



HAL
open science

Modélisation du mélange de polymères chargés et de la casse de fibres rigides en extrusion bivis

Audrey Durin

► **To cite this version:**

Audrey Durin. Modélisation du mélange de polymères chargés et de la casse de fibres rigides en extrusion bivis. Autre. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012. Français. NNT : 2012ENMP0005 . pastel-00687658

HAL Id: pastel-00687658

<https://pastel.hal.science/pastel-00687658>

Submitted on 13 Apr 2012

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.

École doctorale n° 364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

Doctorat ParisTech

THÈSE

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité "Sciences et Génie des Matériaux "

présentée et soutenue publiquement par

Audrey DURIN

le 4 avril 2012

**Modélisation du mélange de polymères chargés et de la
casse de fibres rigides en extrusion bivis**

Directeur de thèse : **Bruno VERGNES**
Co-encadrement de la thèse : **Rudy VALETTE**

Jury

M. René MULLER, Professeur, LiPHT, Université de Strasbourg
M. Francisco CHINESTA, Professeur, GeM, École Centrale de Nantes
M. José COVAS, Professeur, IPC/I3N, Université de Minho, Guimarães
M. Jean-Jacques FLAT, Docteur, Arkema-Cerdat, Serquigny
Mme Chantal DAVID, Docteur, S&CC, Saint-Etienne
M. Rudy VALETTE, Maître Assistant, Cemef, MINES ParisTech, Sophia-Antipolis
M. Bruno VERGNES, Directeur de Recherche, Cemef, MINES ParisTech, Sophia-Antipolis
M. Sébastien GUYON, Ingénieur, Plastic Omnium-Sigmatex, Sainte-Julie

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Examineur
Examineur
Invité

T
H
È
S
E

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

Merci, tout d'abord, aux membres du jury pour avoir accepté d'évaluer mon travail. Merci à René Muller d'avoir accepté de présider ce jury et merci à Francisco Chinesta et à José Covas d'avoir bien voulu en être les rapporteurs.

Merci également à Rudy Valette et Bruno Vergnes qui m'ont donné l'opportunité de faire cette thèse et qui m'ont accompagnée de leurs bons conseils durant ces trois ans et quelques.

Merci aux partenaires du projet Fonlimics dont j'ai pu partager l'expérience pendant cette thèse, et merci en particulier à Pascal, Julien, Funda et Marc qui ont travaillé directement avec moi et qui m'ont beaucoup aidée.

Merci à tous les gens du Cemef et de la délégation qui m'ont rendu la vie et les démarches administratives plus faciles.

Merci à tous ceux qui ont été mes professeurs, à la fac ou à l'École des Mines, et qui m'ont poussée dans cette voie.

Merci à tous les copains de la promo et aux autres pour les coups de main et les bons moments passés ensemble. Merci à Greg pour son aide et pour sa cafetière qui ont contribué activement à la bonne réussite de cette thèse. Merci à Maha pour sa bonne compagnie et pour nos interminables conversations totalement contreproductives. Merci à Trystan, Guillaume, Koffi, Claudia, Greg, Pascal, Julien, Sylvain, Florian, Gilles, Funda et quelques autres de m'avoir supportée tous les midis pendant plus de trois ans pour certains. Merci à Christian pour ses visites surprises, et merci à Ghalia pour m'avoir accueillie au Cemef au début de mon stage de Master.

Merci enfin à ma famille, à mes amis et à Thomas, qui sont toujours là pour m'aider à décompresser quand il n'y a rien qui marche, ou pour fêter ça quand tout marche bien.

Je dédie cette thèse à Natacha, Pauline et Gabrielle.

Table des matières

1	Introduction générale	1
1.1	Caractérisation du mélange distributif	3
1.1.1	Échelle et intensité de ségrégation	3
1.1.2	Entropies	6
1.1.3	Écoulements chaotiques	8
1.1.4	Distribution des temps de séjour	9
1.1.5	Mapping	10
1.2	Caractérisation du mélange dispersif	12
1.3	Résumé de la thèse	15
2	Modélisation du mélange distributif en extrusion bivis	17
2.1	Introduction et bibliographie : calcul d'un écoulement	20
2.2	Calcul par éléments finis de l'écoulement 3D d'un polymère fondu dans une extrudeuse bivis	22
2.2.1	Méthode de calcul	22
2.2.2	Adaptation de maillage	25
2.2.3	Application au calcul de pression, de SME et de longueur de remplissage .	28
2.3	Lâcher de particules	39
2.3.1	Première méthode d'intégration	39
2.3.2	Visualisation du « blocage » des particules et nouvelle méthode d'intégration	44
2.4	Caractérisation du mélange et étude de cas	49
2.4.1	Méthodes de caractérisation	49
2.4.2	Capacité de mélange de différentes configurations de vis	52
2.5	Conclusion et perspectives	59
3	Modélisation du mélange dispersif en extrusion bivis. Application à la casse de fibre	61
3.1	Introduction et bibliographie	66
3.1.1	Renfort par ajout de fibres	66

3.1.2	Rhéologie des suspensions de particules	67
3.1.3	Mouvement d'une particule isolée et forces dues à l'écoulement	71
3.1.4	Simulation de l'orientation des fibres en régime non-dilué	75
3.1.5	Théorie de la casse par flambement	77
3.1.6	Prédiction de la casse de fibre	83
3.2	Modèles théoriques de flambement et de casse d'une fibre soumise à une contrainte de cisaillement	86
3.2.1	Bases théoriques	86
3.2.2	Hypothèse des forces ponctuelles : flambement d'Euler	87
3.2.3	Hypothèse des forces distribuées linéairement	99
3.2.4	Simulation numérique d'une fibre dans un écoulement de cisaillement	99
3.3	Calcul simplifié de l'écoulement en extrusion bivis. Utilisation du logiciel Ludovic®	104
3.3.1	Écoulement dans un élément de vis	104
3.3.2	Écoulement dans les éléments malaxeurs	106
3.3.3	Le modèle global	108
3.4	Méthode de simulation de la casse de fibre	113
3.4.1	Distribution de probabilité	113
3.4.2	Matrice de fragmentation	115
3.4.3	Simulation de la casse de fibre	118
3.4.4	Sensibilité aux paramètres	121
3.5	Confrontation de la méthode de simulation à l'expérience	132
3.5.1	Étude expérimentale	132
3.5.2	Comparaison entre simulation et expérience	133
3.6	Conclusion et perspectives	149
4	Conclusion générale	151
	Bibliographie	153

Chapitre 1

Introduction générale

Dans la recherche de nouvelles propriétés d'emploi pour les polymères, en vue de leur utilisation dans des domaines de plus en plus larges, une grande partie des travaux se concentre sur le mélange de plusieurs matériaux afin d'obtenir une synergie de leurs différentes propriétés. Par exemple, pour obtenir des polymères plus résistants, on ajoute souvent des charges telles que le noir de carbone ou les fibres de verre. On peut également vouloir obtenir des propriétés thermiques ou de conductivité différentes. Un autre but des mélanges peut être la diminution de la part de matériau issu de la pétrochimie. Pour cela, on peut remplacer une partie du polymère par un polymère biosourcé, ou des fibres de verres par des fibres végétales, par exemple. Dans tous les cas, il faut veiller à mélanger correctement les différents matériaux afin d'obtenir des propriétés mécaniques homogènes et optimales. Or, il est difficile de déterminer objectivement ce qu'est un bon mélange, de le quantifier et a fortiori de déterminer la capacité d'un dispositif de mise en forme à l'obtenir. Pour cela, il est nécessaire de trouver des méthodes de caractérisation du mélange et des moyens pour étudier les procédés de mélange sans avoir recours systématiquement à des études expérimentales coûteuses en matières premières et en temps d'occupation de lignes de productions pour les machines industrielles.

Cette thèse s'inscrit dans le projet Fonlimics du pôle de compétitivité Plastipolis qui vise à étudier les possibilités d'amélioration par simulation de la fonctionnalisation de matériaux par ajout de charges. Pour effectuer des mélanges de polymères ou de polymères et de charges, il existe plusieurs procédés dans l'industrie, comme les mélangeurs internes, les malaxeurs de type Buss et les extrudeuses bivis. Dans notre étude, nous nous sommes intéressés en particulier à l'extrusion bivis. En effet, les extrudeuses bivis sont très largement utilisées puisqu'elles peuvent être utilisées en continu et sont très modulaires, ce qui est un atout pour l'industriel qui produit souvent des mélanges « à façon ». Elles sont également plus simples à modéliser que les malaxeurs Buss dans lesquels l'écoulement est plus complexe à cause du mouvement de va-et-vient superposé à la rotation de la vis.

Dans la littérature, une distinction est généralement faite entre mélange dispersif et distributif. D'une part, le mélange distributif consiste à créer une cinématique d'écoulement qui génère une concentration uniforme de tous les composants, fluides ou solides. D'autre part, le mélange dispersif consiste à réduire des blocs ou des agglomérats (talc, noir de carbone, etc.) en particules les plus petites possible et, pour cela, à casser les interactions entre particules [Fig. 1.1]. Le mélange dispersif est donc considéré comme étant fortement lié au niveau de contrainte dans l'écoulement. Bien que le mélange dispersif soit toujours lié aux contraintes subies dans le pro-

cédé, les mécanismes amenant à la fragmentation d'agglomérats varient suivant la nature de la charge. Ainsi, deux types de micropertes de silice peuvent présenter des modes de dispersion différents (désintégration ou rupture) [1]. Un autre aspect du mélange dispersif, cette fois-ci non désiré, est la casse de fibres (de verre, naturelles, etc.). Dans une extrudeuse baxis, le mélange dispersif est obtenu par les contraintes de cisaillement et d'élongation, tandis que le mélange distributif est obtenu par l'étirement et les réorientations dans l'écoulement, en particulier dans les zones comprenant des éléments malaxeurs.

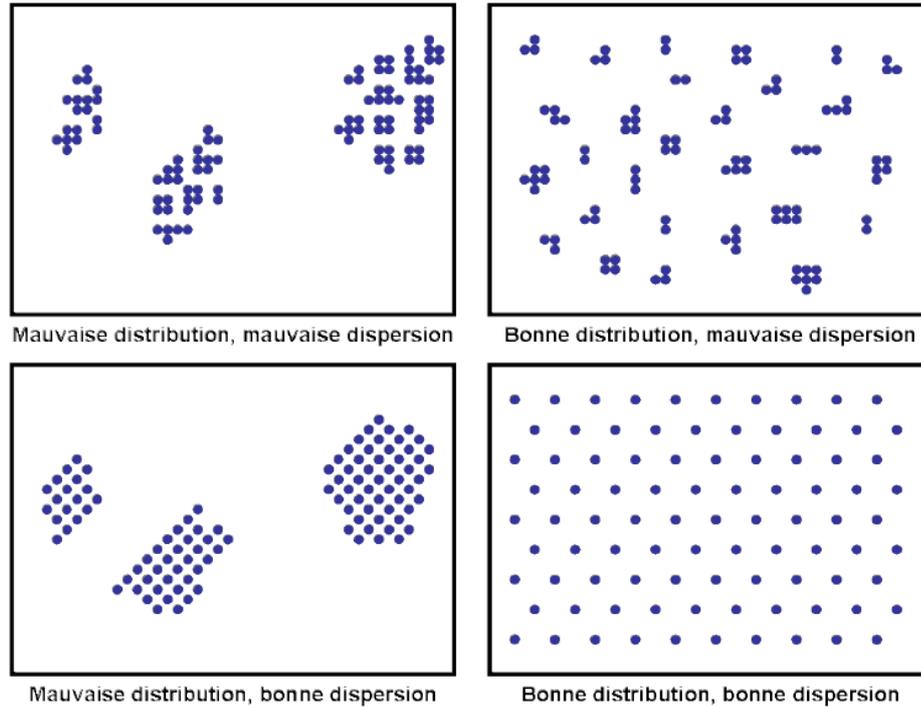


FIGURE 1.1 – Illustration de la différence entre mélanges distributif et dispersif (inspiré de [2])

1.1 Caractérisation du mélange distributif

Dans la première partie de notre étude, nous nous sommes concentrés sur le mélange distributif. Dans un mélange parfaitement homogène (ce que l'on cherche à obtenir), la concentration du composant minoritaire est la même dans tout le mélange. Dans un mélange complètement ségrégué, la concentration du composant minoritaire est égale à un dans une zone de l'écoulement et à zéro dans l'autre. Il existe des cas intermédiaires. Par exemple, on peut trouver plusieurs petites zones où la concentration est forte, ou bien une grande zone où le mélange est uniforme, voisine d'une grande zone où l'on ne trouve pas trace du composant minoritaire [Fig. 1.2]. Il est donc nécessaire, pour caractériser un mélange, de prendre en compte non seulement la qualité « moyenne » du mélange, mais aussi la nature de ce mélange. Plusieurs critères de mesure de la capacité de mélange ont été proposés dans la littérature, certains se basant sur l'étude d'échantillons (simulés ou obtenus expérimentalement), d'autres se basant directement sur l'étude de l'écoulement.

