VI.1. Modélisation 1D

Différents modèles sont disponibles, du plus simple (1D) au plus complexe (3D). Avant de mettre en place un modèle 3D, nous avons tout d'abord implémenté un modèle 1D. Le but est ici de voir si un modèle simple nous permet d'obtenir des résultats proches (ou non) de nos résultats expérimentaux.

VI.1.1. Mise en place du code 1D

Dans le but de modéliser l'écoulement du mélange élastomère dans l'extrudeuse monovis, deux modèles 1D (newtonien équivalent et modèle loi puissance) ont été développés. Ces modèles se fondent sur plusieurs approximations et hypothèses classiquement faites. Rappelons ici que, dans le cas des élastomères, seule la zone de pompage est à considérer.

VI.1.1.1 Hypothèses et approximations des modèles

Les hypothèses et approximations faites sont celles détaillées dans le chapitre bibliographique. Elles concernent :

- Le déroulement du chenal, qui devient alors un chenal rectiligne de section rectangulaire, de hauteur H et de largeur W (Fig.VI.1). On réalise alors une transformation du domaine hélicoïdal occupé par le fluide en un domaine rectiligne plus simple à mailler,
- Le fourreau est fixe et la vis tourne autour.



Fig.VI.1. Schéma du chenal autour de la vis (a) et du chenal déroulé (b) (Vergnes et Puissant, 2002) Voici les caractéristiques de l'extrudeuse présentée dans le chapitre précédent :

Diamètre extérieur D _{ext}	60 mm
Angle du filet $ heta$	12°
Largeur du chenal W	33,3 mm
Hauteur du filet H	10 mm
Longueur du chenal déroulé Z_p	1734 mm

Tableau VI.1. Caractéristiques géométriques de l'extrudeuse

Le calcul de la longueur du chenal déroulé se fait à l'aide de la formule suivante (Eq.VI.1) :

$$Z_p = nombre \ d'hélices. \ longueur \ d'une \ hélice = 9. Z = \frac{9\pi D_{ext}}{\cos(\theta)}$$
(Eq. VI.1)

Notons que le choix du diamètre pour le calcul de la longueur du chenal déroulé a été ici D_{ext} , mais il est possible de dérouler le chenal suivant d'autres hypothèses : D_{int} ou la moyenne des diamètres D_{ext} et D_{int} . Comme on peut le voir dans le tableau VI.2, la valeur de la longueur du chenal déroulé varie sensiblement selon l'hypothèse choisie.

Diamètre utilisé pour le calcul de ${\cal Z}_p$	Valeur de Z_p (mm)
D _{int}	1156
D _{ext}	1734
$\frac{D_{ext} + D_{int}}{2}$	1445

Tableau VI.2. Valeurs de la longueur du chenal déroulé selon le diamètre

L'expression de la vitesse dans le sens de l'écoulement (direction z) vaut (Fig.VI.1):

$$V_{FZ} = V_F * \cos(\theta) = \frac{N}{60} * \pi D_{ext} * \cos(\theta)$$
 (Eq. VI.2)

avec N la vitesse de rotation de la vis en tours par minute, D_{ext} le diamètre extérieur de la vis, θ l'angle du filet par rapport à un plan perpendiculaire à l'axe de la vis. La vitesse dans le sens perpendiculaire vaut :

$$V_{FX} = V_F * \sin(\theta) = \frac{N}{60} * \pi D_{ext} * \sin(\theta)$$
 (Eq. VI.3)

Le modèle étant un modèle 1D, le chenal est découpé en tranches de longueur dz et la température est considérée comme homogène dans la tranche.

VI.1.1.2 Description du code

Le code est un code développé, au CEMEF, sous Matlab© par L. Sardo et suit l'organigramme suivant (Fig.VI.2) :



Fig.VI.2. Organigramme du code 1D

Les paramètres d'entrée sont :

- Les données matériaux (viscosité, densité, capacité calorifique,...),
- La géométrie de la vis et du fourreau (largeur, hauteur du chenal, pas, ...),
- Les conditions opératoires (débit, vitesse de rotation, température de régulation de chacune des parties de l'extrudeuse (PA, cylindre et vis)),
- La température du polymère à l'entrée de la vis (25°C).

Dans le cas de l'extrusion des élastomères, la longueur de remplissage n'est pas forcément totale et n'est pas connue par avance. Les équations de mécanique et de thermique étant différentes selon le remplissage du chenal (complètement rempli ou sous-rempli), on choisit d'effectuer le calcul de la sortie de l'extrudeuse vers l'entrée. Ce type de méthode a déjà été utilisé par Koscher (2003). Tant que l'écart, en entrée, entre la température calculée et la température imposée est supérieur à 1 Kelvin, nous rebouclons en modifiant la température finale de manière à converger. Cette méthode itérative s'initialise en choisissant une valeur approchée de la température de sortie. L'écoulement dans les tubes n'est pas calculé mais leur présence est prise en compte en imposant une pression en fin de vis.

VI.1.1.3 Modèle thermique

Le modèle étant 1D, la thermique est considérée comme isotherme dans la tranche. C'est une hypothèse forte car nous avons vu que le nombre de Péclet peut être grand et le nombre de Cameron petit. Nous appliquons l'équation de l'énergie sur le volume d'une tranche :

$$\rho c_p Vol \overline{V_z} \frac{dT}{dz} = q + \dot{W}$$
(Eq.VI.4)

avec ρ la masse volumique du polymère, c_p sa capacité thermique massique, *Vol* le volume de la tranche (*Vol* = *WHdz*), $\overline{V_z}$ la vitesse moyenne dans la tranche, q la conduction aux parois considérées et \dot{W} la dissipation visqueuse dans la tranche.

La conduction aux parois se calcule de la façon suivante :

$$q = \sum_{i=1}^{np} h_{Ti} (T_{pi} - \bar{T}) S_{pi}$$
(Eq.VI.5)

où, np est le nombre de parois considérées, h_{Ti} le coefficient de transfert thermique entre le polymère et la paroi, T_{pi} la température de régulation de la paroi, \overline{T} la température moyenne dans la tranche et S_{pi} la surface de contact entre la paroi et le polymère.

Le calcul de la dissipation visqueuse dépend du modèle choisi. L'évolution de la température d'une tranche à l'autre s'écrit:

$$T(i) = T(i+1) - \Delta T = T(i+1) - \frac{q + \dot{W}}{\rho c_p Vol\overline{V_z}} dz$$
(Eq.VI.6)

VI.1.1.4 Modèle en loi puissance

Dans le modèle en loi puissance, la viscosité est décrite par une loi puissance (Eq.IV.7). Ce modèle apporte également une solution analytique de l'écoulement tout en prenant en compte le caractère rhéofluidifiant du polymère. Notons que la difficulté ici est que le découplage des écoulements longitudinaux et transversaux ne peut plus être effectué. Seul l'écoulement longitudinal est alors considéré, ce qui est une grosse approximation. La loi puissance utilisée ici est celle déterminée au Chapitre III pour le mélange SBR chargé à 33% en masse en noir de carbone (mélange utilisé pour les essais d'extrusion) :

$$\eta = K a_T^{\ m} \dot{\gamma}^{m-1} \tag{Eq.VI.7}$$

où K vaut 283 000 Pa.s^m, m 0,23, et a_T suit la loi d'Arrhénius suivante (déterminée au Chapitre III) :

$$a_T(T) = exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right]$$
(Eq.VI.8)

avec $E = 51\,000\,J/mol$.

L'utilisation d'une telle loi complexifie les équations, c'est pourquoi certaines approximations sont faites :

Les effets de bords sont négligés. Cette hypothèse est valide (Agassant et al., 1996) lorsque la largeur du chenal est grande devant sa hauteur (W/H >> 10) et il n'est alors pas nécessaire d'utiliser les facteurs de corrections. Dans notre cas, le rapport W/H est inférieur à 4, il est donc communément admis que les parois du chenal influent sur le débit total. Il conviendrait donc d'appliquer des facteurs de corrections. Cependant, leur prise en compte ici est complexe car ils

varient avec l'indice de pseudoplasticité du polymère. Dans ce modèle, nous négligerons donc les effets de bords et n'appliquerons pas de facteurs de corrections.

- L'écoulement de recirculation est négligé.

VI.1.1.4.a. Equations mécaniques dans la zone sous remplie

Dans le cas du chenal sous rempli, dans le sens de l'écoulement, seul l'écoulement de cisaillement est présent.

Le taux de cisaillement vaut donc :

$$\dot{\gamma}_{zy} = \frac{V_{Fz}}{H}$$
(Eq.VI.9)

Il est possible de remonter à la largeur remplie du chenal, notée W^* , grâce à l'équation du débit :

$$Q_{impos\acute{e}} = V_{FZ} \frac{H}{2} W^* \tag{Eq.VI.10}$$

où $Q_{imposé}$ est le débit de polymère imposé.

VI.1.1.4.b. Equations mécaniques dans la zone entièrement remplie

Le débit et la vitesse du fourreau (et donc le débit de cisaillement) étant imposés, le débit dû à la pression est la différence des deux. Il existe quatre types de profil de vitesse que nous pouvons rencontrer (Fig.VI.3) :

- Le profil n°1 se rencontre pour un fort écoulement de contre-pression, nous voyons qu'il y a une recirculation et un extremum sur le profil de vitesse,
- Le profil n°2 se rencontre dans le cas d'un écoulement avec une faible contre-pression, la vitesse augmente avec la hauteur dans le chenal,
- Le profil n°3 se rencontre dans le cas d'un écoulement dû à un faible gradient de pression négatif, la vitesse croît avec la hauteur dans le chenal,
- Le profil n°4 se rencontre pour un fort gradient de pression négatif, nous voyons un extremum de la vitesse.

