Caractérisation du mélange distributif dans des procédés de mélange de polymères fondus

A. DURIN, R. VALETTE, B. VERGNES

Mines ParisTech, Centre de Mise en Forme des Matériaux (Cemef), UMR CNRS 7635 BP 207, 06904 Sophia Antipolis Cedex (France)

Résumé :

On caractérise par simulation directe 3D les conditions d'écoulement pour différentes combinaisons d'éléments de vis et d'éléments malaxeurs dans une extrudeuse bivis. Le matériau considéré est un fluide de Carreau-Yasuda dans des conditions isothermes. L'influence des paramètres géométriques des éléments malaxeurs (angle de décalage, nombre de lobes, épaisseur des disques...) a été caractérisée pour différentes conditions du procédé (vitesses des vis, débit d'alimentation). L'efficacité du mélange a été évaluée par le calcul de différents indices.

Abstract :

A full 3D simulation has been used for characterizing the flow conditions in different combinations of screw and kneading elements in a twin screw extruder. The fluid considered is a Carreau-Yasuda fluid in isothermal conditions. The influence of geometrical parameters of the kneading elements (staggering angle, number of tips, disc thickness...) has been characterized for different processing conditions (screw speed, feed rate). Mixing efficiency has been calculated using different indices.

Mots clefs : extrusion bivis, éléments malaxeurs, mélange, simulation 3D, indices de mélange

1 Introduction

Dans le procédé industriel de mélange par extrusion bivis, l'objectif principal et de disperser un matériau (une charge ou un fluide) dans un autre, pour obtenir une morphologie recherchée (taille et homogénéité de la phase dispersée). Cet objectif est généralement atteint par l'application de contraintes et de déformations dans des configurations d'écoulements complexes : conditions instationnaires, déplacements de surfaces libres,... Le développement de méthodes numériques de simulation permet d'obtenir une information précise sur les conditions locales d'écoulements (champs de vitesses et de contraintes, trajectoires, champs de température ou résultats thermo-mécaniques) et donc une meilleure compréhension et un meilleur contrôle du procédé industriel. Durant les dix dernières années, plusieurs auteurs ont présenté différentes simulations 3D, basées sur des codes qu'ils ont eux-mêmes développés ou sur des logiciels commerciaux [1-6]. Nous avons récemment proposé [7, 8] une méthode pour calculer un écoulement 3D complexe dans une portion d'extrudeuse bivis. Dans cet article, nous utilisons les résultats de ces simulations pour quantifier les capacités de mélange de différentes combinaisons d'éléments de vis et d'éléments malaxeurs.

2 Méthode

Nous considérons l'écoulement d'un polymère fondu dans une portion remplie d'une extrudeuse bivis corotative (diamètre de vis 50 mm). Le polymère est supposé isotherme et obéit à une loi de Carreau-Yasuda. Comme cela est montré en Fig. 1, nous nous intéressons à une combinaison comprenant un élément de vis à pas inverse, précédé soit par des éléments de vis à pas direct, soit par des éléments malaxeurs.



FIG. 1 – Configurations de test

La zone de test est constituée d'un élément de vis à pas direct ou d'un bloc d'éléments malaxeurs. Dans toutes les simulations, on suppose que la contrainte normale est nulle en sortie de l'élément à pas inverse et on impose la vitesse de rotation et le débit. Le chenal est supposé entièrement rempli. Tous les résultats ont été obtenus en utilisant six processeurs 2.4GHz AMD Opteron 280 en parallèle.



FIG. 2 – Champs de pression à vitesse de rotation et débit constants pour un angle de décalage de 30° et différentes épaisseurs d'éléments malaxeurs (gauche : 10 mm, droite : 5 mm). Pression variant de 0 (bleu) à 10 MPa (rouge).