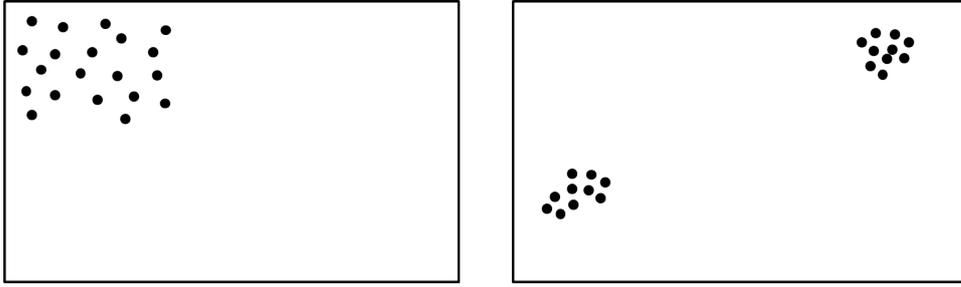


FIGURE 1.2 – Deux mélanges nécessitant un critère objectif de mesure du mélange pour être départagés

1.1.1 Échelle et intensité de ségrégation

En 1952, Danckwerts [3] introduit les concepts d'échelle et d'intensité de ségrégation qui sont encore aujourd'hui les bases de l'étude et de la caractérisation des mélanges [Fig. 1.3]. Cependant, Danckwerts considérait uniquement les mélanges avec une ségrégation à courte distance (la texture). Or, c'est la ségrégation à longue distance qui nous intéresse dans le cas du mélange distributif. L'intensité de ségrégation [Fig. 1.3] telle que définie par Danckwerts est :

$$I = \frac{\sigma_c^2}{\bar{c}(1-\bar{c})} \text{ avec } \bar{c} = \langle c(x) \rangle_\Omega \quad (1.1)$$

où $\sigma_c^2 = \langle (c(x) - \bar{c})^2 \rangle_\Omega$ est la variance de la concentration sur le domaine entier Ω et $c(x)$ est la concentration au point x du domaine. Afin d'étudier les mélanges présentant une ségrégation à longue distance, on doit définir des sous-domaines Ω_f [4]. La valeur moyennée sur une cellule, ou densité à « gros grain » sur un sous-domaine fini Ω_f , est définie par :

$$C_i = \langle c(x) \rangle_{\Omega_i} \quad (1.2)$$

L'équation (eq. 1.1) peut alors être écrite sous une forme discrète [4] :

$$I_d = \frac{1}{A_\Omega} \sum_{i=1}^n \frac{(C_i - \bar{C})^2}{\bar{C}(1-\bar{C})} A_{\Omega_i} \text{ avec } \bar{C} = \bar{c} \quad (1.3)$$

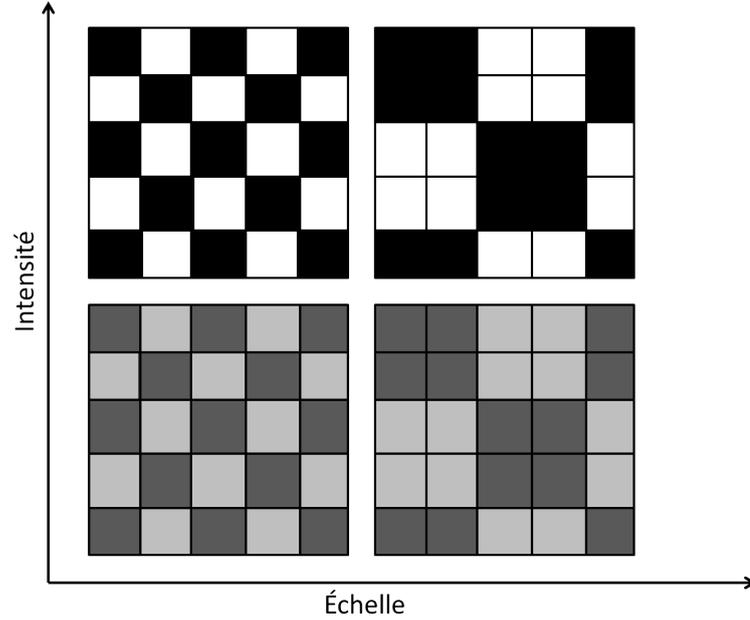


FIGURE 1.3 – Illustration des concepts d'intensité et d'échelle de ségrégation

où A_Ω et A_{Ω_i} représentent respectivement l'aire du domaine de l'écoulement et celle du sous-domaine i . On remarque que I_d dépend de la taille des sous-domaines, qui doivent donc être choisis en fonction de l'échelle de mélange qui nous intéresse. Tucker et Peters [5] choisissent de prendre comme taille de sous-domaine la taille des éléments de maillages construits pour la simulation numérique de l'écoulement. Ils appellent cette échelle « cell size » (échelle de la cellule). Ils nomment ensuite macrostructure le niveau où le plus petit objet est la cellule et où le plus grand est le mélange entier, et microstructure le niveau où le plus petit objet observé est un point (plus grand qu'un atome mais plus petit que la plus petite particule ou striation) et le plus grand la cellule.

L'échelle de ségrégation [Fig. 1.3] est une autre fonction du second moment de la distribution de la concentration, qui mesure si de larges zones non-mélangées sont présentes et s'il existe une périodicité dans la distribution de la concentration. L'échelle de ségrégation est définie par Danckwerts [3] comme l'intégrale de la fonction de corrélation ρ :

$$S_e = \int_0^\infty \rho(r) dr \quad (1.4)$$

où la fonction de corrélation ρ est définie par :

$$\rho(r) = \frac{\langle (c(x) - \bar{c})(c(x+r) - \bar{c}) \rangle_\Omega}{\sigma_c^2} \quad (1.5)$$

Quand la distribution de concentration est discrétisée de la même manière que pour l'intensité de ségrégation, la fonction de corrélation peut être calculée via une transformée de Fourier [4].

D'autres études du mélange distributif utilisent la fonction de corrélation, ou bien la somme de corrélation qui y est apparentée, pour définir des paramètres de caractérisation [6], [7].

Tucker et Peters [5] reprennent l'étude de Danckwerts à l'échelle macroscopique et proposent deux nouveaux critères : l'écart-type à la concentration moyenne, qui permet de savoir à quel point le mélange est non-uniforme, et l'erreur maximale, c'est-à-dire l'écart maximal à la concentration moyenne, qui permet de savoir s'il existe des zones particulièrement mal mélangées. Mackley et Neves Saraiva [8] proposent quant à eux une constante de taux de mélange déterminée à partir de l'évolution de la variance de la concentration au cours du mélange.

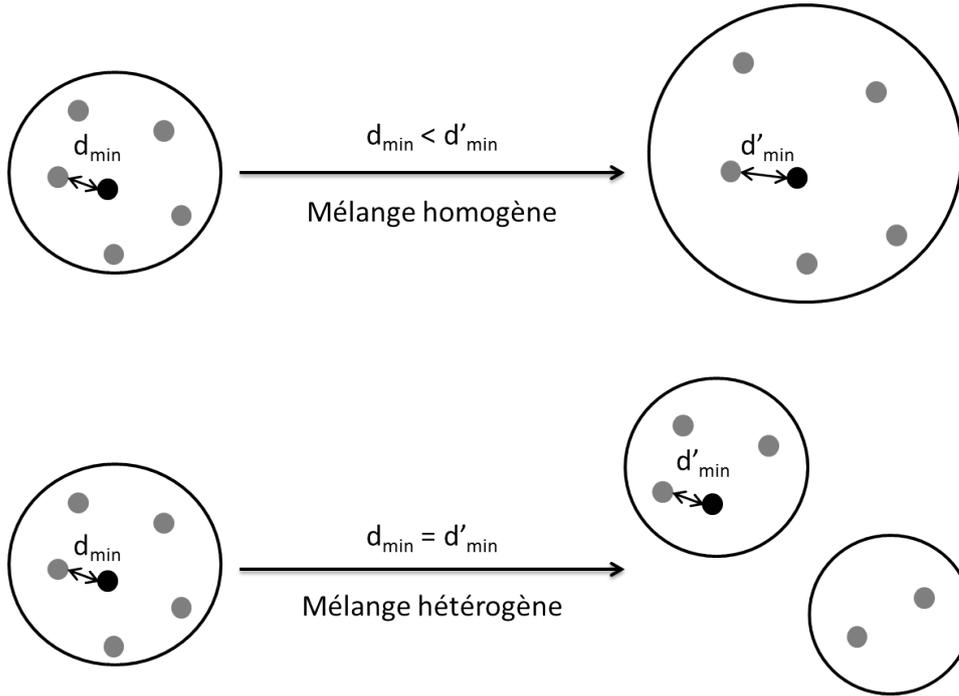


FIGURE 1.4 – Illustration de la différence entre mélanges homogène et hétérogène

Funatsu *et al.* [9] cherchent à différencier des types de mélanges en introduisant le rapport d'accroissement du mélange local :

$$L_{mix} = \frac{\frac{\bar{d}_{min}}{d_{min,0}}}{\frac{\bar{d}_{ave}}{d_{ave,0}}} \quad (1.6)$$

avec \bar{d}_{min} la distance minimale moyenne entre deux marqueurs :

$$\bar{d}_{min} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \min \left[\bigcup_{i \neq j}^n |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{min,i} \quad (1.7)$$

et \bar{d}_{ave} la valeur moyenne des distances moyennes entre deux marqueurs :

$$\bar{d}_{ave} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n \frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}{n-1} \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{ave,i} \quad (1.8)$$

$\bar{d}_{min,0}$ et $\bar{d}_{ave,0}$ sont les valeurs initiale de \bar{d}_{min} et \bar{d}_{ave} , et \mathbf{x}_i est la position d'un marqueur i transporté par l'écoulement. Si l'écoulement est de type distributif uniforme, l'expansion des distances entre marqueurs composant un agglomérat se fait de manière uniforme, la distance minimale entre marqueurs augmente avec la distance moyenne et L_{mix} est égal à 1 (le mélange local est favorisé) (eq. 1.6). Si l'écoulement est de type distributif hétérogène, les agglomérats sont « cassés » par l'écoulement, la distance minimale entre marqueurs n'augmente pas, contrairement à la distance moyenne, et L_{mix} est inférieur à 1 (eq. 1.6) (le mélange local est « nul ») [Fig. 1.4].

Funatsu *et al.* [9] complètent cette étude par l'évaluation des écarts types des distributions de distances minimales $d_{min,i}$ et moyennes $d_{ave,i}$.

1.1.2 Entropies

En 2001, Wang *et al.* [6] proposent d'utiliser la notion d'entropie pour caractériser le mélange. La perte d'information qui résulte de la description d'un système par des valeurs moyennes est quantifiée par l'entropie (de Shannon, dans le cas général : théorie de l'information [10]) sur un élément de volume (« case »). Or, la concentration d'un produit en un point est une valeur moyenne. Dans le cas du mélange, la perte d'information vient du fait que la connaissance de la concentration d'un produit dans un élément de volume (le « point ») ne permet pas de remonter à la répartition du produit à l'intérieur de cet élément.

L'entropie de mélange s'écrit [10] :

$$S = - \sum_{j=1}^M p_j \log_b p_j \quad (1.9)$$

où p_j est la probabilité de trouver une particule dans la « case » j , M le nombre total de « cases » en lequel le produit est divisé ([Fig. 1.5]) et b le nombre de « symboles » de la variable, c'est-à-dire dans notre cas deux : présence ou absence de la particule.

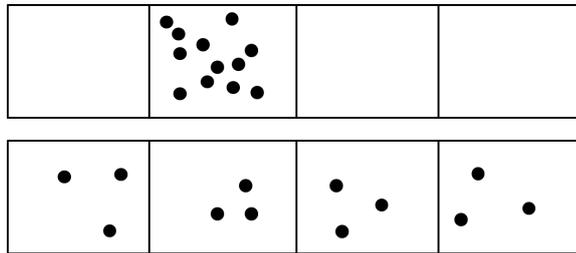


FIGURE 1.5 – Illustration du mélange en termes de répartition des particules. En haut : produit ségrégué ($S = 0$) ; en bas : mélange homogène ($S = 1$)

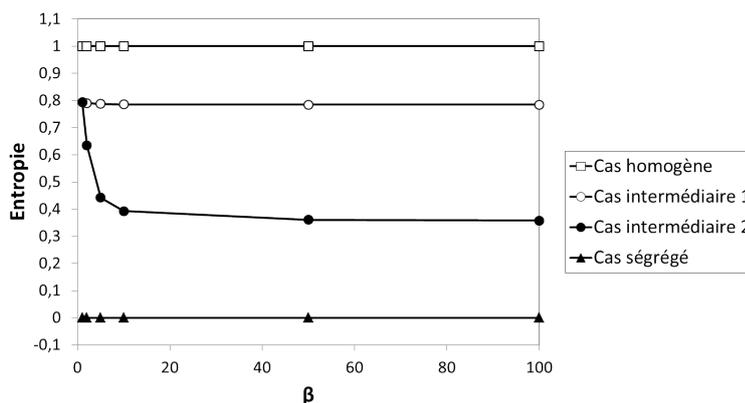


FIGURE 1.6 – Évolution de l'entropie de Rényi en fonction du paramètre β pour les différents cas de mélange présentés en [Fig. 1.7]

La valeur maximale de cette entropie est obtenue lorsque la probabilité de trouver une particule est la même dans toutes les « cases » [Fig. 1.5] (mélange « parfait »), c'est-à-dire $p_j = \frac{1}{M}$.

En divisant S par sa valeur maximale ($\log_2 M$) [10], on obtient une entropie relative variant de 0 pour un produit totalement ségrégué à 1 pour un mélange « parfait ». Un avantage de cette mesure est la propriété d'additivité de l'entropie qui permet d'obtenir la qualité de mélange d'un ensemble de zones distinctes à partir des entropies de chacune.