Dans chacun des cas exposés ci-dessus, les couples d'équations à résoudre pour déterminer le gradient de pression diffèrent. Ceci est lié au fait que les conditions aux limites utilisées pour déterminer les équations des taux de cisaillement changent.



Fig.VI.3. Ecoulements dans la zone entièrement remplie

Nous expliciterons ici les cas rencontrés dans l'extrudeuse monovis modélisée, à savoir le profil n°1, où le contre-débit est important et le profil n°2, où le contre-débit est faible.

• Contre-débit faible :

Dans le cas d'un contre-débit faible, l'écoulement dominant est l'écoulement de cisaillement (écoulement de contre-pression faible par rapport à l'écoulement de cisaillement). Le taux de cisaillement est donc toujours positif (Fig.VI.3, profil n°2). Les équations de l'écoulement à résoudre, pour déterminer le gradient de pression, sont les suivantes :

$$U(y = H) = V_{FZ} = \left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{K a_T^m}\right)^{1/m} \frac{m}{m+1} \left[(H + C_1)^{m+1/m} - C_1^{m+1/m} \right]$$
(Eq.VI.11)

$$Q_{impos\acute{e}} = \left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{K a_T^m}\right)^{1/m} \frac{m}{m+1} \left[\frac{m}{2m+1} \left((H+C_1)^{2m+1/m} - C_1^{2m+1/m}\right) - C_1^{m+1/m}H\right] W$$
(Eq.VI.12)

où C_1 est une constante d'intégration. Sa valeur est obtenue par la résolution des équations (Eq. VI. 11) et (Eq. VI. 12).

• Contre-débit important :

Dans le cas d'un écoulement de contre pression important (Fig.VI.3, profil n°1), pour une hauteur de chenal y^* , le taux de cisaillement change de signe. Cet écoulement est alors décrit par deux couples d'équations. Un premier, pour les hauteurs de chenal comprises entre 0 et y^* (où le taux de cisaillement est négatif) et un second, pour les hauteurs de chenal comprises entre y^* et H.

Pour y $\langle y^*$:

Le taux de cisaillement est toujours négatif dans cette partie et s'écrit :

$$\dot{\gamma}_1 = \frac{\partial U_1}{\partial y} = -\left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}} \cdot (y^* - y)^{\frac{1}{m}}$$
(Eq.VI.13)

Les équations décrivant le profil de vitesse et le débit (pour cette section du chenal) sont donc les suivantes :

$$U_1(y) = -\left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}}\frac{m}{m+1}\left[(y-y^*)^{\frac{m+1}{m}} + (y^*)^{\frac{m+1}{m}}\right]$$
(Eq.VI.14)

$$Q_1 = \int_0^{y^*} U_1(y) W dy = -\left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}} \frac{m}{m+1} W\left[\frac{m+1}{2m}(y^*)^{\frac{2m+1}{m}}\right]$$
(Eq.VI.15)

Pour $y > y^*$:

Ici, le taux de cisaillement est toujours positif dans cette partie :

$$\dot{\gamma}_2 = \frac{\partial U_2}{\partial y} = \left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}} \cdot (y - y^*)^{\frac{1}{m}}$$
(Eq.VI.16)

Les équations décrivant le profil de vitesse et le débit (pour cette section du chenal) sont donc les suivantes :

$$U_2(y) = \left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}}\frac{m}{m+1}\left[(y-y^*)^{\frac{m+1}{m}} - (H-y^*)^{\frac{m+1}{m}}\right] + V_{FZ}$$
(Eq.VI.17)

$$Q_2 = \int_0^{y^*} U_2(y) W dy = -\left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}} \frac{m}{2m+1} (H-y^*)^{\frac{2m+1}{m}} W + V_{FZ} W (H-y^*)$$
(Eq.VI.18)

 y^* et $\frac{dP}{dz}$ se déterminent grâce aux équations de continuité des vitesses en y= y^* (Eq.VI. 13 et 16) et du débit « imposé » (Eq.VI. 14 et 17) :

$$\left(\frac{dP}{dz}\frac{1}{Ka_T^m}\right)^{\frac{1}{m}}\frac{m}{m+1}\left[(y^*)^{\frac{m+1}{m}} - (H-y^*)^{\frac{m+1}{m}}\right] + V_{FZ} = 0$$
(Eq.VI.19 & 20)

 $Q_{impos\acute{e}} = Q_1 + Q_2$

VI.1.1.4.c. Détermination de la dissipation visqueuse

Dans le cas du modèle loi-puissance, la dissipation visqueuse se calcule de la façon suivante :

$$\dot{W} = \int_{0}^{H} K a_{T}^{m} [\dot{\gamma}(y)]^{m+1} W dz dy$$
 (Eq.VI.21)

La thermique de l'écoulement peut donc être résolue grâce aux équations (Eq.VI. 3, 4 et 21).

VI.1.2. Comparaison des résultats de la simulation numérique 1D aux résultats expérimentaux

Afin d'évaluer la pertinence du modèle 1D pour la simulation du procédé d'extrusion pour le mélange SBR chargé à 33% en masse en noir de carbone, les résultats issus de la simulation numérique sont confrontés aux résultats expérimentaux.

Notons que, le débit expérimental étant une donnée d'entrée du code, il sera toujours en légende des figures et nous préciserons alors si ce débit correspond à un essai réalisé sans ou avec 1 ou 2 tubes en sortie d'extrudeuse.

VI.1.2.1 Etude de l'évolution des courbes de pression et de température le long de la vis

Avant l'étude de sensibilité et de pertinence du code, tentons de comprendre ce qui se passe physiquement pour le matériau au travers des courbes de pression et de température le long de la vis. Par l'observation de ces courbes, nous pourrons en effet mettre en évidence des mécanismes élémentaires tels que le sous-remplissage, les échauffements de type dissipatifs, les effets du nombre de tubes en sortie, etc..

Pour faire cette étude, nous prenons une température identique, pour les différentes parties de l'extrudeuse et de la vis, de 90°C. Les tubes n'étant pas pris en compte dans le code, on simule leur présence en imposant la pression en P₄. En effet, imposer une pression plus importante en P₄ revient à avoir une filière plus restrictive en sortie, ce qui équivaut à avoir plus de tubes.

Différents cas tests sont possibles :

- Cas 1 : Résolution des équations de la mécanique sans la présence de la thermique
- Cas 2 : Résolution des équations de la mécanique et de la thermique de façon découplée
 - Cas 2.1 : En conditions adiabatiques
 - Cas 2.2 : En tenant compte des échanges avec les parois (coefficients de transferts aux parois)
- Cas 3 : Résolution des équations de la mécanique et de la thermique de façon couplée avec la prise en compte des échanges avec les parois.

Notons que les cas 1, 2.1 et 2.2 amènent aux mêmes résultats concernant l'évolution de la pression le long de la vis, c'est pourquoi le cas 1 sera représenté au travers du cas 2.1 sur la courbe de pression.

Pour l'étude présentée ci-après, voici les paramètres utilisés :

- Débit : 49,2 kg/h,
- Vitesse : 40 tr/min,
- Deux pressions P₄ de 27,8 et 100 MPa.

Notons que la pression de 27,8 MPa correspond à une pression observée expérimentalement dans le cas d'un essai à une vitesse de vis de 40 tr/min, à 2 tubes pour la configuration (90, 90, 90). La seconde pression a été choisie arbitrairement, mais suffisamment importante comparée à la première. Ceci a été effectué dans le but de rendre compte de l'existence des tubes et de comparer les résultats obtenus pour ces deux pressions.

Intéressons-nous tout d'abord aux résultats obtenus pour les différents cas (2.1, 2.2 et 3) lorsqu'une pression de 27,8 MPa est imposée en P_4 (Fig.VI.4.a et b).



Fig.VI.4. a. Evolution de la pression le long de la vis pour différents cas, b. Evolution de la température le long de la vis pour différents cas

Dans le cas où les équations de la mécanique et de la thermique sont résolues de façon découplée (Cas 2.1 et 2.2), on remarque que l'évolution de la pression le long de la vis est identique et qu'un sous-remplissage important existe (Fig.VI.4.a). L'existence d'un sous-remplissage important montre l'existence d'un débit de contre-pression faible.

Pour ces mêmes cas (2.1 et 2.2), l'évolution de la température dans la zone remplie est différente selon que l'on est en conditions adiabatiques ou que des échanges aux parois existent (coefficient de transfert) (Fig.VI.4.b). En effet, en conditions adiabatiques, on observe une évolution linéaire de la température. Cette augmentation représente l'échauffement du matériau dû à la dissipation visqueuse. Cette augmentation est limitée lorsque des échanges avec les parois existent. En effet, ces échanges (effets conductifs) limitent les effets dissipatifs. Ainsi dans certains cas, il est possible d'approcher un équilibre entre ce qui est créé (échauffement par dissipation) et ce qui est perdu (perte de chaleur grâce aux effets conductifs).

