

Simulations numériques tridimensionnelles d'écoulements non isothermes dans une extrudeuse monovis (système vis-fourreau) par une méthode de volumes finis

Ahmad Khalifeh & Jean-Robert Clermont

Université de Grenoble, Laboratoire de Rhéologie

BP No 53, Domaine Universitaire, 38041 Grenoble Cedex 9, FRANCE

Email : clermont@ujf-grenoble.fr

Résumé :

Les écoulements en extrudeuse, qui correspondent à des situations véritablement 3D, font l'objet, dans la littérature, d'études numériques 2D. Nous considérons dans ce travail une approche tridimensionnelle pour un système vis-fourreau, en tenant compte des effets thermiques, avec des lois de comportement thermo-rhéologiques anélastiques et viscoélastiques. Dans le contexte de la méthode des volumes finis, nous développons un algorithme découplé pour la résolution numérique, avec des schémas de stockage creux permettant de traiter des problèmes 3D comportant jusqu'à 1,5 millions de degrés de liberté. Les résultats obtenus pour diverses conditions thermiques, géométriques et cinématiques, permettent de décrire les différentes caractéristiques de l'écoulement. En rapport avec des approches simplifiées théoriques bidimensionnelles, nous présentons aussi des courbes caractéristiques d'extrudeuse issues de nos simulations.

Abstract :

Flows studies in extruder systems which correspond to true three-dimensional situations are generally considered as two-dimensional in the literature. In this paper, we present a three-dimensional approach for a screw-barrel system, in non-isothermal conditions, with thermo-rheological models of inelastic and viscoelastic types. In the context of the finite volume method, we propose a decoupled solving algorithm, using specific methods for sparse matrices, leading to consider three-dimensional problems involving 1.5 millions of degrees of freedom. The results of simulations, for different thermal, geometrical (gap, number of pitches, ...) and kinematics (rotating rate of screw) allow us to describe the different flow characteristics, concerning notably the velocities and temperatures as also the pressure and stress fields. In relation to theoretical two-dimensional approaches, we also present characteristic extruder curves obtained from our computations.

Mots-clé :

volumes finis, système vis-fourreau, viscoélasticité non isotherme

1 Introduction

La géométrie complexe d'une extrudeuse monovis correspond à des écoulements véritablement tridimensionnels, associés à des situations industrielles d'extrusion et d'injection. D'un point de vue pratique, la prédiction des caractéristiques d'écoulement avec un modèle rhéologique donné, en conditions non-isothermes, peut contribuer de manière significative à l'optimisation du procédé considéré et à la qualité du produit final obtenu. Sur ce sujet, différentes approximations ont été proposées dans la littérature (e. g. Tadmor *et al.*, 1979, Syang-Peng Rwei, 2001). Des simulations numériques ont été proposées dans le cas bidimensionnel (Lai *et al.*, 2000) dans le cas de fluides newtoniens purement visqueux. L'étude présentée se rapporte à des simulations numériques 3D permettant de prédire la cinématique, la température, les pressions et contraintes ainsi que des courbes caractéristiques d'extrudeuse, qui complètent notablement des études analytiques basées sur des approximations géométriques. Nous supposons que, dans le système vis-fourreau, l'écoulement est stationnaire et que la vis tourne à l'intérieur du fourreau à une vitesse de rotation ω (variant de 1.0 à 6.0 rad/s) en tenant compte de l'inertie. Les régions respectives d'écoulement amont et aval Ω_u et Ω_d

du domaine Ω , sont indiquées en Figure 1a ainsi que les conditions aux limites (Fig. 1b), pour un entrefer variant de 2.5% à 20%, avec des vis à pas constant et variable.