En relaxant cet axiome d'additivité, Rényi [11] étend l'entropie à une famille de fonctions d'un paramètre β définies par :

$$S(\beta) = \frac{\log_2 \left(\sum_{j=1}^M p_j^\beta \right)}{1 - \beta} \quad (1.10)$$

Lorsque le paramètre β tend vers 1, on retrouve l'entropie de Shannon (eq. 1.9). Pour $\beta > 0$, les propriétés de l'entropie restent globalement les mêmes que pour l'entropie de Shannon : elle est maximale et égale à $\log_2 M$ pour un mélange homogène, nulle pour un mélange parfaitement ségrégué. On peut la normaliser par sa valeur maximale $\log_2 M$ pour obtenir une entropie relative variant de 0 à 1, qui permet de mesurer l'écart de concentration par rapport au mélange idéal ($Ecart = 1 - \frac{S(\beta)}{\log_2 M}$). Cette mesure est équivalente à l'intensité de ségrégation. L'entropie de Rényi est une fonction strictement décroissante de β , par conséquent, sa valeur ne peut pas dépasser celle de l'entropie de Shannon ($\beta \rightarrow 1$) pour un mélange donné [Fig. 1.6]. On retrouve un équivalent du calcul de l'erreur maximale proposé par Tucker et Peters [5] dans l'entropie de Rényi. En effet, lorsque l'on augmente le paramètre β , l'entropie est calculée en privilégiant de plus en plus les plus fortes probabilités. Ainsi, deux mélanges peuvent avoir une même entropie de Shannon et une entropie de Rényi différente (à β donné), la présence d'une zone à forte concentration donnant une entropie de Rényi plus faible [Figs. 1.6, 1.7]. Wang *et al.* [6] caractérisent le mélange par extrusion monovis en utilisant l'entropie de Rényi, tandis que Domingues *et al.* [12, 13] utilisent l'entropie de Shannon.

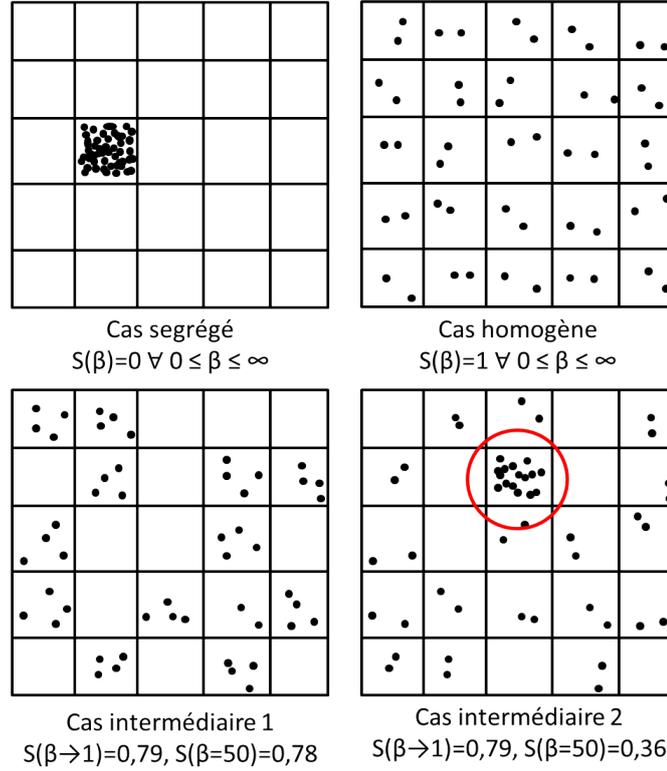


FIGURE 1.7 – Illustration de la différence entre entropies de Renyi avec différents paramètres β ($\beta \rightarrow 1$: entropie de Shannon)

1.1.3 Écoulements chaotiques

D'après Aref [14], il peut exister des écoulements aux champs de vitesses simples mais aux trajectoires de particules complexes, c'est à dire des écoulements chaotiques laminaires, par opposition aux écoulements chaotiques turbulents. Le groupe de recherche de Ottino a été très actif dans ce domaine, tant sur le plan expérimental que théorique [15].

La capacité des écoulements chaotiques à séparer rapidement des particules initialement proches est due à leur sensibilité aux conditions initiales. Comme expliqué par Ottino dans son livre résumant l'état de l'art sur ce sujet [15], on dit d'un écoulement qu'il est sensible aux conditions initiales s'il n'existe pas de domaine pouvant contenir une trajectoire issue d'un point à temps infini. La caractérisation de la divergence des conditions initiales peut être quantifiée par un nombre appelé coefficient de Liapunov :

$$\sigma_l(\mathbf{X}, \mathbf{M}) = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ |\mathbf{dX}| \rightarrow 0}} \left[\frac{1}{t} \ln \left(\frac{|\mathbf{dx}|}{|\mathbf{dX}|} \right) \right] \quad (1.11)$$

où \mathbf{X} est la position d'une particule dans la configuration initiale, \mathbf{dX} le vecteur reliant cette particule à une particule proche dans la configuration initiale, \mathbf{dx} le vecteur reliant ces deux mêmes particules au temps t , \mathbf{M} le vecteur unitaire d'orientation de \mathbf{dX} . À noter que ce coefficient est

estimé à temps infini et ne peut donc être déterminé que par approximation.

D'après Poitou [16], pour caractériser un écoulement, on peut se servir du coefficient de Liapunov, et le généraliser à toutes les configurations initiales en prenant son maximum en fonction de l'orientation définie par le vecteur reliant deux particules initialement proches. Si ce maximum est supérieur à 0, deux trajectoires voisines divergent exponentiellement et l'écoulement est chaotique, sinon, elles ne divergent que linéairement et l'écoulement n'est pas chaotique.

Mackley et Neves Saraiva [8] utilisent une notion proche du coefficient de Liapunov, qui est le taux d'allongement d'une « ligne » de fluide au cours de l'écoulement, défini par :

$$\alpha_l(t) = \frac{1}{t} \int_0^t \frac{d(\ln l)}{dt} dt \quad (1.12)$$

avec l la longueur de la ligne de fluide.

D'autres auteurs [7, 17, 18] utilisent le taux d'accroissement d'une surface de fluide, qui peut être interprété comme l'augmentation de l'interface entre deux fluides non-miscibles avec le mélange :

$$\eta_{surf}(\mathbf{X}, \mathbf{N}, t) = \lim_{dA \rightarrow 0} \frac{da}{dA} = \sqrt{\mathbf{N}^{-1} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{N}} \quad (1.13)$$

avec dA la surface initiale, da la surface au temps t , \mathbf{N} le vecteur unitaire de la surface dA et \mathbf{C} le tenseur de Cauchy-Green droit ($\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$ avec \mathbf{F} le tenseur des déformations).

Plus simplement, Cheng et Manas-Zloczower [19] utilisent l'histoire de la déformation et l'allongement d'une ligne de fluide et d'un élément de surface le long de l'écoulement comme mesures du mélange.

D'une manière générale, toutes ces approches reviennent à calculer une ou plusieurs composantes d'une mesure (tensorielle) de la déformation.

1.1.4 Distribution des temps de séjour

Alternativement, une méthode simple pour accéder à l'allongement d'un élément de fluide est la mesure de la distribution des temps de séjour. Comme l'explique Poitou [16], une mesure de la largeur de la distribution des temps de séjour permettra d'accéder au taux d'allongement axial moyen subi par la matière, ce qui donne une évaluation partielle de l'efficacité du mélange. Cette méthode est très couramment utilisée dans les études du mélange [20–23]. Les mesures de temps de séjour permettent d'estimer les capacités d'un dispositif, mais ne suffisent pas si l'on veut visualiser les mécanismes physiques du mélange le long de l'écoulement, ce qui rend les conclusions obtenues sur un procédé difficilement extrapolables à un autre.

Le temps de séjour a également été étudié par Gao *et al.* [24] ainsi que par Poulesquen [25], qui ont modélisé et analysé le temps de séjour moyen et la distribution du temps de séjour dans une extrudeuse bivis. Gao *et al.* [24] et Gasner *et al.* [26] ont montré une corrélation entre le débit d'entraînement et le temps de séjour : plus le débit d'entraînement est important, plus le temps de séjour autour des éléments de mélange est court et moins le mélange est bon. Ainsi, un

équivalent de la mesure de la distribution des temps de séjour est celle du reflux Q_{back} à travers une section de l'extrudeuse bivis simulée [18, 21] :

$$G = \frac{Q_{back}}{Q_{total}} \quad (1.14)$$

1.1.5 Mapping

Afin de quantifier le mélange, Kruijt *et al.* [4] proposent de calculer directement la distribution de la concentration dans l'espace au cours du mélange. Pour cela, ils utilisent une méthode de « mapping » basée sur l'utilisation d'une matrice de distribution. Un suivi des frontières d'un élément de fluide permet d'accéder à sa déformation après un certain nombre de périodes. La quantité de fluide déformé est quantifiée et les propriétés de mélanges peuvent être étudiées en analysant sa distribution. Des mesures du mélange, comme l'intensité et l'échelle de ségrégation peuvent ensuite être calculées. La méthode de suivi des frontières est limitée car le nombre de marqueurs nécessaires pour décrire la frontière est difficilement prévisible et peut augmenter exponentiellement entre chaque période, nécessitant d'insérer des marqueurs supplémentaires au cours du temps (méthode de suivi adaptatif), ce qui demande de grandes capacités de calcul. La méthode proposée par Kruijt *et al.* [4] nécessite de découper le domaine de calcul Ω en sous-domaines Ω_i . Les frontières des sous-domaines sont suivies entre $t = t_0$ et $t = t_0 + \Delta t$. Une matrice de distribution Φ est calculée, Φ_{ij} contenant la fraction (de surface en 2D) du sous-domaine Ω_j à $t = t_0$ qui est contenue, à $t = t_0 + \Delta t$ (en prenant en compte les frontières originales à $t = t_0$), par Ω_i [Fig. 1.8] :

$$\Phi_{ij} = \frac{\int_{\Omega_j|_{t=t_0+\Delta t} \cap \Omega_i|_{t=t_0}} dA}{\int_{\Omega_j|_{t=t_0}} dA} \quad (1.15)$$

La concentration est décrite par un vecteur $\underline{\mathbf{C}}$ [27], ses composants C_i sont les concentrations moyennées sur les sous-domaines Ω_i . Si la distribution à $t_0 = 0$ est décrite par $\underline{\mathbf{C}}^0$, la concentration après un temps Δt est calculée par $\underline{\mathbf{C}}^1 = \Phi \underline{\mathbf{C}}^0$. La concentration après n pas similaires est $\underline{\mathbf{C}}^{n+1} = \Phi^n \underline{\mathbf{C}}^0$. La matrice Φ^n devenant rapidement très grande avec n , Galaktionov *et al.* [27] calculent la concentration de manière itérative $\underline{\mathbf{C}}^{i+1} = \Phi \underline{\mathbf{C}}^i$. La méthode de mapping suppose que la concentration est constante sur chaque sous-domaine. Par conséquent, les contributions venant de différents sous-domaines « donneurs » sont moyennées sur le domaine qui « reçoit ». Cette approximation conduit à une erreur systématique qui peut être considérée comme de la diffusion numérique et qui dépend de la taille des sous-domaines. Galaktionov *et al.* [27] appliquent cette méthode à un cas d'extrusion bivis.

Ici aussi, la méthode de mapping revient à intégrer une mesure de déformation.

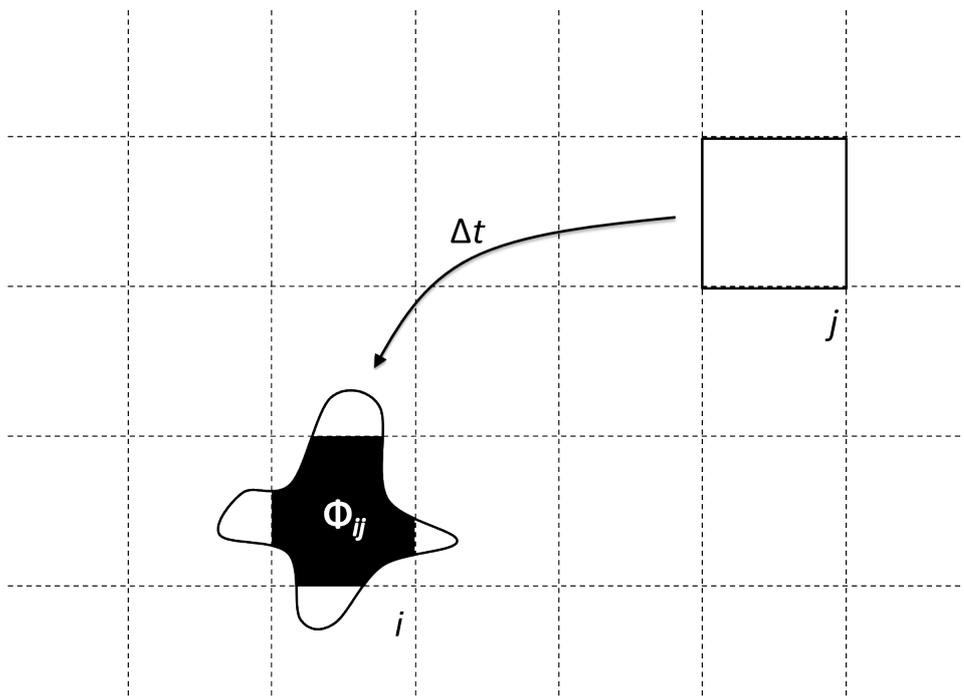


FIGURE 1.8 – Illustration de la méthode de mapping

1.2 Caractérisation du mélange dispersif

Dans la deuxième partie de notre étude, nous nous sommes intéressés à un cas particulier du mélange dispersif : la casse de fibre rigide. Dans ce cas-là, le but n'est pas de favoriser mais de limiter la dispersion afin de garder les propriétés mécaniques offertes par des fibres longues.

