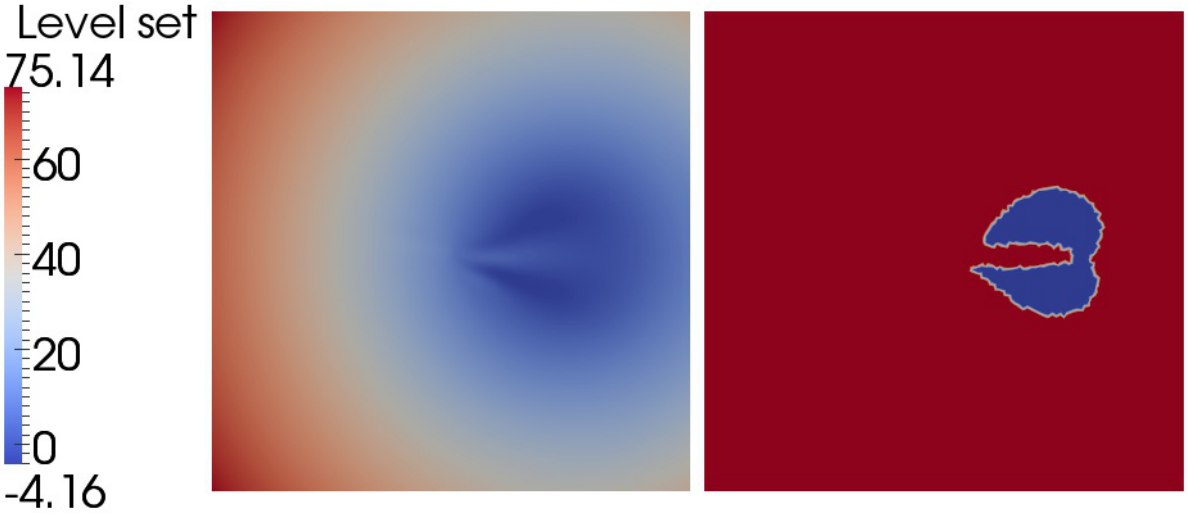


FIGURE 3.8 – Test de Zalesak stabilisé SUPG et taille de maille calculée à chaque élément, forme finale après une rotation

fausser les résultats et conduire à des instabilités, puisqu'il apparait localement de très forts gradients.

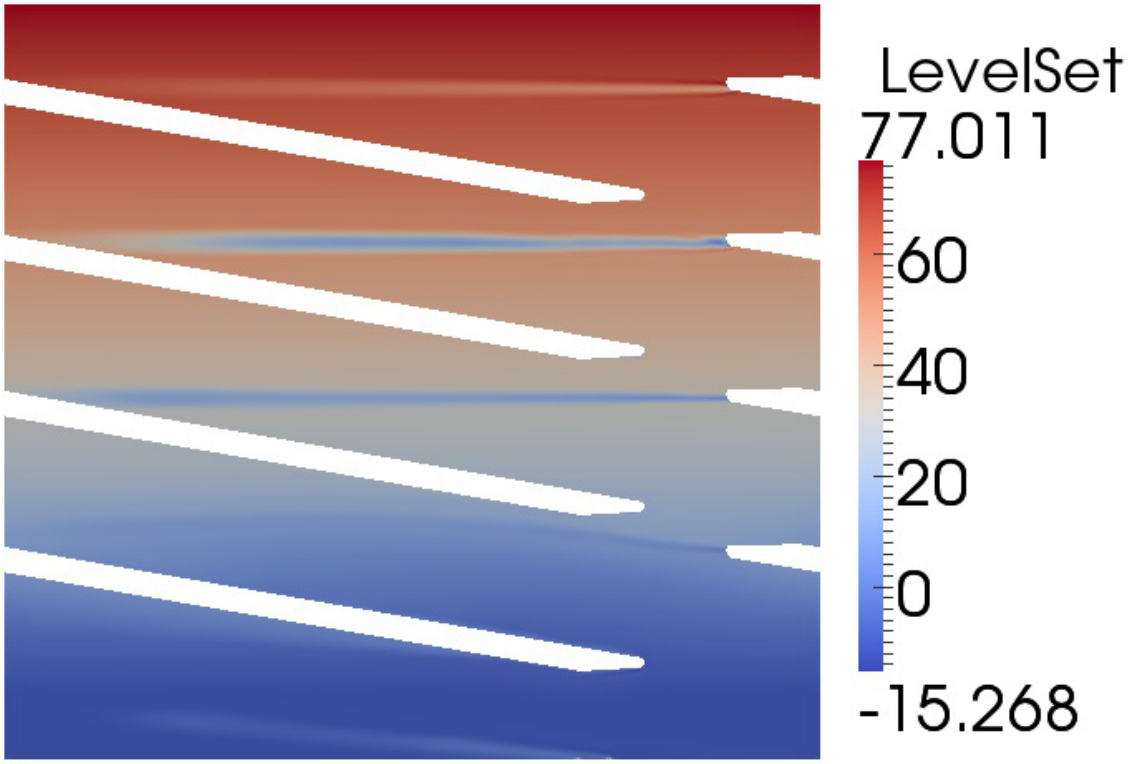


FIGURE 3.9 – Gradient sur la level set

Chopp (1993) propose de réinitialiser la fonction distance lorsque celle-ci est trop dégradée.

3.2.3 Redistanciation de l'interface

La méthode que nous allons utiliser pour la réinitialisation de l'interface est la technique développée par Sussman *et al.* (1994) qui proposent de réinitialiser l'interface en

résolvant l'équation :

$$\phi_t + sgn(\phi_0)(\mid \nabla\phi \mid -1) = 0 \tag{3.24}$$

avec la fonction signe, sgn, définie comme suit

$$sgn(x) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + (\delta x)^2}} \tag{3.25}$$

avec δx un lissage de la fonction sur une distance égale à 2 à 3 fois la taille maille moyenne. La fonction signe vaut donc 0 sur l'interface, est négative dans le fluide et positive dans l'air. Il est possible de réécrire l'équation de redistanciation comme l'équation de transport suivante :

$$\phi_t + \vec{v_\phi}(\nabla\phi) = sgn(\phi_0) \tag{3.26}$$

avec

$$\vec{v_\phi} = sgn(\phi_0)\frac{\nabla\phi_0}{\mid \nabla\phi_0 \mid} \tag{3.27}$$

La redistanciation rétablit un gradient de 1 pour la fonction à transporter et donc règle les problèmes de forts gradients. Néanmoins, les gradients apparaissant au niveau des angles de filet et possiblement "loin" de l'interface lorsque l'on part d'un co-malaxeur vide, la redistanciation sur l'intégralité du domaine nécessite beaucoup de ressources. De plus, dans le cas du co-malaxeur, la vis oscillante complexifie les conditions aux limites en sortie, car, au cours de la rotation, la vitesse peut être entrante au niveau de la sortie du domaine. Une méthode consiste donc à filtrer la level set par une fonction qui tend, à courte distance, vers une asymptote (El Kosseifi, 2012).

3.2.4 Filtrer la fonction level set

Filtrer la level set permet de simplifier les conditions aux limites et d'éliminer les gradients loin de l'interface. La nouvelle fonction distance proposée est :

$$\phi = \alpha tanh\left(\frac{\phi}{\alpha}\right) \tag{3.28}$$

avec, α, la distance à partir de laquelle l'on veut filtrer la level set. L'équation de transport de la level set ne varie pas, mais l'équation de redistanciation à mettre en place est légèrement modifiée puisque le gradient à obtenir n'est plus de 1 dans tout le domaine mais la dérivée de la fonction tanh. Ceci conduit donc à obtenir des gradients quasi nuls loin de l'interface. Maintenant que la level set filtrée est mise en place, nous allons à nouveau réaliser un test de remplissage du co-malaxeur.

Comme on peut le voir sur la Figure 3.10, les résultats sont plus satisfaisants. L'interface est mieux décrite et les problèmes précédents ont disparu. Ce test a été réalisé sans les oscillations de la vis du co-malaxeur. Le taux de remplissage étant logiquement plus ou moins stable au cours d'une rotation, le calculer à chaque pas de temps alourdirait le calcul pour peu d'informations supplémentaires.

Nous venons d'évaluer deux principales méthodes pour le transport d'une équation, ici l'équation d'écrivant le remplissage puisque c'est une équation sans terme source. La

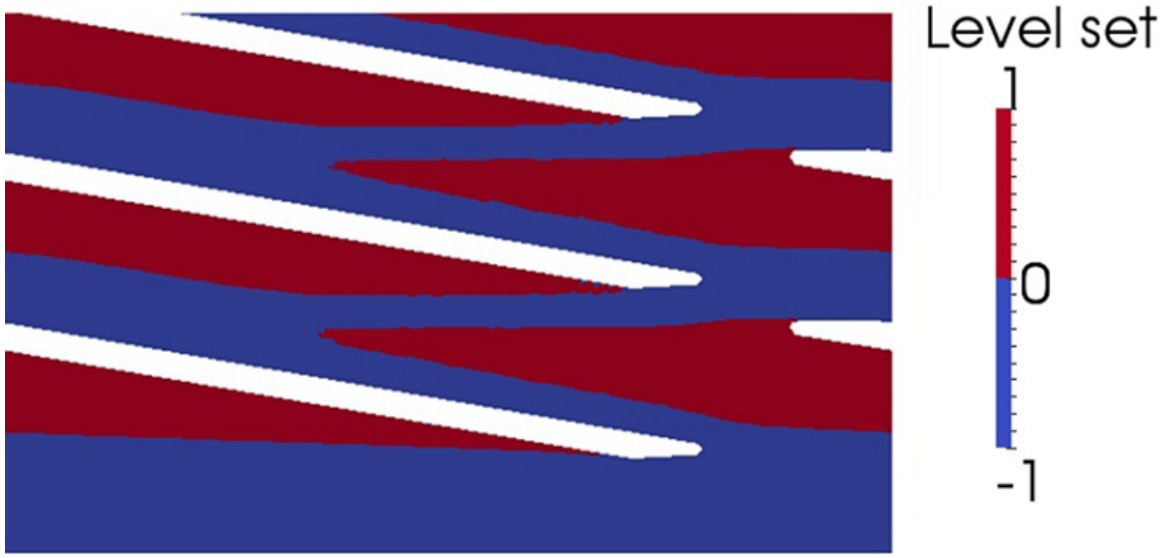


FIGURE 3.10 – Test de remplissage d'élément de transport pour un débit de $5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ et une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

solution retenue pour les volumes finis est un transport de l'équation avec un seuillage régulier afin de limiter la diffusion. Cette solution est admissible pour l'évaluation du remplissage du co-malaxeur, mais pour le transport des températures ou des indices de mélange, le seuillage détruirait l'information. La méthode développée par éléments finis avec stabilisation SUPG conduit à limiter la diffusion comme le montre le test de Zalesak. Bien que le remplissage du co-malaxeur ait nécessité une filtrage et une réinitialisation de la fonction distance, nous retiendrons pour le transport de la température et des indices de mélange les éléments finis stabilisés par SUPG.

3.3 Implémentation numérique du modèle thermique

Maintenant que nous avons implémenté une équation de transport et résolu les problèmes numériques qui pouvaient en découler, nous allons intégrer à notre code la thermique en la stabilisant avec SUPG comme vu précédemment. Notre modèle mécanique précédent nous fournit des vitesses aux éléments, en P0 et le transport sera effectué avec ces vitesses.

3.3.1 Formulation faible de l'équation de la thermique

L'équation de la thermique retenue a été explicité précédemment (eq. (3.5)). Le problème a résoudre est donc le suivant :

$$\begin{cases} \rho c_p \left[\dfrac{\partial T}{\partial t} + v_x \dfrac{\partial T}{\partial x} + v_z \dfrac{\partial T}{\partial z}\right] = k\Delta T + \eta\dot{\gamma}^2 & \text{dans } \Omega \\ T = T_{impose} & \text{sur } \partial\Omega \ = \ \partial\Omega_e \end{cases} \tag{3.29}$$

La formulation faible s'obtient en multipliant notre problème par la fonction test T^* :

$$\rho c_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_z \frac{\partial T}{\partial z}\right] T^* = k\Delta T T^* + \eta\dot{\gamma}^2 T^* \tag{3.30}$$

En discrétisant la dérivée temporelle de la température, nous obtenons :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T(t+dt) - T(t)}{dt} \tag{3.31}$$

Afin d'alléger l'écriture, dans la suite, nous noterons :

$$T(t+dt) = T^{+} \text{ et } T(t) = T^{t} \tag{3.32}$$

soit

$$\rho c_p \left[T^{+} + v_x \frac{\partial T^{+}}{\partial x} + v_z \frac{\partial T^{+}}{\partial z} \right] T^{*} = \rho c_p T^{t} T^{*} + k \Delta T T^{*} + \eta \dot{\gamma}^2 T^{*} \tag{3.33}$$

$$\int_{\Omega} \rho c_p \left[T^{+} + v_x \frac{\partial T^{+}}{\partial x} + v_z \frac{\partial T^{+}}{\partial z} \right] T^{*} d\Omega = \int_{\Omega} \rho c_p T^{t} T^{*} d\Omega + \int_{\Omega} k \Delta T T^{*} d\Omega + \int_{\Omega} \eta \dot{\gamma}^2 T^{*} d\Omega \tag{3.34}$$

En appliquant le théorème de Green, nous avons :

$$\int_{\Omega} k \Delta T T^{*} d\Omega = - \int_{\Omega} k \nabla T \nabla T^{*} d\Omega + \int_{\partial\Omega} k \nabla T T^{*} d\partial\Omega \tag{3.35}$$

d'où

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \rho c_p \left[T^{+} + v_x \frac{\partial T^{+}}{\partial x} + v_z \frac{\partial T^{+}}{\partial z} \right] T^{*} d\Omega = \int_{\Omega} \rho c_p T^{t} T^{*} d\Omega \\ &- \int_{\Omega} k \nabla T \nabla T^{*} d\Omega + \int_{\partial\Omega} k \nabla T T^{*} d\partial\Omega + \int_{\Omega} \eta \dot{\gamma}^2 T^{*} d\Omega \end{aligned} \tag{3.36}$$

Nous négligeons la conduction dans le polymère, mais nous prenons en compte les échanges au niveau des parois (de la vis et du fourreau) :

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \rho c_p \left[T^{+} + v_x \frac{\partial T^{+}}{\partial x} + v_z \frac{\partial T^{+}}{\partial z} \right] T^{*} d\Omega = \\ &\int_{\Omega} \rho c_p T^{t} d\Omega + \int_{\partial\Omega} h_t (T_{paroi} - T^{t}) T^{*} d\partial\Omega + \int_{\Omega} \eta \dot{\gamma}^2 T^{*} d\Omega \end{aligned} \tag{3.37}$$

Ceci est la formulation faible de l'équation de la thermique. Maintenant, en appliquant la limitation de la diffusion grâce à la méthode SUPG, il faut remplacer T^{*} par $T^{*} + \tau \vec{v} \nabla T^{*}$, la formulation faible devient donc

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \rho c_p \left[T^{+} + v_x \frac{\partial T^{+}}{\partial x} + v_z \frac{\partial T^{+}}{\partial z} \right] T^{*} d\Omega + \int_{\Omega} \rho c_p \left[T^{+} + v_x \frac{\partial T^{+}}{\partial x} + v_z \frac{\partial T^{+}}{\partial z} \right] \tau \vec{v} \nabla T^{*} d\Omega = \\ &\int_{\Omega} \rho c_p T^{t} T^{*} d\Omega + \int_{\Omega} \rho c_p T^{t} \tau \vec{v} \nabla T^{*} d\Omega + \int_{\partial\Omega} h_t (T_{paroi} - T^{t}) T^{*} d\partial\Omega \\ &+ \int_{\partial\Omega} h_t (T_{paroi} - T^{t}) \tau \vec{v} \nabla T^{*} d\partial\Omega + \int_{\Omega} \eta \dot{\gamma}^2 T^{*} d\Omega + \int_{\Omega} \eta \dot{\gamma}^2 \tau \vec{v} \nabla T^{*} d\Omega \end{aligned} \tag{3.38}$$

3.3.2 Conditions aux limites

Dans notre système, comme condition aux limites nous avons la température imposée en entrée mais également les échanges avec les parois qui régulent la température. Les échanges polymères - filets de vis sont négligés comme indiqué précédemment.

3.3.2.1 Température imposée en entrée

La condition aux limites imposée est une condition de Dirichlet qui consiste à imposer la température en entrée de notre système. Nous imposons la même température sur toute l'entrée du domaine.

3.3.2.2 Transfert thermique aux parois

Le transfert thermique aux parois, s'effectue grâce à la prise en compte dans la formulation faible de l'équation (3.3) d'un terme source.

3.3.3 Organigramme du code - Couplage thermo-mécanique

L'organigramme du code s'en trouve légèrement modifié. En effet, nous effectuons le calcul thermique à la suite du calcul mécanique et recalculons la viscosité avec la nouvelle température (Figure 3.11). La phase d'initialisation de température étant relativement chronophage, afin d'initialiser plus rapidement la température, nous nous plaçons dans le cas où la vitesse axiale d'oscillation est nulle, ce qui correspond à la vitesse axiale moyenne sur une oscillation, et nous effectuons un calcul mécanique puis une dizaine de calculs thermiques puis de nouveau un calcul mécanique et ainsi de suite, jusqu'à avoir convergé sur la température.

3.3.4 Validation du modèle thermique

Afin de valider le modèle, nous avons réalisé un écoulement entre plaques parallèles, celui déjà réalisé pour la validation du code mécanique (§2.4.1), à savoir un écoulement de Poiseuille entre deux plaques parallèles. Le débit imposé en entrée est de $30\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ soit, pour une densité de $900\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$, un débit volumique de $9259\,\mathrm{mm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$, la viscosité du polymère est de $1000\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$, la largeur du chenal de 80 mm, la hauteur de 5 mm et la longueur de 750 mm. Pour cet écoulement, nous négligeons les échanges thermiques aux parois, ce qui nous permet de relier l'élévation de température à la différence de pression et nous imposons 180 °C en entrée. L'élévation de température entre l'entrée et la sortie doit, théoriquement, être de 4,64 °C. Sur la simulation, la différence est de 4,65 °C (Figure 3.12). Nous considérons donc notre modèle thermique comme validé.

