

Simulation numérique et modélisation de l'enrobage de deux fluides visqueux par la méthode du champ de phase

D. BORZACCHIELLO^a, E. LERICHE^b, J. GUILLET^a, B. BLOTTIÈRE^a

- a. *Université de Lyon, F-42023, Saint-Etienne, France; CNRS, UMR 5223, Ingénierie des Matériaux Polymères, F-42023, Saint-Etienne, France; Université de Saint Etienne, Jean Monnet, F-42023, Saint Etienne, France.*
- b. *Université de Lyon, LMFA@UJM St-Étienne, CNRS UMR 5509, F-42023 Saint-Étienne, France, Faculté des Sciences et Techniques, Université Jean-Monnet, Rue du Docteur Paul Michelon 23, F-42023 Saint-Étienne Cedex 2, France*

Résumé :

Le phénomène de l'enrobage représente un sujet de grand intérêt industriel surtout dans le cadre de la co-extrusion des matières plastiques. L'objectif de cette recherche est de développer un modèle (tant physique que numérique) pour le traitement des écoulements stratifiés de deux fluides non miscibles et de simuler le réarrangement des couches de fluides en raison de leurs différences de propriétés physiques. La méthode numérique adoptée est celle des volumes finis appliquée aux équations de Navier-Stokes incompressibles couplées avec une équation du type Champ de Phase pour la prise en compte des surfaces libres.

Abstract :

Encapsulation phenomena represent a subject of great interest mainly for polymer processing techniques such as co-extrusion. The aim of this work is to develop a model for the treatment of stratified flows of two non-miscible fluids in order to capture the physics of layers rearrangement due to their differences in physical properties. The equations of motion are coupled with a Phase-Field model to take into account for the biphasic nature of the flow and are solved in the framework of Finite Volume Methods.

Mots clefs : Enrobage ; Volumes Finis ; Champ de Phase

1 Introduction

Les écoulements biphasiques de co-extrusion ont été analysés expérimentalement pour une grande variété de géométries de conduites et de nombres de Reynolds. Le phénomène de l'enrobage est défini par la tendance de ces écoulements stratifiés à évoluer vers une configuration où un des fluides entoure l'autre par effet de différence de propriétés physiques. Les travaux de *Southern et Ballman* [12], *Han* [5] et *Lee* [8], identifient les rapports de viscosité et élasticité entre les deux fluides comme les paramètres qui déterminent le degré et la direction de l'enrobage. Néanmoins les études expérimentales n'ont pas été jusqu'à présent confrontées en détail et avec succès aux études numériques. Les travaux de *Sunwoo et al.* [13], et de *Takase et al* [14] mettent en évidence les difficultés d'ordre numérique dues à la complexité du modèle qui comporte la résolution de systèmes non-linéaires de taille importante ou dues à la modélisation concernant la formulation des conditions aux limites pour le point triple de contact mobile des deux phases avec la frontière du domaine. Les publications récentes de *Yue et al* [15] présentent des résultats importants sur la simulation numérique par éléments finis de l'enrobage élastique de deux fluides en régime "Quasi-3D" utilisant la méthode du *Champ de phase* pour le traitement du point triple ainsi que pour la régularisation des forces de tension de surface. D'un autre côté, plusieurs auteurs ont souligné la robustesse des méthodes de volumes finis qui s'appliquent bien aux écoulements visco-élastiques en raison de la nature principalement hyperbolique des lois constitutives pour les fluides

polymères [9, 11]. Dans le cadre de ce travail on se propose d'appliquer la méthode des volumes finis pour la discrétisation des équations qui régissent les écoulements biphasiques de fluides visqueux et/ou visco-élastiques, modélisés par le modèle du Champ de phase, pour la simulation des phénomènes d'enrobage en régime tridimensionnel.