Dans le cas plus classique de la dispersion d'agglomérats de particules, plusieurs méthodes de mesures ont été proposées afin d'évaluer la capacité de mélange dispersif d'un dispositif, les plus simples étant l'étude du taux de cisaillement [21, 22, 28] et de la contrainte de cisaillement [20, 21, 28–30]. Comme la valeur de la contrainte au sommet des éléments malaxeurs ou du filet et dans les zones d'interpénétration est plus élevée qu'ailleurs dans l'écoulement, Ishikawa *et al.* [17] proposent d'évaluer par une méthode de lâcher de particules la quantité de particules qui traversent ces zones. Ils caractérisent ensuite la capacité de mélange dispersif de l'écoulement par une fonction de distribution $g(\sigma)$ de la contrainte maximale :

$$g(\sigma) = \frac{M_p(\sigma)}{\Delta\sigma N_p} \quad (1.16)$$

où $M_p(\sigma)$ est le nombre total de particules subissant une contrainte maximale (au cours de l'écoulement) entre $(\sigma - \Delta\sigma/2)$ et $(\sigma + \Delta\sigma/2)$, et où N_p est le nombre total de particules.

Dans la littérature, il est communément admis que les écoulements d'élongation sont plus efficaces que les écoulements de cisaillement simple pour disperser les liquides à fortes viscosités et faibles tensions interfaciales, ainsi que les agglomérats solides. Une méthode d'évaluation de la capacité d'un écoulement à disperser est donc de déterminer la nature de l'écoulement à travers un critère de classification. L'équipe de Manas-Zloczower [28–32] quantifie les composantes élongationnelles d'un écoulement en évaluant l'importance relative du tenseur taux de déformation et du tenseur vorticit . Ils obtiennent ainsi un param tre λ_c [Fig. 1.9] :

$$\lambda_c = \frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{E}| + |\mathbf{\Omega}|} \quad (1.17)$$

où $|\mathbf{E}|$ et $|\mathbf{\Omega}|$ sont les invariants ($|\mathbf{E}| = \sqrt{\frac{1}{2}(\mathbf{E} : \mathbf{E}^T)} = \sqrt{\frac{1}{2}\sum_i \sum_j E_{ij}^2}$) des tenseur taux de d formation et vorticit . λ varie de 0 pour un  coulement purement rotationnel   1 pour un  coulement purement  longationnel. Cet indice est une simple pond ration entre les cin matiques pr c demment cit es. Il est   noter que cette expression n'est pas objective (invariante par changement de r f rentiel).

Cette d marche est inspir e par le travail d'Astarita, qui propose en 1979 [33] un crit re objectif R_D [Fig. 1.9] pour classer les  coulements selon ces m mes cin matiques afin de simplifier les calculs impliquant les lois de comportements de fluides visco lastiques :

$$R_D \equiv -\frac{\text{tr } \overline{\mathbf{\Omega}}^2}{\text{tr } \mathbf{E}^2} \quad (1.18)$$

avec $\overline{\mathbf{\Omega}} = \mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega}_D$ le tenseur spin relatif au tenseur taux de rotation $\mathbf{\Omega}_D = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i \dot{\mathbf{e}}_i$ des vecteurs propres \mathbf{e}_i de \mathbf{E} .

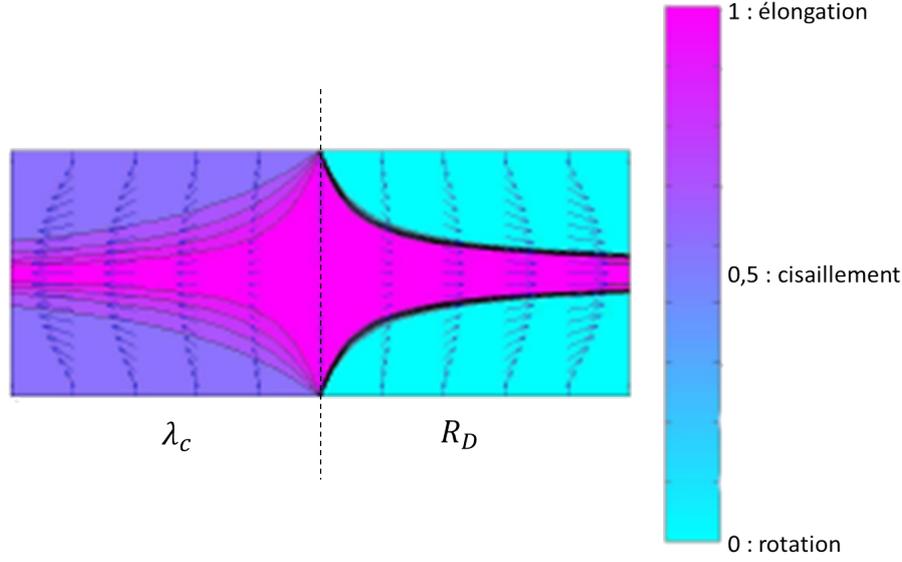


FIGURE 1.9 – Champ de vitesses et critères λ_c (à gauche) et R_D (à droite) dans le cas d'un écoulement d'écrasement plan

En 1985, Larson [34] propose (dans le même contexte) un paramètre de classification équivalent :

$$S_f = \frac{2 (\text{tr } \overset{\circ}{\mathbf{E}})^2}{\text{tr } \overset{\circ}{\mathbf{E}}} \quad (1.19)$$

où $\overset{\circ}{\mathbf{E}}$ est la dérivée temporelle de Jaumann du tenseur taux de déformation \mathbf{E} . Pour un écoulement stationnaire, elle s'écrit :

$$\overset{\circ}{\mathbf{E}} = \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{E} - \boldsymbol{\Omega}^T \cdot \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (1.20)$$

où \mathbf{u} est le champ de vitesse. L'idée de Larson est de caractériser de manière objective ce qu'il appelle « persistence of straining ». En effet, la dérivée de Jaumann de \mathbf{E} correspond à la dérivée corotationnelle de ses axes propres, il s'agit donc de vérifier si l'accélération ainsi calculée est nulle (élongation) ou maximale (rotation).

Le paramètre S_f est compris entre 0 pour un écoulement purement rotationnel et l'infini pour un écoulement purement élongationnel (pour un écoulement de cisaillement simple, $S_f = 1$). L'équipe de Manas-Zloczower [30–32, 35] propose d'utiliser une forme normalisée du paramètre de Larson pour déterminer le type d'écoulement :

$$N_s = \frac{S_f}{1 + S_f} \quad (1.21)$$

L'étude du mélange dispersif est plus compliquée que celle du mélange distributif. En effet, en plus de la caractérisation de la capacité du procédé à « casser » les agglomérats ou les fibres, il est nécessaire d'évaluer l'évolution de la taille des agglomérats (ou des fibres) au cours du

procédé, et pour cela on doit déterminer quels sont les mécanismes de casse. C'est cette partie de l'étude du mélange distributif appliquée au mélange de polymères chargés de fibres rigides que nous avons abordée dans la deuxième partie de notre travail.

1.3 Résumé de la thèse

Dans le cadre de ce projet, nous avons voulu exploiter et étendre les outils de simulation à notre disposition pour proposer des méthodes de caractérisation et de prédiction du mélange à différentes échelles.

À l'échelle locale d'écoulements macroscopiques, nous avons voulu exploiter les possibilités offertes par le logiciel de simulation 3D éléments finis XimeX[®], développé par le Cemef et Sciences Computers Consultants (S&CC), et y apporter des améliorations dans le but d'obtenir un outil d'étude du mélange distributif par extrusion bivis de particules dans un polymère. En effet, un écoulement aussi complexe nécessite une simulation 3D locale pour saisir la cinématique permettant le mélange, et cela nécessite une puissance de calcul importante. Nous avons ainsi enrichi la méthode élément fini existante à l'aide de la bibliothèque éléments finis CimLib[®] du Cemef pour atteindre une plus grande précision de calcul, puis nous avons testé plusieurs méthodes de lâchers de particules afin de simuler le déplacement de charges dans la matrice polymère au cours du mélange. Nous avons ensuite appliqué quelques méthodes de caractérisations du mélange, dont une inédite, à ces lâchers de particules, et ce dans le cas de plusieurs géométries de vis.

À l'échelle de la particule, on s'est intéressé aux mécanismes conduisant à la casse de fibre rigides, telles que les fibres de verre, lors du mélange avec un polymère en extrusion bivis. Nous avons choisi de faire des hypothèses assez importantes afin de simplifier ce problème extrêmement complexe et nous avons proposé une méthode de simulation de l'évolution de la distribution des longueurs de fibres le long de l'écoulement. En effet, il est important de disposer d'un maximum d'information sur les longueurs de fibres, étant donné que seulement quelques fibres longues peuvent considérablement modifier les propriétés mécaniques du matériau final. Jusqu'à présent, seule la méthode proposée tout récemment par Tucker *et al.* [36], et appliquée au procédé d'injection, permettait de simuler l'évolution de la distribution entière. Nous avons proposé une méthode similaire, basée sur la conservation de la masse des fibres au cours de l'écoulement, pour simuler l'évolution de leurs longueurs. Nous avons utilisé comme paramètres de cette simulation les résultats de calcul obtenus par le logiciel Ludovic[®] qui est un logiciel développé par le Cemef et S&CC reposant sur des approches de type « approximation de la lubrification hydrodynamique » (ALH). Nous avons ensuite comparé quelques résultats de calcul à des distributions de longueurs mesurées sur des échantillons prélevés le long d'une extrudeuse bivis, au cours des post doctorats de Funda Inceoglu et de Julien Ville, financés par Arkema et Polytechs dans le cadre du projet Fonlimics.

Dans ce manuscrit, nous allons dans un premier temps exposer notre travail sur la simulation de la distribution de charges dans une extrudeuse bivis dont l'écoulement est calculé en 3D par une méthode éléments finis. Puis, nous décrirons notre méthode de calcul de l'évolution des longueurs de fibres dans une extrudeuse bivis à partir des grandeurs moyennes dans l'écoulement, obtenues par le logiciel Ludovic[®] cette fois-ci.

Chapitre 2

Modélisation du mélange distributif en extrusion bivis

Notations

\circ :	dérivée temporelle de Jaumann
A :	nombre d'arêtes du maillage
A_Ω :	aire du domaine Ω
b :	nombre de « symboles » de la variable
\mathbf{B} :	tenseur de Cauchy-Green gauche
c :	concentration
\bar{c} :	concentration moyenne
C :	concentration moyenne en particules sur l'ensemble des « boîtes »
\mathbf{C} :	tenseur de Cauchy-Green droit
$\underline{\mathbf{C}}$:	vecteur des concentrations, méthode de mapping
\bar{C}_i :	concentration moyenne sur un sous-domaine Ω_i
c_j :	concentration en particules de la « boîte » j
$\underline{\mathbf{C}}^n$:	vecteur des concentrations après n pas de temps similaires, méthode de mapping
d :	dimension du domaine
da :	surface au temps t
dA :	surface initiale
d_{ave} :	distance moyenne entre un marqueur i et les autres marqueurs
\bar{d}_{ave} :	distance moyenne entre deux marqueurs
$\bar{d}_{ave,0}$:	distance moyenne initiale entre deux marqueurs
d_{min} :	distance minimale entre un marqueur i et les autres marqueurs
\bar{d}_{min} :	distance minimale moyenne entre deux marqueurs
$\bar{d}_{min,0}$:	distance minimale moyenne initiale entre deux marqueurs
$d\mathbf{x}$:	vecteur reliant les deux mêmes particules que $d\mathbf{X}$ mais au temps t
$d\mathbf{X}$:	vecteur reliant la particule en \mathbf{X} à une particule proche dans la configuration initiale
\mathbf{E} :	tenseur des taux de déformation
e_E :	erreur sur l'élément E
\mathbf{e}_i :	vecteurs propres de \mathbf{E}
e_{ij} :	erreur sur l'arête \mathbf{X}^{ij}
e_{seuil} :	valeur en dessous de laquelle l'erreur est assez petite
\mathbf{F} :	tenseur des déformations

g :	fonction de distribution de la contrainte maximale
G :	coefficient de mélange
\mathbf{G}^i :	gradient de champ scalaire régulier sur le domaine de calcul
\mathbf{G}^{ij} :	paramètre du calcul de la métrique
h :	taille de maille moyenne dans la direction normale au domaine solide
\mathbf{H} :	hessien
$H(\cdot)$:	fonction heavyside
H^1 :	espace de Hilbert de carré sommable $H^1(\Omega) = \{\mathbf{v} \in L^2(\Omega), \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}_i} \in L^2(\Omega), \forall i, \dots, d\}$
H_0^1 :	sous-espace des fonctions de H^1 « qui s'annulent sur le bord » du domaine
I :	intensité de ségrégation
I_d :	intensité de ségrégation discrète
I_j :	fonction caractéristique associée au domaine j
I_j^h :	approximation P1 du facteur I_j
l :	longueur d'une ligne de fluide
\mathbf{k}_i :	coefficients des schémas d'intégration
L^2 :	espace des fonctions linéaires de carré sommable $L^2(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} (f(x))^2 dx \leq \infty\}$
L_{mix} :	rapport d'accroissement du mélange local
\mathbf{m} :	vecteur unitaire d'orientation de \mathbf{dx}
M :	nombre total de « cases »
\mathbf{M} :	vecteur unitaire d'orientation de \mathbf{dX}
\mathbf{M}_{opt} :	métrique optimisée
M_p :	nombre total de particules subissant une contrainte maximale
N :	nombre d'itérations
\mathbf{N} :	vecteur unitaire de la surface dA
n_{ij} :	nombre d'arêtes créées
N_p :	nombre total de particules
N_s :	critère de classification des écoulements de Larson normalisé
p :	champ de pression
P :	paramètre du calcul de la métrique
p_j :	probabilité de trouver une particule dans la « case » j
q :	fonction test
Q :	facteur de qualité nodale
Q_{back} :	reflux à travers une section d'extrudeuse bivis
$Q_{mailleur}$:	qualité calculée par le mailleur
Q_{min} :	qualité en dessous de laquelle un élément est considéré comme mauvais
Q_{pond} :	qualité pondérée
Q_{total} :	débit total à travers une section d'extrudeuse bivis
R_D :	critère de classification des écoulements d'Astarita
r_e :	ratio à partir duquel l'erreur est assez petite
S :	entropie de mélange
S_e :	échelle de ségrégation
S_f :	critère de classification des écoulements de Larson
s_{ij} :	paramètre du calcul de la métrique
$S_g(\cdot)$:	fonction signe
$S(\beta)$:	entropie de Rényi
\mathbf{u} :	champ de vitesse
\mathbf{u}_Γ :	vitesse sur la frontière extérieure
V_j :	volume de la « boîte » j