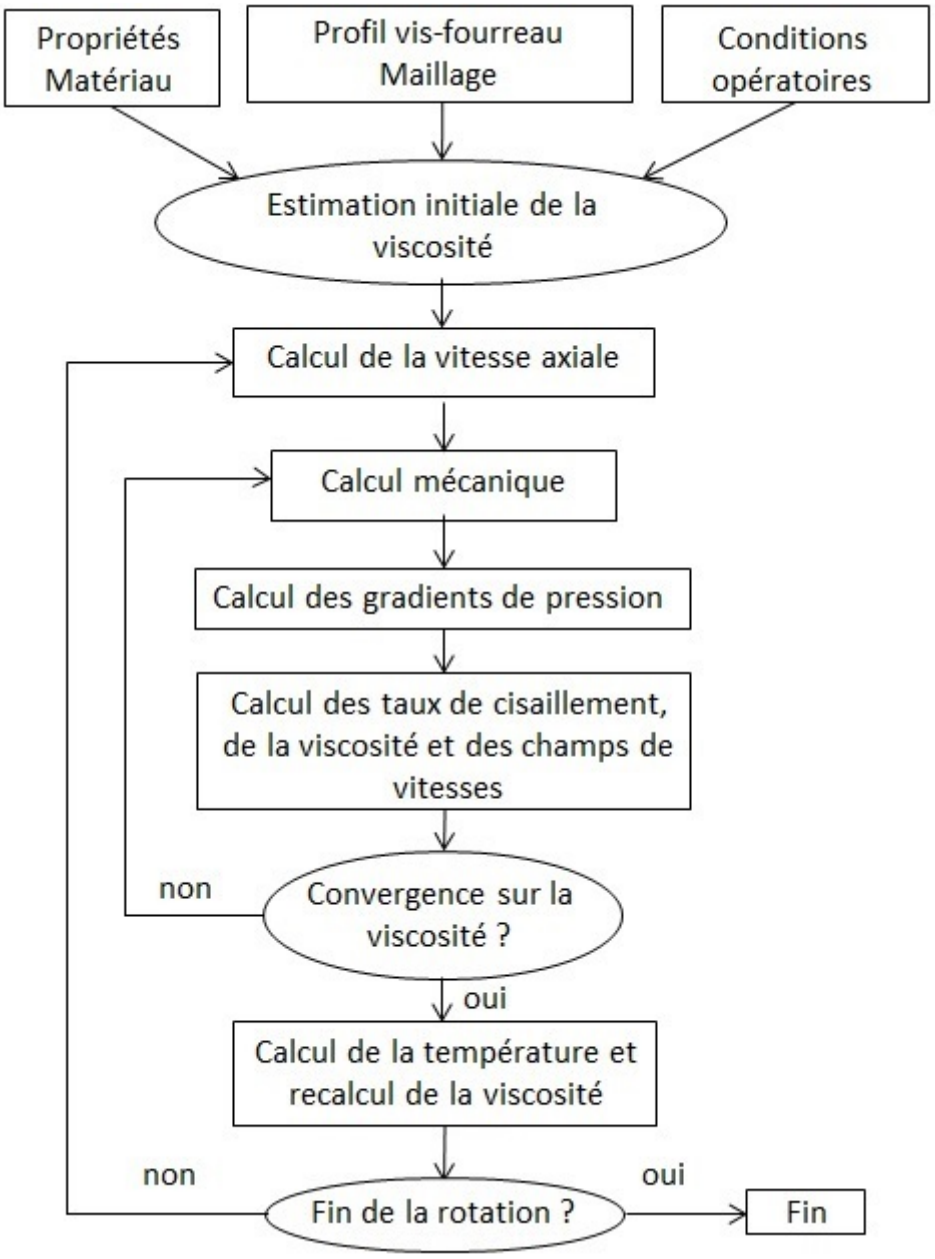


FIGURE 3.11 – Organigramme du solveur thermo-mécanique

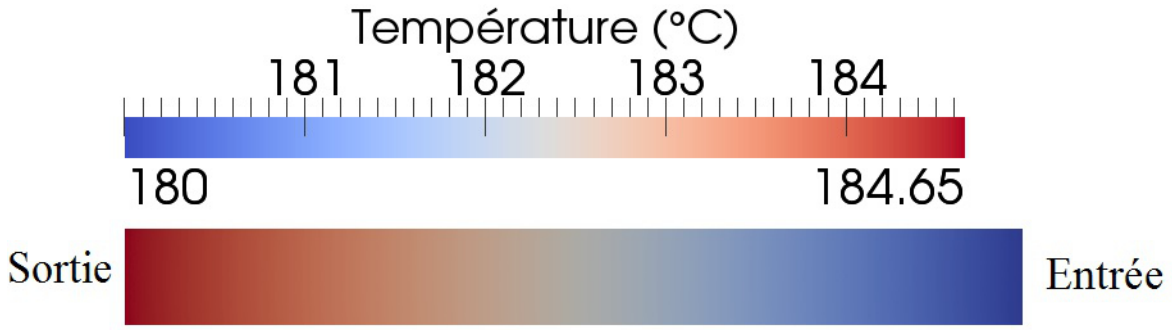


FIGURE 3.12 – Test de validation thermique

3.3.5 Exemple de résultats

La thermique étant fonctionnelle, nous allons maintenant étudier l'impact des oscillations sur les profils de température ainsi que le fait de négliger le sous-remplissage.

Nous avons réalisé sur le profil de référence (Figure 2.18) un calcul thermique en imposant en entrée une température de 180 °C, un débit de $11\,\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ et une vitesse de rotation de $450\,\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$. Les échanges aux parois avec la vis sont négligés, les parois du fourreau sont régulées à 180 °C et le coefficient de transfert thermique choisi est de $2000\,\mathrm{W \cdot m^2 \cdot K}$. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 3.13, il y a un fort auto-échauffement au niveau des éléments de transport et un échauffement de quelques degrés au niveau de la bague de restriction. L'échauffement au niveau de la bague de restriction est observé expérimentalement mais pas celui au niveau des éléments de transports. Ceci est dû au fait que le modèle mécanique ne prenant pas en compte le sous-remplissage, de forts gradients de pression sont présents dans les éléments de transports et induisent donc une forte dissipation visqueuse.

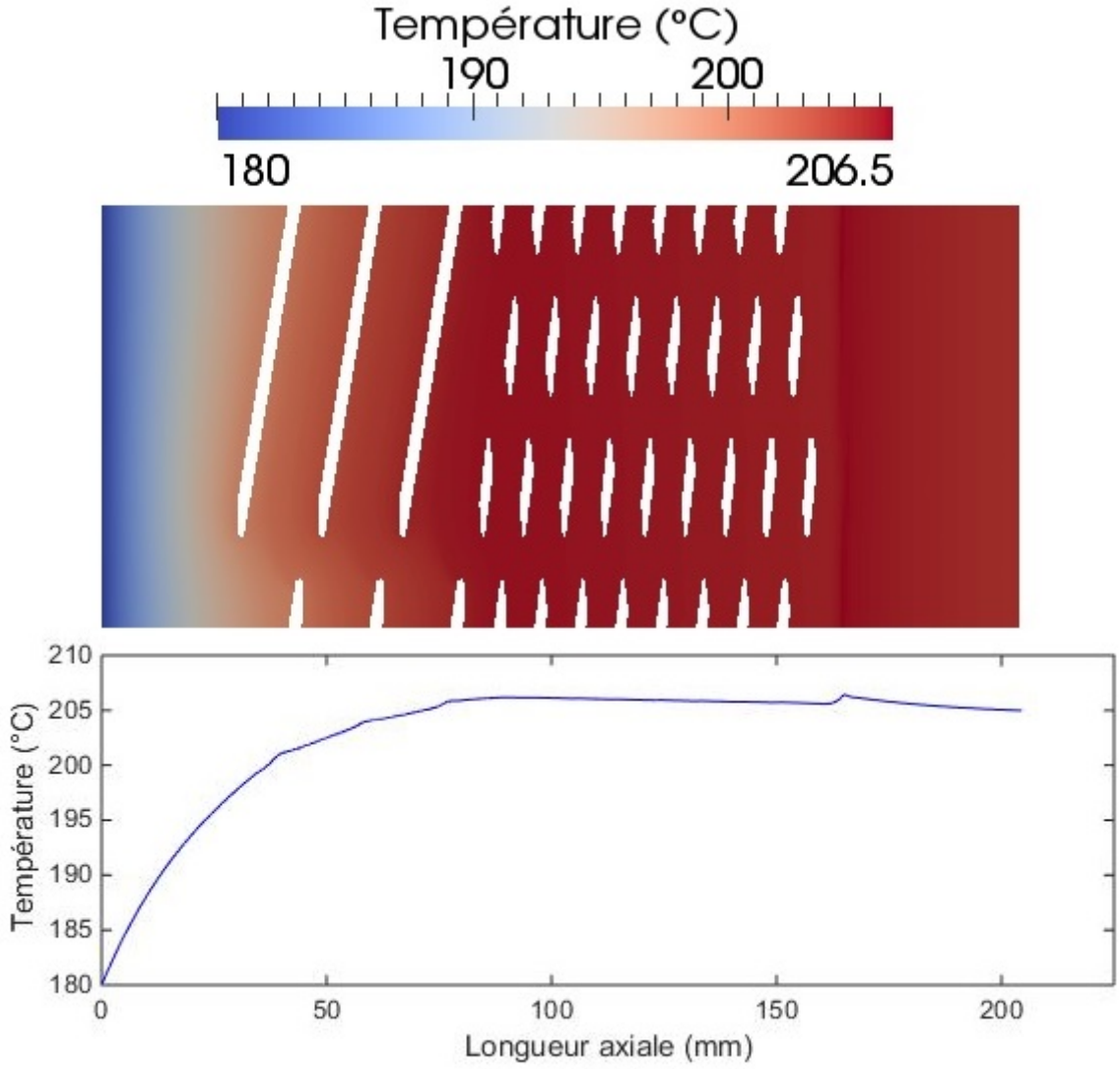


FIGURE 3.13 – Carte et profil de température simulée sur le profil de référence

Nous observons maintenant l'impact des oscillations de la vis sur le profil de tempé-

ratures. Pour ce faire, nous reprenons le profil et les conditions opératoires ci-dessus et appliquons une oscillation de vis. Nous relevons les profils de température pour deux positions de vis opposées au cours d'une oscillation (90° et 270°) qui représentent les phases de vitesses maximales pour le recul et l'avancée de la vis. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 3.14, l'écart de température entre le moment où la vis avance et le moment où la vis recule est infime. Par la suite, nous présenterons uniquement un seul profil de

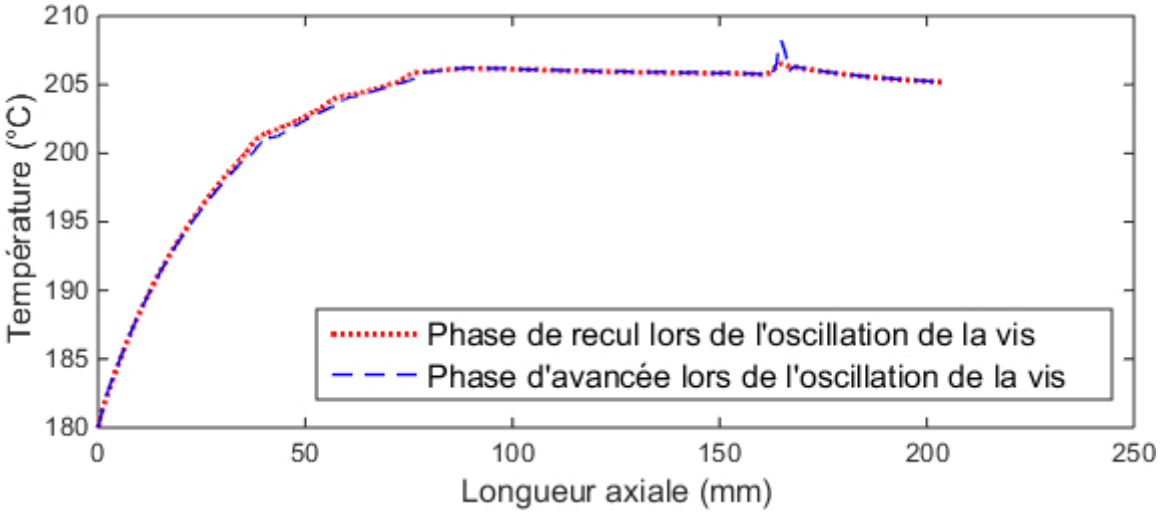


FIGURE 3.14 – Profil de température au cours d'une oscillation sur le profil de référence

température au cours d'une oscillation, celui correspondant à une vitesse axiale nulle, vitesse qui correspond à la moyenne de la vitesse axiale sur une oscillation.

Maintenant que notre modèle thermo-mécanique est développé et qu'il gère de manière satisfaisante les équations de transport, nous allons estimer les capacités de mélange du co-malaxeur. En effet, les co-malaxeurs sont principalement utilisés pour disperser des charges dans un matrice polymère. Il est donc nécessaire d'étudier les indices de mélange.

3.4 Suivi de déformation

Différentes méthodes pour quantifier le mélange existent, comme l'étude de la puissance dissipée ou les DTS. D'autres méthodes alternatives existent comme nous l'avons vu dans le chapitre bibliographique. Une méthode pour suivre les déformations dans le domaine consiste à initialiser l'ensemble du domaine de calcul avec différentes valeurs (appelé sur les figures suivantes "Indice"), typiquement le champ de coordonnées initiales des points du domaine, de manière à obtenir une grille en deux dimensions et obtenir les déformations après transport de cette grille avec les champs de vitesses obtenus précédemment. Dans notre cas, la condition de continuité droite-gauche de notre domaine compliquent le suivi des déformations d'une grille puisqu'il y a continuité de l'angle mais avec modulo 2π. Nous n'effectuerons qu'un marquage horizontal sur notre domaine, (Figure 3.15).
Cette grille est transportée avec la même équation que la level set en fonction des données mécaniques obtenues précédemment. Les profils de vitesses ont été obtenus sur le profil ci-

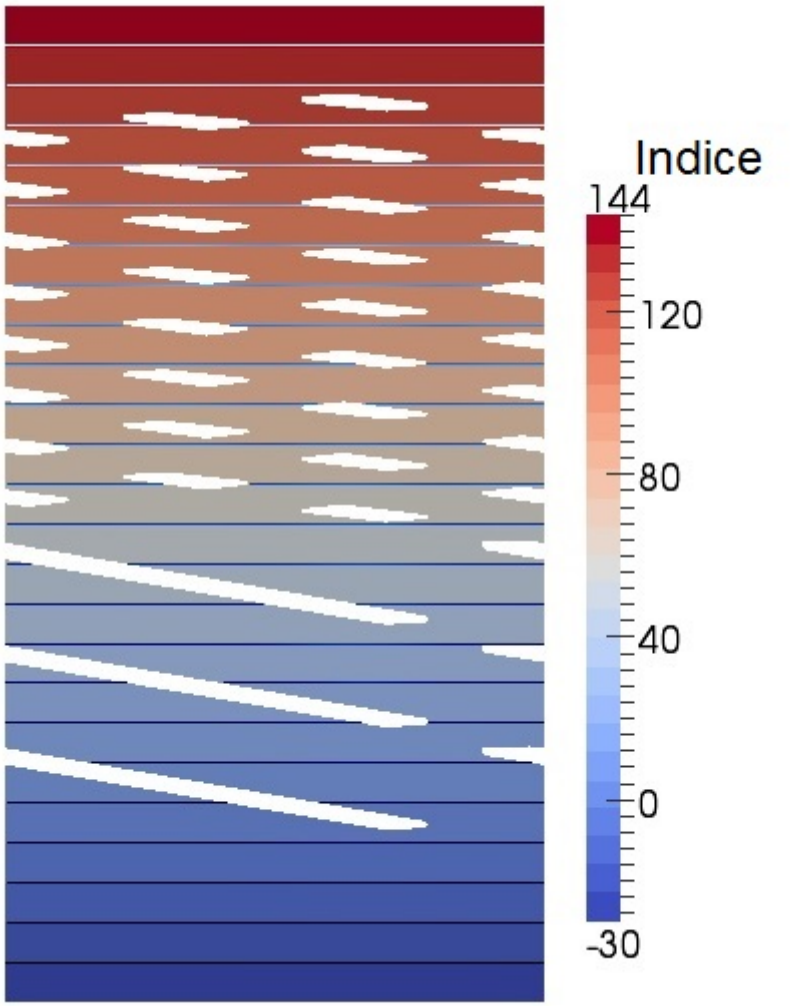


FIGURE 3.15 – Exemple de grille initialisée sur le profil de référence du co-malaxeur

dessus, avec un débit moyen de $12\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ pour une vitesse de rotation de $500\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$. La taille de maille du maillage est de 0,5 mm. Après avoir transporté le champ de coordonnées axiales, ceci nous permet d'estimer les mélanges qui ont eu lieu dans le domaine en calculant la déformation de la grille par rapport à une grille qui serait translatée dans la direction de l'écoulement, ce qui serait la solution obtenue en l'absence d'interruption de filets par transport via un champ uniforme. Le résultat final est visible Figure 3.16.
Afin d'estimer les indices de mélange, nous comparons grâce à la formule suivante, la solution finale obtenue après écoulement, I_{final}, et la solution telle qu'elle aurait été si elle avait été transportée uniformément, I_{mono}. L'indice de mélange est calculé avec la formule suivante, basée sur une norme L2.

$$X = \sum_{i=1}^{nb\ element} \sqrt{\int_S (I_{final} - I_{mono})^2 dS_i} \tag{3.39}$$

avec dS_i, la surface de l'élément. Afin d'obtenir une évolution de cette valeur au cours de l'avancée dans ce profil, nous découpons le profil en 17 tranches d'environ 10 mm et nous effectuons ce calcul pour chaque tranche. Le résultat est reporté Figure 3.17.

Comme nous pouvions le voir sur la Figure 3.17, au fil des oscillations et du temps qui s'écoule l'indice de mélange dans le co-malaxeur augmente. On note que celui-ci sature

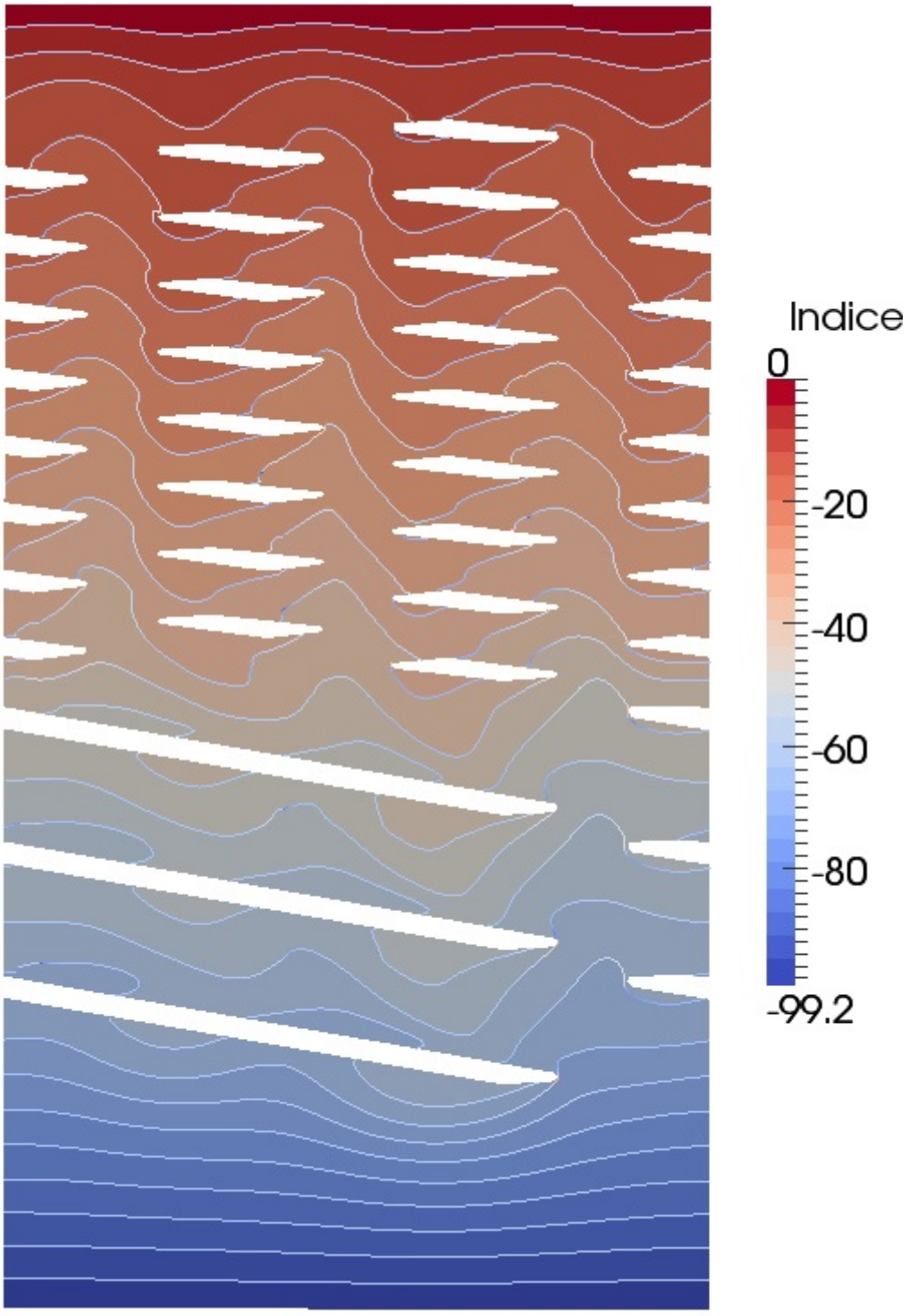


FIGURE 3.16 – Grille déformée par l'écoulement sur le profil de référence du co-malaxeur

après 66 oscillations, ce qui peut vouloir dire que soit l'équilibre est atteint, soit que la précision numérique est atteinte et que l'on n'arrive plus à percevoir le mélange. En zoomant sur un filet de vis et en regardant attentivement, nous pouvons apercevoir que l'on perd de l'information. En effet une zone "rouge foncée", qui passe sous le filet de vis disparait au fil de l'écoulement (Figure 3.18)