2 Les équations de base

Cette section donne les équations qui modélisent les écoulements visco-élastiques isothermes et biphasiques et mette en évidence les paramètres adimensionnels qui en régissent leur comportement. De tels écoulements étant caractérisés par des variations de densité négligeables, on adoptera les équations de Navier-Stokes incompressibles isothermes :

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} \right) + \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mathbf{b} \\ \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \end{cases} \quad (1)$$

avec \mathbf{V} la vitesse, p la pression, $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes de Cauchy et \mathbf{b} les forces de volume.

Vu la présence de deux fluides non miscibles, que l'on indiquera avec les indices 1 et 2, on introduit la fonction scalaire ϕ , dite du *Champ de Phase*, qui vaut 0.5 (resp. -0.5) dans les régions du domaine occupée par le fluide 1 (resp. le fluide 2) et qui varie de manière continue entre ces deux valeurs dans le voisinage de la surface libre qui sépare les 2 fluides. Celle-ci est donc définie mathématiquement par l'iso-surface $\phi(x, y, z) = 0$. Par conséquent, les propriétés physiques comme, par exemple, la viscosité peuvent être exprimées en chaque point comme une fonction linéaire des concentrations des deux phases c_1 et c_2 :

$$\eta = \eta_1 c_1 + \eta_2 c_2 = \eta_1 (0.5 + \phi) + \eta_2 (0.5 - \phi). \quad (2)$$

Par la suite, on considèra comme nulles les différences de densité entre les deux fluides. Le modèle physique pour le Champ de Phase est dérivé dans [7, 6] à partir de l'équation de *Cahn-Hilliard* [1] qui décrit la séparation spinodale d'un fluide binaire, en rajoutant un terme de transport convectif en raison de la présence d'un champ de vitesse non nul :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \chi \nabla^2 \Psi \quad (3)$$

L'équation (3) décrit l'évolution du scalaire ϕ transporté par le champ \mathbf{V} et sujet à des flux de diffusion proportionnels au gradient du potentiel chimique Ψ . Celui-ci est défini d'après [6] comme $\Psi = \beta \phi (4\phi^2 - 1) - \alpha \nabla^2 \phi$. Ce choix donne une tension de surface σ_s proportionnelle à $\sqrt{\alpha\beta}$ et une épaisseur d'interface ϵ_i de l'ordre de $\sqrt{\alpha/\beta}$. Le paramètre de mobilité χ est en général fonction de ϕ , pourtant dans la suite on fera l'hypothèse que $\chi = \text{constante}$. La force de tension de surface régularisée générée par ce modèle est $\mathbf{b} = -\phi \nabla \Psi$.

Pour fermer le système d'équations, il faut spécifier une équation constitutive pour le tenseur des contraintes de Cauchy. Dans le cadre de ce travail, on considère un modèle de fluide visqueux newtonien et un modèle visco-élastique afin d'évaluer l'influence de l'élasticité dans le phénomène de l'enrobage. Le modèle visco-élastique adopté ici est celui de Giesekus [3] :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= 2\eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \boldsymbol{\tau}_e \\ \boldsymbol{\tau}_e + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_e + \frac{\lambda a}{\eta_p} \boldsymbol{\tau}_e^2 &= 2\eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}} \end{aligned} \quad (4)$$

où $\boldsymbol{\tau}_e$ est le premier mode visco-élastique du tenseur des contraintes, λ le temps de relaxation, η_s la viscosité du solvant, η_p la viscosité du polymère et a est une constante dite de mobilité qui tient compte du comportement non isotrope en résistance des molécules de polymère. Ces quatre paramètres

ne dépendent que de la composition locale du fluide comme on peut le voir dans l'équation (2). Enfin $\dot{\gamma}$ est le tenseur des taux de déformation et le terme $\overline{\nabla} \tau_e$ dénote la dérivée supérieurement convectée :

$$\overline{\nabla} \tau_e = \frac{\partial \tau_e}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \tau_e - \tau_e \cdot \nabla \mathbf{V} - (\tau_e \cdot \nabla \mathbf{V})^T$$