La résolution des équations de la mécanique et de la thermique de façon couplée (Cas 3) change de façon importante les résultats. En effet, dans ce cas, le gradient de pression diminue et donc le sous-remplissage aussi, par augmentation du débit de contre-pression. Ceci est dû à l'effet de la dissipation visqueuse qui, par augmentation de la température, diminue la viscosité.

La diminution du gradient de pression entraîne une diminution de la dissipation visqueuse, ce qui limite l'échauffement du matériau en plus des échanges aux parois. C'est pourquoi on observe une température moins élevée comparée aux cas précédents (Cas 2.1 et 2.2) (Fig.VI.4.b). De plus, on peut remarquer que l'on tend vers une température d'équilibre.

Afin d'observer l'influence des tubes sur les profils de pression et de température le long de la vis, comparons les résultats obtenus pour des pressions P_4 de 27,8 MPa et de 100 MPa. Nous ne nous intéresserons ici qu'aux cas 2.2 (résolution découplée des équations de la thermique et de la mécanique) et 3 (résolution couplée des équations de la thermique et de la mécanique).



Fig.VI.5. a. Comparaison de l'évolution de la pression le long de la vis pour différents cas selon la pression imposée en P_4 , b. Comparaison de l'évolution de la température le long de la vis pour différents cas selon la pression imposée en P_4

Pour une résolution dans le cas 3 (couplage thermique et mécanique), que l'on impose une pression en P_4 de 27,8 ou 100 MPa, on remarque que les températures en fin de vis sont identiques, mais que leur évolution en début de vis est différente. Cette différence est due à la dissipation visqueuse qui est plus importante dans le cas où P_4 vaut 100 MPa, car le gradient de pression est bien plus important.

Quant aux pressions, on remarque un débordement de la matière pour le cas 3 avec une pression en tête de 100 MPa. Afin de diminuer le remplissage, il faudrait diminuer le gradient de pression ou le débit de contre-pression (en jouant sur la viscosité).

VI.1.2.2 Etude de la sensibilité et de la pertinence du modèle

Dans cette partie, nous effectuons une étude de sensibilité du modèle à différents paramètres (coefficients de transfert aux parois, débit, vitesse). On juge aussi de la pertinence du modèle en comparant les résultats obtenus de l'étude de sensibilité avec les résultats expérimentaux. L'objectif ici est de voir si le code prédit les résultats expérimentaux en tenant compte d'une éventuelle variabilité dans ses paramètres d'entrée.

VI.1.2.2.a. Etude de la sensibilité au maillage

Une étude de sensibilité des résultats à la taille de maille est réalisée. Cette étude a pour but de déterminer la taille de maille minimale que l'on peut prendre pour effectuer les tests de simulation. Cette taille minimale est la taille de maille pour laquelle une convergence des résultats est observée. Dans un code 1D, la taille de maille vaut dz (épaisseur de la tranche). Différentes tailles de mailles correspondant aux nombres de mailles suivantes ont été testées : 25, 50, 100, 200, 400, 800, 1000, 2000, 4000 et 8000. Concernant les coefficients de transferts aux parois (vis et fourreau), ils ont été choisis égaux à 300 W/m²/K. Le choix du cas pour évaluer l'influence de la taille de maille sur les résultats de la simulation numérique s'est porté vers l'essai expérimental ayant la contre-pression la plus importante. En effet, ce cas est celui pour lequel le plus de chaleur est dissipée.

Les données d'entrée du code pour ce cas sont les suivantes :

- Températures :
 - PA et fourreau : 90°C
 - Vis : 90°C
- Vitesse de vis : 70 tr/min
- Nombre de tubes : 2
- Débit : 83,4 kg/h.



Fig.VI.6.a. Effet du nombre de mailles sur l'évolution de la température le long de la vis, b. Zoom sur la fin du profil de température



Fig.VI.7. Evolution de la pression maximale avec le nombre de mailles

Le profil de température diffère peu selon le nombre de mailles utilisées, excepté pour la fin du profil (Fig.VI.6.a et b). En effet, la température évolue différemment selon le nombre de mailles. On note que, pour un nombre de maille minimum de 200, le nombre de maille n'influe plus sur le profil de température. Si l'on regarde l'évolution de la pression maximale en fonction du nombre de mailles (Fig.VI.7), aucune évolution n'a lieu pour un nombre de mailles supérieur ou égal à 2000. Notons que pour un nombre de maille compris entre 200 et 1000, peu d'évolution de la valeur de la pression maximale est observée.

De cette étude de sensibilité au maillage, on peut voir que pour un nombre de maille minimal de 200 (soit une taille de maille minimale de 8,75 mm), une stabilisation des résultats (température et pression) est obtenue. C'est pourquoi nous avons choisi cette taille de maille pour la suite des tests de simulation numérique.

VI.1.2.2.b. Etude de la sensibilité aux coefficients de transferts aux parois et pertinence du modèle

Une étude de la sensibilité aux coefficients de transferts aux parois (et de pertinence du modèle) est effectuée. L'extrudeuse, présentée Chapitre V, est divisée en trois parties au niveau du fourreau : la partie d'alimentation, la partie cylindre et la partie voûte. Dans cette étude de sensibilité, nous considérons un seul coefficient de transfert pour la partie fourreau, soit pour les trois parties (PA, cylindre et voûte). On l'appelle et le note dans la suite « hT_fourreau ». Le coefficient de transfert aux parois de la vis sera noté « hT_vis ». Il est donc possible de modifier les valeurs de ces deux coefficients de transferts. Voici les différentes valeurs choisies pour les coefficients de transfert aux parois de la vis et du fourreau (en W/m²/K) :

- hT_vis : [50, 100, 150, 200, 300, 500]
- hT_fourreau = [100, 150, 200, 300, 400, 500].

Dans la suite, pour indiquer les valeurs prises pour le coefficient de transfert pour la vis et pour le fourreau, on utilisera la notation suivante: [150, 200]. Ce qui signifie que, pour ces deux coefficients, l'on obtient les 4 couples de valeurs suivants : [150, 200], [150, 150], [200, 150], [200, 200].

Les tests ont été effectués pour toutes les vitesses d'essais (15, 40 et 70 tr/min). Seuls les résultats obtenus pour la vitesse de 40 tr/min et pour des valeurs de h_T de 150, 300 et 500 W/m²/K seront présentés ici.

• <u>Configuration (90, 90, 90)</u>

Les évolutions de la pression et de la température, pour la vitesse de référence de 40 tr/min et la configuration (90, 90, 90) sont représentées figure VI.8 et comparés aux données expérimentales obtenues avec 2 tubes. Les points rouges représentent les valeurs de pression mesurées par les capteurs lors des essais d'extrusion et le point noir représente la valeur de la température mesurée dans la voûte à l'aide d'un thermocouple plongé dans la matière (T₄, cf. Chapitre V).



Fig.VI.8. Evolution de la pression et de la température pour la configuration (90, 90, 90), 2 tubes, 40 tr/min, Q = 49,2 kg/h (points expérimentaux représentés en rouge pour la pression et en noir pour la temperature de sortie) $a. h_{\tau} = [150, 300]$; b. $h_{\tau} = [300, 500]$

Un sous remplissage léger est obtenu en simulation, alors qu'un remplissage complet est observé lors des expériences. Concernant les profils de pression, ils sont peu différents selon les h_T choisis. Des h_T faibles permettent de réduire très faiblement le sous remplissage (Fig.VI.8.a). Concernant les profils de températures, ils sont très proches sauf en sortie où l'on peut voir l'influence du coefficient d'échange choisi pour le fourreau. La température de sortie (simulation) est proche de la température mesurée lorsque le coefficient d'échange du fourreau est égal à 300 W/m²/K.

Notons que le gradient de pression obtenu numériquement diffère légèrement du gradient de pression expérimental (en début de vis). Cette différence peut être due soit à une mauvaise estimation du débit de convoyage impliquant alors une mauvaise estimation du débit de contre-pression, soit à un effet de la température (le gradient de pression étant inversement proportionnel à la viscosité, dépendant elle de la température).

o Autres configurations

Une comparaison des profils (de pression et de température) obtenus pour les autres configurations est faite ici pour une vitesse de 40 tr/min et différents coefficients de transfert. Notons que ces simulations ont été réalisées à l'aide des débits expérimentaux obtenus pour les essais avec 2 tubes en sortie d'extrudeuse.

Notons, que pour la configuration (30, 30, 50), seule la vitesse de 15 tr/min a été réalisée en essais dans le cas où 2 tubes se trouvent en sortie d'extrudeuse. C'est pourquoi cette configuration n'est pas présentée ici.





Fig.VI.9. Evolution de la pression et de la température pour la vitesse de 40 tr/min, 2 tubes et différentes configurations Colonne de gauche : h_T = [150, 300] ; Colonne de droite : h_T = [300, 500]

De façon générale, comme il l'a été constaté pour la configuration (90, 90, 90), les coefficients de transferts aux parois ont peu d'influence sur le profil de pression. Concernant les profils de température, ils se voient modifiés en fin d'extrudeuse. En effet, un coefficient de transfert important (500 W/m²/K) diminue de plus de 10°C les températures de sortie. Cette valeur de transfert thermique tend à éloigner les résultats du modèle des résultats expérimentaux. De plus, l'évolution de la température en début de vis, lors d'un sous-remplissage, est certainement sous-estimée. On voit alors les problèmes que peut engendrer le fait de commencer la résolution en commençant par la fin de la vis sur la thermique.