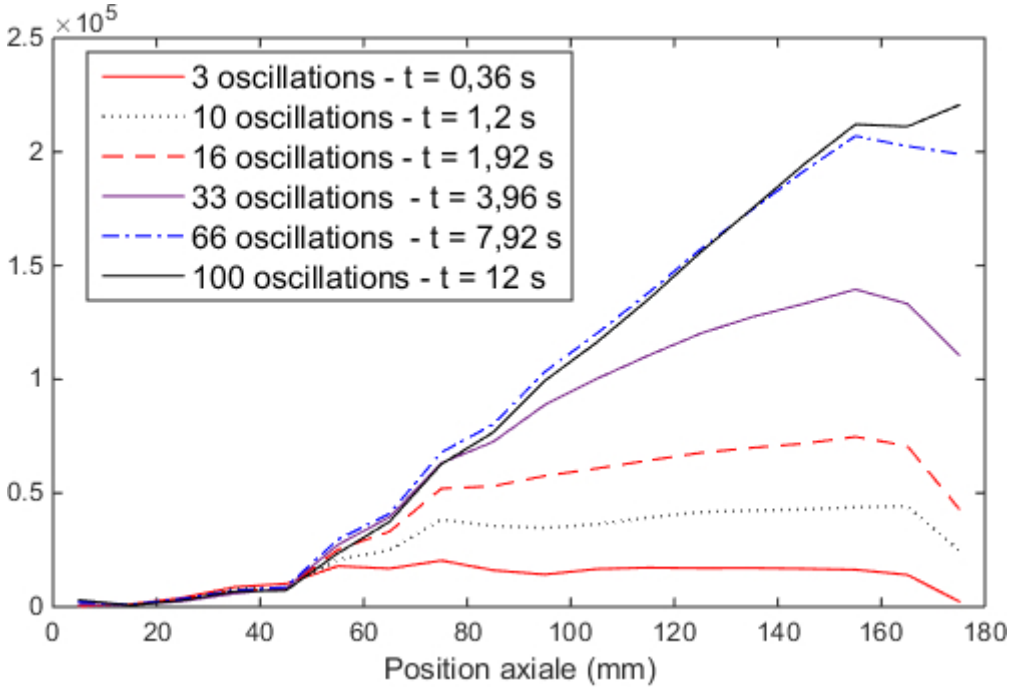


FIGURE 3.17 – Indice de mélange le long du profil du co-malaxeur pour différents temps d'écoulement

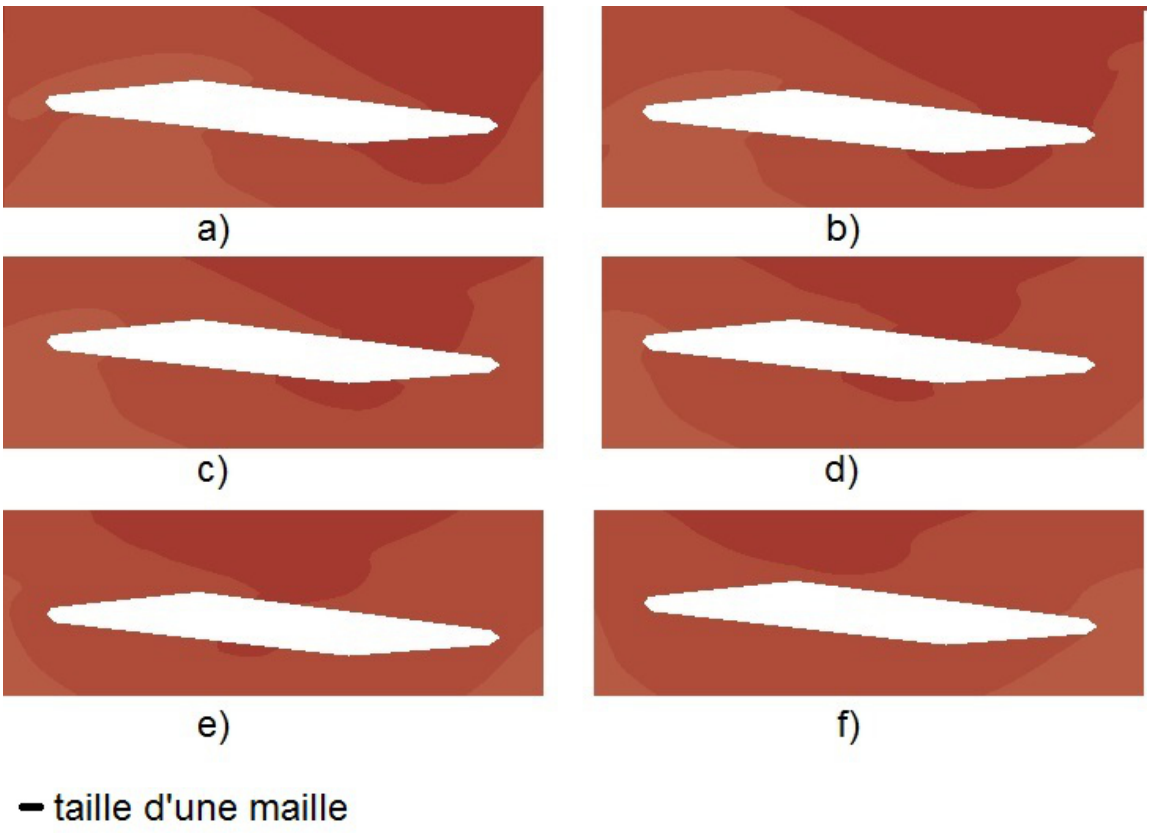


FIGURE 3.18 – Différents snapshots au cours du temps espacé chacun de 4 ms

Afin de ne plus perdre d'informations, la perte pouvant résulter de la diffusion numérique, il faudrait raffiner davantage le maillage afin de garder l'information lors des repliements ou lors de la présence de forts gradients tels que sur la Figure 3.18.
En estimant qu'à chaque interruption de filet, le polymère est distribué dans le chenal n et le chenal $n-1$, il est possible d'estimer le nombre de séparations à partir du nombre total d'oscillations nécessaires pour que le polymère parcoure le profil considéré et le nombre de d'interruptions de filets. Dans notre cas, le nombre d'interruptions de filets est de 28, le temps de séjour moyen du polymère est de 22 s, soit 183 oscillations, le nombre de réorientations possibles est de 4026. Il faudrait donc raffiner 4026 fois les mailles vers la fin du profil afin de pouvoir capter tous les gradients de l'indice de mélange ! Ceci n'est pas possible pour des questions de coût de calcul. Une autre solution moins chronophage serait d'étudier les indices de mélange sur quelques éléments et par la suite convoluer le résultat afin d'obtenir des indices de mélanges sur le profil total.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé le modèle thermique qui joue un rôle important dans les écoulements de polymères mais également nous avons proposé des solutions pour la gestion du sous-remplissage. En effet, le co-malaxeur fonctionne en sous-remplissage et le prendre en compte est nécessaire au niveau du modèle mécanique afin d'obtenir des résultats pertinents au niveau des pressions et des températures. Nous avons également proposé une technique permettant de quantifier les mélanges. La prise en compte de la thermique et du sous-remplissage utilise des équations de transport. La gestion numérique de ces équations amène à des problèmes tels que de la diffusion numérique. Nous avons étudié ce problème et proposé des solutions pour le limiter. Ceci nous permet de proposer des profils de températures et des pistes pour gérer le sous-remplissage. Le calcul des indices de mélange n'est quant à lui pas assez précis actuellement pour permettre de quantifier correctement les mélanges.

Chapitre 4

Etude paramétrique du modèle et comparaison aux données expérimentales

Sommaire

4.1 Étude paramétrique 123

4.2 Comparaison avec les données expérimentales 128

4.2.1 Comparaison des températures 128

4.2.2 Comparaison des pressions et des longueurs de remplissage . . 137

4.2.3 Comparaison des taux de remplissage 140

Nous venons de voir en détail le modèle thermo-mécanique développé. Des données expérimentales issues des travaux de Monchatre (2015) sont disponibles. Elles ont été obtenues sur le co-malaxeur BUSS MK30 du projet. Du fait de sa petite taille, il n'était pas possible d'instrumenter en tout point le co-malaxeur. Les résultats disponibles sont des mesures de températures en certains points, des mesures de taux de remplissage ainsi que des pressions. Des DTS ont été également mesurées par Monchatre (2015) mais nous n'avons pas calculé numériquement de DTS pour quantifier les mélanges. Le couple ainsi que la puissance au niveau du moteur du co-malaxeur ont également été relevés. L'ensemble des essais de Monchatre (2015) l'ont été sur le profil présenté Figure 4.1.

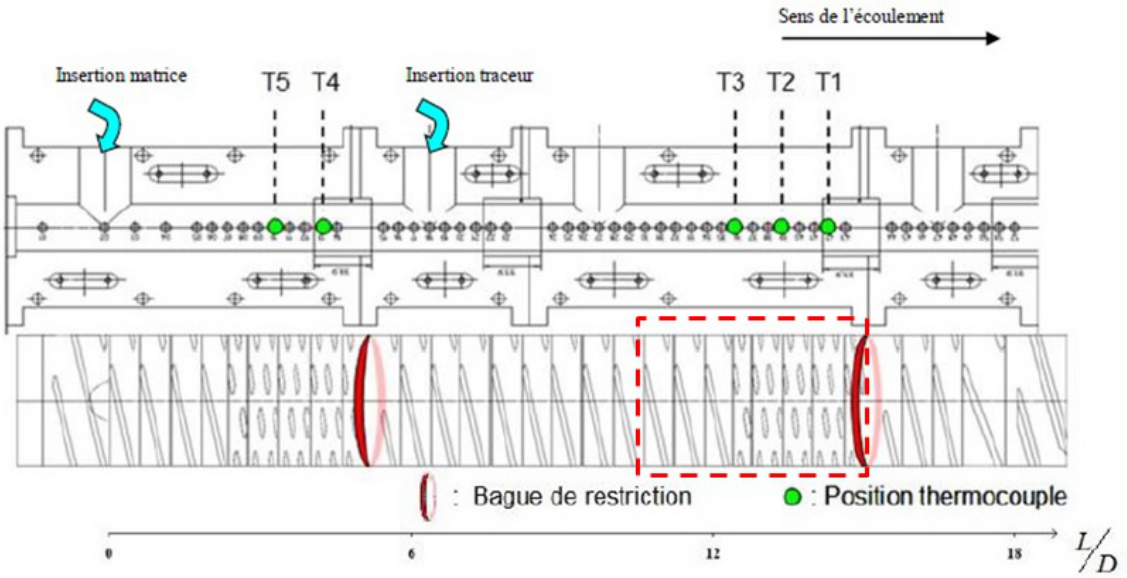


FIGURE 4.1 – Profil du co-malaxeur (Monchatre, 2015)

Dans le cas de notre modélisation, nous ne prenons pas en compte la zone de fusion du co-malaxeur. Nous considérons que cette zone de fusion se termine au niveau de la première bague de restriction. Les essais réalisés l'ont été pour les vitesses de rotation et débits suivants (Tableau 4.1)

Tableau 4.1 – Vitesses et débits expérimentaux utilisés par Monchatre (2015)

$250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$	$2{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
	$5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
	$7{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
$350\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$	$3{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
	$7\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
	$10{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
$450\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$	$4{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
	$9\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$
	$13{,}5\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$

Notre modèle thermo-mécanique ne gérant pas le sous-remplissage, nous ne pourrons pas comparer des grandeurs telles que les puissances dissipées et le couple mesuré au niveau

du moteur. Nous proposerons dans un premier temps une étude paramétrique afin de valider le bon fonctionnement du code et, par la suite, nous comparerons localement des résultats numériques à des mesures expérimentales.

4.1 Étude paramétrique

Afin de valider que le code répond correctement, nous effectuerons des simulations d'écoulement isothermes pour différentes vitesses de rotation à débit fixe (Figure 4.2) sur le profil de référence (Figure 2.18) encadré en rouge Figure 4.1. Les simulations sont effectuées en imposant une pression nulle en sortie et le débit en entrée. Comme nous l'avons relevé lors de leur mise en place, les doigts de malaxage n'apportent pas d'effets significatifs sur les débits et pressions (hormis très localement sur les pressions). Donc, afin d'alléger le calcul, nous négligerons les doigts de malaxage. Les calculs ont été réalisés en prenant en compte les oscillations de la vis. Néanmoins, ceci compliquant la manière de présenter les résultats, nous ne présenterons que les résultats obtenus pour une vitesse axiale nulle, ce qui représente la vitesse axiale moyenne sur une rotation.

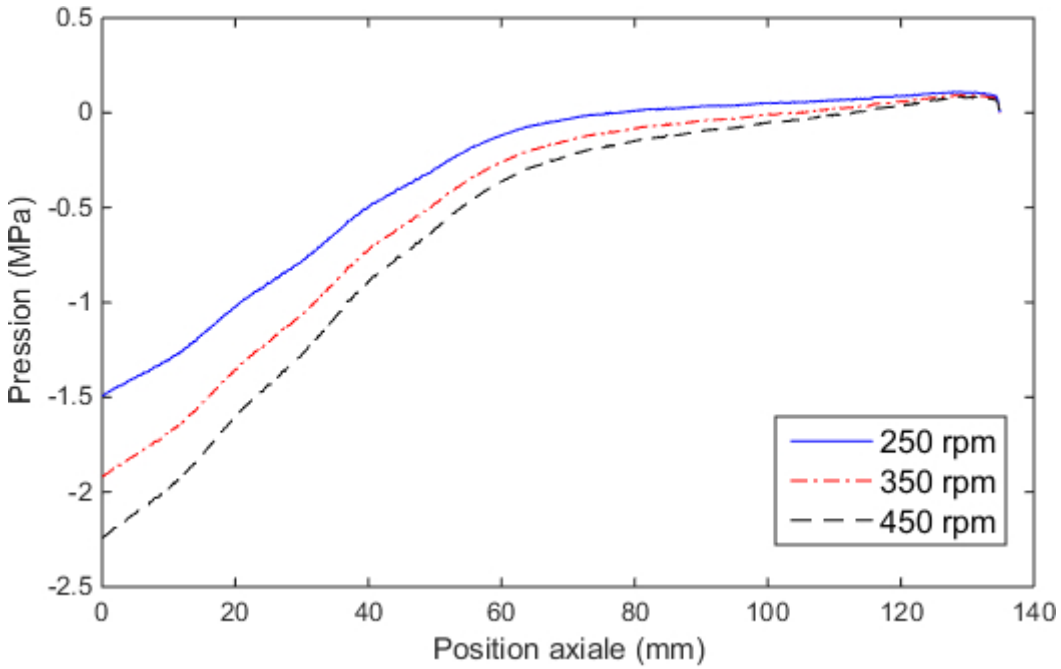


FIGURE 4.2 – Profils de pression obtenus pour différentes vitesses de rotation pour un débit de $7\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$

La mise en pression au niveau de la bague de restriction (à l'extrémité droite du graphique, pour une position axiale d'environ 135 mm) est faible puisque le débit est de seulement $7\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$. De ce fait, l'on voit sur la Figure 4.2 que la majeure partie des profils de pressions est négative. Lorsque la pression atteint 0, ceci signifie que c'est le point de transition entre une zone de vis remplie et une zone sous-remplie. Nous nous concentrerons sur la zone remplie, qui représente un calcul réaliste, et négligerons la zone sous-remplie.

La Figure 4.3, représente donc un zoom de la Figure 4.2 sur la zone où les pressions sont positives. L'on voit sur la Figure 4.3 que la pression maximale est quasi-identique pour

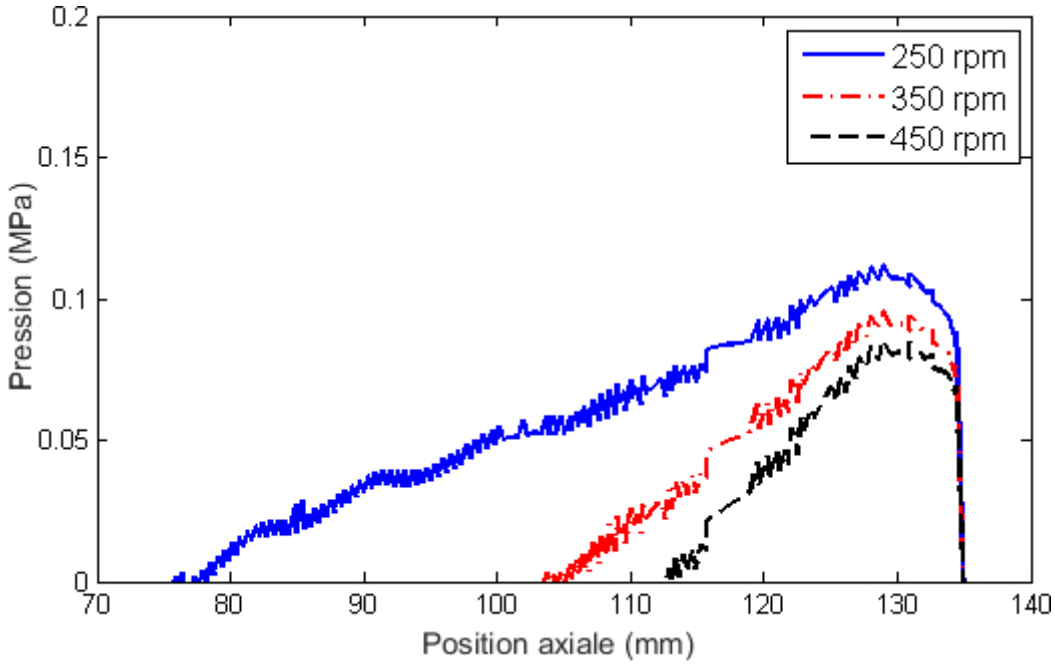


FIGURE 4.3 – Profils de pression obtenus pour différentes vitesses de rotation pour un débit de $7\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$

les 3 situations. La mise en pression au niveau de la bague de restriction l'est (0,07 MPa), mais la mise en pression qui se produit entre l'élément bague de restriction et l'élément de mélange diffère légèrement, entre 0,02 et 0,04 MPa. L'on note que les gradients de pression sont plus importants pour des vitesses plus importantes. Ceci est un résultat attendu. De même, l'on note que plus la vitesse de rotation est élevée, plus la longueur de remplissage est courte. Les longueurs de remplissage, donc entre la bague de restriction et la position axiale pour laquelle la pression devient nulle, sont de 60, 32 et 23 mm respectivement pour des vitesses de rotation de 250, 350 et $450\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$.

Nous avons réalisé le même test avec une vitesse de rotation fixée et différents débits (Figure 4.4).

Cette fois-ci, le débit variant, la mise en pression au niveau de la bague de restriction est différente. Comme précédemment, les pressions négatives ne reflètent pas la réalité, nous zoomons donc sur les zones où la presssion est supérieure à zéro, ce qui est présenté en Figure 4.5.

Au niveau de la bague de restriction, nous observons que plus le débit est important, plus la pression au niveau de la bague est importante, ce qui est un résultat attendu. L'on note également que, plus le débit de polymère est important, plus le gradient de pression dans les éléments de mélange est faible et donc plus les longueurs remplies sont importantes. Ceci est également un résultat attendu.