\mathbf{v} :	fonctions tests
$\mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t_i)$:	vitesse interpolée au point \mathbf{x}_i et au temps t_i
\mathbf{X} :	position d'une particule dans la configuration initiale
\mathbf{x}_i :	position d'une particule au temps t_i
\mathbf{X}^{ij} :	vecteur arête reliant le nœud i au nœud j
\mathbf{x}_i^k :	position d'une particule au temps t_i et à l'itération k
α :	fonction level-set décrivant la distance à l'interface solide-liquide
$\tilde{\alpha}$:	level-set décrivant la distance à la surface libre
α_h :	fonction level-set discrète
α_l :	taux d'allongement d'une « ligne » de fluide
β :	paramètre de Rényi
$\Gamma(i)$:	ensemble des nœuds connectés au nœud i
Γ_s :	interface du domaine solide
δS :	différence normalisée entre entropies de Shannon et de Rényi
Δt :	pas de temps
$\dot{\epsilon}(\lambda_l)$:	multiplicateur de Lagrange correspondant à la contrainte de non-déformation
η :	viscosité dynamique du fluide
η_s :	viscosité dynamique du solide / facteur de pénalisation
η_{surf} :	augmentation de l'interface entre deux fluides non-miscibles
θ :	temps fictif
λ :	allongement d'une ligne de fluide entre deux instants
Λ :	paramètre du calcul de la métrique
λ_c :	critère de classification des écoulements de Manas-Zloczower
ρ :	paramètre de pénalisation
$\rho(\cdot)$:	fonction de corrélation
σ :	contrainte dans le fluide
$\boldsymbol{\sigma}$:	tenseur des contraintes
σ_c^2 :	variance de la concentration
φ :	fonction level-set $\tilde{\alpha}$ réinitialisée
Φ :	matrice de distribution, méthode de mapping
Φ_{ij} :	fraction du sous-domaine Ω_j à $t = t_0$ qui est contenu, à $t = t_0 + \Delta t$, par Ω_i , méthode de mapping
ω :	poids de communication pénalisé
Ω :	domaine
$\bar{\Omega}$:	tenseur de vorticité
$\bar{\Omega}$:	tenseur spin relatif au tenseur Ω_D
Ω_D :	tenseur taux de rotation des vecteurs propres \mathbf{e}_i
Ω_i :	sous-domaine

2.1 Introduction et bibliographie : calcul d'un écoulement

Afin d'obtenir des propriétés mécaniques homogènes, il est important de répartir uniformément les charges dans la matrice polymère lors du mélange. Comme nous l'avons vu plus tôt (§ 1), cette répartition s'appelle mélange distributif et repose sur la cinématique de l'écoulement. Les mécanismes de mélange distributif (étirement, réorientation) sont liés à la complexité de l'écoulement dans le mélangeur. Afin d'appréhender cette complexité, une modélisation de l'écoulement en trois dimensions est nécessaire. Cette modélisation permet ensuite de simuler la capacité de mélange du dispositif à l'aide des critères mentionnés précédemment (§ 1.1), en suivant des marqueurs le long de l'écoulement pour certains.

Après quelques rappels bibliographiques, nous présenterons l'évolution qu'ont suivie nos méthodes de simulation de l'écoulement, de lâcher de particules et de caractérisation du mélange.

Généralement, les codes de simulation de l'écoulement dans un mélangeur ou une extrudeuse bivis sont basés sur la méthode des éléments finis. Certains auteurs utilisent des codes commerciaux comme FIDAP [19, 29–32] et Polyflow [7, 22]. D'autres ont développé leur propre méthode élément finis [9, 17, 18, 20, 21, 23, 27, 37–39].

Le développement de ces méthodes rencontre de nombreuses difficultés. Par exemple, l'absence de symétrie des limites de la partie mobile du mélangeur ou de l'extrudeuse nécessite que leur mouvement soit pris en compte par une méthode particulière. Au début, les simulations étaient basées sur une technique de « snapshot », qui consiste à sélectionner, dans le cas d'une extrudeuse bivis par exemple, différentes positions des vis dans le fourreau, et de mailler l'espace entre les vis et le fourreau. Pour cela, il est nécessaire de définir autant de maillages que de configurations. En faisant l'hypothèse de conditions quasi-statiques (ce qui est vrai pour tous les problèmes de type Stokes), l'écoulement est ensuite calculé en fonction du temps. Une méthode alternative a été introduite par Avalosse [7] et Bertrand *et al.* [40]. Elle consiste à insérer l'écoulement dans un domaine de calcul plus grand. Un maillage unique est alors utilisé, dans lequel la position et le mouvement des vis est imposé à l'aide de différentes techniques [22, 27]. En 2007, Valette *et al.* [41–43] proposent une version simplifiée de cette méthode où le mouvement des vis est imposé par une méthode « multiphase/pénalisation ».

Une fois l'écoulement calculé, certaines méthodes de caractérisation du mélange nécessitent d'effectuer un lâcher de particules afin de disposer de marqueurs. La plupart des auteurs utilisent une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 pour calculer la position des marqueurs à partir des vitesses interpolées sur l'écoulement. On rencontre également des schémas prédicteurs-correcteurs dans la littérature [23]. Certains auteurs rapportent la « perte » de certains marqueurs au cours du lâcher de particules. Ils attribuent souvent [22, 23] cette perte à l'interception des marqueurs par les parois solides des vis ou du fourreau, due à une mauvaise précision de calcul. Lorsque ce cas se présente, Bravo *et al.* [23] réinjectent la particule à l'endroit qu'elle occupait avant d'être interceptée. Ils considèrent que cette approximation est acceptable dans la mesure où ils étudient la distribution des temps de séjour, et non les trajectoires individuelles des particules. Alsteens *et al.* [22], quant à eux, ignorent dans leur évaluation du mélange les particules qui ne sont pas sorties de l'extrudeuse bivis au bout de quarante fois un temps de séjour caractéristique.

Dans la littérature, on trouve peu de résultats permettant de poser une hiérarchie claire entre les différentes configurations de vis en termes de mélange distributif. À partir de simulations élément finis 3D et de lâchers de particules, plusieurs auteurs relèvent quelques tendances géné-

rales : Cheng et Manas-Zloczower [19] évaluent la capacité de mélange d'une extrudeuse baxis dans la zone de convoyage pour différentes vitesses de rotation des vis. Ils utilisent pour cela l'allongement d'une ligne de fluide et d'un élément de surface au cours de l'écoulement, ainsi que la distribution du taux de déformation. Ils trouvent qu'un accroissement de la vitesse de rotation des vis favorise le mélange distributif. Yoshinaga *et al.* [21] déterminent, à l'aide d'une évaluation du « reflux » (eq. 1.14) et de la distance minimale entre particule, que les éléments malaxeurs trilobes décalés de 90° mélangent mieux que ceux décalés avec un angle différent. Funatsu *et al.* [9] utilisent leur rapport d'accroissement (eq. 1.6) pour différencier différents types d'écoulement. Après avoir comparé différentes successions de blocs malaxeurs composés de cinq malaxeurs d'épaisseur 10 mm et d'élément de vis, ils recommandent d'utiliser une combinaison comprenant un bloc d'éléments malaxeurs décalés de 90° pour obtenir un mélange « homogène » [Fig. 1.4]. Ishikawa *et al.* [18] constatent que les éléments mélangeurs spéciaux de type SME, comportant des rainures, mélangent mieux que les éléments malaxeurs simples et que les vis, ces deux derniers cas ne présentant pas de différences significatives en terme de mélange. Ils constatent également, comme Cheng et Manas-Zloczower [19], que le mélange est meilleur pour une vitesse de rotation des vis élevée. Ces résultats sont obtenus à partir de calculs de « reflux » et d'étirement d'un élément de surface. En 2001, Ishikawa *et al.* [17] trouvent que, dans le cas d'éléments malaxeurs bilobes, les disques fins avec des grands angles de décalages mélangent mieux que des disques plus épais ou avec des angles de décalages plus faibles. En 2004, Bravo *et al.* [23] trouvent, contrairement à Ishikawa, que ce sont les éléments malaxeurs les plus épais qui mélangent le mieux, dans le cas d'éléments décalés de 45° . Cependant, les conditions d'écoulements et les dimensions des vis ne sont pas les mêmes. Les méthodes d'évaluation diffèrent également : Bravo *et al.* utilisent le « reflux » (eq. 1.14) et la distribution des temps de séjour comme critères d'évaluation du mélange, tandis qu'Ishikawa *et al.*, utilisent l'étirement d'un élément de surface. Pour finir, Alsteens *et al.* [22] comparent, en 2004 également, différentes épaisseurs et différents angles de décalages d'éléments malaxeurs bilobes et ne trouvent pas de différence significative en comparant les différentes distributions des temps de séjour.

À l'aide de lâchers de particules et de plusieurs critères de caractérisation, nous avons voulu tester le potentiel de la méthode de simulation d'un écoulement en extrusion baxis introduite dans le code XimeX[®] [41–43] pour la caractérisation de l'efficacité de mélange. Cette méthode a pour avantage de permettre une modification facile des paramètres du procédé et de la géométrie des vis. De plus, grâce à la puissance de calcul dont dispose le Cemef, les simulations peuvent être effectuées sur un grand nombre d'éléments, permettant en théorie d'obtenir une plus grande précision dans le calcul de la position des particules que celle obtenue dans des études plus anciennes. Nous présenterons dans un premier temps la méthode de calcul en 3D des vitesses par éléments finis, telle qu'elle existe dans la bibliothèque de calcul du Cemef (Cimlib[®]), avec les adaptations que nous y avons apportées. Puis nous présenterons les méthodes que nous avons testées pour le lâcher de particules. Nous verrons que cette technique est limitée en précision pour les écoulements aussi complexes que ceux existant dans une extrudeuse baxis. Nous présenterons ensuite quelques résultats de calculs de différents critères de caractérisation de la qualité de mélange, avant de proposer plusieurs pistes pour s'affranchir des problèmes d'imprécision de calcul dans l'avenir.

2.2 Calcul par éléments finis de l'écoulement 3D d'un polymère fondu dans une extrudeuse bivis

2.2.1 Méthode de calcul

Une méthode d'immersion de domaines pour calculer un écoulement 3D complexe dans une portion d'extrudeuse bivis a récemment été proposée et intégrée au logiciel XimeX[®] [41–43]. Nous avons utilisé cette méthode pour nos calculs en nous servant de la bibliothèque éléments finis du Cemef : CimLib[©].

Domaine fluide et conditions limites

Considérons un écoulement incompressible dans un domaine $O(t)$ représentant le domaine occupé par le fluide dans une portion d'extrudeuse bivis. Pour un fluide newtonien, le problème vitesse/pression (\mathbf{u}, p) est régi par les équations de bilan de la quantité de mouvement et de continuité :

$$\begin{cases} -\nabla p + 2\eta\Delta\mathbf{u} = \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

où η est la viscosité.

On impose des conditions limites de non-glissement sur les vis mobiles et sur la surface du fourreau.

Deux méthodes peuvent être utilisées pour résoudre ce genre de problème (interaction fluide-structure). La première consiste à discrétiser uniquement le domaine fluide. Lors de la rotation des vis, cela implique une distorsion du maillage et un remaillage dynamique est donc nécessaire. De plus, le traitement du problème de l'évolution d'une éventuelle [43] surface libre (qui peut exister dans une bivis) peut s'avérer plus fastidieux que dans un domaine de calcul eulérien fixe, dans lequel une méthode de type « level set » est facilement applicable. Afin de contourner ces difficultés, on utilise un domaine eulérien fixe Ω qui contient à la fois le domaine fluide Ω_f et le domaine solide Ω_s , occupé par les frontières mobiles, c'est-à-dire les vis. Pour différencier les domaines dans le calcul, des fonctions caractéristiques I_j , $j \in \{f, s\}$, associées à chaque domaine, sont introduites :

$$I_j(x, t) = 1, \text{ si } x \in \Omega_j \text{ et } I_j(x, t) = 0, \text{ si } x \notin \Omega_j \quad (2.2)$$

Par la suite, pour simplifier, seule la fonction I_s associée au domaine solide sera utilisée.

Le problème fluide est ensuite résolu dans tout le domaine : les équations (eq. 2.1) sont résolues par une approche multi-domaine dans laquelle un « modèle fluide » est résolu pour chaque position \mathbf{x} et temps t , avec différentes valeurs imposées du paramètre de viscosité, dépendant de la phase (air, liquide, solide) présente en (\mathbf{x}, t) . Par exemple, pour une valeur de la viscosité liquide donnée, un ratio air/liquide et liquide/solide de 1/1 000 est utilisé dans l'approche multi-domaine.

Technique d'immersion de maillage

Pour identifier la position des interfaces solide/fluide, on utilise une approximation P1 de la distance à ces interfaces.