Notons de plus que, pour la configuration (90, 30, 50), le profil de pression obtenu avec le modèle est très éloigné des résultats expérimentaux. En effet, le gradient de pression obtenu numériquement est nettement supérieur au gradient de pression expérimental. Ceci engendre alors certainement une dissipation visqueuse calculée qui est elle aussi supérieure à la dissipation visqueuse réelle.

Nous pouvons conclure de cette étude sur l'influence des coefficients de transfert thermique que des coefficients pas trop élevés semblent les mieux adaptés. Notons de plus que l'existence de gradients transverses de température n'est pas prise en compte dans ce modèle. En effet, on considère que la température est constante dans une tranche (dz), ce qui n'est certainement pas le cas. En effet, le matériau se trouvant proche du fourreau est nettement plus cisaillé que celui se trouvant à proximité de la vis, créant alors un échauffement local plus important. La non prise en compte de ces gradients peut engendrer une surestimation ou sous-estimation des échanges thermiques (dissipation et transfert aux

parois) selon les températures imposées à la vis et sur le fourreau et donc une mauvaise estimation des coefficients de transferts à imposer.

Quand bien même il n'existe pas un couple unique de valeurs (hT_vis, hT_fourreau) valable dans tous les cas, nous utiliserons, dans la suite, une valeur du coefficient d'échange aux parois de 150 et 300 W/m²/K, respectivement pour la vis et le fourreau.

VI.1.2.2.c. Etude de la sensibilité à la vitesse et pertinence du modèle

Une étude de la sensibilité à la vitesse a été effectuée. Des variations sur la vitesse de +/- 7 % et de +/- 3,5 % ont été considérées. Cette étude a été réalisée pour toutes les vitesses, mais les résultats numériques restant éloignés des résultats expérimentaux, nous ne montrerons ici que les résultats obtenus pour des variations de vitesse autour de la valeur de 40 tr/min (vitesse médiane des essais parmi les trois vitesses d'essais). Rappelons que les débits utilisés dans le code sont les débits expérimentaux.

• <u>Configuration (90, 90, 90)</u>

Les évolutions de la pression et de la température, pour la vitesse de référence de 40 tr/min et la configuration (90, 90, 90) sont représentées ci-dessous pour les différents tubes :



Fig.VI.10. Etude la sensibilité à la vitesse sur l'évolution de la pression et de la température pour la configuration (90, 90, 90), 40 tr/min, hT_vis =150, hT_fourreau = 300 : a. 0 tube (Q = 17,4 kg/h), b. 1 tube (Q = 62,4 kg/h), c. 2 tubes (Q = 49,2 kg/h)

Dans le cas à 0 tube, on remarque qu'une modification de la vitesse n'a aucun effet sur les profils de pressions et n'a que peu d'effet sur les températures (plutôt en sortie). Cependant, notons ici que les résultats expérimentaux obtenus à 0 tube ne sont pas fiables. L'obtention d'un débit bien inférieur aux autres cas (1 et 2 tubes) n'est bien évidemment pas logique. En effet, la diminution de la restriction de

filière (soit la diminution du nombre de tube) doit permettre l'obtention d'un débit plus important ! Concernant le cas à 1 tube, la vitesse de 40 tr/min (valeur de la vitesse d'essai) permettait déjà un bon lissage des points expérimentaux. Une modification de la vitesse entraine une légère modification du profil de pression en début de vis pouvant mener à un « débordement » de matière en tête d'extrudeuse. Dans le cas à 2 tubes, on remarque qu'une vitesse de 38 tr/min permet un meilleur lissage en début d'extrudeuse, mais qui s'écarte des points expérimentaux avant le milieu de la vis. Notons que, pour ces deux cas, une modification de la vitesse entraîne une modification du remplissage de la vis. Un remplissage plus important est obtenu à vitesse faible, ce qui se traduit par une légère diminution du gradient de pression.

Dans tous les cas, une fluctuation de vitesse n'a que peu d'effets sur les profils de températures. Notons que, dans le cas à 2 tubes, le profil de température change légèrement au niveau où l'extrudeuse est totalement remplie. Cette variation est liée aux effets dissipatifs et conductifs.

o Autres configurations

Nous ne présentons ici que les résultats obtenus pour les autres configurations dans le cas à **1 tube** (V = 40 tr/min) :



Fig.VI.11. Etude la sensibilité à la vitesse sur l'évolution de la pression et de la température pour les configurations : a. (90, 30, 90), Q =64,8 kg/h ; b. (30, 30, 90), Q = 68,4 kg/h ; c. (30, 30, 50), Q = 57 kg/h (1 tube, 40 tr/min, hT_vis =150, hT_fourreau = 300)

Pour la configuration (90, 30, 90) (Fig.VI.11.a), on remarque qu'une légère augmentation de la vitesse à 41 tr/min, permet d'éliminer le débordement en début d'extrudeuse que l'on obtenait avec une vitesse de 40 tr/min. De même que pour la configuration précédente, une modification de la vitesse n'a que peu

d'effet sur les températures. Pour la configuration (30, 30, 90) (Fig.VI.11.b), une modification de la vitesse ne permet pas d'approcher numériquement les résultats expérimentaux. En effet, numériquement, on observe un débordement de la matière en entrée d'extrudeuse. Une diminution de la vitesse permettrait de s'approcher numériquement des résultats expérimentaux, mais cette diminution devrait être trop importante pour être « réaliste » (soit représenter une erreur) par rapport à la valeur expérimentale. Pour la configuration (30, 30, 50) (Fig.VI.11.c), de même que pour les configurations précédentes, une variation de la vitesse numériquement ne permet pas un lissage des points expérimentaux.

De façon générale, une augmentation de la vitesse tend à diminuer la longueur remplie et donc à augmenter légèrement le gradient de pression.

Concernant les évolutions des profils de températures, tout comme il l'a été observé pour la configuration (90, 90, 90), une modification de la vitesse n'a que peu d'effet sur les températures.

En conclusion de cette étude de sensibilité des profils de pression et température à la vitesse, nous pouvons voir qu'aucune variation de vitesse n'est réellement satisfaisante. En effet, aucune modification de la vitesse d'un pourcentage « x » (dans une marge de variabilité de fonctionnement autour d'une valeur moyenne) n'est valable pour tous les cas.

VI.1.2.2.d. Etude de la sensibilité au débit

Une étude de la sensibilité au débit a été effectuée. De même que pour la vitesse, des variations sur le débit (expérimental) de +/- 7 % et de +/- 3,5 % ont été considérées et réalisées pour tous les essais expérimentaux. Cependant, nous ne présenterons ici que les résultats obtenus pour la vitesse de 40 tr/min, pour la même raison que précédemment lors de l'étude de la sensibilité à la vitesse.

• <u>Configuration (90, 90, 90)</u>

Les évolutions de la pression et de la température, pour la vitesse de 40 tr/min et la configuration (90, 90, 90) sont représentées ci-dessous pour les différents tubes :



Fig.VI.12. Etude la sensibilité au débit sur l'évolution de la pression et de la température pour la configuration (90, 90, 90), 40 tr/min, hT_vis =150, hT_fourreau = 300 : a. 1 tube (Q = 62,4 kg/h), b. 2 tubes (Q = 49,2 kg/h)

Tout d'abord, comme nous pouvons le remarquer sur la figure VI.12, une modification du débit n'a pas d'influence majeure sur les profils de températures. Seule une légère modification du profil de température est observée pour le cas à 2 tubes (Fig.VI.12.c). Cette modification est liée au niveau de remplissage.

Concernant le débit, une augmentation de débit a une influence sur le gradient de pression et donc sur le remplissage. En effet, une augmentation du débit provoque une augmentation de la longueur remplie, pouvant dans certains cas provoquer un débordement en entrée d'extrudeuse (Fig.VI.12.b). Cette augmentation de débit entraine une légère diminution du gradient de pression. Ceci s'explique par le fait que le débit total résulte du débit de cisaillement et du débit de contre-pression. Ainsi, à vitesse constante et débit de cisaillement inchangé, une augmentation de débit implique une diminution du gradient de pression.

o Autres configurations

Nous ne présentons ici que les résultats obtenus pour les autres configurations dans le cas à **1 tube** (V = 40 tr/min).



Fig.VI.13. Etude la sensibilité au débit sur l'évolution de la pression et de la température pour les configurations : a. (90, 30, 90), Q =64,8 kg/h ; b. (30, 30, 90), Q = 68,4 kg/h ; c. (30, 30, 50), Q = 57 kg/h (1 tube, 40 tr/min, hT_vis =150, hT_fourreau = 300)

Les conclusions faites sur la configuration (90, 90, 90) restent valables pour les configurations ci-dessus (Fig.VI.13).

Cette étude de sensibilité des profils de pression et température au débit, tout comme ceux de sensibilité à la vitesse, montre qu'aucune variation de débit n'est satisfaisante. En effet, aucune modification du débit d'un pourcentage « x » (dans une marge de variabilité de fonctionnement) n'est valable pour tous les cas.