Nous allons également étudier l'influence de la température de régulation des parois sur les profils de pressions et de températures. Pour cela, les simulations sont maintenant anisothermes et ont été effectuées sur le profil de référence, pour un débit de $7\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$, une vitesse de rotation de $350\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ et un coefficient de transfert thermique de $2000\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{K}^{-1}$. La température d'entrée du polymère dans le domaine est

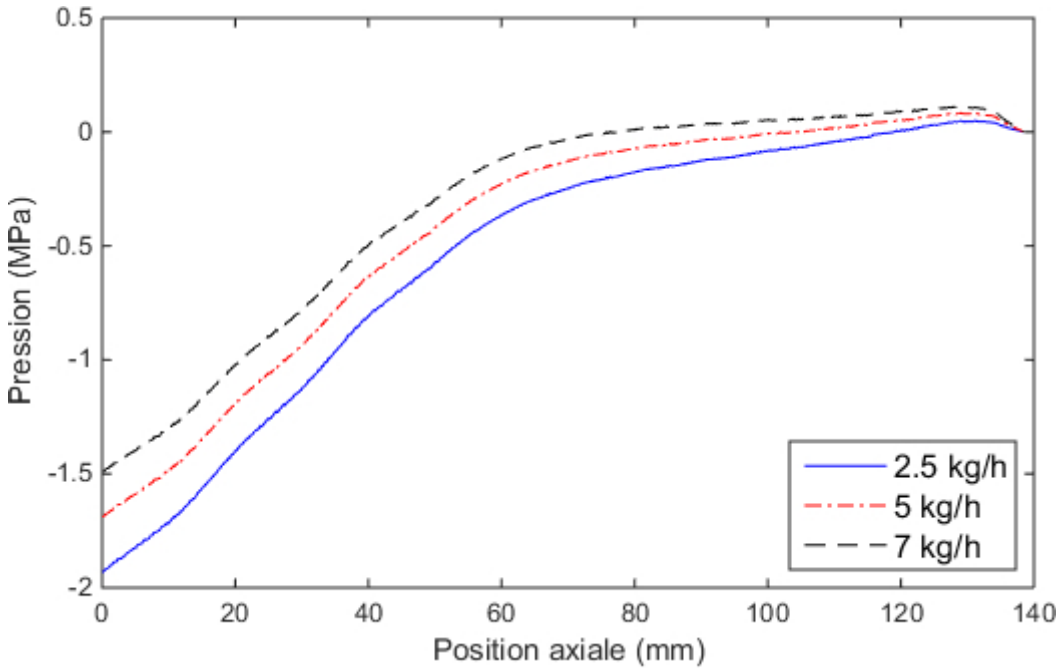


FIGURE 4.4 – Profil de pression obtenu pour différents débits et une vitesse de rotation de 250 tr · min^{-1}

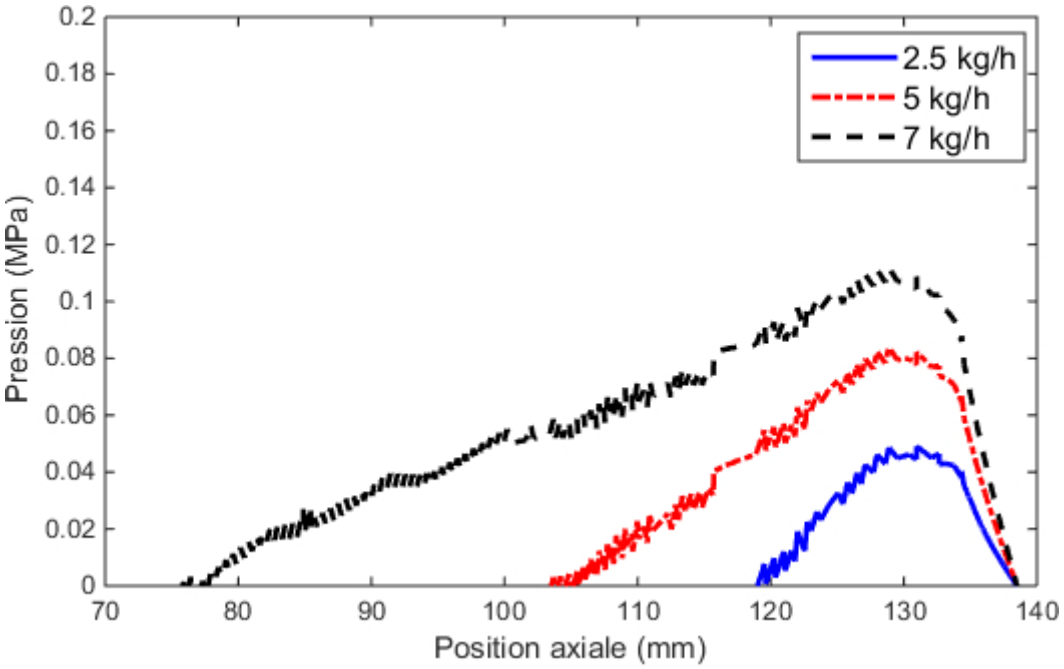


FIGURE 4.5 – Profil de pression obtenu pour différents débits et une vitesse de rotation de 250 tr · min^{-1}

de 180 °C. Les profils de pression et de températures sont présentés Figure 4.6 et 4.7.

Comme nous pouvons le voir, dans les premiers éléments, les éléments de transport, une forte contre-pression apparait et cette contre-pression induit un fort auto-échauffement. Cette forte contre-pression se produit dans une zone où la pression est négative et donc non réaliste puisque cette zone est normalement sous-remplie. L'élévation de température est donc non réaliste sur les profils thermiques. On note toutefois que la température du polymère dans les éléments de mélange et proche de la bague de restriction est stabilisée

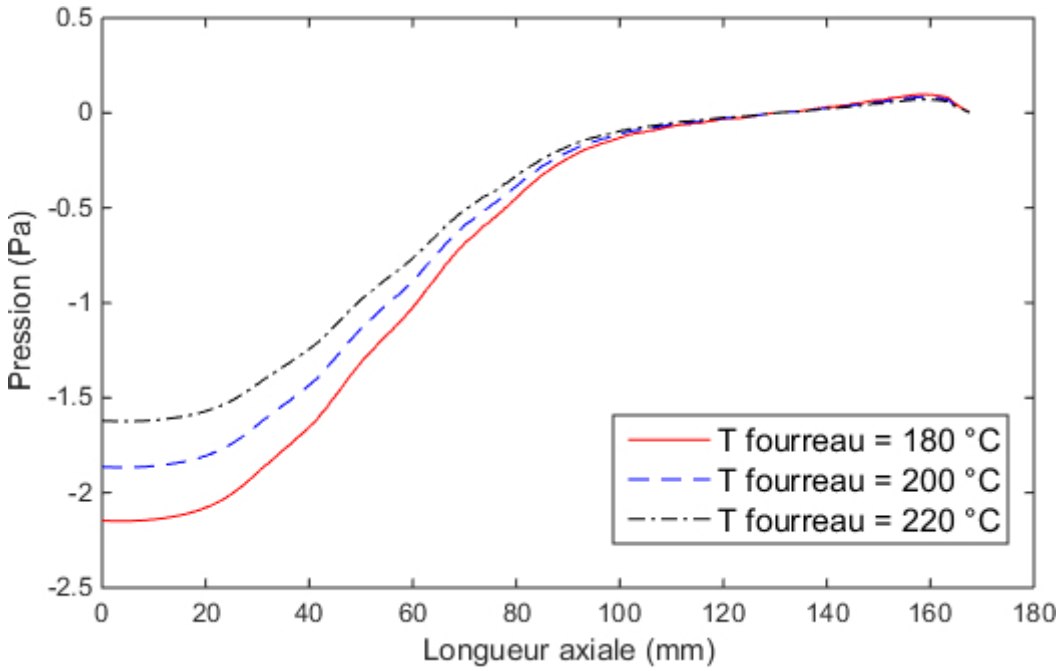


FIGURE 4.6 – Profil de pression obtenu pour différentes températures de régulation du fourreau

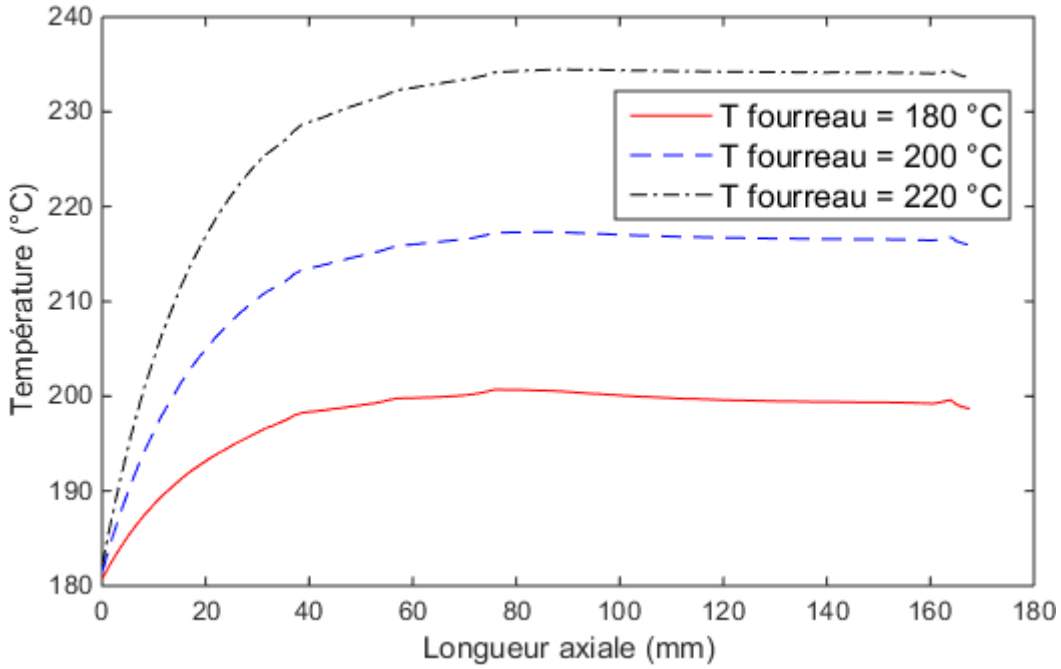


FIGURE 4.7 – Profil de températures obtenu pour différentes températures de régulation du fourreau

à des températures comprises entre 15 et 20 °C au-dessus de la température de régulation du fourreau. La régulation thermique du fourreau donne donc des résultats cohérents.

Nous allons étudier l'impact de la température sur l'écoulement. Pour cela, nous allons comparer deux simulations ; l'une prenant en compte la thermo-dépendance de la viscosité et l'autre sans prise en compte du couplage thermo-mécanique. Les deux simulations ont été réalisées pour un débit de $14{,}8\,\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$, une vitesse de rotation de $300\,\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et une pression imposée nulle en sortie. La température de régulation au fourreau et la tempéra-

ture d'entrée sont de 180 °C et le coefficient de régulation thermique de 2000 $\mathrm{W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}}$. Les profils de pression et de température obtenu sont présentés Figure 4.8 et 4.9.

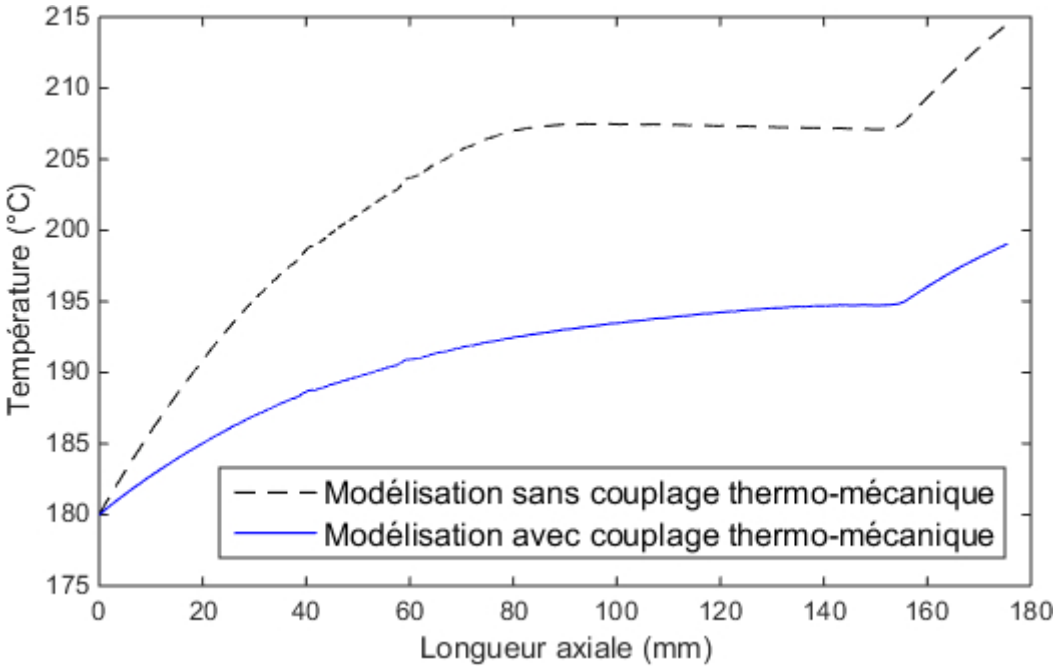


FIGURE 4.8 – Profils de température obtenus en prenant en compte et en négligeant le couplage themo-mécanique

Comme nous pouvons le voir sur la Figure 4.8, la température augmente significativement quand nous négligeons la thermo-dépendance de la viscosité ce qui induit de surestimer la dissipation visqueuse.

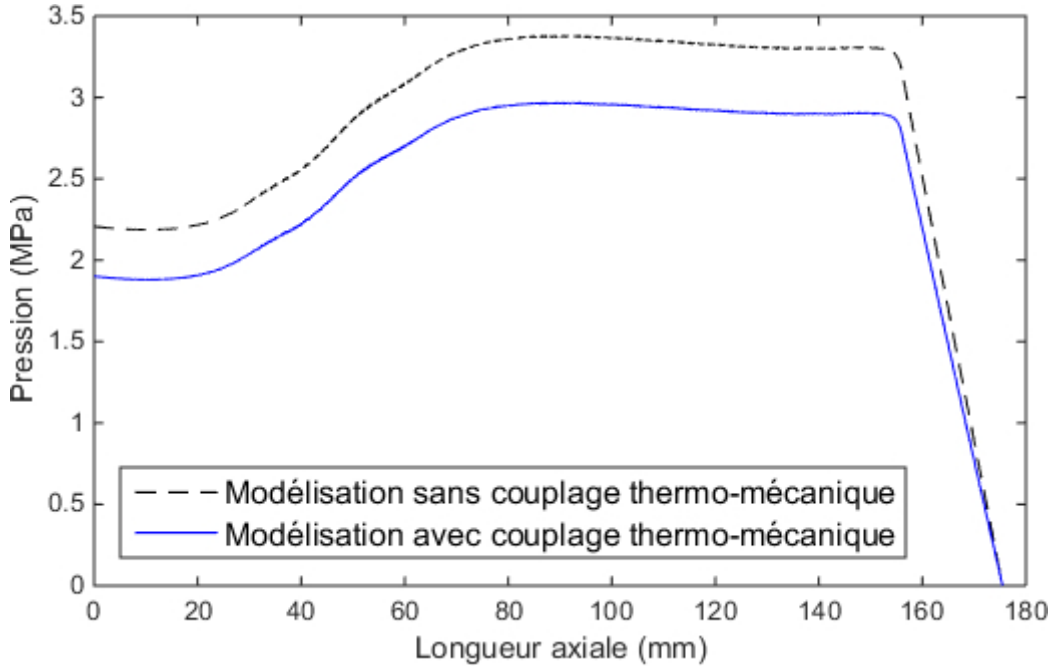


FIGURE 4.9 – Profils de pression obtenus en prenant en compte et en négligeant le couplage themo-mécanique

Sur la Figure 4.9, la non prise en compte de la thermodépendance de la viscosité surestime

la mise en pression au niveau de la bague de restriction mais également les gradients de pressions dans les éléments de transports.

Maintenant que nous avons réalisé une étude paramétrique de notre modèle et que nous avons vu que les variations étaient attendues, nous allons comparer les données issues des simulations aux données expérimentales disponibles.

4.2 Comparaison avec les données expérimentales

4.2.1 Comparaison des températures

Nous allons comparer les températures simulées aux températures mesurées par Monchatre (2015). Toutes les mesures expérimentales qui seront présentées dans ce chapitre ont été effectuées sur le profil présenté en Figure 4.10. Les températures ont été mesurées avant la première bague de restriction, zone où le polymère fond et avant la deuxième bague de restriction, zone où le polymère est entièrement fondu (Figure 4.10).

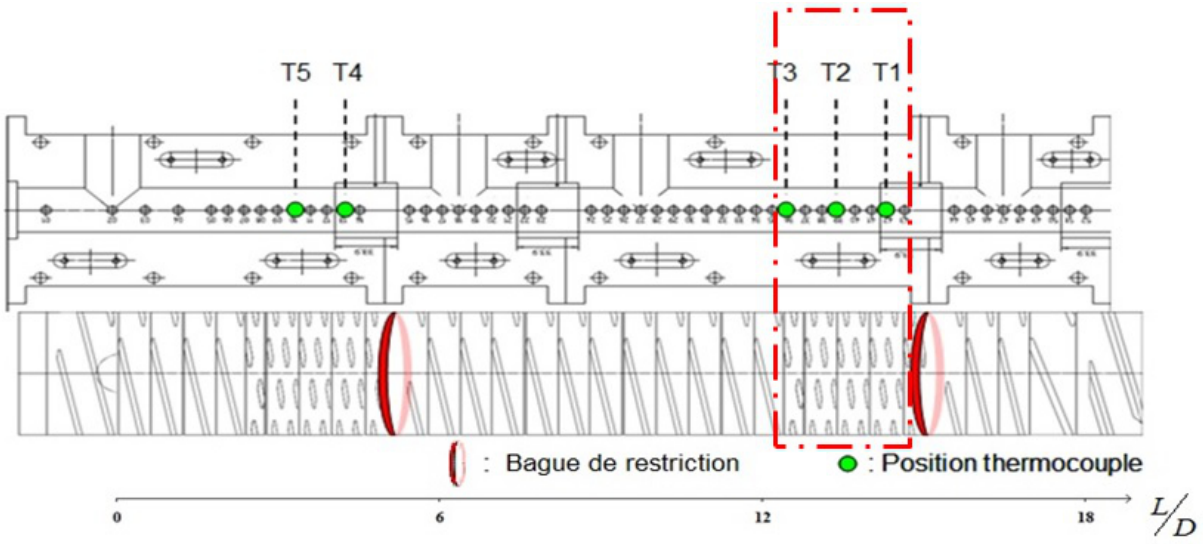


FIGURE 4.10 – Position des thermocouples sur le co-malaxeur (Monchatre, 2015)

Comme nous l'avons vu précédemment, du fait que le modèle mécanique ne prend pas en compte le sous-remplissage, la hausse de température est surestimée dans les zones sous-remplies. Afin de comparer aux températures expérimentales les températures obtenues grâce aux simulations, nous réaliserons une simulation ne prenant en compte que la zone de mélange du co-malaxeur composée de 4,5 éléments de mélange, encadrée de rouge sur la Figure 4.10, zone qui d'après les mesures de Monchatre (2015) est toujours remplie ou quasiment remplie. C'est également la seule zone instrumentée où tout le polymère est fondu. Le domaine de calcul est présenté en Figure 4.11.
Nous effectuerons donc les simulations pour les conditions procédés présentées dans le Tableau 4.1 et pour des températures de régulation du fourreau de 180, 200 et 220 °C comme Monchatre (2015). Le co-malaxeur Buss MK30 sur lequel les mesures ont été effectuées n'ayant pas de régulation thermique au niveau de la vis, nous ne prendrons pas en compte numériquement les échanges thermiques avec la vis. Les simulations sont effectuées avec

la viscosité non newtonienne du polymère. Nous considérons comme température d'entrée du polymère la température de régulation du fourreau. Le débit est imposé en entrée et la pression est imposée nulle en sortie. Les doigts de malaxage sont toujours négligés et les oscillations également, pour alléger le calcul. Nous avons vu dans le chapitre précédant que prendre en compte les oscillations de la vis ne modifiait pas significativement le champ de température. Le coefficient de transfert thermique aux parois est inconnu. Nous allons donc réaliser les simulations pour différents coefficients de transfert thermique afin de déterminer lequel semble être le plus réaliste. Un échantillon des résultats obtenus est présenté sur les Figures 4.12 à 4.20. Les points rouges correspondent aux mesures expérimentales de Monchatre (2015).

Les profils thermiques simulés sont plutôt en accord avec les températures mesurées expérimentalement si l'on choisit un coefficient de transfert thermique de l'ordre de $2000\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{K}^{-1}$ et ce pour toutes les températures de régulation testées. Pour tous les futurs calculs thermiques, nous retiendrons donc cette valeur. Il faut néanmoins garder à l'esprit que ces calculs ont été effectués sur 4.5 éléments de co-malaxeur, ce qui représente une très faible partie du profil. Maintenant que le coefficient de transfert thermique a été déterminé à partir des données expérimentales, nous refaisons une étude paramétrique pour valider le code thermique. Pour cela, nous réalisons différentes simulations avec le coefficient de transfert thermique de $2000\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{K}^{-1}$ pour des débits de 5, 7 et $9\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$ et des vitesses de rotation de 250, 350 et $450\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$. Le débit est imposé en entrée, avec une température d'entrée de 200 °C et une pression nulle en sortie. Les résultats obtenus pour une vitesse de rotation fixe de $350\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ et différents débits sont présentés Figure 4.21. L'on observe que plus le débit est important, plus la température en sortie du domaine de calcul est basse. C'est un résultat attendu. Nous étudions maintenant l'évolution de la température en fonction de la vitesse de rotation (Figure 4.22).

L'on note ici que plus la vis tourne vite, plus la température en sortie est importante. Ceci est également un résultat attendu car accélérer la vitesse de rotation de la vis amène plus de dissipation visqueuse.

Un dernier test consiste à observer l'évolution de la température pour différentes températures de régulation du fourreau. Pour cela, nous allons réaliser des simulations avec trois températures de régulation différentes (180, 200 et 220 °C).

Le résultat présenté Figure 4.23, nous montre que plus la température de régulation du fourreau est élevée, plus la température du polymère est haute. Le polymère se stabilise à chaque fois environ 13 à 19 °C au-dessus de la température de régulation. L'on note donc bien également l'effet de la régulation thermique.

