

# Modélisation d'un nouveau type de mélangeur de polymères

Cyril Loux, René Muller, Gilles Bouchet, Michel Bouquey

## ▶ To cite this version:

Cyril Loux, René Muller, Gilles Bouchet, Michel Bouquey. Modélisation d'un nouveau type de mélangeur de polymères. CFM 2009 - 19ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2009, Marseille, France. hal-03391429

## HAL Id: hal-03391429 https://hal.science/hal-03391429

Submitted on 21 Oct 2021

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modélisation d'un nouveau type de mélangeur de polymères

C. LOUX<sup>a</sup>, R. MULLER<sup>a</sup>, G. BOUCHET<sup>b</sup>, M. BOUQUEY<sup>a</sup>

a. Laboratoire d'Ingénierie des Polymères et des Hautes Technologies (LIPHT), 25 rue Becquerel, 67200 STRASBOURG b. Institut de Mécanique des Fluides et des Solides (IMFS), 2 rue Boussingault, 67000 STRASBOURG contact : cyril.loux@ecpm.u-strasbg.fr

## Résumé :

Le développement d'un nouveau type de mélangeur de polymères nécessite d'étudier les phénomènes physiques qui y sont associés. Dans ce contexte, nous avons mis en place deux méthodes (numérique et expérimentale) nous permettant d'analyser l'écoulement de fluides Newtoniens ou non-Newtoniens à travers notre nouvelle machine RMX.

### Abstract :

To develop a new polymer's mixing device, we need to study the physical phenomena in it. In this context, we developed two methods (numerical and experimental) that allows us to analyze the flow through our new RMX mixer.

#### Mots clefs : Mélangeur, Polymères, Simulation numérique

## 1 Introduction

L'importance de la qualité du mélange dans le domaine de la mise en oeuvre des polymères et de la formulation n'est plus à démontrer. La recherche de nouveaux procédés pour améliorer l'efficacité du mélange ou de la dispersion de charges dans un polymère est donc toujours d'actualité.

Les outils classiquement utilisés, comme les mélangeurs internes ou les extrudeuses, génèrent essentiellement des écoulements de cisaillement ; leur efficacité est limitée ([1][2][3]), en particulier pour disperser une phase minoritaire de viscosité élevée.

Plusieurs dispositifs tendant à générer au sein de la matière des écoulements de type élongationnel ([4][5][6][7]), plus efficaces au niveau des mécanismes de dispersion, ont été décrits dans la littérature. La plupart de ces outils, basés sur une succession de convergents/divergents, induisent une perte de charge élevée, incompatible avec une production en continu à l'échelle industrielle. C'est dans ce contexte que nous avons développé un nouveau type de mélangeur (appelé RMX) privilégiant lui aussi la composante élongationnelle de l'écoulement, mais basé sur un concept entièrement original.

Afin d'appréhender les phénomènes physiques intervenant dans ce nouveau mélangeur, nous avons réalisé une étude numérique que nous avons complétée par une campagne expérimentale menée à la fois sur le RMX et sur un prototype transparent.

## 2 Principe du mélangeur

La caractéristique principale du RMX est de pouvoir enchaîner un nombre variable de cycles d'écoulements convergents-divergents pour une même quantité de matière. Pour cela, nous avons conçu un système simple composé d'un élément mélangeur statique (pouvant être démonté et changé facilement) et de deux pistons reliés chacun à un actionneur (1).



FIG. 1 – A actionneurs ; P pistons ; C chambres de mélange ; EM élément de mélange.

Après une période de fusion, le produit est poussé par le piston dans le canal de l'élément de mélange. A l'issue d'un nombre déterminé de cycles, on récupère la matière directement dans un moule.

Cette conception du dispositif RMX présente l'avantage de traiter une quantité variable de matière (entre 5g et 40 g) dans une géométrie étanche. Par ailleurs, les pistons arrivant en butée sur l'élément de mélange, la

matière est entièrement transférée d'une chambre de mélange à l'autre à chaque cycle ce qui contribue de manière significative à l'efficacité du mélange. Un premier prototype a été conçu sur ce principe. Il est composé de deux pistons chacun actionné par un moteur électrique piloté par ordinateur. L'élément de mélange est composé d'un canal cylindrique et de deux parties coniques ayant un angle de 45 degrés. Chaque chambre de mélange est entourée d'un collier chauffant permettant de faire fondre le produit et de le maintenir à une température constante.