Afin d'adimensionnaliser les équations, on considère les dimensions caractéristiques de référence L^* , V^* , $t^* = L^*/V^*$, $\dot{\gamma}^* = V^*/L^*$, $\eta_{1,2}^* = \eta_{p,1,2} + \eta_{s,1,2}$, $\tau^* = p^* = \eta^* \dot{\gamma}^*$, $\epsilon^* = \sqrt{\alpha/\beta}$, $\sigma^* = \sqrt{\alpha\beta}$, $\lambda^* = \lambda_1$. L'indice 1 (resp. 2) fait référence aux grandeurs du fluide 1 (resp. 2).

On peut ainsi former les groupements adimensionnels suivants :

$$Re = \frac{\rho_0 V^* L^*}{\eta^*}, \quad De = \frac{\lambda^*}{t^*}, \quad Ca = \frac{V^* \eta^*}{\sigma^*}, \quad \epsilon = \frac{\epsilon^*}{L^*}, \quad \beta_{1,2} = \frac{\eta_{s1,2}}{\eta_{1,2}^*}, \quad \mu = \frac{\eta_2^*}{\eta_1^*}, \quad r = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}, \quad Pe = \frac{\chi \sigma^*}{\epsilon^* L^* V^*}$$

où Re est le nombre de Reynolds, De le nombre de Deborah, Ca le nombre capillaire, ϵ l'épaisseur adimensionnelle de l'interface, $\beta_{1,2}$ le rapport des temps de retardation et de relaxation du fluide 1 (resp. du fluide 2), μ le rapport de viscosité, r le rapport d'élasticité et Pe le nombre de Péclet. Les équations en forme adimensionnelle seront donc :

$$Re \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \bar{\mu} \left[\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T \right] \right\} + \nabla \cdot \tau_e - \frac{1}{Ca \epsilon} \phi \nabla \Psi \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \Psi \quad (7)$$

$$\tau_e + \overline{De} \overline{\nabla} \tau_e + \frac{\overline{De} \bar{a}}{\bar{\beta}} \tau_e^2 = \bar{\beta} \left[\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T \right] \quad (8)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \Psi &= \phi (4\phi^2 - 1) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi \\ \overline{De} &= De [(0.5 + \phi) + r(0.5 - \phi)] \\ \bar{\mu} &= (0.5 + \phi) \beta_1 + \mu (0.5 - \phi) \beta_2 \\ \bar{a} &= (0.5 + \phi) a_1 + (0.5 - \phi) a_2 \\ \bar{\beta} &= (0.5 + \phi) (1 - \beta_1) + \mu (0.5 - \phi) (1 - \beta_2). \end{aligned}$$

Dans le système d'équations (8), l'équation constitutive peut se réduire, soit au modèle de Maxwell lorsque $a_{1,2} = 0$, soit au modèle visqueux newtonien simple lorsque $De = 0$. On peut enfin modéliser la co-extrusion d'un fluide visqueux newtonien et d'un fluide visco-élastique en imposant $De \neq 0$, $r = 0$.

3 Discrétisation numérique spatiale et temporelle

Pour la **discrétisation spatiale** des équations, on utilise la méthode des volumes finis en géométrie cartésienne avec un maillage à pas constant suivant les trois directions spatiales. Les développements ultérieurs sont intégrés dans le code développé par G. Mompéan et L. Thais [9]. Les composantes de vitesse sont évaluées aux centres respectifs des faces de chaque cellule (maillage à grille décalée de type MAC). Par contre, toutes les autres inconnues sont évaluées aux centres des cellules. Cette formulation ne nécessite pas de conditions aux limites tant pour la pression que pour le tenseur de contraintes où pour chaque face la composante normale de vitesse est nulle. Pour obtenir les flux convectifs, les grandeurs aux centres des cellules sont interpolées au cinquième ordre aux centres des faces avec un schéma décentré de type WENO (*Osher et al.* [10]). Le choix de ce schéma se justifie pour la solution de l'équation du champ de phase, bornée par les valeurs 0.5 et -0.5, car il permet la suppression des oscillations, normalement associées aux schémas d'ordre élevé, et qui pourraient conduire à des valeurs