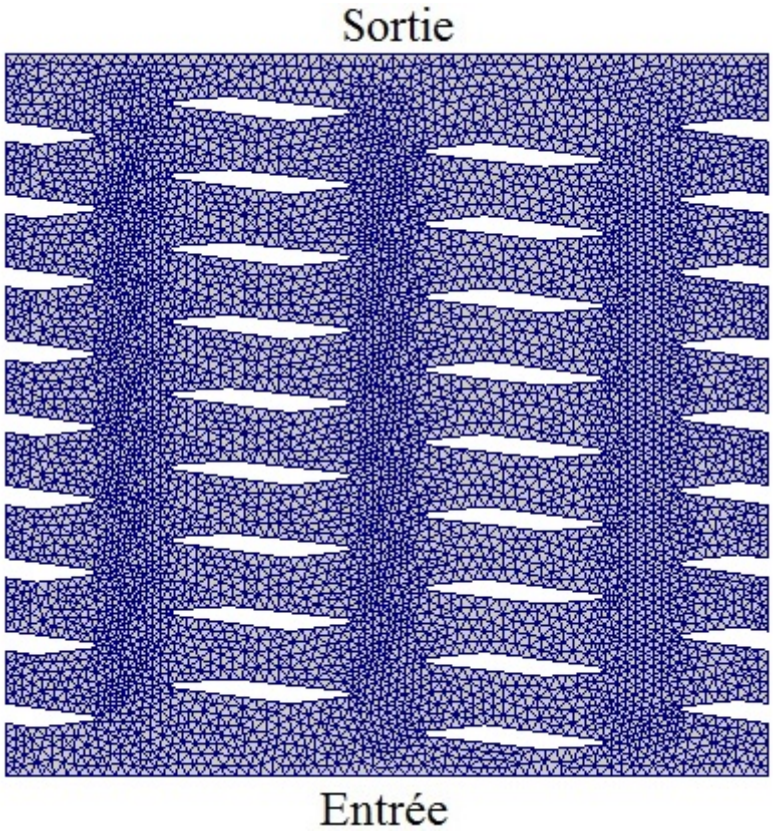


FIGURE 4.11 – Domaine de simulation pour les calculs de températures

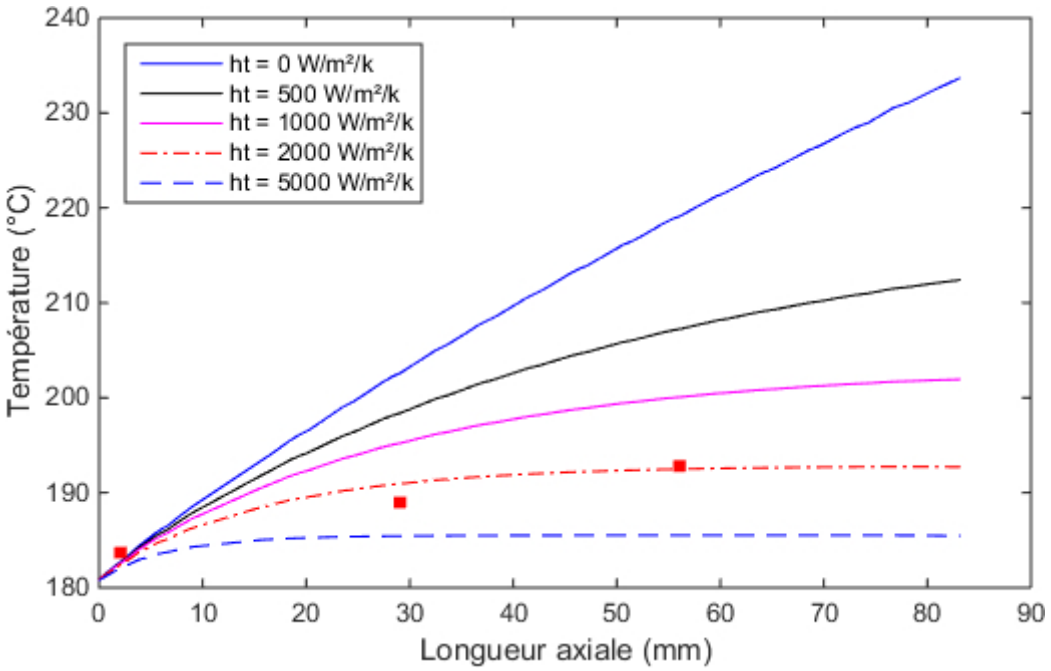


FIGURE 4.12 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=250 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 5 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 180 °C

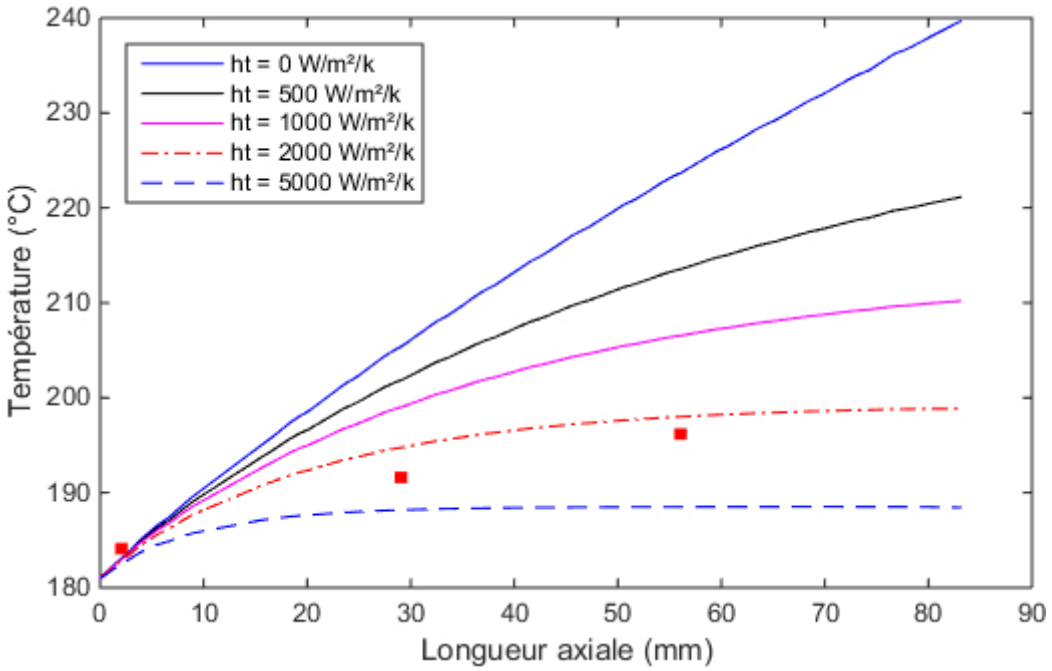


FIGURE 4.13 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=350 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 7 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 180 °C

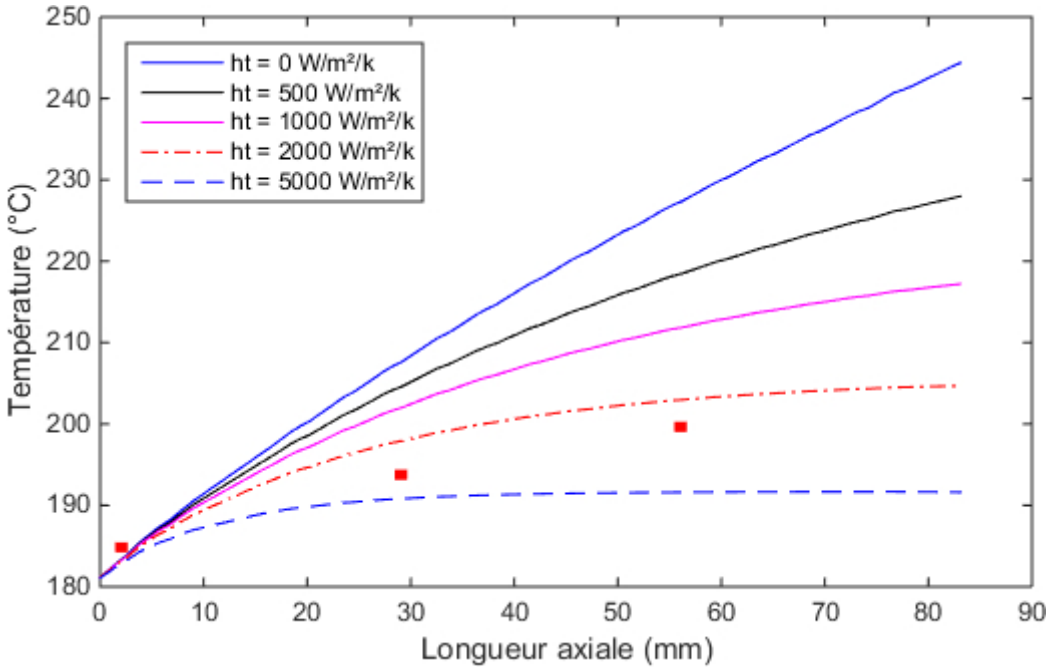


FIGURE 4.14 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=450 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 9 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 180 °C

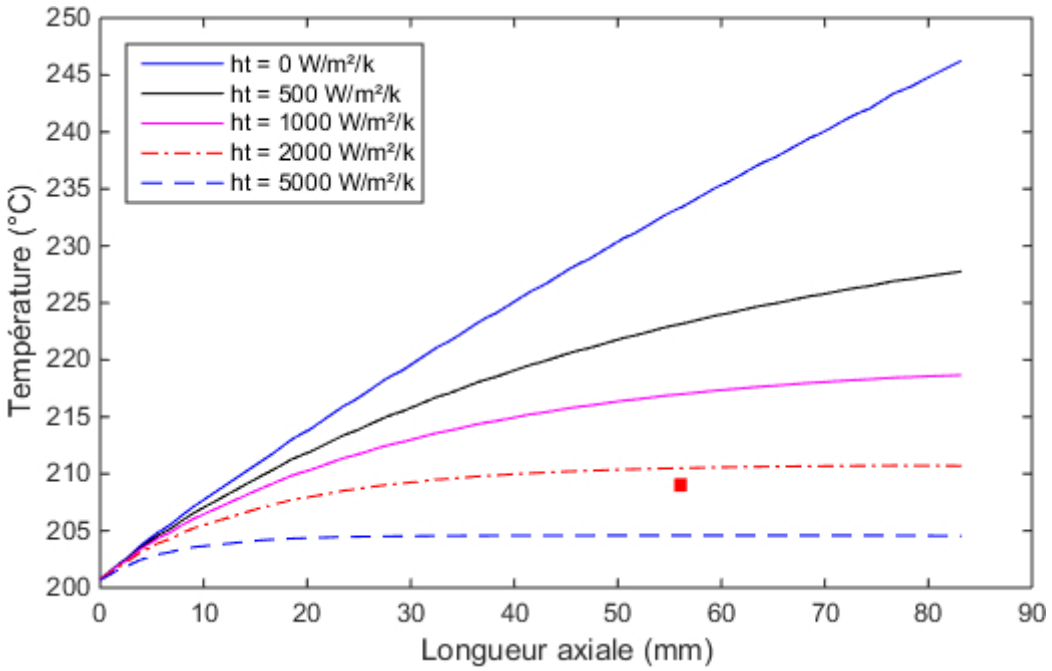


FIGURE 4.15 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=250 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 5 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 200 °C

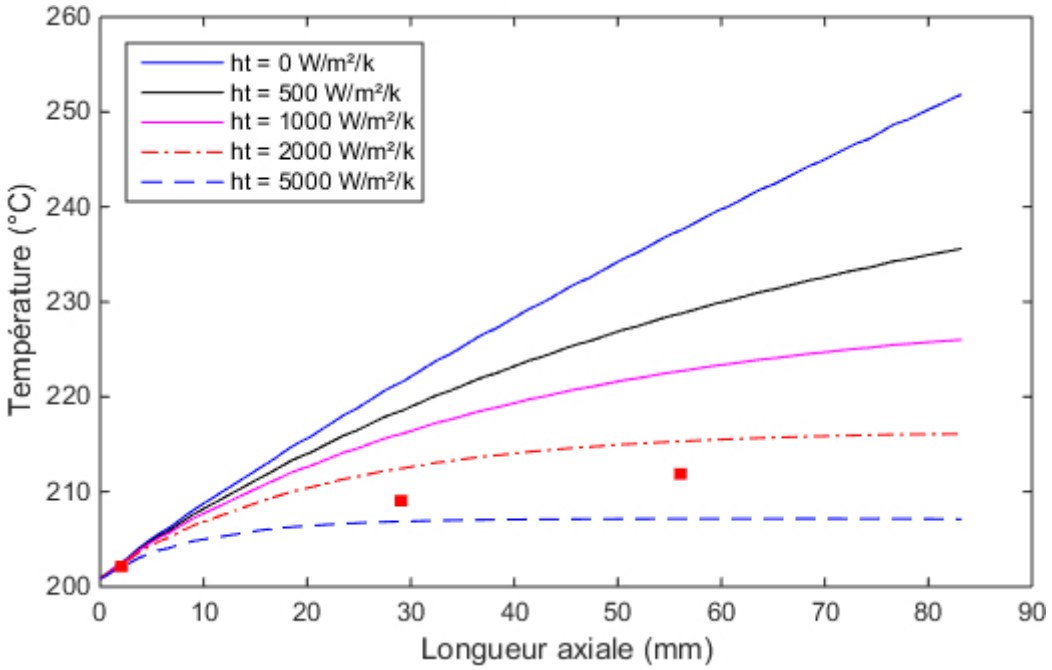


FIGURE 4.16 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=350 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 7 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 200 °C

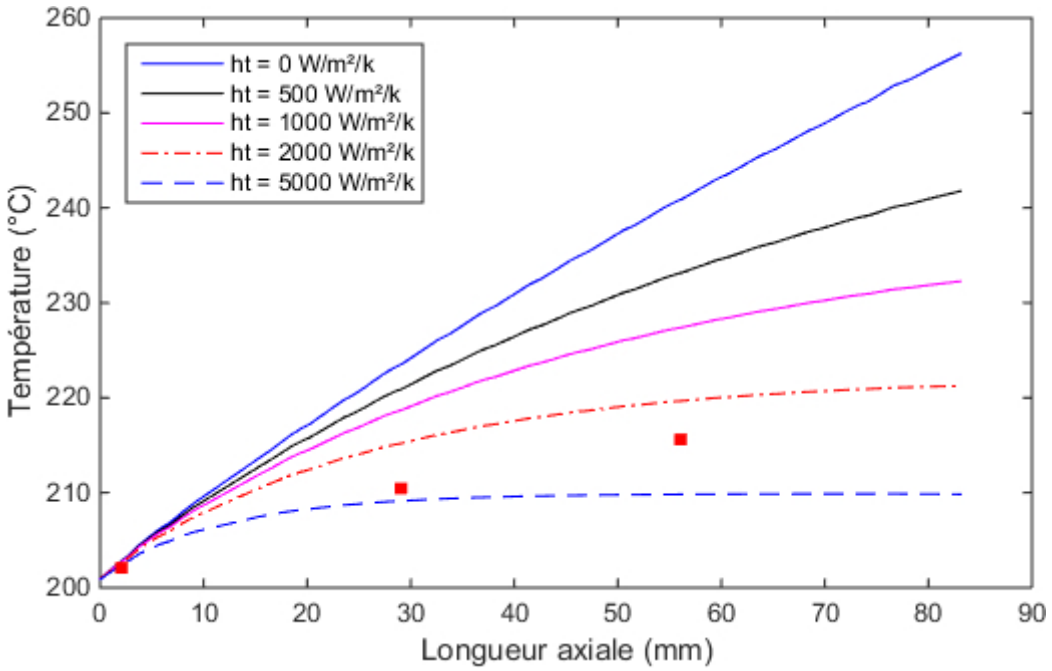


FIGURE 4.17 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=450 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 9 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 200 °C

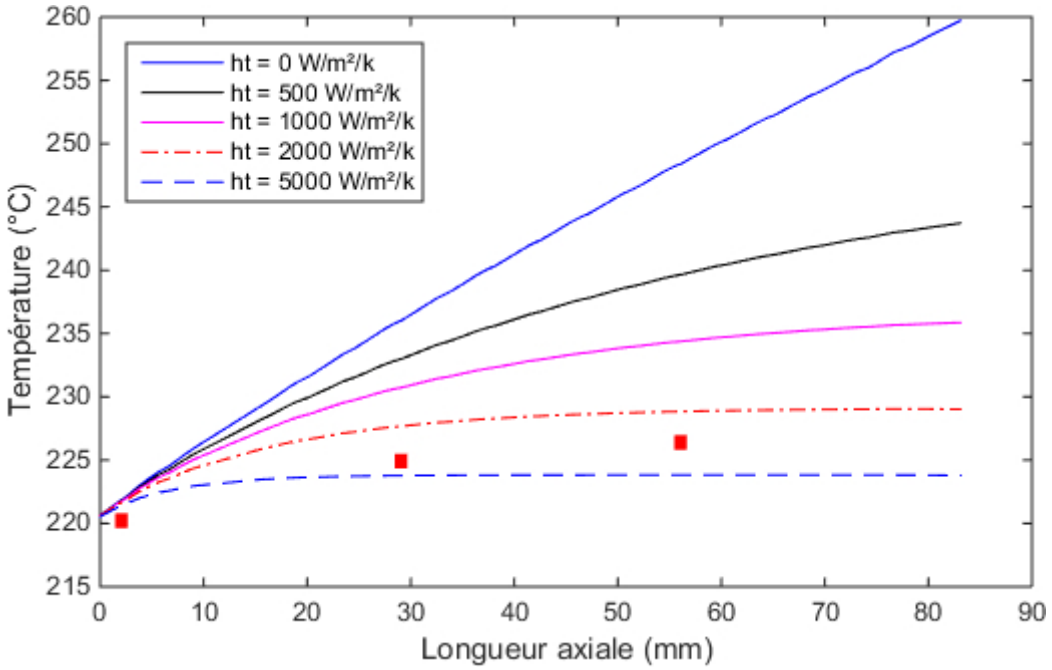


FIGURE 4.18 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=250 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 5 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 220 °C

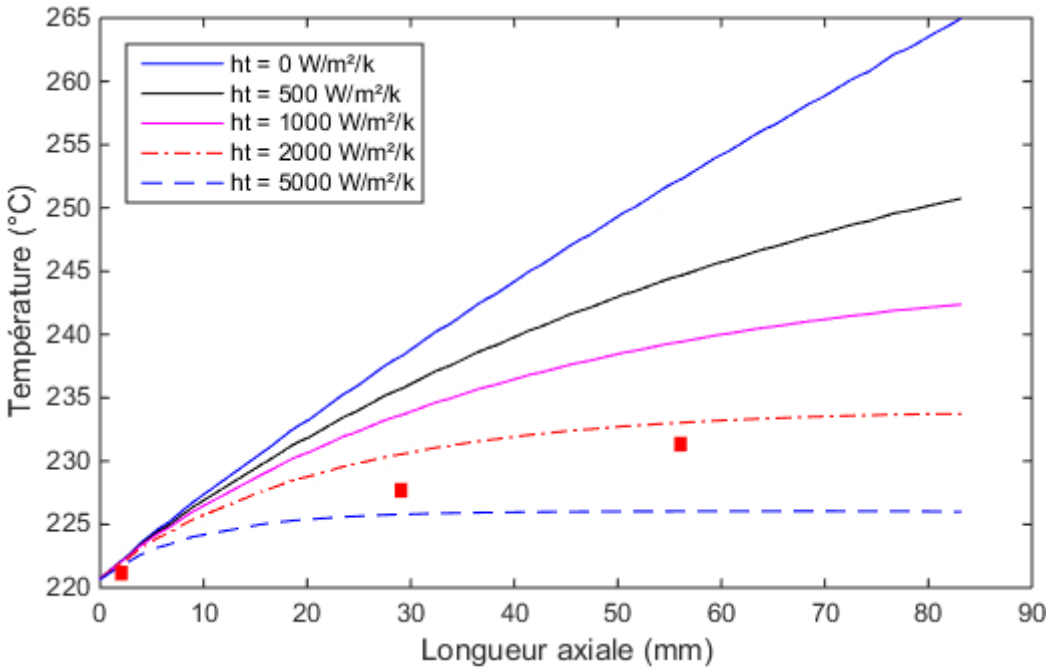


FIGURE 4.19 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=350 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 7 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 220 °C