Comme ce premier prototype est en acier, il nous était impossible de visualiser l'écoulement au cours d'un cycle. Nous avons donc réalisé un deuxième mélangeur, en PMMA, afin de pouvoir comparer qualitativement et quantitativement les expériences avec les simulations numériques. Sur ce deuxième prototype, qui fonctionne à température ambiante, l'élément de mélange étant interchangeable, nous avons testé différents angles de convergent, en commençant par un angle droit.

#### **3** Etude numérique

Le premier objectif étant d'obtenir une cartographie des contraintes au sein du fluide, la simulation numérique a été réalisée, dans un premier temps, sur la géométrie du premier prototype (2) mais avec le même fluide Newtonien dans les deux chambres (écoulement monophasique) et une condition d'axisymétrie.



FIG. 2 – Mélangeur.

La géométrie est donc composée des deux chambres de mélange dans lesquelles se déplacent de part et d'autre les deux pistons permettant de pousser la matière à travers l'élément de mélange. L'espace a été discrétisé à l'aide d'un maillage structuré. Les conditions aux limites sont de type non-glissement (« wall ») sur les parois à l'exception des deux pistons sur lesquels une condition de vitesse parallèle à l'axe est imposée de façon identique. Au cours de la simulation, le volume total est donc conservé.

La résolution de ce problème a été obtenue à l'aide d'un code de calcul volumes finis permettant de résoudre les équations de continuité (1) et de Navier-Stokes (2) pour un fluide incompressible. La géométrie étant en mouvement, un remaillage du volume est nécessaire à chaque pas de temps. Le solveur fait alors une compression des cellules d'un côté et une dilatation des cellules de l'autre. Le mouvement du maillage est pris en compte dans les calculs grâce à la méthode ALE qui consiste à faire une simple interpolation.

$$\vec{\nabla}.\vec{v} = 0 \tag{1}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} - v_{\vec{m}})\vec{\nabla}.\vec{v}\right) = -\vec{\nabla}p + \mu\vec{\nabla}^2.\vec{v} + \rho\vec{f}$$
<sup>(2)</sup>

Dans le cas de fluides très visqueux, l'élévation de la température ne peut être négligée. On résout pour cela l'équation de l'énergie sous la forme de l'équation de l'enthalpie totale (3). Les conditions aux limites sont de type isotherme ( $T_0$ ) sur la paroi externe et adiabatique sur les pistons. La viscosité suit une loi d'Arrhenius (4) qui permet d'observer l'influence de l'élévation de la température sur le champ de vitesse dans le mélangeur.

$$\frac{\partial(\rho h_0)}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho \vec{v} h_0) = \vec{\nabla}.(k \nabla T) + \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{v}\sigma + s$$
(3)

$$\mu = \mu_0 . exp\left(\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \tag{4}$$

 $\mu_0$  correspond à la viscosité du fluide à la température initiale,  $E_a$  à l'énergie d'activation initialisée à  $1.10^5$  kJ/mol, R à la constante des gaz, T à la température et  $T_0$  à la température initiale du fluide.

Pour visualiser le mélange, une grille de 10 colonnes de 25 points a été mise en place dans une chambre de mélange. Ces points font office de traceurs et n'ont aucune influence sur l'écoulement (scalaire passif).