négatives pour les grandeurs dépendantes du champ de phase (comme la viscosité ponctuelle ou bien le temps de relaxation) et déstabiliser la solution. D'ailleurs l'utilisation d'un schéma décentré s'adapte aussi au caractère hyperbolique de l'équation constitutive qui peut manifester des régions à fort gradient ou des discontinuités, notamment dans les coins, en permettant la reconstruction correcte des flux selon la direction locale de l'écoulement et en réduisant donc les raideurs numériques provenant du modèle rhéologique. Néanmoins, l'intégration numérique des flux sur chaque face reste spatialement d'ordre deux et on est ainsi autorisé à utiliser des différences centrales pour l'approximation des termes de diffusion au second ordre dans les équations du champ de phase et de bilan de quantité de mouvement afin que le schéma soit globalement du second ordre en espace. En intégrant les équations sur chaque cellule on obtient un système discret en espace et continu en temps :

$$\begin{aligned}\partial_t \mathbf{U} &= \mathcal{L}(\mathbf{U}, p) \\ \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{V} &= 0\end{aligned}\quad (9)$$

avec $\mathbf{U} = \{\mathbf{V}, \phi, \boldsymbol{\tau}\}^T$, $\hat{\mathbf{D}}$ l'opérateur discret de divergence dans l'espace des vitesses discrètes et \mathcal{L} l'opérateur, en général non linéaire, dérivant de la discrétisation par volumes finis des équations. Pour la **discrétisation temporelle** on utilise une méthode de type Runge-Kutta explicite du troisième ordre (RK-3) présentée par *Gottlieb et Shu* [4]. Le schéma d'intégration du pas de temps t^n au pas de temps $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ s'écrit pour le système (9) comme :

$$\begin{aligned}\mathbf{U}^{(1)} &= \mathbf{U}^n + \mathcal{L}(\mathbf{U}^n) \\ \mathbf{U}^{(2)} &= \frac{3}{4}\mathbf{U}^n + \frac{1}{4}\mathbf{U}^{(1)} + \frac{1}{4}\mathcal{L}(\mathbf{U}^{(1)}) \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \frac{1}{3}\mathbf{U}^n + \frac{2}{3}\mathbf{U}^{(2)} + \frac{2}{3}\mathcal{L}(\mathbf{U}^{(2)})\end{aligned}\quad (10)$$

À chaque sous-pas du schéma RK-3, les inconnues de vitesse et de pression sont déterminées par une méthode de projection qui demande la résolution d'une équation de Poisson pour la pression. Pour gagner en efficacité, on utilise une combinaison de méthodes directes basées sur la transformé de Fourier rapide et de solutions de systèmes tri-diagonaux. En effet, en raison de l'uniformité du pas de discrétisation spatiale, le système algébrique peut être diagonalisé en développant la solution suivant les trois directions spatiales en série de cosinus avec l'algorithme DCT-II de la librairie *FFTW* [2]. Dans notre cas, on ne développe la solution en série de cosinus que suivant deux directions spatiales x et y . Les équations restent toujours couplées suivant la direction z et le système se présentera sous forme de $(N_x \times N_y)$ systèmes tridiagonaux indépendants, avec N_x et N_y les nombres de cellules suivant les directions x et y . Les opérations nécessaires pour la résolution du système sont donc :

- N_z transformations DCT-II bidimensionnelles de taille $(N_x \times N_y)$
- $(N_x \times N_y)$ solutions de systèmes tridiagonaux de tailles N_z
- N_z transformations inverses DCT-II bidimensionnelles de taille $(N_x \times N_y)$