Comme pour les méthodes « level-set » [44], l'idée est de définir une fonction distance dans tout le domaine, dont l'isovaleur zéro est la position de l'interface. Cette fonction est choisie positive dans un sous-domaine et négative en dehors. Si l'interface du domaine solide est définie par une courbe Γ_s , une fonction level-set α est définie par :

$$\begin{cases} \alpha(x) = \|x - \Gamma_s\| & \text{dans } \Omega_s \\ \alpha(x) = -\|x - \Gamma_s\| & \text{dans } \Omega_f \end{cases} \quad (2.3)$$

En général, les surfaces complexes d'éléments de vis sont définies par la triangulation non structurée de surfaces, plutôt que par une formule analytique, comme pour le format STL (stéréolithographie) de CAO (conception assistée par ordinateur). L'approximation P1 $\alpha_h(x)$ de la distance à la surface est obtenue en prenant, pour chaque nœud du maillage de calcul, le minimum de la distance calculée à tous les triangles de la surface. Nous appelons cette méthode technique d'immersion de maillage. Afin de diminuer le temps de calcul, une décomposition cellulaire octree de la surface STL est utilisée dans la méthode d'immersion de domaine. Les détails de l'algorithme de calcul sont donnés par Schneider et Eberly [45]. Une illustration de la technique d'immersion de domaine est donnée [Fig. 2.1]. La partie gauche de la figure montre l'immersion d'éléments de vis dans le domaine du fourreau. La partie droite présente la configuration finale, où un bloc d'éléments malaxeurs avec un décalage neutre est inséré entre deux éléments de vis à pas direct. L'approximation P1 de la distance aux interfaces fluide/solide obtenue est ensuite utilisée dans une approche multi-domaine.

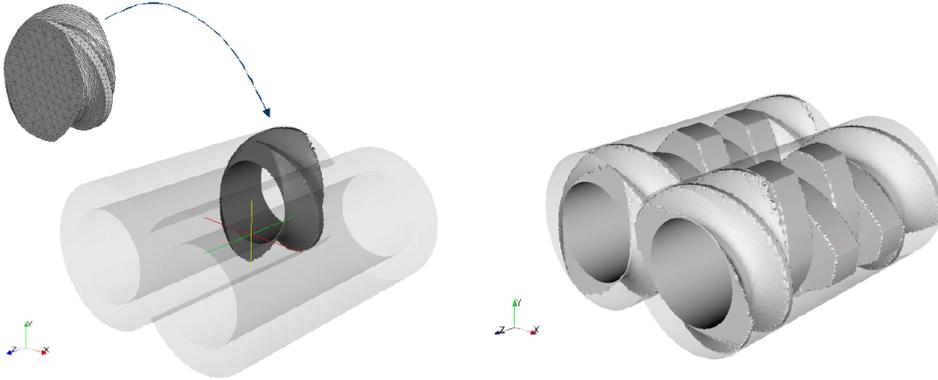


FIGURE 2.1 – Illustration de la technique d'immersion de maillage : à gauche, une surface triangulée est représentée et immergée dans un maillage de calcul ; à droite, l'isovaleur zéro de la fonction « level-set » solide est représentée

Approche multi-domaine et solveur éléments finis

Dans la formulation multi-domaine, la vitesse d'un fluide newtonien non-inertiel (pour simplifier) sur la frontière extérieure, c'est à dire les parois du fourreau et les parties solides en mouvement, est égale à la vitesse de la surface de la frontière extérieure : $\mathbf{u} = \mathbf{u}_\Gamma$.

Patankar *et al.* [46] ont proposé de généraliser les équations de Navier-Stokes au domaine solide en utilisant les multiplicateurs de Lagrange, avec une condition de rigidité $\mathbf{E}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$ sur

le domaine solide. Dans le domaine solide, l'écoulement est alors décrit par :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \mathbf{E}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (2.4)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes et $\mathbf{E}(\mathbf{u})$ est le tenseur des taux de déformation. Cela revient à avoir dans le solide un tenseur des contraintes de la forme :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\eta_s \mathbf{E}(\mathbf{u}) \mathbf{E}(\lambda_l) \quad (2.5)$$

sous la contrainte $\mathbf{E}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$, où η_s est un facteur de pénalisation et $\mathbf{E}(\lambda_l)$ le multiplicateur de Lagrange correspondant. Cependant, il a été montré [47] que, tant qu'un facteur de pénalisation de l'ordre de $10^3 \eta_f$ est utilisé, le multiplicateur de Lagrange n'améliore le calcul que dans le cas de maillages très raffinés, rarement utilisés pour les simulations 3D de cas applicatifs. En conséquence, une méthode de pénalisation a été utilisée. Le problème variationnel peut s'écrire :

$$\begin{cases} \text{trouver } (\mathbf{u}, p) \text{ tels que } \forall (\mathbf{v}, q) \in H_0^1(\Omega) \times L^2(\Omega) \\ \int_{\Omega} 2\eta(I_s) \mathbf{E}(\mathbf{u}) : \mathbf{E}(\mathbf{v}) \, d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

où η est défini dans tout le domaine par une loi de mélange :

$$\eta(I_s) = I_s \eta_s + (1 - I_s) \eta_f \quad (2.7)$$

Le mouvement de corps rigide est rendu en assignant directement des vitesses aux nœuds du maillage (comme pour des conditions limites habituelles) situés à l'intérieur des vis et du fourreau (nulles dans le fourreau), à une distance $2h$ de la surface, où h est la taille de maille moyenne dans la direction normale au domaine solide. Le traitement des nœuds « solides » restants est effectué en utilisant une loi de mélange « pénalisée » sur les viscosités [47]. Plus précisément, la fonction « level-set » $\alpha_h(x)$ est utilisée sur chaque élément pour calculer I_s^h , l'approximation P1 du facteur I_s (qui est utilisé comme facteur de pondération dans la loi de mélange) du domaine solide, en utilisant une fonction sigmoïde :

$$I_s^h = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha_h/h)} \quad (2.8)$$

Le problème global est résolu en utilisant une méthode éléments finis mixte P1 + /P1 - (MINI-élément) qui a l'avantage de permettre une résolution efficace des systèmes linéaires par des solveurs itératifs [48].

Les problèmes algébriques résultant de la formulation éléments finis ont été assemblés et résolus en utilisant la méthode résiduelle conjuguée associée au conditionneur incomplet LU de la librairie PETSC (Portable Extensive Toolkit for Scientific Computation). Une stratégie parallèle maître-esclave a été utilisée [49], comprenant les modules SPMD (Single Program, Multiple Data) et la librairie MPI (Message Passing Interface) standard.

Dans le cas de fluides newtoniens généralisés (suivant une loi de Carreau-Yasuda par exemple), une méthode de Newton est utilisée pour résoudre le problème non-linéaire résultant.

2.2.2 Adaptation de maillage

À partir des résultats de calcul de l'écoulement, nous voulons effectuer des lâchers de particules. Or, comme nous le verrons plus tard (§ 2.3.1), une méthode pouvant permettre d'éviter de perdre trop de particules en simulant un écoulement aussi complexe que celui que l'on trouve dans une extrudeuse bîvis est d'améliorer la précision des champs de vitesses calculés. Pour cela, la meilleure option est la diminution de la taille de maille et du pas de temps dans le calcul de vitesse, ce qui augmente la durée du calcul et la taille des fichiers résultats. Une méthode possible pour éviter d'atteindre des durées de calcul trop importantes est de réduire la taille de maille uniquement aux endroits nécessitant plus de précision, et de l'augmenter dans les zones qui n'influencent pas les résultats de calcul. Ainsi, on gagne en précision sans trop « alourdir » le maillage.

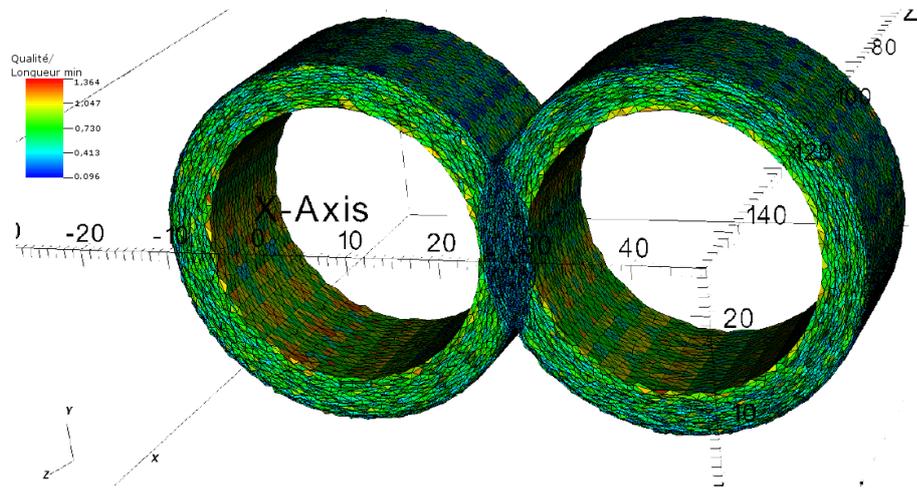
Dans un premier temps, nous avons dû passer d'un maillage dont la forme était celle du fourreau à un maillage parallélépipédique, afin d'éviter de dégrader la méthode lors de l'utilisation d'un maillage trop grossier aux bords du domaine [Fig. 2.2]. Le fourreau est immergé dans le maillage, comme les vis, et les conditions limites sont imposées sur les vis et sur la zone du maillage située à l'extérieur du fourreau. Nous avons décidé de remailler finement les zones où la variation du taux de cisaillement est importante, ciblant ainsi le domaine fluide à proximité des vis et du fourreau, et dans la zone d'interpénétration des vis, ces zones étant celles qui posent le plus de problème en terme de perte de particules au cours du lâcher (entrée dans les vis, sortie du fourreau, grande accélération dans la zone d'interpénétration). Les zones autour d'éléments malaxeurs solides, dans lesquelles la précision du calcul n'influence pas les résultats de lâchers de particules, sont quant à elles déraffinées.

On remaille en plusieurs incréments pour permettre la convergence du maillage vers une solution optimale, et ce pour chaque pas de temps afin de suivre le mouvement des vis. Pour cela, on utilise une méthode basée sur un estimateur d'erreur.

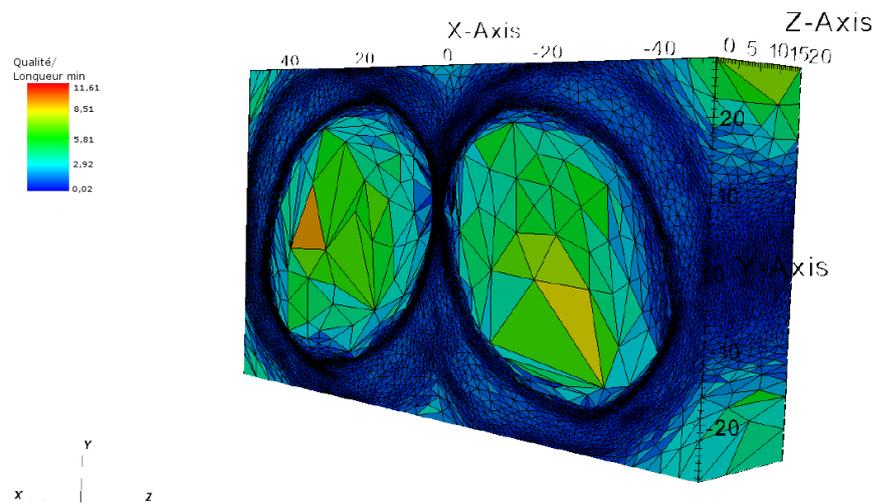
Estimateur d'erreur

Les méthodes d'adaptation de maillage sont basées principalement sur une estimation d'erreur. L'estimateur d'erreur va indiquer les zones de faible erreur où l'on peut déraffiner le maillage et les zones d'erreur importante où l'on doit raffiner le maillage. Pour une adaptation de maillage anisotrope, l'estimateur d'erreur doit être capable d'estimer également la variation des erreurs selon des directions différentes. De ces informations, l'orientation et le ratio d'étirement des mailles permettant de minimiser l'erreur sont déduits. Les informations sur l'orientation et le rapport d'étirement peuvent être déterminées directement par l'inversion du hessien \mathbf{H} de la fonction du problème (pour nous le taux de cisaillement). Le tenseur décrivant les tailles de maille (métrique) est ensuite calculé sous la contrainte d'un nombre d'éléments et de nœuds, ou bien sous la contrainte de l'erreur maximale.

Pour remailler, nous utilisons un outil introduit par Coupez [50], qui permet de construire une métrique optimisée (en termes d'erreur) directement aux nœuds du maillage à partir du gradient d'un champ scalaire régulier sur le domaine de calcul. Dans notre cas, nous avons choisi le taux de cisaillement comme champ scalaire et nous limitons la prise en compte du taux de cisaillement par une valeur maximale (500 s^{-1}) afin d'éviter un emballement du remaillage dans des zones présentant des singularités.



(a) Maillage « classique » [47]



(b) Maillage optimisé, utilisant la méthode [50]

FIGURE 2.2 – Ancien et nouveau maillage d'une portion d'extrudeuse bivis

Parallélisation

Nous effectuons nos calculs sur plusieurs processeurs. Or, entre deux pas de remaillage, dans la phase de repartitionnement de la méthode de parallélisation, les éléments qui ne sont pas encore adaptés autour des interfaces de partitionnement (entre les zones remaillées par différents processeurs) et qui sont de mauvaise qualité doivent être migrés (éléments contraints) dans un des sous-domaines (processeur) pour être remaillés [Fig. 2.3].