La Fig. 2 donne un exemple de résultats obtenus pour un bloc de disques malaxeurs avec le même angle de décalage (30°) mais deux épaisseurs différentes, 10 et 5 mm, dans les mêmes conditions d'écoulement (débit de 20 kg/hr et vitesse de rotation de 200 tr/min). Quand l'épaisseur du disque est réduite, nous observons que la pression décroît. L'observation du champ de pression indique que les sommets des éléments malaxeurs créent un pseudo filet de vis, dont le pas est directement relié à l'épaisseur du disque. En réduisant l'épaisseur, le pseudo-pas décroît, conduisant à un plus fort gradient de pression, et donc à une modification du champ de pression.



FIG. 3 – Lâcher de particules dans un cas avec éléments malaxeurs décalés de 90° et d'épaisseur 5 mm pour les temps 0, 1, 2, 3, 4, 5 et 6 s

A partir du champ de vitesse calculé et en utilisant des méthodes de suivi de particules, on peut calculer les positions au cours du temps de particules lâchées dans l'écoulement comme illustré en Fig. 3 pour une configuration à blocs malaxeurs. Sur cet exemple, on note que la vitesse d'avancée des particules est très distribuée autour de sa valeur moyenne, en effet, un tel écoulement est réputé présenter des zones d'allongement et de recirculations. D'après ces positions, il est possible de quantifier la capacité de ces différentes configurations à accomplir un mélange distributif. Pour cela, différents indices peuvent êtres définis, comme l'intensité de ségrégation [2], l'allongement [4] ou les entropies de Shannon et de Renyi [9]. Par exemple, la Fig. 4 montre l'évolution de l'allongement moyen avec le temps, pour un élément de vis et

des blocs d'éléments malaxeurs à 30° (épaisseur 10 mm). Il est clair que ce bloc malaxeur permet d'obtenir un mélange bien plus efficace qu'un simple élément de vis.



FIG. 4 – Evolution de l'allongement moyen avec le temps pour un bloc de disques malaxeurs (angle de décalage : 30°, épaisseur 10 mm) et pour un élément de vis

Il est ainsi possible de quantifier et de comparer la capacité à mélanger de différentes configurations de vis et d'évaluer l'influence des paramètres imposés à l'écoulement sur la qualité du mélange, comme illustré en Fig. 5, et ceci par différentes méthodes donnant des informations complémentaires.



(b)



FIG. 5 – Evolution de l'allongement moyen (a), de l'entropie de Shannon (b) et de l'entropie de Renyi (c) avec le temps pour deux bloc d'éléments malaxeurs (angle de décalage : 30°, épaisseur 5 et 10 mm) et pour un élément de vis.

On constate par exemple, dans le cas d'un bloc d'éléments malaxeurs ayant un angle de décalage de 30° , une amélioration de la qualité de mélange avec l'augmentation de l'épaisseur des éléments [Fig. 5]. Cette observation peut être faite à partir de n'importe lequel des critères calculés [Fig. 5 (a), (b), (c)], ce qui montre la cohérence de ces méthodes. Les oscillations de l'entropie de Renyi [Fig. 5 (c)] dénotent théoriquement une instabilité au cours du procédé dans la « forme » du mélange, c'est-à-dire une alternance entre des configurations de type petite zone à forte concentration [Fig. 6 (b)] et des configurations de type grande zone à faible concentration [Fig. 6 (c)]. En effet, l'entropie de Renyi pénalise les petites zones mal mélangées présentes dans les mélanges de type (b).



FIG. 6 – Exemple de différentes « formes » de mélange. Plus la zone est foncée, plus la concentration est forte.

3 Résultats

Voyons quelques exemples de résultats obtenus illustrés par des courbes d'allongement moyen. Comme nous l'avons vu précédemment [Fig. 5], les éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm semblent mieux mélanger que les éléments malaxeurs d'épaisseur 5 mm dans le cas d'un angle de décalage de 30°. Reprenons une configuration combinant une épaisseur de 5 mm et un angle de décalage de 30° et comparons là cette fois-ci à des éléments malaxeurs de même épaisseur mais d'angle de décalage différent (90°) [Fig. 7]. Nous constatons que l'augmentation de l'angle de décalage augmente aussi la qualité du mélange dans le cas d'une épaisseur de 5 mm.