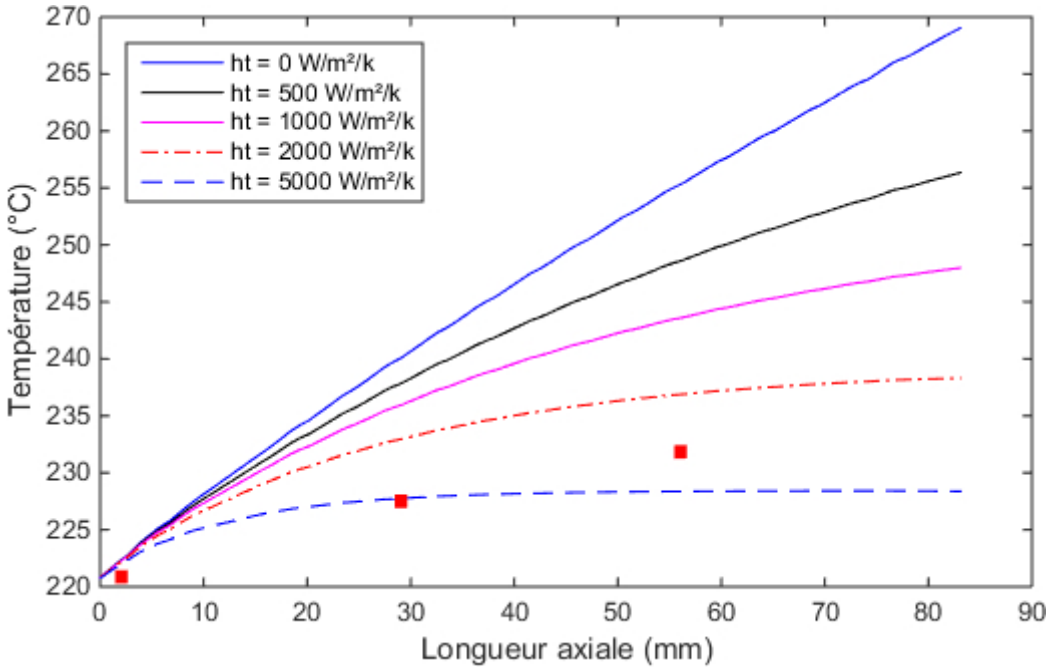


FIGURE 4.20 – Profils de température simulés et mesures expérimentales à N=450 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ et 9 $\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ pour une température de régulation du fourreau de 220 °C

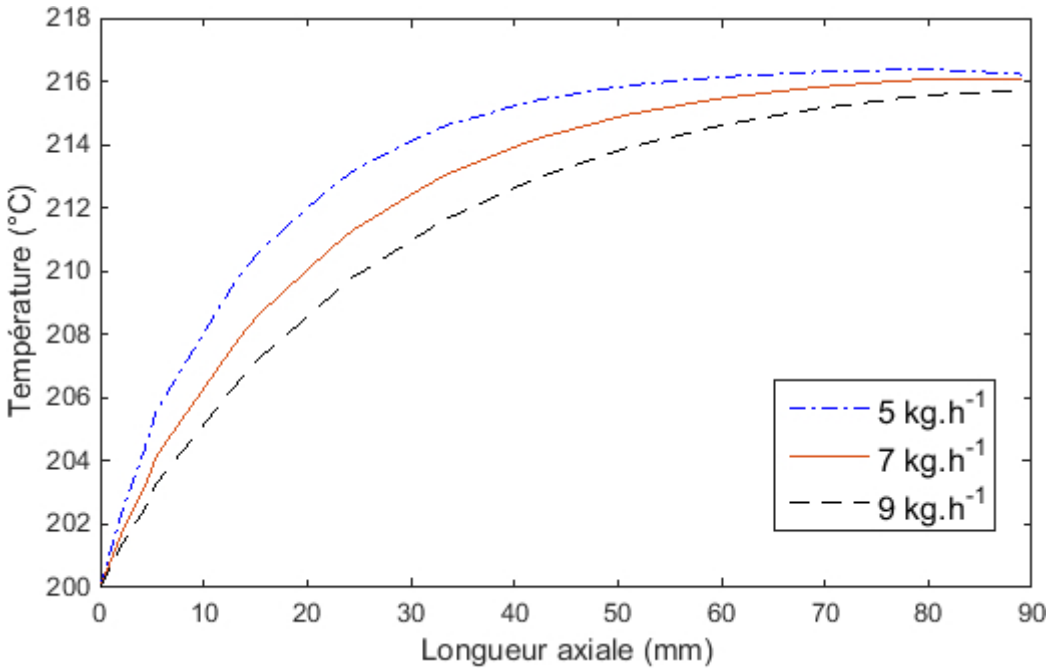


FIGURE 4.21 – Profil de température simulé pour différents débits à N=350 tr · min^{-1} pour une température de régulation du fourreau de 200 °C

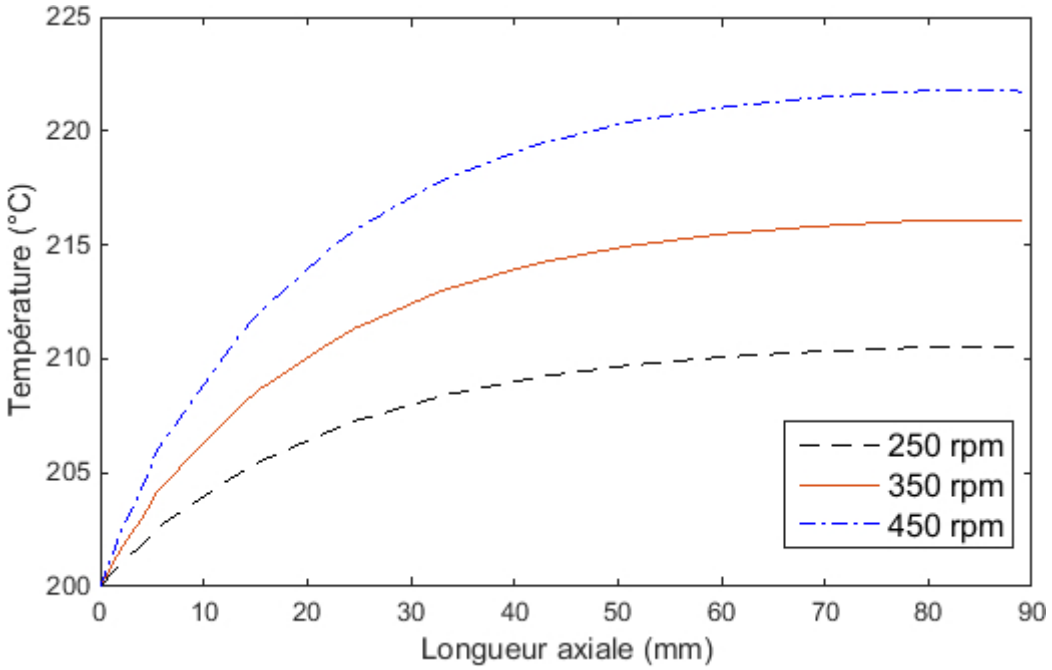


FIGURE 4.22 – Profil de température simulé pour 7 kg · h^{-1} à différentes vitesses de rotation pour une température de régulation du fourreau de 200 °C

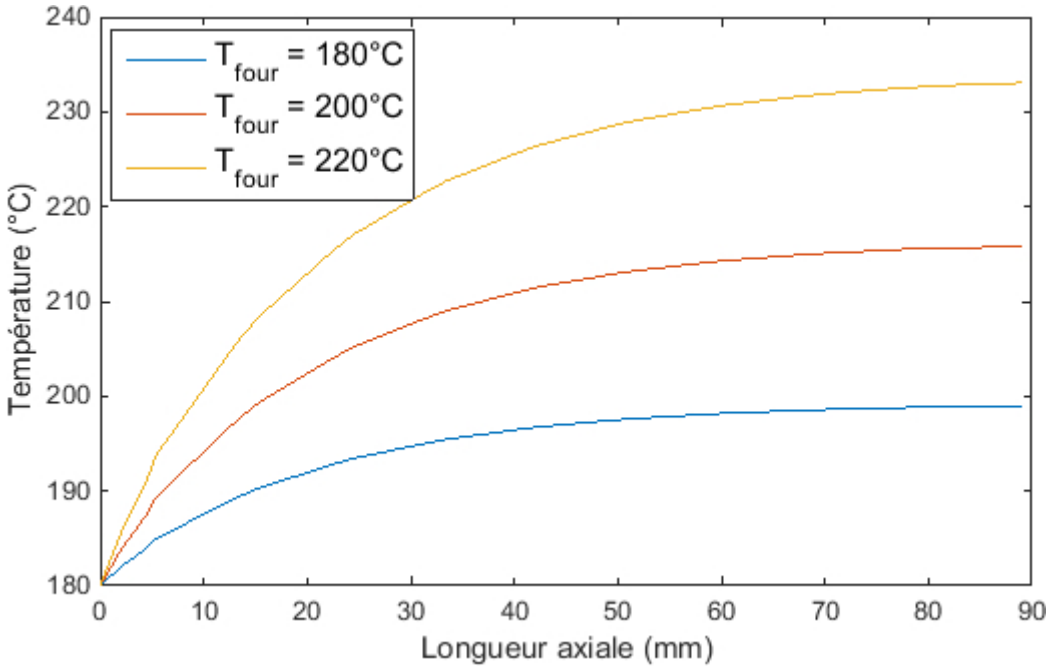


FIGURE 4.23 – Profil de température simulé pour $7\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{h}^{-1}$, $300\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ et différentes températures de régulation du fourreau

4.2.2 Comparaison des pressions et des longueurs de remplissage

Un autre moyen de valider notre modèle est de comparer les longueurs de remplissage. Comme ceci a été évoqué plus tôt, il était impossible de positionner des capteurs de pression en différents points du co-malaxeur du fait de sa petite taille. Monchatre (2015) a retiré des doigts de malaxage dans la zone de mélange précédant la deuxième bague de restriction du co-malaxeur sans les remplacer par un doigt bouchon ce qui a laissé un "trou" (Figure 4.24).

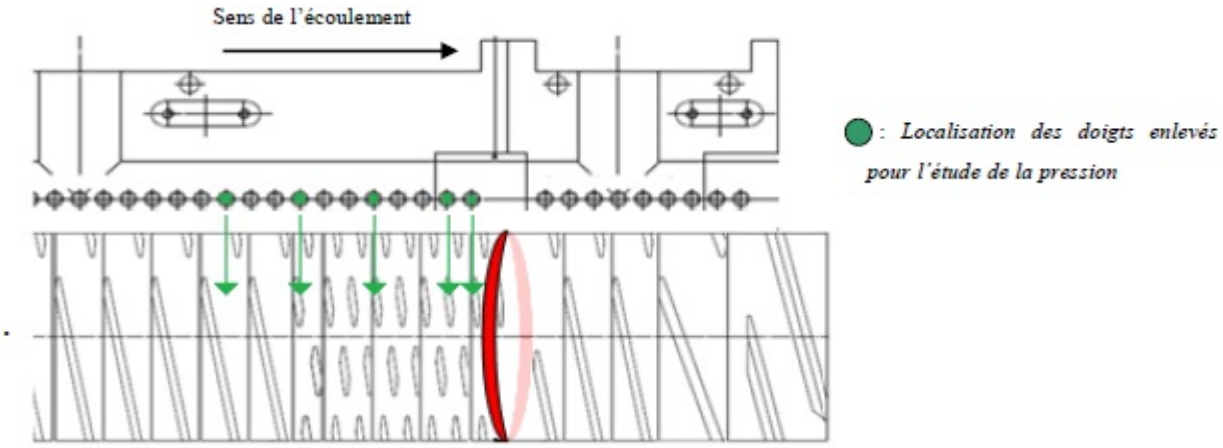


FIGURE 4.24 – Positions où les doigts de malaxage ont été retirés pour mesurer la pression (Monchatre, 2015)

En observant le débit de polymère sortant et en faisant l'approximation d'un tube de Poiseuille, il recalcule le gradient de pression et donc la pression à l'intérieur du fourreau reliée à ce débit (Figure 4.25). Il faut garder à l'esprit que, la vis oscillant et tournant, cette valeur de pression est une moyenne sur la période d'oscillation et également qu'au cours de la rotation, le filet de vis passe directement en regard du "trou" laissé par le doigt de malaxage.

Dans le cas du modèle, effectuer le calcul thermique dans les éléments de transport surestime la dissipation visqueuse et donc la température. Nous n'effectuerons donc le calcul thermomécanique que sur les 3,5 derniers éléments de mélange du profil présenté Figure 4.25. Les doigts de malaxage ainsi que les oscillations seront négligés. Nous imposerons en sortie de notre calcul les pressions mesurées par Monchatre (2015), à savoir 0,06, 0,155 et 0,28 MPa respectivement pour les rapports Q/V 0,01, 0,02 et 0,03. Monchatre (2015) a défini les rapports Q/V comme les rapports des débits en $kg \cdot h^{-1}$ sur les vitesses des rotations en $tr \cdot min^{-1}$. Les profils de pressions présentés sont les profils de pression mesurés au centre du domaine, au milieu de la deuxième interruption de filets. Pour le rapport Q/V de 0,01, Monchatre (2015) obtient des gradients de pression similaires pour les 3 couples débit-vitesse de rotation et, sur la Figure 4.25, en prolongeant le gradient de pression obtenu proche de la sortie, on obtient une position axiale de début de remplissage d'environ 82 mm, position où la pression commence à être non nulle. Les simulations numériques effectuées donnent les profils de pression présentés sur la Figure

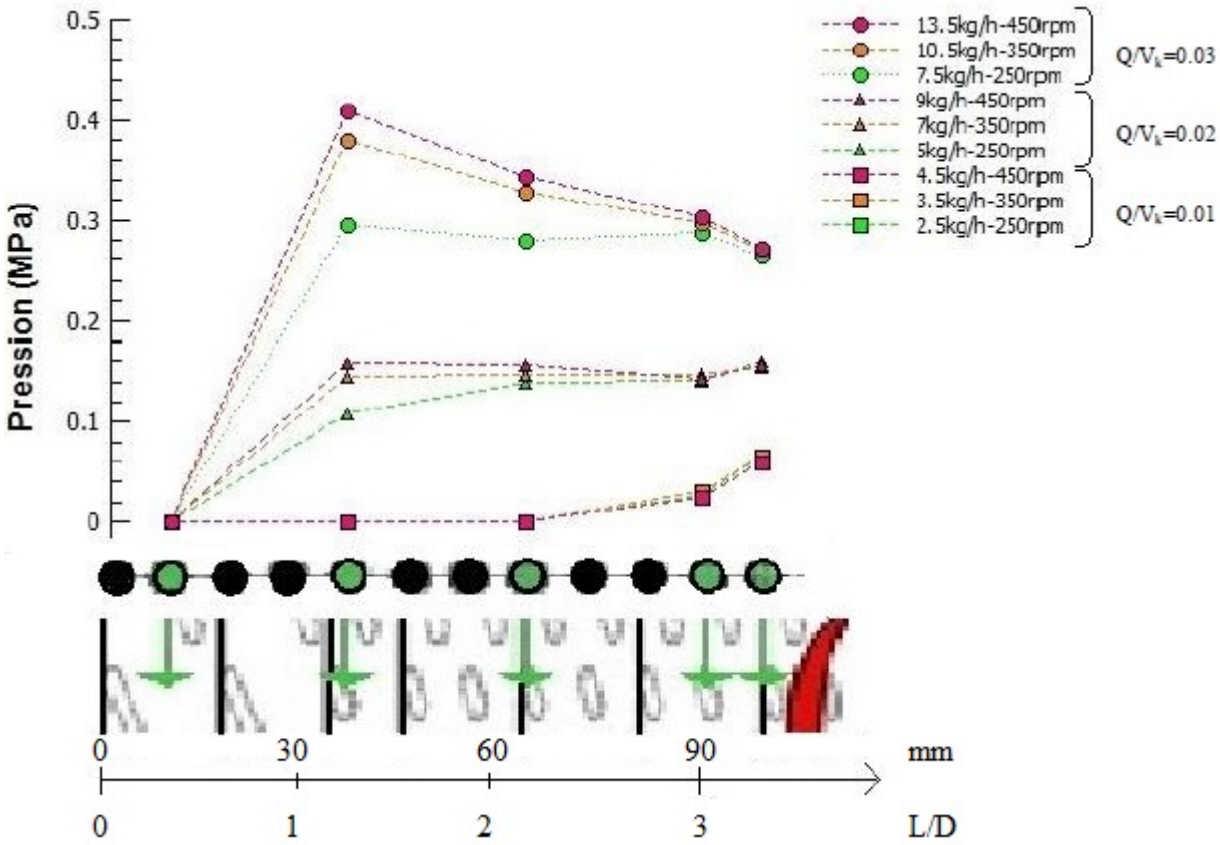


FIGURE 4.25 – Pressions recalculées par Monchatre (2015) pour différents débits et vitesses de rotations avec une température de régulation de 200 °C

4.26 où les carrés représentent les données expérimentales, superposées pour les 3 couples débit-pression. Elle montre que les profils de pression ne sont ni superposés ni ordonnés. En effet, le profil de pression pour un débit de $2{,}5\,\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ et $250\,\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ est très inférieur aux deux autres et le gradient de pression le plus faible apparait pour le couple de $3{,}5\,\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$ et $350\,\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$.

Nous comparons également les positions axiales où la pression devient nulle. Pour les données expérimentales de Monchatre (2015), la position axiale à partir de laquelle le remplissage apparait semble être d'environ 82 mm, ce qui conduit à une longueur remplie, jusqu'à la fin du profil d'environ 17 mm pour les 3 couples débit-vitesse. Pour les simulations numériques, les valeurs sont présentées dans le Tableau 4.2.

Tableau 4.2 – Calculs des positions axiales où le remplissage apparait

Vitesse de rotation ($\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$)	Débit ($\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$)	Position axiale (mm)
250	2,5	77,5
350	3,5	67,5
450	4,5	69,4

Les positions axiales où apparait le remplissage sont proches de celles constatées sur les essais de Monchatre.

Nous effectuons les mêmes simulations pour des rapports Q/V de 0,02, dans le cas

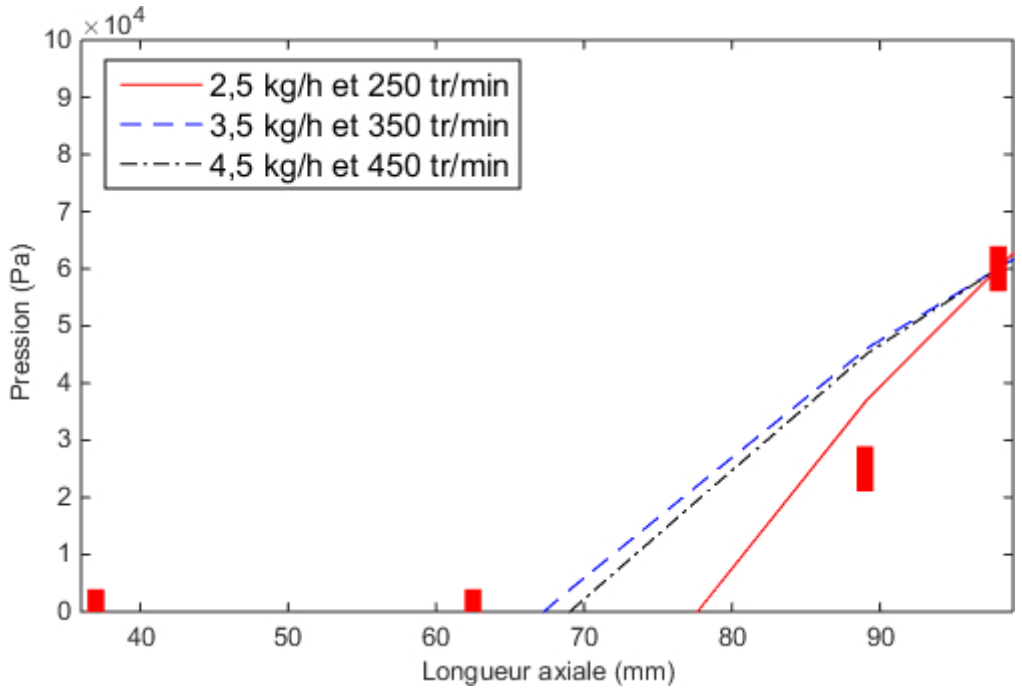


FIGURE 4.26 – Profil de pressions calculées pour un écoulement non-newtonien et anisotherme dans des éléments de malaxage pour les cas Q/V = 0,01 de Monchatre (2015)

des essais expérimentaux de Monchatre. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 4.25, les gradients de pression expérimentaux sont nuls ou quasi nuls dans la zone de mélange, alors que, dans le cas de la simulation numérique, ils sont bien présents (Figure 4.27). Néanmoins, les pressions restent positives en entrée et donc cette partie du co-malaxeur est, comme dans les essais de Monchatre, remplie sur la simulation numérique.