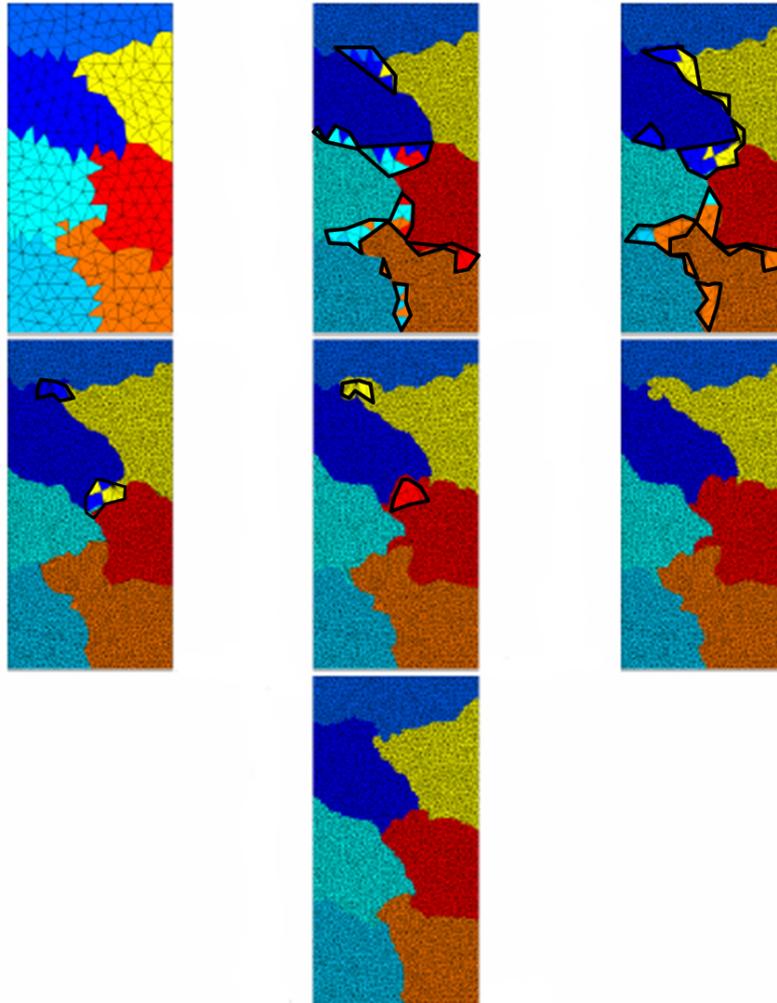


FIGURE 2.3 – Illustration de la stratégie de parallélisation du maillage sur sept processeurs (différentes couleurs) en 2D : itération des phases de repartitionnement-remailage. Les zones en cours de remaillage sont encadrées (inspiré de [51])

On utilise la pénalisation pour contraindre un élément et la méthode de repartitionnement est basée sur un algorithme de minimisation d'une fonction coût [52]. Si l'on veut faire migrer les interfaces des sous-domaines, une méthode est donc d'augmenter artificiellement (pénalisation)

le coût des communications associées aux éléments et nœuds que l'on veut contraindre. Si l'on veut contraindre les éléments qui sont de « mauvaise qualité » (aplatis), on doit faire dépendre les poids de communication de la qualité des éléments. On définit les poids de communication pénalisés de la manière suivante :

$$\omega(n) = 1 + \rho H\left(\frac{Q(n)}{Q_{min}} + 1\right) \quad (2.9)$$

où $H(\cdot)$ représente la fonction Heavyside, ρ est un paramètre de pénalisation (~ 1000), $Q(n)$ est un facteur de qualité nodale et Q_{min} est la qualité en dessous de laquelle un élément est considéré comme mauvais et doit être incorporé à un domaine de remaillage.

Pour l'adaptation de maillage basée sur une estimation d'erreur, un choix des éléments contraints basé uniquement sur leur qualité n'est pas suffisant. En effet, il peut exister des zones dans lesquelles la présence d'éléments de mauvaise qualité n'affecte pas la qualité du calcul. Par exemple, si l'on autorise des tailles de mailles très grandes dans certaines zones, il arrive que l'échelle de variation de la taille de maille imposée soit petite devant la taille de maille réelle et que des éléments soient considérés de mauvaise qualité.

Si l'on contraint tous les éléments de « mauvaise qualité », y compris ceux qui n'engendrent pas une erreur importante, il peut exister trop de nœuds contraints qui doivent être remaillés et migrés dans un sous-domaine. Dans ce cas, il peut n'y avoir qu'un seul processeur qui travaille, ce qui diminue fortement l'efficacité du calcul parallèle. Pourtant, ces éléments de mauvaise qualité peuvent ne pas être remaillés puisqu'ils sont dans des zones de faible erreur qui n'influencent pas beaucoup le calcul. Une solution pour éviter les extra-tailles de maille permises, qui augmentent le nombre d'élément de mauvaise qualité, est l'utilisation d'une taille de maille maximale.

Malheureusement, cette méthode va augmenter le nombre de nœuds nécessaires et causer la perte de certaines informations sur l'anisotropie du maillage adapté. De plus, la taille maximale dépend de chaque problème, il n'est donc pas facile de la choisir arbitrairement. Une deuxième solution, proposée par Nguyen [53] dans le cadre de sa thèse au Cemef, est d'utiliser une nouvelle mesure de la qualité des éléments (ou nœuds) pondérée par l'erreur. La qualité pondérée d'un élément est définie comme bonne si son erreur est assez faible, peu importe la qualité calculée par le mailleur, et est égale à la qualité normale si son erreur est importante. Cette méthode permet de diminuer le nombre d'éléments contraints en préservant l'anisotropie du maillage optimal. La qualité sur un élément E pondérée par l'erreur est définie de la manière suivante :

$$Q_{pond}(E) = H\left(\frac{e_E}{e_{seuil}} - 1\right) + \left(1 - H\left(\frac{e_E}{e_{seuil}} - 1\right)\right) Q_{mailleur}(E) \quad (2.10)$$

où $e_{seuil} = \frac{\max(e_E)}{r_e}$, e_E est l'erreur sur l'élément E , r_e est le ratio à partir duquel l'erreur est assez faible et $Q_{mailleur}$ est la qualité calculée par le mailleur. Les éléments contraints sont ceux dont la qualité pondérée est inférieure à la qualité seuil Q_{min} . Les nœuds contraints sont définis comme étant ceux qui appartiennent au moins à un élément contraint.

2.2.3 Application au calcul de pression, de SME et de longueur de remplissage

On applique la méthode présentée précédemment à l'étude du mélange dans une zone de test d'une extrudeuse bivis de diamètre 50 mm. Le cas test est composé d'un élément de vis à pas

direct de 33,3 mm et de 50 mm de long, suivi d'une zone de test de 50 mm de long qui peut être composée d'un élément de vis ou d'un bloc d'éléments malaxeurs, et d'un élément de vis à pas inverse de 33,3 mm et de 50 mm de long [Fig. 2.4]. Les vis ont un rayon intérieur de 20 mm et un rayon extérieur de 24 mm. L'entraxe est de 45 mm et le fourreau à un rayon intérieur de 25 mm. Pour éviter les problèmes de maillage au contact entre vis et entre vis et fourreau, on a choisi de laisser un jeu de 1 mm pour cette étude. On peut faire varier le débit imposé sur la surface d'entrée, ainsi que la vitesse de rotation des vis. La pression est imposée nulle sur la surface de sortie.

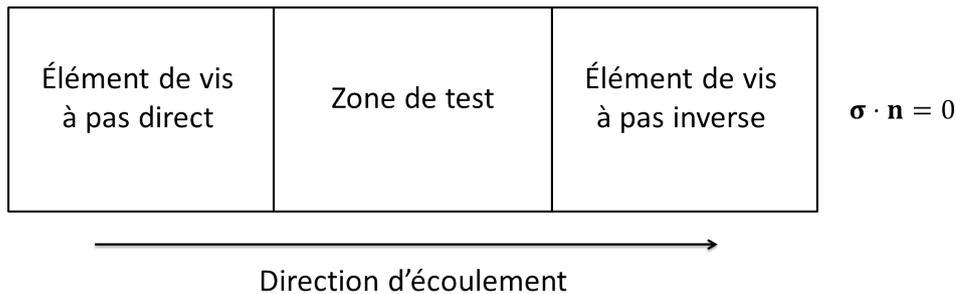


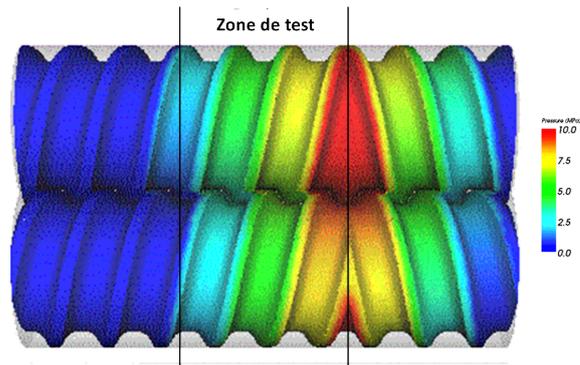
FIGURE 2.4 – Configuration d'un cas test de simulation d'un écoulement en extrusion baxis

Dans le cas d'une zone de test composée de 5 éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm, décalés de 30°, et pour une vitesse de 200 tr/min et un débit de 20 kg/h, on avait avant remaillage un maillage d'environ 4,5 millions d'éléments, allant d'une taille minimale d'arête de 0,1 mm à 1,4 mm. Après un remaillage effectué en cinq itérations (à chaque pas de temps), on obtient un maillage d'environ 4,5 millions d'éléments, allant de 0,02 mm à 16,56 mm. Pour chaque pas de temps, le temps de calcul de l'écoulement comprenant le remaillage en cinq itérations est de 2 heures sur 34 processeurs. On effectue un calcul de vitesse par pas de temps (1,5 ms) sur un demi-tour de vis (100 pas), la section du profil de vis étant invariante par rotation de π . Au final, le calcul de l'écoulement prend 200 h sur 34 processeurs, ce qui reste assez important, mais la taille des fichiers obtenus reste la même qu'avant le remaillage, pour une précision plus grande.

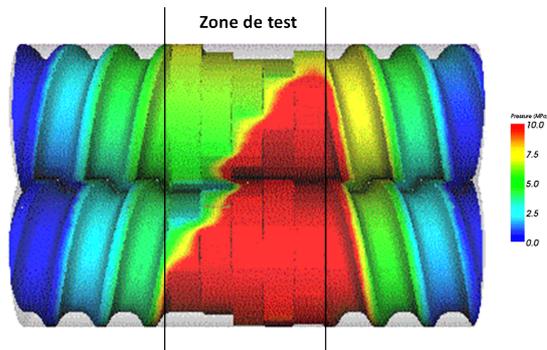
La méthode éléments finis 3D [43] intégrée dans le logiciel XimeX[®] permet d'obtenir de bons résultats pour la simulation du champ de pression, de la longueur de remplissage des vis ainsi que de l'énergie mécanique spécifique (SME) dans des sections d'extrudeuses baxis.

	Type d'élément	Pas ou Angle de décalage	Nombre de filets ou de lobes	Nombre d'éléments	Longueur ou épaisseur d'un élément (mm)
Cas A [Fig. 2.5(a)]	Vis	33,3 mm	2	1	50
Cas B [Fig. 2.5(b)]	Malaxeur	+30°	2	5	10
Cas C [Fig. 2.5(c)]	Malaxeur	+30°	2	10	5
Cas D [Fig. 2.5(d)]	Malaxeur	+60°	2	5	10
Cas E [Fig. 2.5(e)]	Malaxeur	+60°	2	10	5
Cas F [Fig. 2.5(f)]	Malaxeur	0°	2	1	50
Cas G [Fig. 2.5(g)]	Malaxeur	90°	2	5	10
Cas H [Fig. 2.5(h)]	Malaxeur	90°	2	10	5
Cas I [Fig. 2.5(i)]	Malaxeur	-60°	2	5	10
Cas J [Fig. 2.5(j)]	Malaxeur	-30°	2	5	10
Cas K [Fig. 2.5(k)]	Malaxeur	-30°	2	10	5

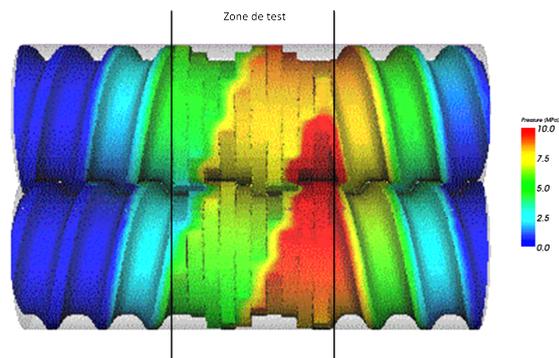
TABLE 2.1 – Description des différentes zones de test simulées