Dans un deuxième temps, nous nous sommes intéressés à l'écoulement d'un fluide non-Newtonien, dont la viscosité suit une loi de Carreau (5), et nous avons comparé la cartographie des contraintes obtenue à celle d'un fluide Newtonien. Son utilisation nous a obligé à utiliser un maillage du domaine plus fin.

$$\mu = \mu_{\infty} + (\mu_0 + \mu_{\infty}) \left[ 1 + (K\dot{\gamma})^a \right]^{\frac{n-1}{a}}$$
(5)

De façon classique, l'efficacité d'un mélange dispersif est évaluée grâce à l'évolution du tenseur des taux de déformation |D| et du tenseur des vorticités  $|\Omega|$ . Nous avons pour cela choisi le paramètre  $\lambda$  (6) défini par Yang et Manas-Zloczower ([8]) permettant d'obtenir les caractéristiques d'un écoulement.

$$\lambda = \frac{|D|}{|D| + |\Omega|} \tag{6}$$

Ce paramètre est compris entre 0 et 1. La valeur 0 correspond à une rotation pure, 0.5 à un cisaillement simple et 1 à une élongation pure.

#### 4 Résultats et discussion

La première étape des simulations a été de déterminer l'évolution spatio-temporelle du paramètre  $\lambda$  (6) au sein du mélangeur.

#### 4.1 **Premier prototype : cartographie**

Les produits destinés à être utilisés dans le RMX ont des viscosités élevées et la vitesse de déplacement des pistons est faible. Le nombre de Reynolds de l'écoulement est donc faible dans les chambres de mélange mais, le rapport de contraction étant de 10 sur cette géométrie axisymétrique, il est 100 fois plus élevé dans le canal.

Dans un premier temps, nous avons déterminé la cartographie du paramètre  $\lambda$  (3) pour un fluide Newtonien à viscosité dynamique constante et à un nombre de Reynolds de  $1.10^{-2}$  dans le canal ( $1.10^{-4}$  dans les chambres).



FIG. 3 – Cartographie du paramètre  $\lambda$  dans le mélangeur pour un fluide Newtonien à viscosité constante et visualisation de la trajectoire d'une particule.

Dans le RMX, au voisinage de l'axe de déplacement des pistons (axe x) l'élongation est prédominante alors qu'on observe un écoulement de cisaillement simple près de la paroi des chambres et dans le canal de l'élément de mélange.

Nous avons ensuite regardé comment cette cartographie était modifiée soit en passant d'un fluide Newtonien à un fluide non-Newtonien (utilisation de la loi de Carreau), soit en rendant la viscosité dépendante de la température (utilisation d'une loi d'Arrhenius).

Selon la loi de Carreau utilisée, la viscosité diminue quand les contraintes augmentent ainsi, dans le cas d'un fluide non-Newtonien, elle est plus faible au voisinage de la paroi. Ce phénomène est le même dans le cas où la viscosité du fluide suit une loi d'Arrhenius (5.a.) car l'élévation de la température est maximale là où les contraintes sont maximales. La vitesse moyenne dans le canal étant la même dans tous les cas, le profil de vitesse selon l'axe y dans le canal est différent (4.a.). Au voisinage de la paroi, la vitesse est plus importante dans les cas rhéofluidifiants alors que la vitesse maximale (sur l'axe x) est plus faible que dans le cas Newtonien.

Néanmoins, les déformations subies par une particule restent purement du cisaillement dans le canal (4.b.) car la composante x de la vitesse est élevée devant la composante y. La différence se fait surtout dans le convergent et dans le divergent où l'écoulement a tendance à être plus élongationnel dans les cas rhéofluidifiants.

Pour visualiser le mélange, une grille de points a été mise en place dans une des deux chambres (6.a.) et sa déformation a été suivie au cours du temps. Dans le cas de fluides Newtoniens, à des nombres de Reynolds de  $1.10^{-2}$ , cette grille revient, à chaque cycle, dans son état initial. Une différence a été observée dans l'étude des cas résolvant l'équation de l'énergie. Suite à l'élévation de la température, la grille est étirée (6.b.) mais on remarque que les colonnes de points sont toujours disposées dans le même ordre et que les points ne sont pas



FIG. 4 – a. Profil de vitesse le long de l'axe y au centre du canal. - b. Paramètre  $\lambda$  le long de la trajectoire d'une particule.



FIG. 5 – a. Comparaison des vitesses dans le canal. - b. Comparaison des  $\lambda$  le long de la trajectoire des particules.

dispersés.