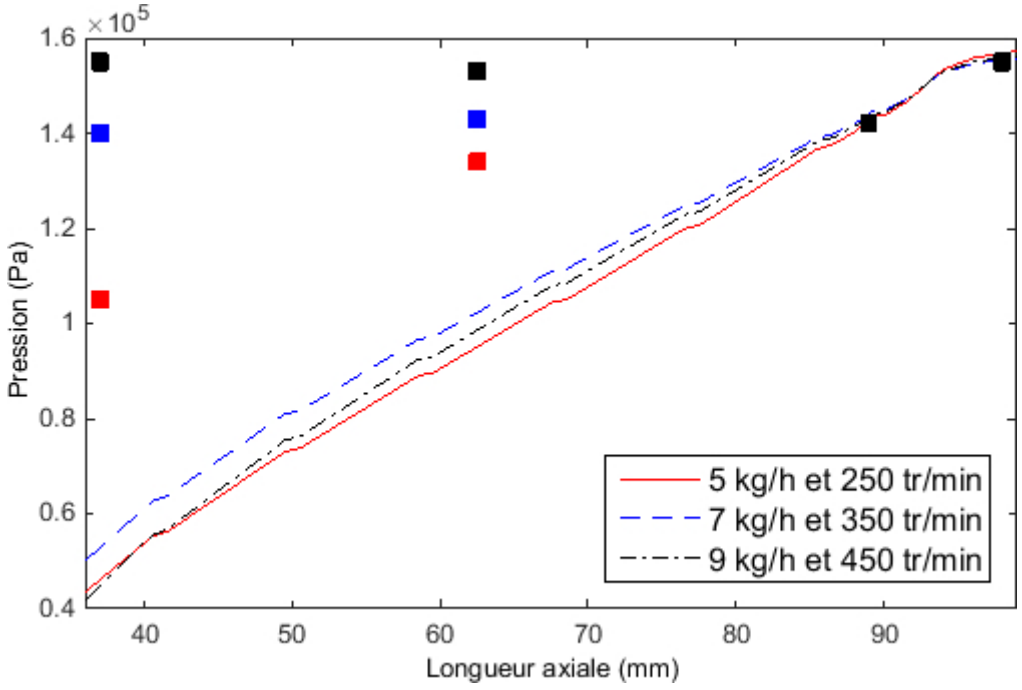


FIGURE 4.27 – Profil de pression pour un écoulement non-newtonien et anisotherme dans des éléments de malaxage pour les cas Q/V = 0,02 de Monchatre (2015)

Nous effectuons maintenant les simulations numériques sur le dernier couple débit-vitesse.

Dans le cas des essais expérimentaux, les gradients de pression sont négatifs, c'est à dire que la pression est plus élevée en entrée des premiers éléments de malaxage. Sur les simulations, nous obtenons toujours un gradient de pression positif, mais plus faible par rapport au couple débit-vitesse précédent (Figure 4.28).

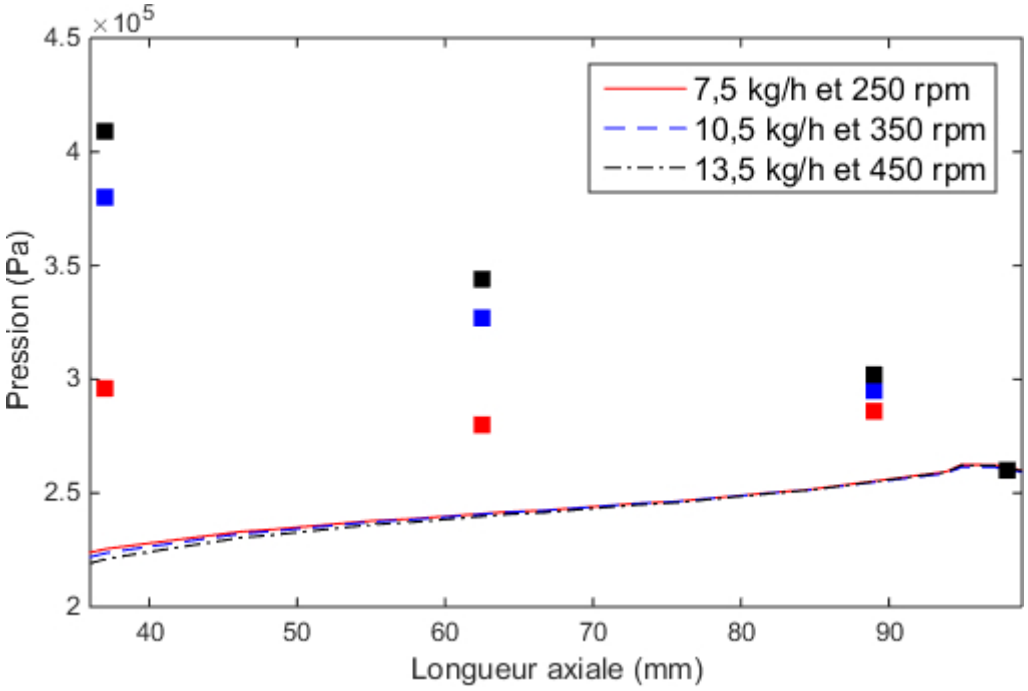


FIGURE 4.28 – Profil de pression pour un écoulement non-newtonien et anisotherme dans des éléments de malaxage pour les cas Q/V = 0,03 de Monchatre (2015)

Les ordres de grandeur apportés par les simulations numériques sont en accord avec les résultats expérimentaux. Les différences subsistant peuvent provenir de l'imprécision de la méthode de mesure des pressions et des approximations du modèle. Comme évoqué précédemment, d'une part les mesures de pression n'étant pas possibles via un capteur de pression, la technique développée par Monchatre (2015) estime une moyenne de la pression et, d'autre part, notre modèle réalise plusieurs approximations. Néanmoins, malgré ces approximations, les prévisions du modèle sont du même ordre de grandeur.

4.2.3 Comparaison des taux de remplissage

Monchatre (2015) a mesuré des taux de remplissages lors des différents essais pour des débits et des vitesses de rotation similaires à celles présentées ci-dessus. La méthode level set étant trop gourmande en ressources comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, nous allons estimer les taux de remplissage autrement. Dans le chapitre présentant la mise en place du modèle mécanique, nous avons analysé pour les éléments de transport et les éléments de mélange les débits des différentes zones ainsi que le débit de convoyage total. Les éléments de mélange étant toujours remplis ou avec des taux de remplissage très proche de 1 (Monchatre, 2015), nous n'effectuerons le calcul que pour les éléments de transport. Afin de réaliser ce type de calcul, nous allons, pour différentes vitesses de rotation, calculer le flux dans le chenal clos et au travers de l'interruption de filet comme

nous l'avions fait précédemment (§ 2.5.1.3.4). Expérimentalement, le taux de remplissage n'est pas forcément mesuré au même moment de la rotation, nous considérerons donc qu'il s'agit du taux de remplissage moyen sur une rotation. Nous effectuerons donc une moyenne au cours d'une oscillation du débit de convoyage pur et la même moyenne concernant le débit traversant l'interruption de filet.

Comme nous l'avions fait précédemment, nous réalisons pour différentes vitesses de rotation des simulations en imposant une pression nulle en entrée et en sortie et en considérant le caractère non-newtonien du polymère, puis nous calculerons les débits observés dans les différentes parties du chenal (Figure 4.29).

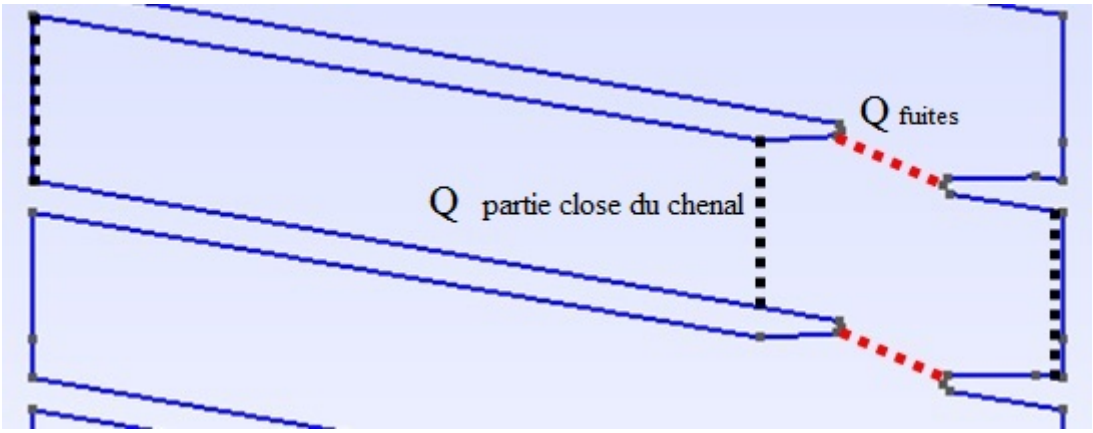


FIGURE 4.29 – Découpage du chenal de transport et débits analysés

Nous calculerons le débit à l'intérieur des parties closes du chenal, le débit traversant les interruptions de filet, Q_{fuites} et le débit de convoyage de l'élément. Les débits obtenus sont présentés dans le Tableau 4.3. Nous nous apercevons que le débit de convoyage de l'élément correspond à la différence entre le débit de la partie close du chenal et le débit traversant les interruptions de filet.

Tableau 4.3 – Débits dans les différentes zones du chenal et débit total de convoyage pour différentes vitesses de rotation

Vitesse de rotation ($\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$)	Débit au travers des interruptions de filets ($\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit dans la partie close ($\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit de convoyage total de l'élément ($\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}$)
100	2,0	6,0	3,9
200	4,0	11,9	7,8
300	6,1	17,9	11,7
400	8,1	23,8	15,6
500	10,1	29,8	19,6

Les valeurs de débits évoluent de manière linéaire avec les vitesses de rotation comme le montre la Figure 4.30.

Afin de comparer aux essais expérimentaux réalisés, nous estimons les débits pour les vitesses de rotation de 250, 350 et 450 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ (Tableau 4.4)

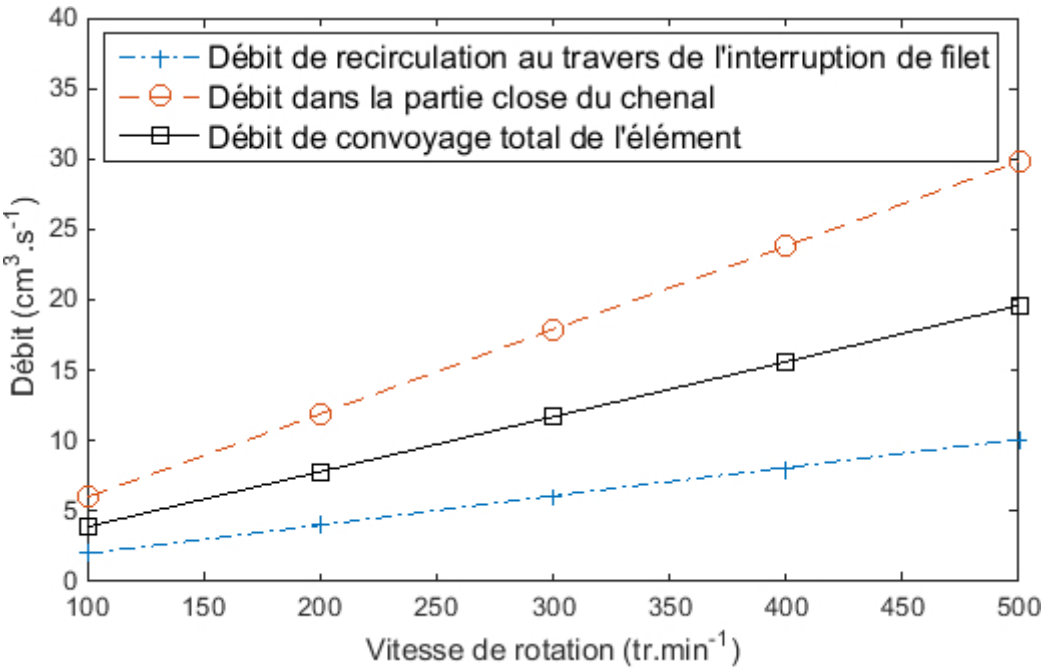


FIGURE 4.30 – Débits dans les différentes zones en fonction de la vitesse de rotation

Tableau 4.4 – Débits recalculés en fonction de la vitesse de rotation

Vitesse de rotation ($\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$)	Débit au travers des interruptions de filets ($\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit dans la partie close ($\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit de convoyage total de l'élément ($\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}$)
250	5,1	14,9	9.8
350	7,1	20,8	13,7
450	9,1	26,8	17,6

Habituellement, le taux de remplissage, f, se calcule en faisant le rapport du débit Q sur le débit de convoyage de l'élément considéré :

$$f = \frac{Q}{Q_{max}} \tag{4.1}$$

avec Q le débit imposé et Q_{max} le débit de convoyage de l'élément. Les taux de remplissage relevés expérimentalement sont présentés dans le Tableau 4.5.

Si l'on calcule les taux de remplissage avec l'équation 4.1 et les débits maximaux de convoyage de l'élément (Tableau 4.4), nous obtenons les résultats suivants (Tableau 4.6).

Les taux de remplissage calculés sont très inférieurs à ceux mesurés expérimentalement. L'interruption de filet et la recirculation du polymère jouent donc un rôle dans le taux de remplissage. Si l'on calcule le rapport entre le débit qui traverse les interruptions de filet et le débit dans la partie close du chenal (Tableau 4.4), quelle que soit la vitesse de rotation, on obtient un rapport de 34 %, ce qui correspondrait au débit recirculant d'un chenal à l'autre à chaque rotation. Cette valeur est obtenue lorsque le chenal est entièrement rempli mais pour un cas où le gradient de pression est nul. L'on peut donc supposer que, même sous-rempli, avec une pression nulle et donc des gradients de pression nuls, l'écoulement étant toujours induit par la vitesse relative du fourreau qui pousse le

Tableau 4.5 – Taux de remplissage observé expérimentalement pour un élément de transport de MK30 (Monchatre, 2015)

Vitesse de rotation $\mathrm{tr} \cdot \mathrm{min}^{-1}$	Débit $\mathrm{kg} \cdot \mathrm{h}^{-1}$	taux de remplissage
250	2.5	0.45
	5	0.60
	7.5	0.775
350	3.5	0.525
	5	0.575
	7.5	0.675
450	2.5	0.5
	5	0.55
	7.5	0.60

Tableau 4.6 – Calcul direct des taux de remplissage des éléments avec la formule 4.1

Vitesse de rotation $(\mathrm{tr} \cdot \mathrm{min}^{-1})$	Débit en $\mathrm{kg} \cdot \mathrm{h}^{-1}$	Débit en $\mathrm{mm}^3 \cdot \mathrm{s}^{-1}$	Taux de remplissage
250	2.5	772	0,08
	5	1543	0,16
	7.5	2315	0,24
350	3.5	1080	0,08
	7	2160	0,16
	10.5	3241	0,24
450	4.5	1389	0.08
	9	2778	0,16
	13.5	4167	0,24

polymère sur le filet arrière de la vis et au travers de l'interruption de filet, ces débits restent similaires. Ceci voudrait donc dire que, pour une vitesse de rotation donnée, quel que soit le remplissage de l'élément, le débit de recirculation est toujours le même. Cela signifie que le débit dans l'élément n'est plus Q, le débit de polymère imposé en entrée, mais

$$Q + Q_{fuites} \tag{4.2}$$

Avec cette hypothèse, le taux de remplissage s'écrit maintenant

$$f = \frac{Q + Q_{fuites}}{Q_{max}} \tag{4.3}$$

avec Q_{fuites} le débit de fuite, appelé précédemment "débit qui traverse les interruptions de filet". A partir de cette donnée, l'on peut estimer le taux de remplissage des éléments de transport (EZ) pour différents débits et vitesses de rotation. Nous ferons ces calculs pour les vitesses de 250, 350 et $450\,\mathrm{tr} \cdot \mathrm{min}^{-1}$ puisque ce sont les vitesses utilisées expérimentalement et pour lesquelles nous avons des taux de remplissage mesurés expérimentalement.

Pour l'élément de transport, avec une vitesse de rotation de 250, 350 et 450 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$, le débit de recirculation est respectivement de 5069, 7097 et 9125 $\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$. Afin de calculer les taux de remplissage, nous ajouterons ces débits au débit de polymère imposé "en entrée". Le calcul des taux de remplissage donne les résultats présentés dans les Tableaux 4.7 à 4.9.

Tableau 4.7 – Taux de remplissage calculé pour un élément de transport de MK30 à 250 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ avec la formule 4.3

Débit ($\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$)	Débit ($\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit + Débit de fuite ($\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$)	Taux de remplissage
1	309	5378	0,361
2,5	772	5841	0,393
5	1543	6613	0,444
7,5	2315	7384	0,496
10	3086	8156	0,548
20	6173	11242	0,756

Tableau 4.8 – Taux de remplissage calculé pour un élément de transport de MK30 à 350 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ avec la formule 4.3

Débit ($\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$)	Débit ($\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit + Débit de fuite ($\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$)	Taux de remplissage
1	309	7406	0,356
3,5	1080	8178	0,393
7	2160	9258	0,444
10,5	3241	10338	0,496
20	6173	13270	0,637

Tableau 4.9 – Taux de remplissage calculé pour un élément de transport de MK30 à 450 $\mathrm{tr \cdot min^{-1}}$ avec la formule 4.3

Débit ($\mathrm{kg \cdot h^{-1}}$)	Débit ($\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$)	Débit + Débit de fuite ($\mathrm{mm^3 \cdot s^{-1}}$)	Taux de remplissage
1	309	9434	0,352
4,5	1389	10514	0,393
9	2778	11903	0,444
13,5	4167	13292	0,496
20	6173	15298	0,571
30	9259	18385	0,686

Les taux de remplissages relevées expérimentalement sont présentés dans le Tableau 4.5

Les comparaisons entre les taux de remplissage expérimentaux et les taux de remplissage calculés sont présentés des Figures 4.31 à 4.33.

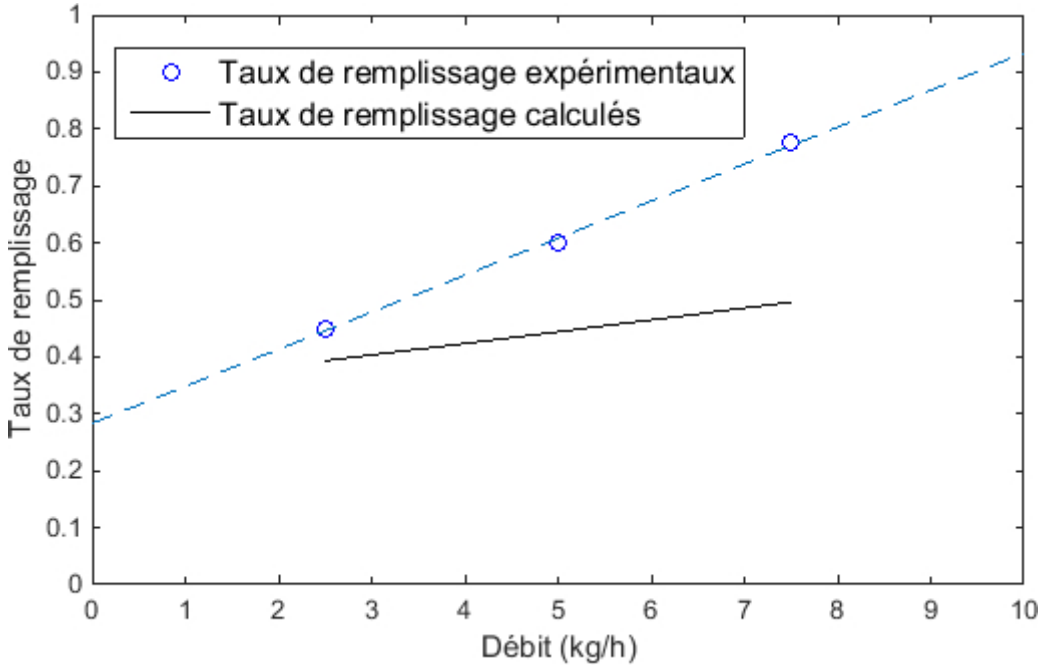


FIGURE 4.31 – Taux de remplissage expérimentaux et simulés pour une vitesse de rotation de $250\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

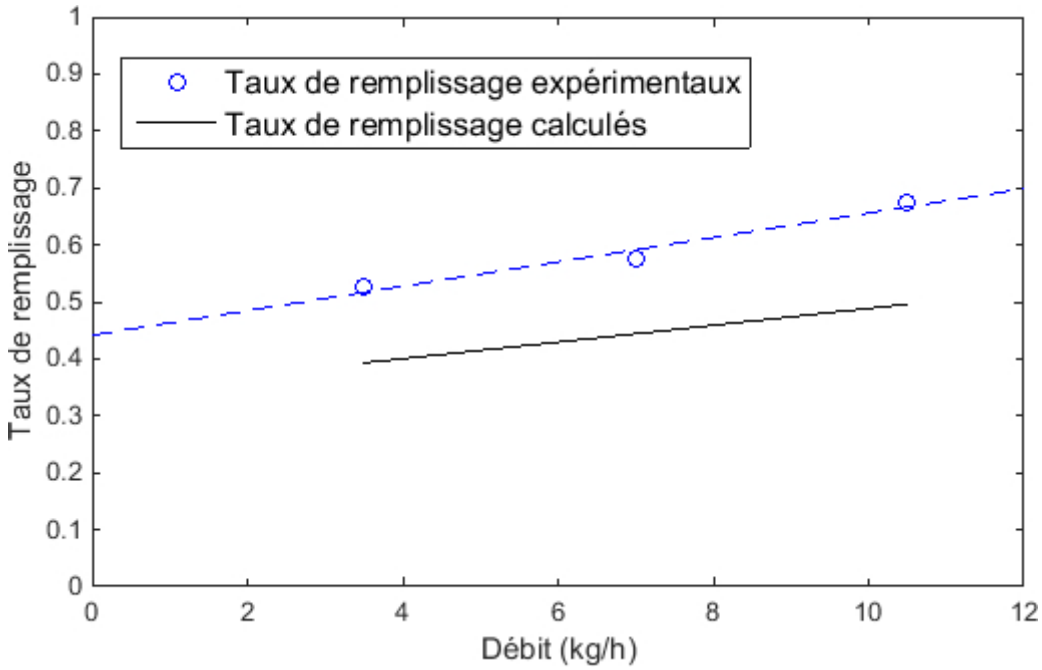


FIGURE 4.32 – Taux de remplissage expérimentaux et simulés pour une vitesse de rotation de $350\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

Sur ces trois figures, si l'on effectue des régressions linéaires sur les taux de remplissages expérimentaux, l'on s'aperçoit que les taux de remplissage pour un débit nul sont compris entre 0,28 et 0,45. Ceci semble donc confirmer qu'il y a bien un débit de fuites qui recircule car sur une extrudeuse monovis sans interruptions de filet, pour un débit nul, le taux de remplissage serait de 0. Pour rappel, numériquement, le taux de remplissage pour un débit nul a été estimé à 0,34. Les taux de remplissage calculés sont identiques pour des rapports débit-vitesse identiques alors qu'expérimentalement ils diffèrent. L'on remarque aussi que plus la vitesse de rotation augmente, plus les taux de remplissage expérimentaux se rapprochent des estimations numériques. Pour une vitesse de rotation de $450\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$, la régression linéaire des taux de remplissage expérimentaux est quasiment parallèle aux taux de remplissage estimés numériquement et sont les plus proches (environ 0,1 d'erreur). Le fait que les taux de remplissage calculés diffèrent des taux de remplissage expérimentaux peut s'expliquer par le fait que les mesures ne sont pas aisées à réaliser et ont donc une part d'incertitude. De plus notre modélisation ne prend pas à compte le contact collant du polymère à la paroi, ce qui tend à surestimer le débit de convoyage Q_{max} de l'équation (4.3) et donc à minimiser le taux de remplissage.