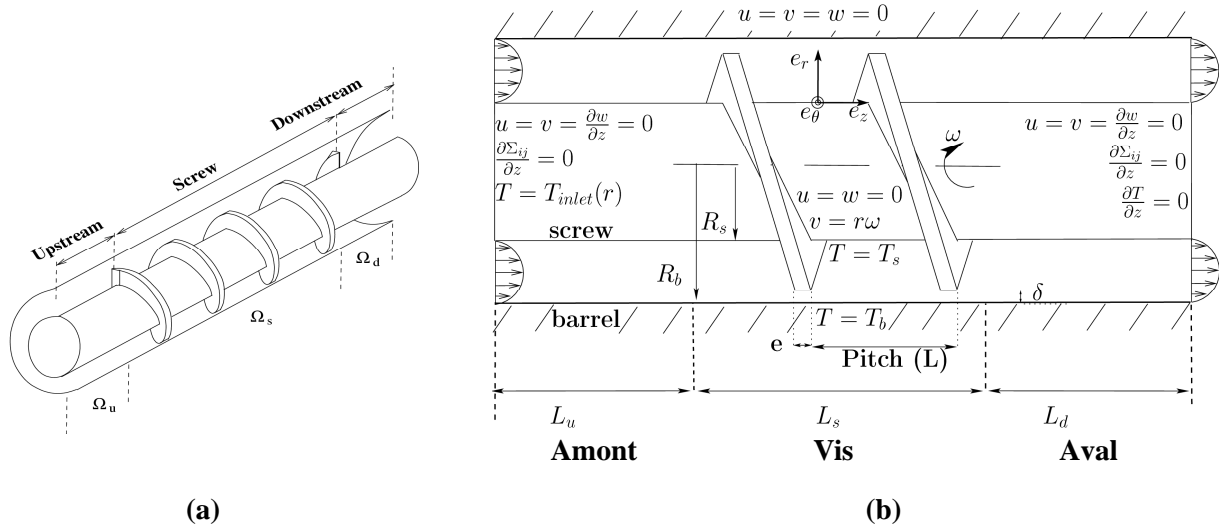


FIG. 1 – (a) Domaine d'écoulement pour un système vis-fourreau (b) Conditions aux limites

2 Equations gouvernantes

Les lois de conservation s'écrivent comme suit :

$$1) \text{ Conservation de la masse : } \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (1)$$

où $\vec{\nabla} \cdot$ désigne l'opérateur divergence, \vec{v} le vecteur vitesse.

$$2) \text{ Conservation des quantités de mouvement : } \rho \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} - \vec{\nabla} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} = \vec{0} \quad (2)$$

où p désigne la pression, ρ la densité du fluide et $\vec{\tau}$ le tenseur des extra-contraintes, relié au tenseur des contraintes totales $\vec{\sigma}$ par la relation $\vec{\sigma} = -p\vec{I} + \vec{\tau}$, où \vec{I} désigne le tenseur unité.

$$3) \text{ Conservation de l'énergie : } \rho \dot{u} = \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + Q \quad (3)$$

où \dot{u} désigne l'énergie interne par unité de masse, \vec{q} le vecteur flux de chaleur et Q le terme source d'énergie. Des considérations d'ordre thermodynamique conduisent aux hypothèses d'une loi de Fourier de conduction thermique, avec $\vec{q} = -k\vec{\nabla}T$ (k , conductivité thermique), d'une énergie interne dépendant seulement de la température, de telle sorte que l'on ait $Q = \vec{\tau} : \vec{L}$ (e.g. Peters, 1993), et de paramètres thermiques constants. L'équation de l'énergie s'écrit alors :

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \vec{\tau} : \vec{L} \quad (4)$$

On peut décrire, par le facteur de translation a_T , la dépendance en température de paramètres rhéologiques tels que la viscosité η et le temps de relaxation λ associé à un fluide viscoélastique, donnés par les relations $\eta(T) = a_T(T)\eta(T_0)$, $\lambda(T) = a_T(T)\lambda(T_0)$, pour lesquelles $\eta(T_0)$ and $\lambda(T_0)$ désignent respectivement la viscosité et le temps de relaxation à une température de référence T_0 . Le facteur de translation a_T obéit à la loi WLF (William-Landel-Ferry) (Ferry, 1980) donnée par :

$$\log a_T = -\frac{C_1(T - T_0)}{C_2 + T - T_0} \quad (5)$$

où C_1 et C_2 sont des paramètres de la loi WLF.

Les modèles rhéologiques sont de types anélastique et viscoélastique, exprimés d'abord dans le cas isotherme. Dans les calculs, nous utilisons les lois de comportement suivantes :

$$(i) \text{ loi newtonienne : } \bar{\tau} = 2\eta_0 \bar{D} \quad (6)$$

où \bar{D} désigne le tenseur des taux de déformation, η_0 la viscosité constante du fluide.

$$(ii) \text{ loi non-newtonienne purement visqueuse: } \bar{\tau} = 2\eta \left(II_{\bar{D}} \right) \bar{D} \quad (7)$$

telle que la viscosité obéit à la loi de Carreau-Yasuda (Bird *et al.*, 1989), donnée par :

$$\eta = \eta_{\infty} + \left[(\eta_0 - \eta_{\infty}) \left(1 + (K\dot{\gamma})^a \right) \right]^{\frac{n-1}{a}}, \text{ avec } \dot{\gamma} = \sqrt{-2II_{\bar{D}}} \text{ (taux de cisaillement généralisé)} \quad (8)$$

$II_{\bar{D}}$ désigne le deuxième invariant du tenseur \bar{D} , η_0 la viscosité à l'origine, a , n et K sont des constantes. On a par ailleurs $\frac{\eta_{\infty}}{\eta_0} = 0.1$, $a = 2$, $n = 0.44$, $K = 0.55$.