VI.1.3. Conclusions sur le code 1D

Les résultats obtenus avec le modèle 1D ont été comparés aux résultats expérimentaux. Ces comparaisons ne sont pas toujours satisfaisantes. En effet, les profils de pressions et de températures calculés par le modèle 1D sont, de façon générale, trop éloignés des résultats expérimentaux. Ce modèle simple ne permet donc pas de rendre compte des phénomènes se déroulant lors du procédé d'extrusion. Plusieurs hypothèses faites dans le modèle 1D peuvent être la source de ce désaccord entre les résultats expérimentaux et les résultats issus de la modélisation :

- La non prise en compte des effets de bords. En effet, dans le modèle, ces effets sont négligés. Cette hypothèse est valable lorsque la largeur du chenal est grande devant la hauteur du chenal (W/H >> 10). Or, dans notre cas, le rapport W/H est inférieur à 4, ce qui signifie que d'importants effets de bords existent et doivent donc être pris en compte. Ces effets de bords ont une influence sur les débits de convoyage (débit de cisaillement) et de contre-pression. Ils auront donc un effet sur le remplissage de l'extrudeuse.
- La non prise en compte des gradients transverses de température. En effet, dans le modèle 1D, la température est supposée homogène dans la tranche. Or, la matière se trouvant du côté du fourreau, étant plus fortement cisaillée que celle se trouvant dans le chenal, a certainement une température plus importante.

De plus, prenons le cas où les températures de régulation de la vis et du fourreau valent respectivement 50°C et 90°C :



On imagine bien ici la présence de gradients de température importants ! Ces effets ont une influence sur les échanges thermiques, soit sur l'équilibre dissipation visqueuse/échanges aux parois, ainsi que sur l'estimation de la viscosité et donc du gradient de pression.

 La dernière source d'erreur peut être liée à la présence de glissement du matériau aux parois. Le modèle considère un contact collant aux parois de la vis et du fourreau. Or, comme nous avons pu le voir lors de la caractérisation rhéologique du mélange 1 (Chapitre III), un glissement du matériau peut avoir lieu au-delà d'une contrainte limite qui vaut, pour ce mélange, 0,56 MPa. L'existence d'un glissement induit des changements dans les conditions d'écoulement. La prise en compte d'une vitesse de glissement (sur la vis) pourrait améliorer le débit de convoyage lorsque ce dernier est trop faible. La prise en compte d'un glissement aux parois aurait aussi une incidence sur les échanges thermiques, via un effet sur la dissipation visqueuse.

Une autre source d'erreur concerne la prise en compte de l'écoulement transversal. En effet, dans le modèle 1D en loi puissance, sa prise en compte est négligée.

Nous voyons donc ici l'intérêt de passer à un modèle plus complet qui permettrait de prendre en compte les effets de bords ainsi que l'existence des gradients de température. Pour ce faire, nous nous sommes tournés vers un modèle à trois dimensions, seul modèle capable de prendre en compte la température et son évolution. Notons cependant que les temps de calculs pour un modèle 3D seront plus importants que les temps de calculs observés ici pour le modèle 1D, où ils ne sont que de quelques minutes.

VI.2. Modélisation 3D

VI.2.1. Mise en place du code 3D

La simulation numérique 3D, contrairement à la simulation numérique 1D, permet de prendre en compte les effets de bords ainsi que les gradients de températures existants. Nous présentons tout d'abord le fonctionnement général du code avant d'en tester sa sensibilité à différents paramètres.

VI.2.1.1 Fonctionnement du code 3D

Le problème modélisant l'écoulement réel est tridimensionnel du fait des parois latérales (pouvant induire des écoulements secondaires) et comporte des équations d'évolution le long du chenal (le problème de thermique, par exemple, ne se résout raisonnablement par tranche que si le nombre de Péclet est petit et le nombre de Cameron est grand).

La simulation directe d'écoulements laminaires 3D utilisant des lois newtoniennes généralisées, typiquement Cross ou Carreau-Yasuda, est possible depuis plusieurs années dans de nombreux codes de calcul. Strictement parlant, la simulation directe nécessite de prendre en compte le mouvement de la vis dans la géométrie du fourreau. Ceci requiert des techniques spécifiques car le domaine occupé par le fluide varie au cours du temps. Deux approches sont possibles : remailler systématiquement le domaine ou utiliser des approches de type domaines fictifs. Dans les deux cas, la résolution des problèmes de transport (problème du transport du domaine fluide et problème thermique) nécessite de nombreuses étapes qui allongent le temps de calcul. Ces problèmes sont décrits et traités par exemple dans Hachem et al. (2012) et Valette et al. (2009).

On peut s'affranchir des problèmes de régénération du domaine fluide en se plaçant dans le repère de la vis. Les conditions aux limites du problème ne considèrent alors pas la filière et la zone d'entrée. Cette méthode permet en revanche de calculer les courbes caractéristiques (points de fonctionnement) de l'extrudeuse très rapidement.

Dans ce travail, pour simplifier les opérations de CAO, on utilise, comme dans le modèle 1D, la méthode classique d'approximation du chenal déroulé.

Le problème mécanique à résoudre dans le domaine Ω occupé par le fluide est alors:

$$-\vec{\nabla}p + 2\eta\Delta\vec{u} = \vec{0}$$
(Eq.VI.23
$$\nabla\vec{u} = 0$$
et IV.24)

où p et \vec{u} sont respectivement le champ de pression et de vitesse.

Dans le cas général, la viscosité est non-newtonienne et dépend de la valeur locale du champ de température T. Ce champ est calculé en résolvant le problème thermique :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \vec{\nabla} T \right) = k \Delta \vec{T} + \eta \dot{\varepsilon}^2 (\vec{u})$$
(Eq.VI.25)

où le 1^{er} terme de droite est un terme de diffusion et le second un terme de dissipation mécanique. Ces deux problèmes (de mécanique et de thermique) sont résolus de la manière suivante : à chaque pas de

temps, le problème (Eq.VI.23 et 24) est résolu, puis le champ solution est introduit dans (Eq.VI.25) par un schéma temporel de type Euler implicite, qui est résolu avant d'incrémenter le pas de temps.

La prise en compte des conditions aux limites du problème thermique (Eq.VI.25) peut se faire de deux façons :

- On notera « température imposée » la prise en compte de conditions de Dirichlet :

$$T_{paroi} = T_{régulation},$$

- On notera « flux calculé » la prise en compte de conditions de flux à la paroi :

$$-q_{paroi} = h(T_{paroi} - T_{régulation}).$$

Les conditions aux limites du problème mécanique (Eq.VI.23 et 24) sont de type Dirichlet. La résolution des deux problèmes est effectuée par une méthode éléments finis décrite par Valette et al. (2009) pour le solveur mécanique et par Hachem et al. (2012) pour le solveur thermique.

Notons que le code mis en place ici prend en compte l'existence des tubes au travers de la perte de charge et que les températures de la PA et du cylindre ne peuvent être différentes.

VI.2.1.2 Etude de la sensibilité du code

Dans cette partie, on s'intéresse à la sensibilité du code à la taille de maille et aux conditions limites (température paroi imposée ou condition de flux). Cette étude a pour but, en prenant des ordres de grandeurs caractéristiques (par rapport aux essais expérimentaux) de quantifier la réponse du code.

Notons que dans la suite, lorsque l'on impose la température de la vis, cette dernière est imposée sur les 3 faces de la vis, c'est-à-dire en fond de filet et sur les filets.

VI.2.1.2.a. Sensibilité au maillage

Cette étude de sensibilité au maillage a pour but de déterminer la taille de maille minimale pour laquelle une stabilisation des résultats est obtenue, tout en prenant aussi en compte les temps de calculs. En effet, plus la taille de maille sera petite, plus le temps de calcul sera long. En ce sens, une étude de l'influence de l'étirage de la maille dans le sens de l'écoulement (suivant z, où les gradients sont a priori les plus faibles) sur les profils de température a été tout d'abord réalisée. Pour ce faire, les résultats entre un maillage non étiré, étiré 2 et 4 fois ont été comparés. La maille est de forme tétraédrique. Les profils de température obtenus étant très peu dépendants de l'étirage de la maille (étirage nul ou non nul), nous choisissons pour la suite des simulations numériques de conserver un maillage étiré 4 fois selon z.

L'étude de la sensibilité à la taille de maille est alors effectuée avec un maillage étiré 4 fois selon z. Les différentes tailles de mailles choisies sont les suivantes : 1,5, 0,75, 0,5 et 0,375 mm. C'est-à-dire que dans les directions x et y, les côtés du tétraèdre sont de 1,5 mm tandis qu'il a une dimension de 1,5*4 dans la direction z.

Le cas test choisi est le suivant :

- Températures :
 - PA et fourreau : 90°C
 - Vis : 90°C
- Vitesse de vis : 70 tr/min.

Le choix se justifie par le fait qu'à haute vitesse d'importants échauffements ont lieu, ce qui induit les conditions de températures les plus défavorables. Concernant le débit pris (imposé) pour cette

simulation, nous avons pris le débit de cisaillement maximal (obtenu de la simulation numérique pour la vitesse de 70 tr/min, Q = 22 432 mm³/s soit 87,9 kg/h) réduit de 15%. Cette valeur de 15% de contrepression est la valeur minimale de contre-pression qui a été observée lors des essais d'extrusion. Notons que le choix d'un débit différent d'un débit expérimental s'explique par le fait que nous voulons ici évaluer les réponses du code 3D de façon totalement découplée des résultats expérimentaux.