Dans ce chapitre nous avons vérifié avec une étude paramétrique que le modèle donnait des résultats attendus, puis nous avons comparé les données issues des simulations aux données expérimentales issues des travaux de Monchatre (2015). Le modèle donne des résultats allant dans le sens des essais expérimentaux réalisés. Les profils de températures simulés dans les zones de mélange sont plutôt en accord avec ceux mesurés expérimentalement. Pour les pressions, le modèle tend à sur-estimer les gradients de pression dans les éléments de mélange, mais les résultats ne sont pas très éloignés des essais expérimentaux.

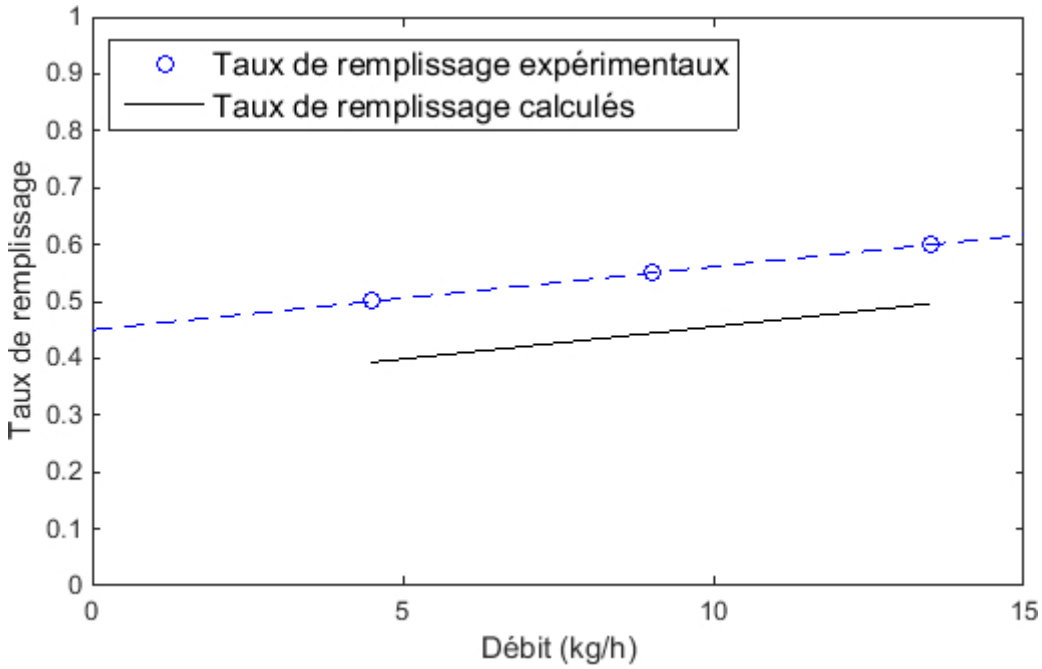


FIGURE 4.33 – Taux de remplissage expérimentaux et simulés pour une vitesse de rotation de $450\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$

Chapitre 5

Conclusions et perspectives

L'objectif de ce travail était de créer un modèle thermomécanique permettant de calculer en quelques dizaines de secondes des écoulements dans un co-malaxeur afin de réduire le délai de mise au point d'un nouveau matériau. Dans un premier temps, nous nous sommes orientés vers une modélisation 1D qui a rapidement montré ses limites du fait de la complexité de la géométrie des co-malaxeurs et, dans une moindre mesure, l'oscillation de la vis couplée aux doigts de malaxage, qui rendait le domaine de calcul instationnaire. Un modèle résolvant les équations thermo-mécanique en 2 dimensions a donc été développé.

Ce modèle 2D incompressible a été mis au point. Il s'appuie sur les approximations usuelles lors de la modélisation d'une extrudeuse monovis, comme le fait de mettre à plat la géométrie de la vis et le fait de considérer le fourreau comme tournant autour de la vis. Il est également basé sur les approximations d'Hele-Shaw. L'écoulement est considéré dans les deux directions principales que sont, le long du chenal et au travers des interruptions de filet. Le contact est considéré comme non-collant au niveau des filets de vis. Ce modèle prend en compte les particularités du co-malaxeur telles que les bagues de restriction, les oscillations de vis et les doigts de malaxage. Ceci nous permet donc d'obtenir en tout point du domaine la pression et, à partir de celle-ci, il est possible de recalculer des vecteurs débits, des vitesses de cisaillement, des températures, la viscosité du polymère etc ... Nous avons donc étudié l'impact des oscillations et des doigts de malaxage. L'impact des doigts de malaxage se limite à des gradients de pression et des vitesses de cisaillement élevés localement, alors que le cas des oscillations de vis se révèle plus complexe à analyser. En effet, dans les simulations, nous devons imposer le débit. Or, ce débit varie du fait des oscillations. Nous avons proposé une solution se basant sur les oscillations de débits mesurées sur les éléments de transports et à les imposer sur le profil total. Cette solution a l'avantage de ramener à des résultats plus physiques les oscillations de pression et de longueur de remplissage mais cette solution reste à valider pour tous les cas industriels. Cette solution est nécessaire car notre modèle mécanique ne gère pas le sous-remplissage.

Afin de vérifier que le modèle thermomécanique répond de manière satisfaisante, il a été comparé aux données expérimentales issues du projet Lucomax. Les comparaisons

avec des résultats disponibles montrent que le modèle réagit bien et suit les tendances observées expérimentalement. Néanmoins, nous avons également remarqué que le fait d'avoir un contact non collant au niveau des filets de vis entraine une sur-estimation du débit de convoyage des éléments et donc fausse le calcul de pression. Afin d'avoir des résultats expérimentaux plus proches de la réalité, la prise en compte des filets de vis par l'introduction de facteurs de correction est une piste. Nous avons aussi noté qu'expérimentalement les éléments de transport sont très souvent sous-remplis. Prendre en compte le sous-remplissage dans les éléments de transport permettrait d'obtenir des profils de pression et de température sur l'ensemble du profil.

Nous avons donc proposé au chapitre 3 une gestion du sous-remplissage. Afin de gérer celui-ci, nous avons évalué deux méthodes, l'une basée sur les volumes finis et la seconde basée sur une méthode level set. Nous avons vu que ces deux méthodes souffraient de diffusion numérique. La méthode par volume finis a été seuillée et donne après seuillage des résultats satisfaisants. La méthode level set donne des résultats plus précis que la méthode volumes finis mais elle est également nettement plus consommatrice en temps de calcul.

Ces deux méthodes n'ont pour le moment été testées que dans le cas du remplissage d'éléments de transport, sans oscillation de vis, ni doigt de malaxage. Il faudra donc combiner toutes ces spécificités du co-malaxeur avec ces méthodes, voir si les résultats sont toujours satisfaisants et idéalement améliorer le temps de calcul de ces deux méthodes. Une amélioration du temps de calcul ainsi qu'une meilleure précision des calculs sans seuillage ou réinitialisation permettrait d'obtenir des indices de mélange plus fiables puisque le calcul des indices de mélange utilise la même équation de transport.

Une fois la prise en compte du sous-remplissage effectuée correctement ainsi que des facteurs de correction, les résultats du modèle thermomécanique devraient être beaucoup plus précis dans les éléments de transport et devraient permettre d'obtenir des cartes de pression et de températures réalistes sur un profil complet de co-malaxeur.

Références

Agassant, J.-F., Avenas, P., Sergent, J.-P., Vergnes, B. et Vincent, M. (2014). *Mise en forme des polymères ; approche thermomécanique de la plasturgie*. Lavoisier : Tec & Doc, Paris.

Babuska, I. et Szabo, B. (1982). On the rates of convergence of the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 18(3):323–341.

Booy, M. L. et Kafka, F. Y. (1987). Isothermal flow of viscous liquids in the mixing section of a Buss kneader. *In SPE ANTEC Tech. papers*, pages 140–145.

Brito-Bazan, M., Fradette, L. et Tanguy, P. A. (2012). Experimental Flow Visualization and Residence Time Distributions in a Co-Kneader. *International Polymer Processing*, 27(4):414–426.

Brito Bazan, M. M. (2011). *Mixing Studies in a Co-Kneader*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.

Brooks, A. N. et Hughes, T. J. R. (1982). Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32(1–3):199–259.

Brzoskowski, R., Kumazawa, T. et White, J. L. (1991). A Model of Flow in the Mixing Section of the List KoKneader. *International Polymer Processing*, 6(2):136–142.

Brzoskowski, R. et White, J. L. (1990). Further Considerations of Simulation of Flow in Pin Barrel Extruders and in Screw Extruders with Sliced Flights. *International Polymer Processing*, 5(4):238–243.

Brzoskowski, R., White, J. L., Szydlowski, W., Nakajima, N. et Min, K. (1988). Modelling Flow in Pin-Barrel Screw Extruders. *International Polymer Processing*, 3(3): 134–140.

Buss Corporation (2015). BUSS Kneader Technology - Engineered Compounding Solutions.

BUSS SA (2015). Principe de fonctionnement et avantages du ko-malaxeur BUSS.

Chopp, D. L. (1993). Computing Minimal Surfaces via Level Set Curvature Flow. *Journal of Computational Physics*, 106(1):77–91.

Codina, R., Schäfer, U. et Oñate, E. (1994). Mould filling simulation using finite elements. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 4(4):291–310.

El Kosseifi, N. (2012). *Numerical simulation of boiling for industrial quenching processes*. Theses, Ecole Nationale Sup{é}rieure des Mines de Paris.

Elemans, P. (1989). *Modelling of the Processing of Incompatible Polymer Blends*. Thèse de doctorat, Eindhoven : Technische Universiteit Eindhoven.

Elemans, P. H. M. (2009). Continuous Equipment Simulation - Co-Kneader. *In* Manas-Zloczower, I., éditeur : *Mixing and Compounding of Polymers*, pages 419–450. Hanser Publisher, Munich, 2nd édition.

Elemans, P. H. M. et Meijer, H. E. H. (1990). On the modeling of continuous mixers. Part II : The cokneader. *Polymer Engineering & Science*, 30(15):893–904.

Ern, A. et Guermond, J. L. (2002). *Éléments finis : théorie, applications, mise en oeuvre*. Mathématiques et Applications. Springer Berlin Heidelberg.

Froeschlé, C. (1984). The Lyapunov characteristic exponents and applications. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, Numéro spé:101–132.

Geuzaine, C. et Remacle, J.-F. (2009). Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309–1331.

Heinz, L. (1950). Continuously operating kneader and mixer.

Hirt, C. W. et Nichols, B. D. (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201–225.

Hughes, T. J. R. et Mallet, M. (1986). A new finite element formulation for computational fluid dynamics : III. The generalized streamline operator for multidimensional advective-diffusive systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 58(3):305–328.

Lafleur, P. G. et Vergnes, B. (2014). *Extrusion des polymères*. Hermès : Lavoisier, Paris.

Lesaint, P. et Raviart, P.-A. (1974). *On a finite element method for solving the neutron transport equation*. Univ. Paris VI, Labo. Analyse Numérique, Paris.

Lyu, M.-Y. et White, J. L. (1995). Models of Flow and Experimental Studies on a Modular List/Buss Kokneter. *International Polymer Processing*, 10(4):305–313.

Lyu, M.-Y. et White, J. L. (1996). Modelling of a Viscous Non-Newtonian Polymer Melt in a List/Buss Kneader and Comparison to Experiment. *International Polymer Processing*, 11(3):208–221.

Lyu, M.-Y. et White, J. L. (1997a). Non-isothermal non-Newtonian analysis of flow in a modular List/Buss kneader. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 16(16): 1445–1460.

Lyu, M.-Y. et White, J. L. (1997b). Simulation of linear viscoelastic flow behavior in the Buss Kneader. *Polymer Engineering & Science*, 37(3):623–635.

Lyu, M.-Y. et White, J. L. (1997c). Simulation of Non-Isothermal Flow in a Modular Buss Kneader and Comparison with Experiment. *International Polymer Processing*, 12(2):104–109.

Lyu, M.-Y. et White, J. L. (2000). Simulation of non-linear viscoelastic flow behavior in the Buss kneader. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 19(10):756–791.

Manas-Zloczower, I. (1994). Studies of Mixing Efficiency in Batch and Continuous Mixers. *Rubber Chemistry and Technology*, 67(3):504–528.

Manas-Zloczower, I. (1997). Analysis of Mixing in Polymer Processing Equipment. *Rheology Bulletin*, 66(1):5–8.

McKelvey, J. M. (1962). *Polymer Processing.* Wiley, New York.

Mehranpour, M., Nazokdast, H. et Dabir, B. (2002a). Computational Study of the Velocity Field in the Conveying Element of a Ko-kneader with CFD Method. *International Polymer Processing*, 17(2):108–114.

Mehranpour, M., Nazokdast, H. et Dabir, B. (2002b). Estimation of Residence Time Distribution in two Elements of a Ko-Kneader. *International Polymer Processing*, 17(1):22–25.

Mehranpour, M., Nazokdast, H. et Dabir, B. (2003a). Computational Study of Velocity Field in the KE Element of a Modular Ko-Kneader with CFD Method. *International Polymer Processing*, 18(4):330–337.

Mehranpour, M., Nazokdast, H. et Dabir, B. (2003b). Prediction of Residence Time Distribution in EZ and KE Element of a Ko-Kneader by using CFD Method. *International Polymer Processing*, 18(4):327–329.

Mehranpour, M., Nazokdast, H. et Dabir, B. (2004). Prediction of Residence Time Distribution for Different Screw Configurations of a Ko-Kneader by using a Cluster Model. *International Polymer Processing*, 19(1):13–15.

Meijer, H. E. H. et Elemans, P. H. M. (1988). The modeling of continuous mixers. Part I : The corotating twin-screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 28(5):275–290.

Meijer, H. E. H., Janssen, J. M. H. et Anderson, P. D. (2009). Mixing of Immiscible Liquids. *In* Manas-Zloczower, I., éditeur : *Mixing and Compounding of Polymers*, pages 41–182. Hanser Publisher, Munich, 2nd édition.

Monchatre, B. (2015). *Contribution à l'étude expérimentale d'un outil de mélange de type co-malaxeur : application aux polymères*. Thèse de doctorat, Université Jean Monnet, Saint-Etienne, France.

Mulder, W., Osher, S. et Sethian, J. A. (1992). Computing Interface Motion in Compressible Gas Dynamics. *J. Comput. Phys.*, 100(2):209–228.

Osher, S. et Sethian, J. A. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12–49.

Sussman, M., Smereka, P. et Osher, S. (1994). A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1): 146–159.

Tadmor, Z. et Gogos, C. G. (2006). *Principles of Polymer Processing*. Wiley-Interscience, Hoboken, N.J.

Tezduyar, T. E. et Park, Y. J. (1986). Discontinuity-capturing finite element formulations for nonlinear convection-diffusion-reaction equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 59(3):307–325.

Vergnes, B. et Puissant, S. (2002). Extrusion monovis (partie 1). *Techniques de l'ingénieur Plasturgie : procédés d'extrusion*, (ref. article : am3650).

Yabushita, Y., Brzoskowski, R., White, J. L. et Najakima, N. (1989). Flow of Rubber Compound in a Pin Barrel Screw Extruder. *International Polymer Processing*, 4(4):219–224.

Zalesak, S. T. (1979). Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of Computational Physics*, 31(3):335–362.

Résumé

L'objectif de ce travail a été de modéliser les écoulements de polymères dans les co-malaxeurs de type BUSS. Le co-malaxeur est une extrudeuse particulière utilisée comme une boite noire depuis des dizaines d'années par des industriels. En effet, sur le fourreau sont fixés des doigts de malaxage et la vis principale dispose d'interruptions de filets et oscille pour permettre le passage des doigts de malaxage dans les différents chenaux. Les industriels l'utilisent pour gélifier du PVC ou disperser des charges dans des matrices polymères. Ce travail répond donc à un besoin industriel puisque actuellement, mettre au point un produit nécessite de nombreuses heures d'essais coûteux.

Un modèle thermomécanique en deux dimensions basé sur les approximations d'Hele-Shaw a été développé. La discrétisation du domaine du co-malaxeur a été faite par éléments finis. La résolution numérique s'effectue par éléments finis et éléments finis stabilisés par SUPG. La modélisation nous permet d'obtenir en tout point du domaine de calcul la pression, les vecteurs débits, les taux de cisaillement, la viscosité et la température.

Les résultats issus des simulations nous permettent d'obtenir des tendances de pression, température et des indices de mélange de polymère pour différentes conditions procédés. Une comparaison entre les résultats issus de la modélisation et des essais expérimentaux montre que dans les zones remplies, le modèle donne des résultats satisfaisants.

Mots Clés

Co-malaxeur BUSS, Extrusion, Modélisation thermo-mécanique, Simulation Numérique, Eléments Finis

Abstract

The aim of this study was to modelize molten polymers flow in BUSS type co-kneaders. The BUSS co-kneader is a particular single-screw extruder. It is composed of a rotating screw like standard single screw extruders, but with interrupted flights and mixing pins fixed to the barrel. The screw has also an axial reciprocal movement. It's used for decades in industry for its mixing capacities, specifically for PVC gelification or polymer compounding with fibres, additives or carbon black. This work is therefore answering to nowadays industrial needs, as developing new products is expensive and takes time.

A 2D thermomechanical model based on Hele Shaw approximations was developed and the co-kneader domain was discretized by finite elements. The numerical resolution was done by finite elements and SUPG stabilised finite elements. This modelization gives us, at every point of the calculation domain, the pressure, throughput vectors, shear rates, the viscosity as well as the temperature.

Simulation results provide us pressure and temperature tendencies, as well as directions on polymer mixing depending on process parameters. A comparison between the model results and experimental trials show that, in filled zones, the model gives good results.

Keywords

Buss-type co-kneaders, Extrusion, Thermomecanial modeling, Numerical simulation, Finite element