(iii) Les deux lois viscoélastiques correspondent aux modèles différentiels de Maxwell (UCM) (Bird *et al.*, 1989) et de Phan-Thien/Tanner (PTT) (Phan-Thien *et al.*, 1979). (concept d'une solution de polymère dans un solvant). Nous considérons un temps de relaxation λ , la contrainte élastique $\bar{\Sigma}$ (pour UCM) ou la contrainte viscoélastique \bar{S} (pour PTT), une viscosité η_S du solvant, η_p viscosité du polymère, avec $\beta = \frac{\eta_p}{\eta}$ relatif à la viscosité globale η , telle que $\eta = \eta_S + \eta_p$.

$$\text{- Equation du modèle UCM : } \lambda \frac{\Delta \bar{S}}{\Delta t} + \bar{S} = 2\beta \eta_0 \bar{D} \quad (9)$$

où $\eta = \eta_p = \text{constante}$, $\eta_S = 0$. $\frac{\Delta}{\Delta t}$ est la dérivée convective supérieure qui comporte le tenseur gradient de vitesse \bar{L} tel que $\frac{\Delta}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} - \bar{L} \cdot - \bar{L}^T$. Nous avons ici $\beta = \frac{\eta_p}{\eta} = 1$, $\bar{\tau} = 2\eta_0 \bar{D} + \bar{S} = 2\eta_0 \bar{D} + \bar{\Sigma}$. Le tenseur des extra-contraintes est $\bar{\tau} = 2\eta_0 \bar{D} + \bar{S} = 2\eta_0 \bar{D} + \bar{\Sigma}$

$$\text{- Equations pour le modèle PTT : } \bar{\tau} = \bar{S} + 2\eta_S \bar{D} ; \lambda \frac{\delta \bar{S}}{\delta t} + g \bar{S} = 2\beta \eta \bar{D} \quad (10)$$

où $\frac{\delta}{\delta t}$ désigne la dérivée convectée de Gordon/Schowalter et nous avons $g = 1 + \frac{\lambda \epsilon}{\eta_{p0}} \text{tr} \bar{S} \cdot \epsilon$ et ξ sont des paramètres matériels. Nous adoptons des valeurs des paramètres pour obtenir une viscosité décroissante en fonction du gradient de vitesse. Les valeurs de viscosité du modèle de Carreau sont ajustées de manière à être identiques à celles du modèle PTT.

Pour la résolution numérique, la discrétisation en espace dans le cas 3D, en situation stationnaire, est réalisée dans le cadre d'une formulation par volumes finis, pour laquelle on définit des grilles décalées, pour les inconnues (\vec{v} , p , $\bar{\tau}$, T) et des schémas performants d'approximation des dérivées (schéma QUICK, par exemple). Les équations gouvernantes discrétisées à partir d'intégrales de volume, en coordonnées cylindriques (Khalifeh *et al.*, 2005). Les conditions aux limites sont indiquées sur la Fig. 1b. Les équations gouvernantes sont alors résolues par un algorithme itératif découplé

3 Résultats numériques

Les simulations ont été menées sur des ordinateurs à processeur Pentium IV-2.8 GHz. Les tests numériques ont permis de retenir les maillages des calculs, les techniques de stockage creux assurant l'optimisation de la place mémoire informatique. Les Figs. 2 à 4 présentent des exemples de résultats cinématiques et thermiques obtenus (température de référence 462K) ainsi que des courbes

caractéristiques d'extrudeuse. La Fig. 2 décrit les différences d'ordre cinématique indiquées par les fluides considérés. Les fluides à viscosités constantes newtonien (NEWT) et UCM montrent des similitudes du point de vue cinématique, d'une part, de même que les fluides rhéofluidifiants de Carreau (CAR) et de Phan-Thien/Tanner (PTT), d'autre part, en particulier pour les zones de recirculations au sein de l'entrefer..