On remarque que la taille de maille n'a que peu d'influence sur les profils de vitesse et de pression, contrairement aux profils de température, c'est pourquoi on ne présente ici que son effet sur la température. La figure VI.14 montre l'évolution du profil de la température, sur la dernière tranche du chenal, obtenue pour les différentes tailles de maille.



Fig.VI.14. Evolution du profil de température dans la hauteur du chenal en fin de vis selon la taille de maille

D'après la figure VI.14, il est clair que la taille de maille influe sur le profil de température. Plus la taille de maille est grossière (1,5 mm par exemple), moins le profil de température est stabilisé et reste éloigné de la solution finale. Ce n'est qu'à partir d'une taille de maille inférieure ou égale à 0,5 mm que le profil de température n'évolue plus et que la taille de maille n'a plus d'influence sur ce dernier. C'est pourquoi, pour la suite des simulations numériques, nous choisissons une taille de maille de 0,5 mm.

VI.2.1.2.b. Sensibilité aux conditions aux limites « thermiques » (Tparoi imposée et coefficients de transfert aux parois)

Différents « cas tests » ont été réalisés dans cette étude de l'influence des conditions aux limites thermiques sur la température de sortie du matériau (température moyenne sur la dernière tranche du chenal). Les conditions limites sont au nombre de deux : soit on impose une température paroi, soit on impose un flux en imposant des coefficients de transferts aux parois. Différentes valeurs de coefficients de transfert aux parois (vis et fourreau) ont été choisies :

- hT_vis : 0, 150 ou 300 W/m²/K
- hT_fourreau : 0, 300 ou 600 W/m²/K.

La température imposée au fourreau et à la vis est de 90°C.

Ces tests ont été effectués sur deux valeurs du débit :

- Débit de cisaillement pur maximal réduit de 15 %, soit Q = 11216 mm³/s = 74,7 kg/h,
- Débit de cisaillement pur maximal réduit de 50 %, soit Q = 11216 mm³/s = 43,9 kg/h.

Rappelons ici que les débits, comme pour l'étude du maillage, ne sont pas des débits expérimentaux. Ce choix est de nouveau fait afin d'évaluer les résultats du code 3D indépendamment des résultats expérimentaux.

Le premier cas testé est identique à celui utilisé pour l'étude de la sensibilité au maillage, soit pour un débit égal au débit de cisaillement maximal réduit de 15 % (contre-pression). La condition limite de « température à la paroi imposée » donne une température moyenne de sortie égale à 110°C. On compare, en figure VI.15, les évolutions de la température sur la dernière tranche du chenal, pour différentes conditions limites thermiques (« température paroi imposée » et « flux ») :



Fig.VI.15. Evolution de la température dans la hauteur du chenal sur la dernière tranche selon différentes conditions aux limites

Voici les valeurs de températures moyennes obtenues pour les différentes valeurs de coefficients de transfert aux parois testées :

hT_vis (W/m²/K)	hT_fourreau (W/m²/K)	T _{moyenne} (°C)
0	300	180,5
0	600	166,8
150	300	164,2
300	300	159,4
300	600	150,4
300	0	173,2

Tableau VI.3. Valeurs des températures (moyennées sur la dernière tranche du chenal) selon les différentes valeurs de coefficients de transfert aux parois

Une nette différence est observée entre la condition limite « température paroi imposée » et celle de « flux imposé ». En effet, la condition limite de température paroi imposée mène à une température bien inférieure (109,9°C) à celles observées pour les cas en flux imposé (supérieures à 150°C). On remarque que les évolutions de la température sur la tranche sont légèrement différentes lorsque l'on impose une condition limite de flux (Fig.VI.15). En effet, dans le cas où les coefficients de transfert de la vis et du fourreau valent 300 W/m²/K, on obtient une température un peu moindre au niveau de la vis. Le calcul des températures moyennes sur la tranche montre une différence de quelques degrés. En effet, dans le cas où les coefficients de transfert 300 et 150 W/m²/K, la température moyenne sur la tranche vaut 164°C alors qu'elle est égale à 159°C lorsque les

coefficients sont tous deux égaux à 300 W/m²/K (Tableau VI.3). C'est pour ces valeurs de coefficients de transfert aux parois que l'on obtient une température du matériau la plus basse.

Si l'on calcule l'échauffement en conditions adiabatiques à l'aide de l'équation VI.26, on peut le comparer à l'écart de température du matériau entre la sortie (T_{moyenne}) et l'entrée (T_{entrée} = 25°C) le long de la vis (Tableau VI.4).

$$\frac{dT}{dz} = \frac{\eta \dot{\gamma}^2}{\rho c_p \bar{V} Vol}$$
(Eq.VI.26)

_	hT_vis (W/m²/K)	hT_fourreau (W/m²/K)	T _{moyenne} – T _{entrée} (°C)	Echauffement en conditions adiabatiques (°C)
	0	300	155,5	182
	0	600	141,8	187
	150	300	139,2	189
	300	300	134,4	198,8
	300	600	125,4	191,5
	300	0	148.2	192.5

Tableau VI.4. Comparaisons des écarts de températures avec la condition de flux aux parois et en conditions adiabatiques

L'échauffement calculé en conditions adiabatiques, représentant l'échauffement dû à la dissipation, est toujours supérieur à l'écart de température du matériau entre la sortie et l'entrée (le long de la vis). La condition de flux permet en effet un refroidissement du matériau grâce aux échanges de conduction entre le matériau et les parois de l'extrudeuse. Les écarts les plus importants entre ces deux valeurs sont pour des valeurs de coefficients de transfert de la vis et du fourreau respectivement égaux à 300 W/m²/K et 300 ou 600 W/m²/K. Ces deux couples de coefficients de transfert (vis et fourreau : (300,300) et (300,600)) sont donc ceux qui permettent le refroidissement le plus important du matériau.

Le deuxième cas étudié correspond à un débit égal au débit de cisaillement pur réduit de 50%. Cette valeur de 50% de contre-pression correspond au plus grand pourcentage de débit de contre-pression observé expérimentalement. Lorsque la condition aux limites « température aux parois imposée » est utilisée, on obtient une température moyenne de 115°C.

De même que précédemment, on compare, en figure VI.16, quelques-unes des évolutions de la température sur la dernière tranche du chenal, pour différentes conditions limites thermiques. On observe que le profil de température est très hétérogène dans la section du chenal.



Fig.VI.16. Evolution de la température dans la hauteur du chenal sur la dernière tranche selon différentes conditions aux limites

Voici les températures de sortie du matériau (moyennées sur la dernière tranche du chenal) pour les différents coefficients de transfert testés (Tableau VI.5) :

hT_vis (W/m²/K)	hT_fourreau (W/m²/K)	Température (°C)
0	300	218,4
0	600	166,2
150	300	173,5
300	300	169
300	600	155,2
300	0	192,9

Tableau VI.5. Valeurs des températures (moyennées sur la dernière tranche du chenal) selon les différentes valeurs de coefficients de transfert aux parois

De ces résultats, on peut voir, de façon générale, qu'imposer un des deux coefficients de transfert aux parois nul est défavorable (températures les plus élevées) (Tableau VI.5). On remarque ici que doubler la valeur du coefficient de transfert du cylindre, pour un coefficient de transfert de la vis fixé, permet une diminution de température plus importante que lorsque l'on double le coefficient de transfert de la vis (à coefficient de transfert fourreau fixe).

De même que précédemment, l'échauffement en conditions adiabatiques est comparé à l'écart de température du matériau entre la sortie et l'entrée (Tableau VI.6) :

hT_vis (W/m²/K)	hT_fourreau (W/m²/K)	T _{moyenne} – T _{entrée} (°C)	Echauffement en conditions adiabatiques (°C)
0	300	193,4	260
0	600	141,2	278
150	300	148,5	271
300	300	144	273
300	600	130,2	287
300	0	167,9	249

Tableau VI.6. Comparaisons des écarts de températures avec la condition de flux aux parois et en conditions adiabatiques Avec une condition aux limites de « température imposée à la paroi », on obtient un échauffement en conditions adiabatiques d'environ 371°C. Pour une condition aux limites de type flux, l'écart constaté entre les deux échauffements est important mais reste, de façon générale, du même ordre de grandeur quelles que soient les valeurs des coefficients de transfert aux parois (vis et fourreau).

De ces deux études sur les conditions aux limites avec des coefficients de transfert sur la vis et sur le fourreau, on peut voir à quel point il est difficile de choisir un couple de valeurs de coefficients de transfert unique. La condition aux limites de « température parois imposée » est une condition plus simple dans le sens où elle n'impose pas un choix de valeurs. Cependant, cette condition, imposant que le polymère à la paroi soit à la température de la paroi, ne semble pas réaliste dans notre cas. En effet, ceci n'est vrai que dans le cas où il existe un contact collant à la paroi, ce qui dans le cas des élastomères est souvent mis en défaut. Nous choisissons donc plutôt une condition limite de type « flux ». Le choix des valeurs de coefficients de transfert aux parois (vis et fourreau) de (300, 300) semble être un choix judicieux.

VI.2.2. Comparaison des résultats de la simulation numérique 3D aux résultats expérimentaux

Nous avons précédemment évalué le code 3D mis en place ici de façon découplée des résultats expérimentaux. Maintenant, afin de juger de sa pertinence, nous comparons ici les résultats numériques aux résultats expérimentaux.