Afin d'estimer la complexité de cette étape d'inversion, et en prenant $N_x = N_y = N_z = \sqrt[3]{N}$ avec N égal au nombre de nœuds de pression, on peut alors estimer le coût de chaque transformation DCT-II comme étant $O(\frac{2}{3}\sqrt[3]{N^2} \log(N))$ et le coût de chaque inversion tridiagonale comme $O(\sqrt[3]{N})$, conduisant ainsi au coût global pour une inversion du système de l'ordre de $O(\frac{4}{3}N \log(N) + N)$.

4 Résultats

Pour la validation du modèle on considère l'écoulement de deux couches de fluide ayant la même épaisseur mais une répartition des débits $Q_2/Q_1 = 2$, dans une filière à section rectangulaire avec un rapport d'aspect (largeur/hauteur) de 2 et une longueur égale à dix fois sa hauteur. La taille du maillage uniforme considéré est de $65 \times 65 \times 128$ suivant les directions spatiales x , y et z . Le choix des paramètres adimensionnels pour chacun des deux cas analysés est présenté dans le tableau 1.

Dans la pratique le nombre capillaire est choisi très élevé mais fini pour ne pas ressentir des effets de tension de surface qui sont typiquement négligeables dans les cas réels. Le paramètre ϵ est pris du même ordre de grandeur que la taille de mailles en direction normale à l'interface et le nombre de Péclet est choisi d'après les considérations faites en [15].

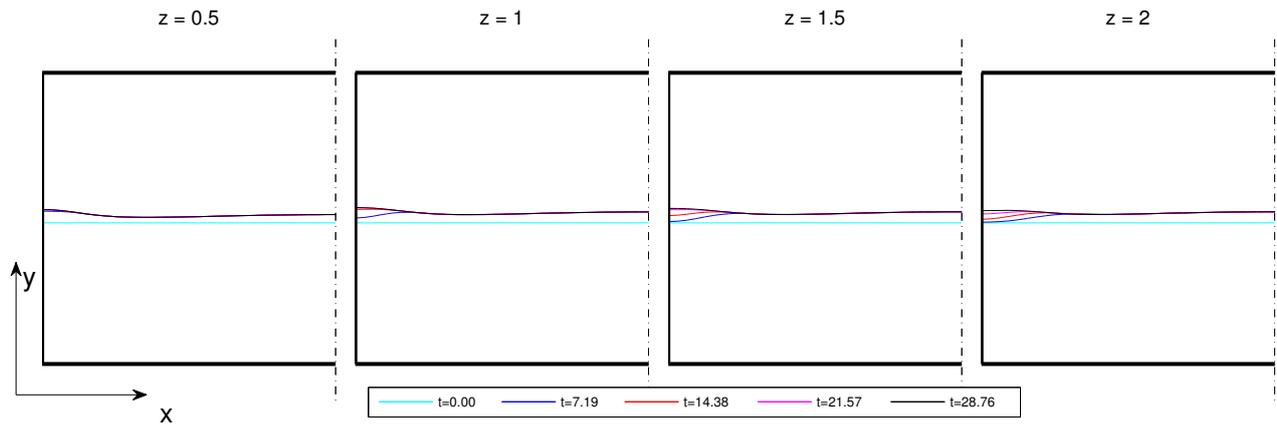


FIGURE 1 – Co-extrusion de deux fluides visqueux newtoniens

Les conditions aux limites assignées sont : un profil entièrement développé pour la vitesse et une condition de Dirichlet homogène pour le tenseur de contraintes sur la section d'entrée ; une condition de non-glissement sur les parois solides et finalement une condition de Neumann homogène pour le tenseur de contraintes et pour les composantes tangentielles de vitesse en sortie. Pour la composante de vitesse dans le sens de l'écoulement on applique la condition $-\eta \frac{\partial w}{\partial n} + p = 0$. Enfin pour le champ de phase on impose partout une condition de Neumann homogène pour ϕ et Ψ . Ce choix implique un angle de contact statique de $\pi/2$.