FIG. 6 – a. Grille initiale de particules. - b. Déformation de grille après deux cycles :  $\mu = 1.10^4 Pa.s$ .

#### 5 Mélangeur transparent

#### 5.1 Premières manipulations

Le produit utilisé pour les premières expériences a été la glycérine. Sur l'image (7), on peut voir la mise en place expérimentale. La chambre gauche du mélangeur a été remplie de produit coloré. Cette partie est entièrement poussée dans la chambre droite contenant le produit non coloré (déplacement des pistons vers la droite jusqu'à la butée).

Après ce premier quart de cycle, toute la matière est alors repoussée dans la première chambre (déplacement des pistons vers la gauche jusqu'à la butée (8.a.)). Lors de ce retour, on a remarqué que, lorsque les pistons sont dans leur position initiale (fin du deuxième quart de cycle (7)), on retrouve la matière fluorescente dans la chambre de gauche et la matière transparente dans la chambre de droite. L'écoulement est donc réversible.

L'ensemble de la matière est ensuite repoussé dans la chambre de droite (déplacement des pistons vers la droite jusqu'à la butée (8.b.)). La vitesse de l'écoulement a été estimée à 3.5m/s ce qui correspond à un nombre de Reynolds de 9. Il y a apparition de recirculations dues aux effets inertiels déjà présents à ces vitesses d'écoulement. A plus bas nombre de Reynolds, l'écoulement est parfaitement réversible.



FIG. 7 – Mise en place.



FIG. 8 – a. Résultat après trois quarts de cycle. - b. Résultat après un cycle.

## 5.2 Premières simulations sur le nouveau mélangeur

La cartographie de l'écoulement au sein du mélangeur transparent a été effectuée à l'aide du paramètre  $\lambda$  (6). Les zones d'élongation se situent au voisinage de l'axe x en dehors du canal de l'élément de mélange (9) où l'écoulement reste un écoulement de cisaillement simple. Pour se rendre compte des déformations subies par une particule durant un quart de cycle, on a tracé le paramètre  $\lambda$  en fonction du temps (10) pour une particule donnée dont la trajectoire est représentée sur la figure (9).



FIG. 9 – Cartographie des contraintes dans le nouveau prototype et déformation le long de la trajectoire d'une particule.



FIG. 10 – Déformation subies par la particule durant un quart de cycle.

#### 6 Conclusion

Le mélange de deux polymères est un sujet d'étude assez vaste et qui intéresse directement le domaine industriel constamment à la recherche de nouveaux procédés d'obtention de nouveaux matériaux. Une nouvelle machine est actuellement développée au LIPHT de Strasbourg. Sa caractéristique principale est d'effectuer des mélanges en privilégiant les écoulements élongationnels. Pour la mise au point de ce mélangeur, on a réalisé un nouveau prototype transparent qui nous permet de comparer qualitativement et quantitativement les simulations numériques avec les expériences.

#### Références

- [1] Meller M. and al . Flow through a convergence. part1 : Critical condition for unstable flow. Polymer engineering and science, 42, 611–633, 2002.
- [2] Luciani A. and al . Flow through a convergence. part2 : Mixing of high viscosity ratio polymer blends. Polymer engineering and science, 42, 634–653, 2002.
- [3] Grace H. and al . Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and application of static mixers as dispersion devices in such systems. Chemical Engineering Communication, 14, 225–243, 1982.
- [4] Bourry D. and al . Extensional flow of polymeric dispersions. Polymer engineering and science, 39, 1072–1086, 1999.
- [5] Nguyen X. and al. Extensional flow mixer. U.S. Patent, 5, 451,106, 19 september 1995.
- [6] Utracki L. and al. Extensional flow of polymeric dispersions. Intl. Plast. Eng. Technol., 2, 37, 1996.
- [7] Mackley M. and al . The application of the multi-pass rheometer for precise rheo-optic characterisation of polyethylene melts. Chemical Engineering Science, 56, 5653–5661, 2001.
- [8] Manas-Zloczower I. and al . Dispersive and distributive mixing characterization in extrusion equipment. ANTEC Proceedings, pages 220–225, 2001.