VI.2.2.1 Etude préliminaire

VI.2.2.1.a. Vérification du débit

Dans le but de valider les résultats numériques, des cas tests prenant comme conditions aux limites « température paroi imposée » sont effectués. La première vérification concerne celle du débit. En effet, si le code ne nous renvoie pas le bon débit alors la comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux n'aura pas d'intérêt.

Nous choisissons la configuration la plus simple étant (90, 90, 90). Afin de pouvoir tracer les courbes caractéristiques de l'extrudeuse et les comparer aux courbes caractéristiques expérimentales, différentes valeurs de débits ont été choisies pour chacune des vitesses, en prenant comme première valeur de débit celle du débit de cisaillement pur (Tableau VI.7). Cette valeur est obtenue en imposant une pression nulle en sortie (tout comme en entrée) et la vitesse du fourreau égale à la vitesse expérimentale. Une contrepression a ensuite été ajoutée en fin du domaine calculé. Les pourcentages de contre-pression choisis sont de manière à engendrer un débit de contre-pression de respectivement 10, 20, 30, 40 et 50 % du débit de cisaillement pur.

Vitesse (tr/min)	Vitesse (mm/s)	Débit de cisaillement pur (3D) (mm ³ /s)	Débit de cisaillement pur (3D) (kg/h)	Débit de cisaillement pur (1D) (kg/h)
15	47	5044	19,8	30,2
40	126	12652	49,8	80,5
70	220	22432	87,6	140,8

Tableau VI.7. Valeurs des débits de cisaillement pur obtenus de la simulation numérique 3D pour les différentes vitesses Notons ici que le débit de cisaillement pur obtenu en simulation 3D est bien inférieur à celui obtenu en simulation 1D. Ceci est à mettre en corrélation avec la prise en compte des parois latérales dans la simulation 3D, ce qui n'est pas le cas dans le code 1D. Le tracé des courbes caractéristiques va permettre de mieux rendre compte des écarts de débits entre débits expérimentaux et débits numériques 3D.

Afin de déterminer les points de fonctionnement, un calcul des caractéristiques des filières est effectué en prenant une température du matériau de 100°C (température de sortie expérimentale la plus faible dans ce cas) et à l'aide de l'équation suivante :

$$Q = \pi \frac{m}{3m+1} \left[\frac{1}{2K} \frac{\Delta P}{L} \right]^{1/m} R^{(3m+1)/m}$$
(Eq.VI.27)

avec *m* l'indice de pseudo-plasticité, *K* la consistance, *L* la longueur du « tube » (80 mm pour 0 tube, 305 mm pour 1 tube et 530 mm pour deux tubes), *R* le rayon du tube et ΔP la perte de charge dans la filière.

Voici les courbes caractéristiques obtenues :



Fig.VI.17. Courbes caractéristiques obtenues numériquement (lignes pleines et pointillées) et points expérimentaux (symboles pleins) pour la configuration (90, 90, 90)

On remarque que les débits calculés sont, de façon générale, très inférieurs aux débits expérimentaux (Fig.VI.17). A pression donnée (et nulle), il existe donc un problème de débit. Ceci provient certainement de la non prise en compte de l'existence d'un glissement par le modèle 3D développé ici. En effet, comme nous avons pu le montrer lors des caractérisations rhéologiques (Chapitre III), un glissement du matériau existe dès lors qu'on dépasse une contrainte critique de 0,53 MPa, dans le cas du mélange SBR chargé à 33% en masse en noir de carbone. Si l'on regarde les niveaux de contraintes obtenus en simulation numérique en entrée du chenal (Fig.VI.18), on remarque qu'elles sont supérieures à la contrainte critique et un glissement existe alors certainement. Afin de pallier ce problème, une vitesse de glissement homogène sur la vis et les parois latérales du chenal a été ajoutée dans le code. Ce choix d'une vitesse de glissement homogène dans le chenal est effectué par raison de simplification. En effet, comme on peut le voir sur la figure VI.18, les contraintes n'étant supérieures à la contrainte critique qu'en entrée d'extrudeuse, il serait alors plus judicieux d'appliquer une vitesse de glissement évoluant avec la contrainte dans le chenal et donc plus importante en entrée de chenal qu'en bout de chenal.



Fig.VI.18. Niveaux de contrainte en entrée du chenal pour la configuration (90, 90, 90) (V = 40 tr/min, Q = 44,6 kg/h, soit une contre-pression de 10% sur le débit de cisaillement pur)

Ces vitesses de glissement ont été déterminées en conditions limites de « température parois imposée » et en pression nulle. Différentes vitesses de glissement ont été testées jusqu'à obtenir une vitesse de glissement telle que le débit de cisaillement obtenu en simulation 3D soit égal à celui calculé théoriquement à l'aide de la formule suivante :

$$Q = \frac{WV_{1z}H_p}{2} \tag{Eq.VI.28}$$

où W est la largueur du chenal, V_{1z} la vitesse longitudinale dans l'axe du chenal et H_p la hauteur du chenal.

Le débit numérique reste encore éloigné du débit expérimental. Il faut donc déterminer les vitesses de glissement en prenant en compte les pertes de charge, qui influent sur la contrainte aux parois. De nouvelles simulations sont alors effectuées pour déterminer la valeur de la vitesse de glissement en imposant une différence de pression égale à celle observée expérimentalement (avec une condition limite de température imposée aux parois). Voici les valeurs des vitesses de glissement obtenues pour la configuration (90, 90, 90) :

Vitesse (tr/min)	Nombre de tubes	ΔP _{expérimental} (MPa)	Vitesse de glissement (en pourcentage de la vitesse de la vis)
15	2	22,1	27,3
40	1	19,2	16,6
40	2	27,8	0,56
70	0	9,2	15,7
70	1	21,7	6,5
70	2	30,1	3,8

Tableau VI.8. Valeurs des vitesses de glissement pour les différents essais

On remarque une tendance à la diminution de la vitesse de glissement avec la pression. Ce résultat est celui attendu. En effet, la pression permet au matériau de moins glisser dans le chenal.

VI.2.2.1.b. Evaluation des vitesses de glissement en condition limite de flux

Nous avons vu précédemment que la vitesse de glissement dépend de la pression. Les vitesses de glissement ont alors été déterminées en imposant la perte de charge observée expérimentalement, avec des coefficients de transfert aux parois (vis et fourreau) de 300 W/m²/K.

Voici un exemple des valeurs de glissement obtenues pour différentes configurations et différentes vitesses de vis (Tableau VI.9) :

Configuration	Nombre de	Vitesse (tr/min)	$\Delta P_{exp \acute{e}rimental}$	Contrainte moyenne	Vitesse de glissement (en pourcentage de la
	tubes	((()))	(IVII d)	(MPa)	vitesse)
(90, 90, 90)	2	15	22,1	0,62	6
(90, 90, 90)	1	40	19,2	0,73	18
(90, 90, 90)	2	40	27,8	0,73	9,1
(90, 90, 90)	0	70	9,2	0,79	28
(90, 90, 90)	1	70	21,7	0,79	19
(90, 90, 90)	2	70	30,1	0,79	8,8
(30, 30, 90)	1	40	22,8	0,72	22
(30, 30, 50)	1	40	20,1	0,73	14

Tableau VI.9. Valeurs des vitesses de glissement pour les différents essais



Fig.VI.19. Evolution de la contrainte en fonction du débit

Quelles que soient les conditions d'essais (températures des parties de l'extrudeuse, nombre de tube, vitesse), la vitesse de glissement reste inférieure à la valeur de 30%. Comme on a pu le remarquer plus haut, la vitesse de glissement, à vitesse donnée, tend à diminuer avec la pression. De plus, à vitesse et nombre de tube fixés, elle ne varie que très peu avec les températures des différentes parties de l'extrudeuse. Une évaluation de la contrainte moyenne en entrée du chenal a été effectuée. D'après les caractérisations rhéologiques (cf. Chapitre III), un glissement du matériau existe pour une contrainte supérieure à 0,53 MPa. L'évolution de cette contrainte moyenne en fonction du débit expérimental a été tracée (Fig.VI.19). On remarque, qu'au-delà d'un certain débit (environ 80 kg/h pour la configuration (90, 90, 90), la contrainte moyenne n'évolue plus.

Nous avons donc pu constater l'existence d'un défaut en terme de débit dans le code 3D. Ce problème (débit trop faible) est à relier à l'existence d'un glissement aux parois du matériau. Nous avons pu voir que le débit numérique pouvait être proche du débit expérimental dès lors qu'une vitesse de glissement

a été mise en place. Pour l'étude paramétrique, ces valeurs des vitesses de glissement seront prises en compte dans la simulation.

VI.2.2.2 Etude paramétrique

Dans cette partie, nous étudions les effets de la vitesse, du nombre de tubes et des températures de régulations aux parois sur les pressions et les températures. Nous comparons les résultats issus de la simulation numérique avec ceux obtenus lors des essais sur extrudeuse instrumentée. Concernant la simulation numérique, la vitesse de glissement est ajustée afin de récupérer le bon débit de cisaillement.

VI.2.2.2.a. Effet de la vitesse

L'influence de la vitesse sur les profils de pression et de température a été étudiée. Pour ce faire, nous avons choisi la configuration (90, 90, 90) et les pertes de charges obtenues expérimentalement dans les cas à 2 tubes. On impose alors dans le code la vitesse de la vis, la vitesse de glissement (obtenue précédemment) et la pression expérimentale obtenue en P_4 . On récupère les évolutions de la température et de la pression le long de la vis.