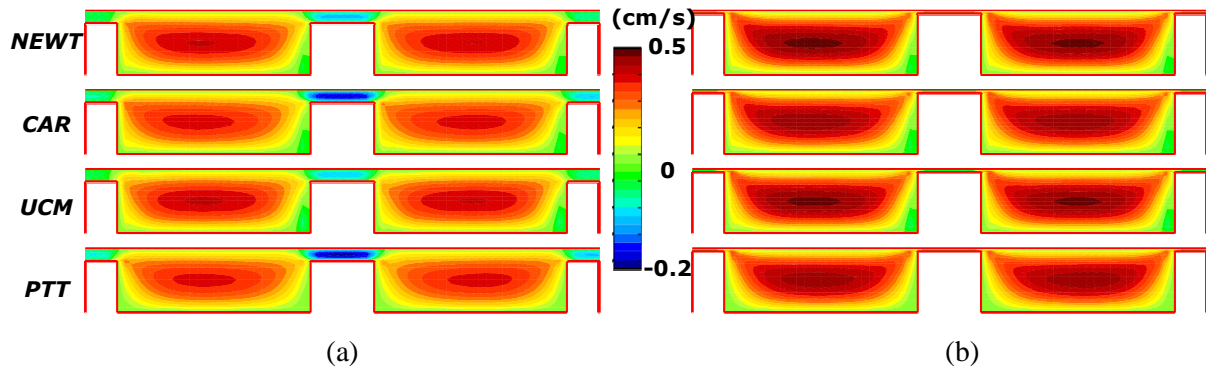


FIG. 2 – Profils de vitesse calculés w dans une section azimutale de la géométrie vis-fourreau avec différents fluides, vitesse de rotation de vis $\omega=1$ rad/s, pour deux configurations géométriques (a) taux d'entrefer de 20% ; (b) taux d'entrefer de 5%

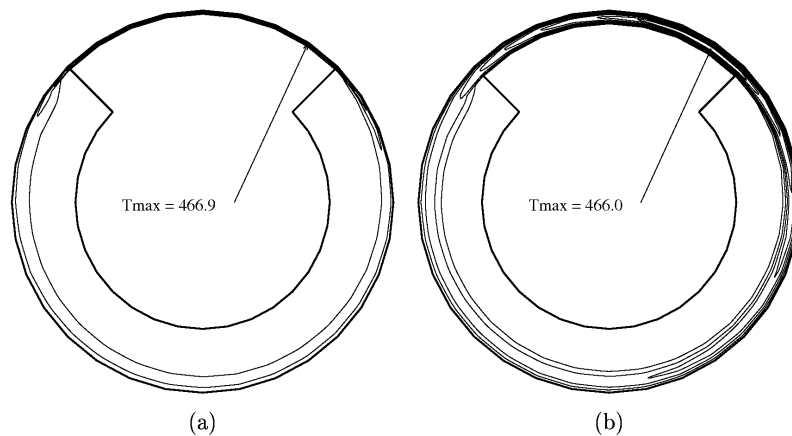


FIG. 3 – Températures calculées dans une section d'écoulement établi d'un système vis-fourreau dans deux configurations géométriques d'entrefer (a) 5% et (b) 20%. La zone d'entrefer est celle correspondante au maximum de température

La Fig. 3 présente les isovaleurs de température, dans une section droite d'écoulement établi, pour un cas où celles de la vis et du fourreau sont supposées identiques, dans deux configurations géométriques d'entrefer. Le décalage entre la température maximale et celle de référence atteint près de 5K pour la géométrie avec entrefer faible (5%).

La Fig. 4 montre des courbes caractéristiques d'extrudeuse. Les courbes de débit en fonction de la perte de charge de la Fig. 4a, qui sont des droites d'après le modèle théorique de Crawford, 1987, pour un fluide newtonien, permettent de déterminer le point de fonctionnement de l'extrudeuse qui se déplace sur ces courbes.. Les graphiques déduits de nos simulations numériques pour des fluides newtoniens de différentes viscosités sont également des droites, décalées par l'ordonnée à l'origine et de pentes différentes de celles données par le modèle théorique. La Fig. 4b montre l'influence de l'entrefer sur les courbes caractéristiques calculées à partir de nos simulations 3D, pour un fluide rhéofluidifiant à loi de Carreau.