FIG. 7 – Evolution de l'allongement moyen avec le temps pour deux bloc d'éléments malaxeurs (angle de décalage : 30° et 90°, épaisseur 5 mm) et pour un élément de vis.

Cependant, si nous cherchons à augmenter l'épaisseur d'éléments malaxeurs décalés d'un angle de 90° [Fig. 8], ou l'angle de décalage entre malaxeurs d'épaisseur 10 mm [Fig. 9], nous ne constatons pas d'amélioration significative de la qualité de mélange.



FIG. 8 – Evolution de l'allongement moyen avec le temps pour deux bloc d'éléments malaxeurs (angle de décalage : 90°, épaisseur 5 et 10 mm) et pour un élément de vis.



FIG. 9 – Evolution de l'allongement moyen avec le temps pour deux bloc d'éléments malaxeurs (angle de décalage : 30° et 90°, épaisseur 10 mm) et pour un élément de vis.

La configuration 5 mm, 30° apparaît donc comme un cas particulier. Nous pouvons expliquer la mauvaise

capacité de mélange de cette configuration par la similitude de géométrie entre ce bloc d'éléments malaxeurs et un élément de vis simple [Fig. 10], le pseudo-pas de 30° du bloc malaxeur agissant ici comme un élément de convoyage.



FIG. 10 – Champs de pression à vitesse de rotation et débit constants pour un bloc d'éléments malaxeurs d'épaisseur 5mm et décalés d'un angle de 30° (à gauche) et pour un élément de vis de pas=33,3 mm. Pression variant de 0 (bleu) à 10 MPa (rouge).

4 Discussion

En conclusion, l'ajout du calcul aux codes de simulation 3D déjà existants pour l'étude de l'extrusion bivis, permettrait de quantifier objectivement la qualité d'un mélange. La principale limite de ces calculs et de ces observations sur lâchers de particules est qu'une partie des particules restent bloquées par la vis durant la simulation du fait de la difficulté à adapter le pas de temps aux grandes différences de vitesse au cours du temps et dans l'espace pour ce type d'écoulement. Pour remédier à ce problème, nous cherchons une méthode plus appropriée pour transporter les particules. Nous pourrons ensuite ajouter l'évaluation de la distribution du temps de séjour, pour l'instant trop sensible à ce problème, à nos critères d'évaluation de la qualité de mélange. Par la suite, nous effectuerons la caractérisation d'autre configurations (angle de décalage et épaisseur) afin d'obtenir de nouveaux résultats, et nous évaluerons l'influence de la position initiale des particules sur la qualité du mélange.

Remerciements

Ce travail a été effectué en partie dans le cadre du projet Fonlimics, labellisé par le pôle de compétitivité Plastipolis. Nous remercions la DGE pour son soutien financier.

Références

- [1] Yao C.H., Manas-Zloczower I., Intern. Polym. Proc., 13, 334 (1998)
- [2] Avalosse T., *Macromol. Symp.*, **112**, 91 (1996)
- [3] Kajiwara T., Nagashima Y., Nakano Y., Funatsu K., Polym. Eng. Sci., 36, 2142 (1996)
- [4] Lawal A., Kalyon D.M., J. Appl. Polym. Sci., 58, 1501 (1995)
- [5] Bravo V.L., Hrymak A.N., Wright J.D., Polym. Eng. Sci., 40, 525 (2000)

[6] Galaktionov O.S., Anderson P.D., Peters G.W.M., Meijer H.E.H., Intern. J. Num. Meth. Fluids, 40, 345 (2002)

[7] Valette R., Bruchon J., Digonnet H., Laure P., Leboeuf M., Silva L., Vergnes B., Coupez T., *Méca. Indus.*, **8**, 251 (2007)

- [8] Valette R., Coupez T., David C., Vergnes B., Intern. Polym. Proc., 24, 141 (2009)
- [9] Wang W., Manas-Zloczower I., Kaufman M., Intern. Polym. Proc., 16, 315 (2001)