Concernant la température, le profil le long de la vis est obtenu de la façon suivante : des tranches sont réalisées à différentes côtes du chenal (5,33 ; 10,68 ; 16 ; 21,33 ; 26,67 et 32 cm) sur lesquelles la température moyenne est calculée. C'est cette température moyenne qui est reportée sur la courbe d'évolution de la température en fonction de la position axiale (Fig.VI.20). Sur le graphique, les valeurs de température expérimentales, obtenue au capteur T₄ (cf. Chapitre V), sont aussi reportées (symboles pleins).



Fig.VI.20. Evolution de la température (moyennée sur la tranche) en fonction de sa position dans le chenal (obtenue par la simulation, traits pleins) et comparaison avec les températures mesurées expérimentalement par le capteur T₄ (symboles pleins) (Configuration (90, 90, 90), 2 tubes)

On remarque que les évolutions de températures sont similaires pour les différentes vitesses, un échauffement plus important étant constaté pour la vitesse la plus importante. Les températures du matériau en bout de chenal sont proches des températures mesurées expérimentalement par le capteur de température « T₄ » (cf. Chapitre V). En effet, l'écart le plus important est de 8°C et est observé dans le cas de la vitesse de 70 tr/min.

Le profil de pression est, quant à lui, tracé pour la position médiane de la hauteur du chenal. Afin de vérifier qu'aucune erreur importante n'était faite en agissant de cette manière, une démarche similaire à celle de la température détaillée précédemment a aussi été testée. Aucune différence importante entre les profils de pression obtenus par ces deux méthodes n'étant constatée, nous avons choisi la première méthode, ceci dans un souci de gain de temps. Le profil de pression obtenu pour la configuration (90, 90, 90), dans le cas de deux tubes et pour les différentes vitesses d'essai est présenté en figure VI.21.



Fig.VI.21. Profil de pression le long du chenal (obtenu par la simulation, traits pleins) et comparaison avec le profil de pression expérimental (symboles pleins) (Configuration (90, 90, 90), 2 tubes)

La pression augmente bien avec la vitesse. Un écart, entre les résultats numériques et expérimentaux, est constaté en entrée d'extrudeuse. Notons que les fluctuations constatées sur la pression, en début de chenal, peuvent être dues à un effet de bord des conditions aux limites imposées en vitesse.

Cette étude montre un assez bon accord entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux.

VI.2.2.2.b. Effet du nombre de tubes

L'influence du nombre de tubes sur les profils de pression et de température a été étudiée. Pour ce faire, nous avons choisi la configuration de (90, 90, 90) et la vitesse de 70 tr/min. Rappelons que l'existence des tubes est prise en compte au travers de la perte de charges.

Pour cette étude paramétrique, comme précédemment, sont imposées : la vitesse de la vis, la vitesse de glissement ainsi que la perte de charge (pression à la position axiale correspondante à P_4 prise égale à la pression mesurée expérimentalement). Voici les profils de température et de pression obtenus (Fig.VI.22) :



Fig.VI.22. a. Profil de température le long du chenal (obtenue par la simulation, traits pleins) et comparaison avec les températures mesurées expérimentalement par le capteur T₄ (symboles pleins); b. Profil de pression le long du chenal (obtenu par la simulation, traits pleins) et comparaison avec le profil de pression expérimental (symboles pleins) (Configuration (90, 90, 90), V = 70 tr/min)

Les températures au bout de chenal (obtenues numériquement), contrairement au cas précédent, sont éloignées des températures expérimentales (Fig.VI.22.a). Un écart maximal de 28°C est observé pour le cas à 0 tube. Concernant les profils de pression, la simulation numérique sous-estime la pression le long de la vis (l'écart le plus important entre les données expérimentales et les résultats numériques étant encore constaté dans le cas à 0 tube), mais le gradient de pression est bien prédit.

VI.2.2.2.c. Effet de la température de régulation des parois (PA, cylindre et vis)

Enfin, l'étude de l'influence de la température de régulation des parois (parties de l'extrudeuse), sur les profils de température et de pression, a été réalisée. La vitesse et le nombre de tubes choisis pour cette étude sont respectivement de 40 tr/min et 1 tube. Ce sont les mêmes paramètres, que ceux des études précédentes, qui sont imposés ici.



Fig.VI.23. a. Profil de température le long du chenal (obtenue par la simulation, traits pleins) et comparaison avec les températures mesurées expérimentalement par le capteur T₄ (symboles pleins); b. Profil de pression le long du chenal (obtenu par la simulation, traits pleins) et comparaison avec le profil de pression expérimental (symboles pleins) (V = 40 tr/min, 1tube)

De même qu'il l'a été constaté lors de l'étude de l'influence du nombre de tube, les températures au bout du chenal sont un peu éloignées des températures expérimentales (Fig.VI.23.a). L'écart le plus important ici, de 13°C, est observé dans le cas de la configuration (30, 30, 90). Concernant la configuration (30, 30, 50), la température de sortie numérique est inférieure à la température mesurée expérimentalement par le capteur T_4 . Dans le code, il est possible de donner une valeur de coefficient de transfert au filet. Pour les simulations, ce coefficient a été pris égal à celui de la vis. Cependant, il est facilement imaginable que, le filet n'étant pas régulé thermiquement (aucune circulation d'eau), tout se passe comme si son coefficient de transfert était faible voir nul. La diminution de la valeur du coefficient de transfert aux parois du filet permettrait alors une augmentation de la température obtenue en bout de chenal par la simulation numérique. Un essai a été effectué en l'imposant nul, ce qui a permis un gain de température d'environ 4°C (pour la configuration (30, 30, 50)). Notons cependant que ceci provoquerait aussi une augmentation des températures pour les autres configurations, ce qui dégraderait la qualité des résultats.

Les profils de pressions sont de nouveaux sous-estimés (sur une grande partie) par le code (Fig.VI.23.b). Ces profils de pression inférieurs aux débits expérimentaux sont à mettre en relation avec les températures supérieures dans le cas de la simulation numérique en comparaison aux cas expérimentaux.

VI.2.3. Conclusions sur le code 3D

De façon générale, le modèle 3D développé ici, bien que restant encore imprécis, donne de bonnes réponses aux paramètres d'entrée, pourvu que certains paramètres (coefficients) et phénomènes (glissement approximé) soient bien choisis. Notons de plus, que les temps de calculs ont été au maximum d'une journée. Nous n'avons pas cherché dans ce travail à réduire ce temps de calcul, ce dernier n'étant pas un facteur déterminant/prépondérant pour les simulations effectuées ici.

L'écart observé entre les résultats numériques et expérimentaux peut provenir de la non prise en compte de certains phénomènes par le modèle 3D mais aussi d'hypothèses trop simplificatrices. Par exemple, la prise en compte d'un glissement homogène sur la vis et les parois latérales du chenal ne rend pas compte de la réalité. En effet, cette hypothèse est trop simplificatrice et il serait plus judicieux d'avoir une évolution de la vitesse de glissement dans le chenal avec la contrainte par exemple. Celle-ci serait alors plus importante en entrée, lieu où les niveaux de contraintes sont les plus élevés, comme nous avons pu le voir. Cependant, l'ajout d'une vitesse de glissement ici nous a permis de voir l'importance de la prise en compte de ce paramètre en simulation numérique. En effet, nous avons pu voir que la prédiction du modèle se trouvait améliorée dès lors que l'on prend en compte une vitesse de glissement, même ici de façon assez « grossière ». La précision du modèle pourrait donc être améliorée en l'enrichissant avec une vraie loi de glissement et non une approximation de ce dernier.

Un point important est la mise en évidence de l'hétérogénéité de température au sein du chenal, ce qui pose la question de la justification d'une température moyenne et de la pertinence des mesures expérimentales.

VI.3. Conclusion sur la modélisation

Nous avons mis en place deux modèles numériques, 1D et 3D, dans le but de modéliser le procédé d'extrusion.

Nous avons pu voir que le modèle 1D ne peut donner que des tendances et ne permet pas de rendre compte des résultats expérimentaux. Ceci peut provenir d'hypothèses trop simplificatrices et de la non prise en compte de certains phénomènes (effets de bords, gradients de température et vitesse de glissement).

Le passage à un modèle 3D a permis de prendre en compte les effets de bords ainsi que les gradients de température. Cependant, il s'est avéré que le débit n'était pas correctement évalué. Ce problème provient certainement de la prise en compte des bords du chenal dans le code. Ce problème a été amélioré par la prise en compte d'un glissement du matériau dans le procédé, glissement qui, d'après les caractérisations rhéologiques (Chapitre III), a lieu dès que l'on dépasse une certaine contrainte critique. Cependant, n'ayant pas pu déterminer lors de la caractérisation rhéologique une loi de glissement (Chapitre III), la prise en compte d'un phénomène de glissement a été effectuée en ajoutant une vitesse de glissement homogène sur la vis et les parois latérales du chenal. Notons néanmoins que cette hypothèse est très simplificatrice.

Une comparaison des résultats obtenus avec les modèles 1D et 3D aurait été intéressante. Cependant, n'ayant pas effectué de simulations dans les mêmes conditions pour les deux modèles (par exemple, coefficients de transfert aux parois différents), cette comparaison ne semble pas être pertinente.