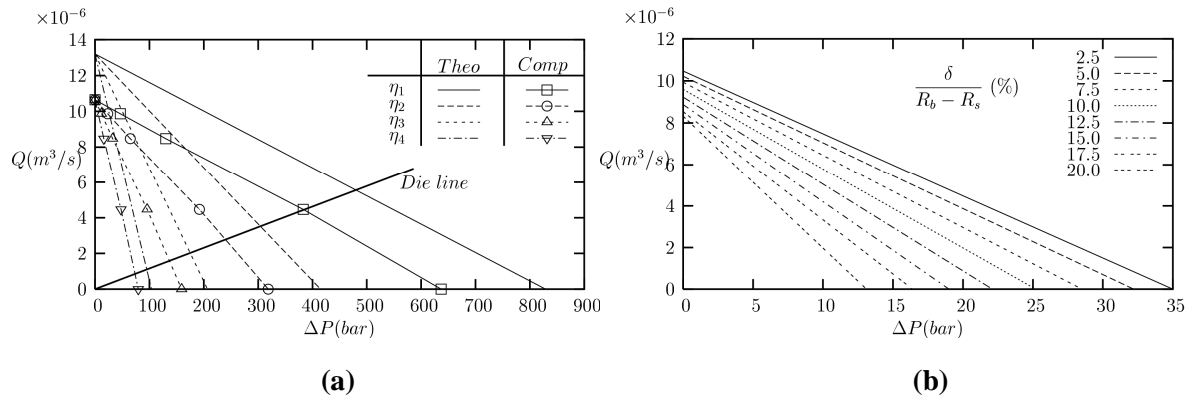


FIG. 4 – Courbes caractéristiques d’extrudeuse (a) Courbes théoriques pour un fluide newtonien de débit Q en fonction de la perte de charge ΔP , pour différentes viscosités $\eta_1 = 2 \times 10^4 \text{ Pa.s}$, $\eta_2 = 10^4 \text{ Pa.s}$, $\eta_3 = 5 \times 10^3 \text{ Pa.s}$, $\eta_4 = 2.5 \times 10^3 \text{ Pa.s}$, comparées à celles obtenues par nos calculs ; (b) Courbes caractéristiques $Q(\Delta P)$ pour un fluide de Carreau, for en fonction de l’entrefer (en pourcentages de $\frac{\delta}{R_b - R_s}$) d’une extrudeuse (Fig. 1b), pour une vitesse de rotation $\omega = 3 \text{ rad/s}$

4 Conclusions

L’étude numérique tridimensionnelle effectuée dans le cadre des volumes finis nous a permis d’étudier le comportement de fluides complexes variés dans une extrudeuse. Les résultats obtenus dans différentes configurations géométriques ont permis de quantifier l’écoulement, en ce qui concerne la cinématique, les températures, les pressions et contraintes et de déterminer également les courbes caractéristiques d’extrudeuse de manière beaucoup plus précise que les données fournies par des approches analytiques basées sur des approximations. Les résultats permettent également de préciser les réponses des fluides en fonction de leurs propriétés rhéologiques, notamment des variations de viscosité et de l’élasticité.

Références

- Bird, R.B. Armstrong R.C. & Hassager O. 1989. Dynamics of polymer liquids. Wiley, New-York
- Crawford. R.J. 1987. Processing of Plastics. Chapter 4 in “Plastic Engineering”, 2nd Ed., 154-223, Pergamon Press. Elmsford, N.Y.
- Ferry D. 1980. Viscoelastic properties of polymers, J. Wiley and Sons, New-York
- Khalifeh A. & J.-R. Clermont. 2005. Numerical simulations of non-isothermal three-dimensional flows in an extruder by a finite-volume method. J. Non-Newton. Fluid Mech., 126, 7-22
- Lai E. & Yu Wen D. 2000. Modeling of the plasticating process in a single-screw extruder with flow analysis network. A fast-track approach. Polym. Eng. Science, Vol. 40, No 5, 1074-1084
- Peters G.W.M. 1993. Thermorheological modelling of viscoelastic materials. IUTAM Symposium on non-isothermal flows of viscoelastic fluids, Kluwer Academic Publisher
- Phan-Thien N. & Tanner R.I. .1979. A new constitutive equation derived by network theory. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2: 353-365
- Syang-Peng Rwei. 2001. Distributive mixing in a single-screw extruder. Evaluation in the flow direction with flow analysis network method. Pol. Eng. Science, Vol. 41, No 10, 1665-1673
- Tadmor Z. & C.G. Gogos. 1979. Principles of Polymer Processing, Wiley and Sons