La figure 1 montre l'évolution temporelle de la surface libre pour différentes sections le long de la filière. Pour le cas newtonien le taux d'enrobage observé est très faible même pour un rapport de viscosité important. La surface se déplace surtout à cause de la différence de pression due à la différence de débit en entrée et elle atteint rapidement un état stationnaire. Différentes conditions de glissement à la paroi et d'angle de contact statique ont aussi été prises en compte. Pourtant les diverses lois de comportement du point triple n'influencent le champ le phase que dans des régions très minces en proximité des parois et donc le choix d'imposer dans l'équation (5) $V = 0$ est retenu pour des raisons de simplicité. Dans ce cas le mouvement du point triple est dû entièrement aux effets de diffusion de phase.

Dans le cas de deux fluides visco-élastiques, figure 2, la méthode confirme qualitativement les principales observations expérimentales. Le fluide le moins visqueux entoure celui le plus visqueux et le taux d'enrobage est croissant tout au long de la conduite. Ce phénomène est explicable par le *Principe de Minimisation de Dissipation Visqueuse* selon lequel pour un débit donné la configuration préférée est celle qui minimise la dissipation visqueuse. Pour des régimes à faible nombre de Reynolds, les gradients de viscosité perpendiculaires à l'écoulement ne peuvent pas déclencher de mouvement secondaire dans le cas du modèle newtonien, mais pour un fluide à comportement visco-élastique le couplage spatial introduit par l'élasticité permet le développement de mouvements secondaires au sein de l'écoulement principal qui rendent possible une évolution vers une configuration énergétiquement plus favorable.

Cas	Re	De	Ca	ϵ	$\beta_{1,2}$	$\alpha_{1,2}$	μ	r	Pe
Newt.	1.0	0.0	∞	0.016	-	-	0.2	-	2500
Non-Newt.	1.0	1.0	∞	0.016	0.5	0.1	0.2	0.5	2500

TABLE 1 – Paramètres adimensionnels utilisés dans les simulations

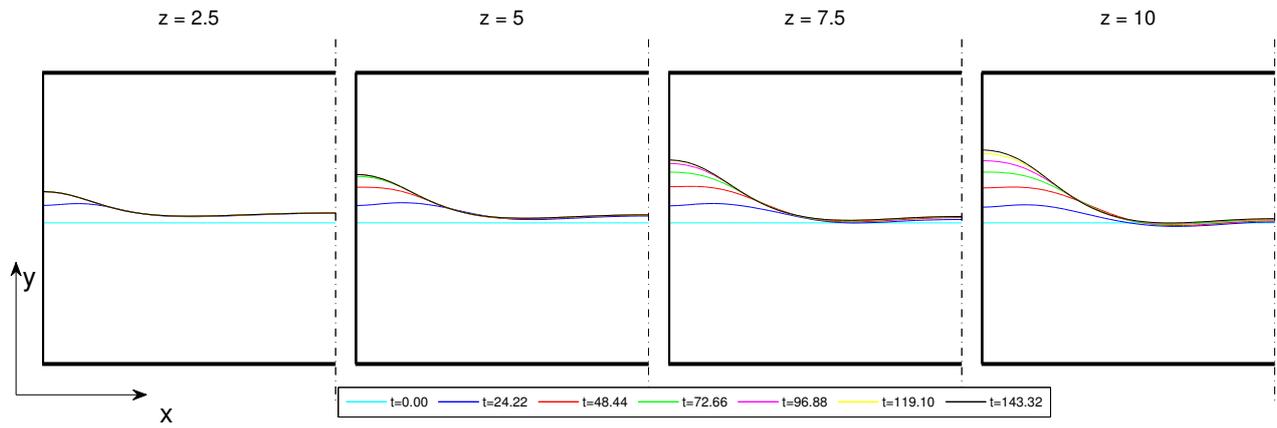


FIGURE 2 – Co-extrusion de deux fluides visco-élastiques

5 Conclusions

Nous avons développé une méthode de volumes finis pour la simulation en régime transitoire des écoulements biphasiques de fluides visqueux newtonien et visco-élastiques. Cette méthode donne des résultats qualitativement en accord avec les observations expérimentales sur l'enrobage et permet de justifier la plus forte tendance des fluides non-newtoniens à manifester ce comportement. Le traitement implicite en temps des équations, prévu pour la suite de cette activité de recherche, rendra possible l'extension de notre analyse aux régimes caractérisés par des nombres de Reynolds plus faibles et des nombres de Deborah plus élevés plus proche des cas industriels.

6 Remerciements

L'activité de recherche de Mr D. Borzacchiello est financé par une allocation doctorale de la Région Rhône-Alpes.

Références

- [1] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy*, J. Chem. Phys. **28** (1958), no. 2, 258–267.
- [2] M. Frigo, Steven, and G. Johnson, *The design and implementation of fftw3*, Proceedings of the IEEE, 2005, pp. 216–231.
- [3] H. Giesekus, *A simple constitutive equation for polymeric fluids based on the concept of configuration-dependent tensorial mobility*, Rheol. Acta **21** (1982), 366.
- [4] S. Gottlieb and C. W. Shu, *Total variation diminishing Runge-Kutta schemes*, Math. Comp **67** (1998), 73–85.
- [5] C. D. Han, *A study of bicomponent coextrusion of molten polymers*, J. App. Polymer Sci. **17** (1973), no. 4, 1289–1303.
- [6] D. Jacqmin, *Calculation of Two-Phase Navier-Stokes Flows Using Phase-Field Modeling*, J. Comp. Phys. **155** (1999), 96–127.
- [7] ———, *Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface*, J. Fluid Mech. **402** (2000), 57–88.
- [8] Biing L. Lee and James L. White, *An Experimental Study of Rheological Properties of Polymer Melts in Laminar Shear Flow and of Interface Deformation and Its Mechanisms in Two-Phase Stratified Flow*, J. Rheol. **18** (1974), no. 3, 467–492.
- [9] G. Mompean and L. Thais, *Finite volume simulation of viscoelastic flows in general orthogonal coordinates*, Mathematics and Computers in Simulation **80** (2010), no. 11, 2185–2199.
- [10] S. Osher, T. Chan, and X. Liu, *Weighted essentially non-oscillatory schemes*, 1994.
- [11] A. R., Secchi A. R., and Cardozo N. S. M. Muniz, *High-order finite volume method for solving viscoelastic fluid flows*, Brazilian Journal of Chemical Engineering **25** (2008), 153–166 (en).
- [12] J. H. Southern and R. L. Ballman, *Additional observations on stratified bicomponent flow of polymer melts in a tube*, J. Polymer Sci. **13** (1975), no. 4, 863–869.
- [13] K. B. Sunwoo, S. J. Park, S. J. Lee, K. H. Ahn, and S. J. Lee, *Three-dimensional viscoelastic simulation of coextrusion process : comparison with experimental data*, Rheol. Acta **41** (2002), 144–153, 10.1007/s003970200013.
- [14] M. Takase, S. Kihara, and K. Funatsu, *Three-dimensional viscoelastic numerical analysis of the encapsulation phenomena in coextrusion*, Rheologica Acta **37** (1998), 624–634, 10.1007/s003970050149.
- [15] P. Yue, C. Zhou, J. Dooley, and J. J. Feng, *Elastic encapsulation in bicomponent stratified flow of viscoelastic fluids*, J. of Rheol. **52** (2008), no. 4, 1027–1042.