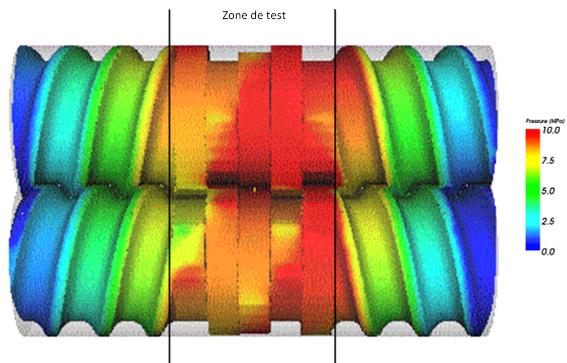
(a) Cas A



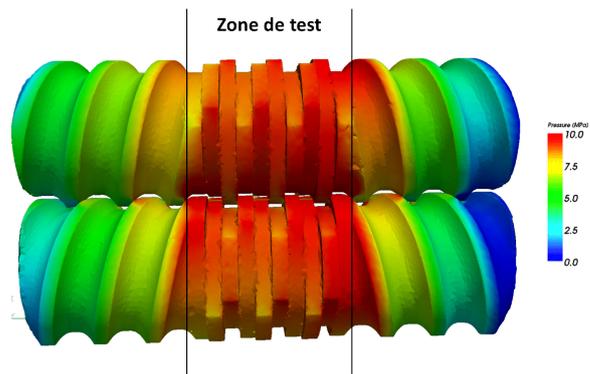
(b) Cas B



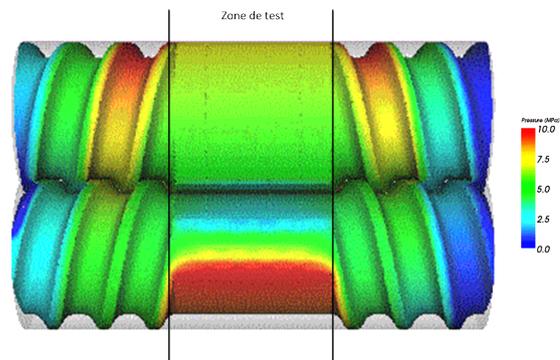
(c) Cas C



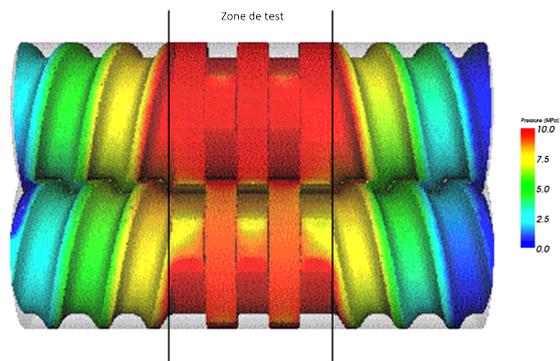
(d) Cas D



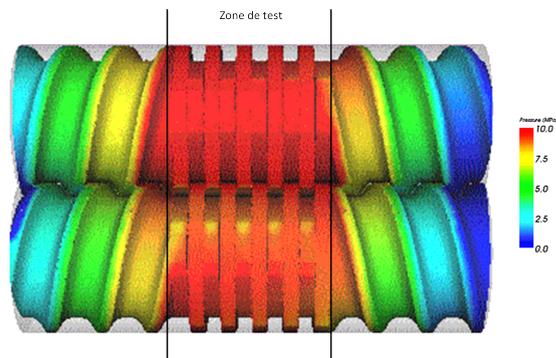
(e) Cas E



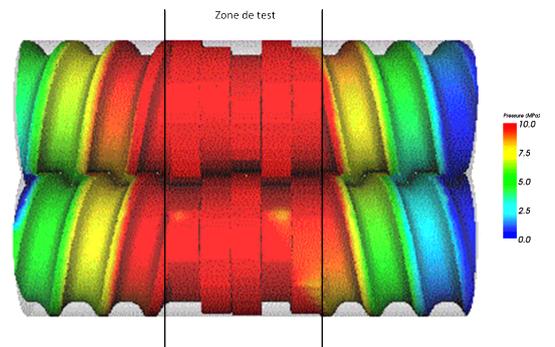
(f) Cas F



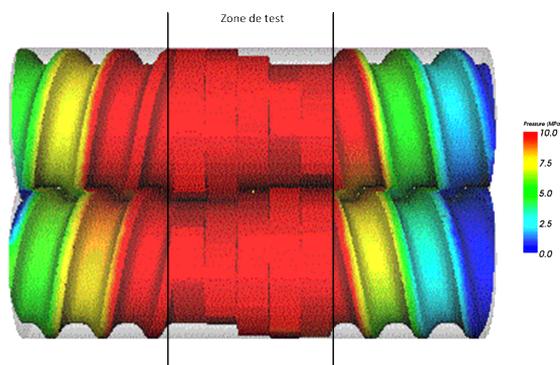
(g) Cas G



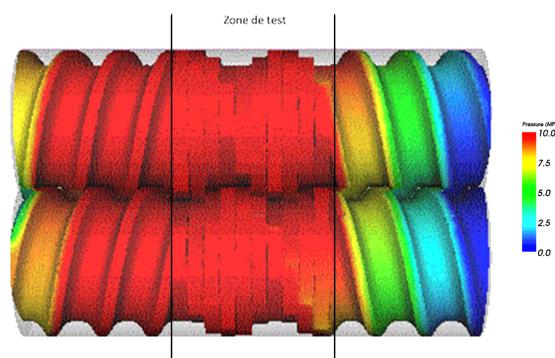
(h) Cas H



(i) Cas I



(j) Cas J



(k) Cas K

FIGURE 2.5 – Géométrie de vis et champ de pression calculé par XimeX[®] pour différents cas tests [Tab. 2.1] (vitesse de rotation des vis : 200 tr/min et débit : 20 kg/h)

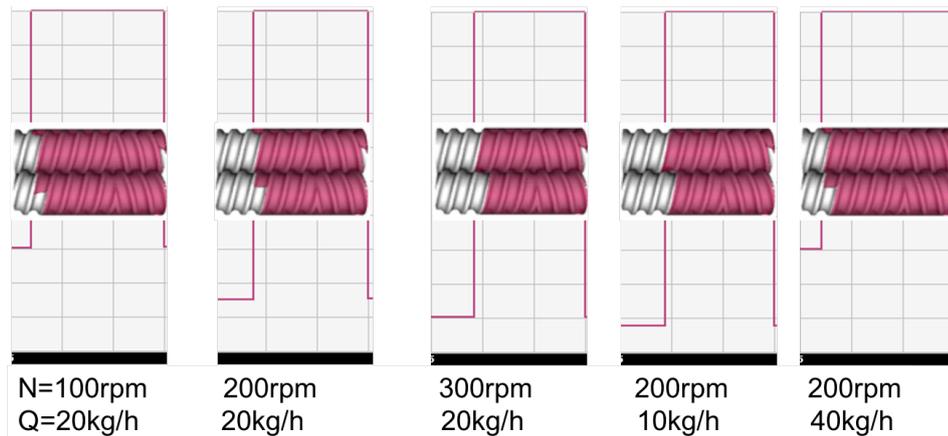


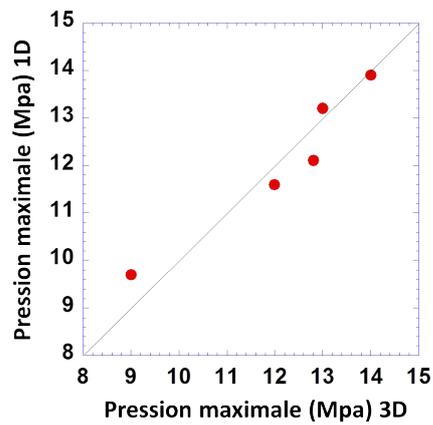
FIGURE 2.6 – Comparaison entre les longueurs de remplissage déterminés par Ludovic[®] (courbe) et celles calculées par éléments finis 3D (image)

Des simulations ont été effectuées pour la même configuration de vis que celle présentée précédemment (§ 2.2.2) [Fig. 2.4]. Dans un premier temps, la zone de test est composée d'un élément de vis à pas direct (Cas A [Fig. 2.5(a)], [Tab. 2.1]) et l'on impose des vitesses de rotations de 100, 200 et 300 tr/min avec un débit fixé à 20 kg/h, puis des débits de 10, 20 et 40 kg/h pour une vitesse de rotation de 200 tr/min. On compare ensuite les résultats de calcul à ceux obtenus par le logiciel 1D Ludovic[®] [54] (§ 3.3), basé sur l'approximation de la lubrification hydrodynamique, et dont la précision de calcul a été vérifiée expérimentalement à de nombreuses reprises [Figs. 2.6, 2.7]. On obtient une bonne concordance des résultats, ce qui indique que la méthode éléments finis 3D atteint une bonne précision pour le calcul de ces grandeurs.

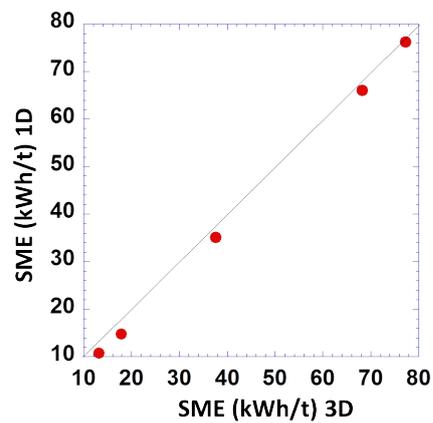
Dans un deuxième temps, on fixe la vitesse de rotation des vis à 200 tr/min et le débit à 20 kg/h et l'on change la géométrie de la zone de test. Celle-ci est composée de 5 éléments malaxeurs d'une largeur de 10 mm. On teste différents angles de décalage entre éléments malaxeurs (+30°, +60°, 0°, 90°, -60° et -30° (Cas B, D, F, G, I et J [Tab. 2.1], [Fig. 2.5])) et l'on compare à nouveau les résultats de calcul 3D de la pression et de la SME à ceux obtenus par Ludovic[®] [Fig. 2.8]. On constate que la simulation 3D amène une plus grande précision dans la différenciation des configurations de vis. En effet, la simulation 1D donne les mêmes résultats de calcul de la pression maximale pour tous les éléments décalés selon une forme de pas direct et le même résultat de calcul de la SME pour toutes les configurations.

Enfin, toujours pour une vitesse de rotation des vis de 200 tr/min et un débit de 20 kg/h, on fait varier l'épaisseur des éléments malaxeurs. On teste 5 et 10 mm d'épaisseur pour des angles de décalages de +30°, 90° et -30° (Cas B, C, G, H, J et K [Tab. 2.1], [Fig. 2.5])). En comparant les résultats 1D et 3D du calcul de SME, on constate que le calcul 1D ne permet pas de différencier les malaxeurs d'épaisseur 5 et 10 mm, tandis que le calcul 3D donne des résultats différents pour les deux épaisseurs [Fig. 2.9].

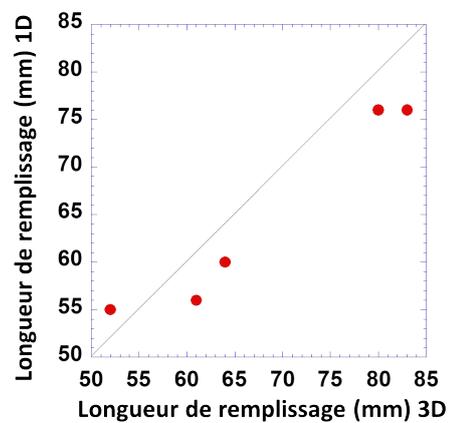
Le calcul éléments finis 3D permet d'effectuer un « zoom » sur l'écoulement et d'accéder à une plus grande précision de calcul des grandeurs telles que la pression et la SME en prenant en compte des détails (angles de décalage, épaisseur des malaxeurs) que la simulation 1D ne « voit » pas toujours.



(a) Pression maximale sur la zone de test



(b) SME



(c) Longueur de remplissage

FIGURE 2.7 – Comparaison entre les résultats de calcul de la pression maximale (a), de la SME (b) et de la longueur de remplissage (c) obtenus par Ludovic[®] (1D) et par XimeX[®] (3D) pour différents débits et vitesses de rotation des vis

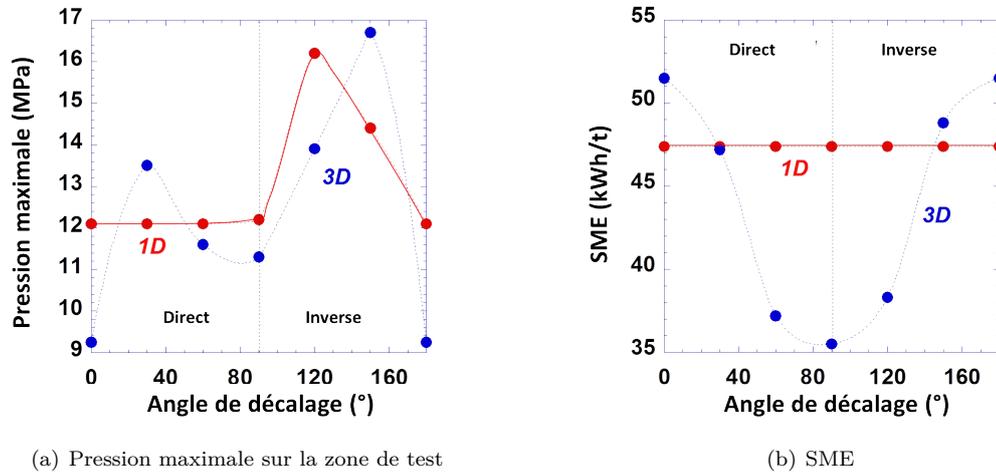


FIGURE 2.8 – Comparaison entre les résultats de calcul de la pression maximale (a) et de la SME (b) obtenus par Ludovic® (1D) et par XimeX® (3D) pour différents angles de décalage des éléments malaxeurs

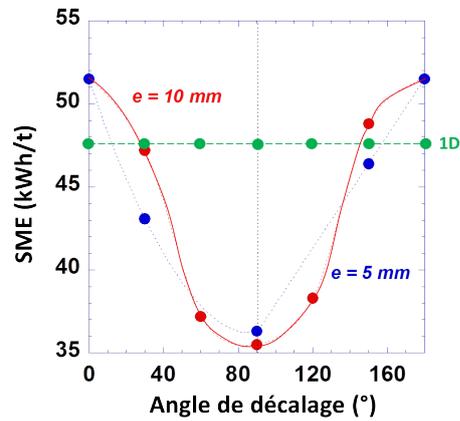


FIGURE 2.9 – Comparaison entre les résultats de calcul de la SME obtenue par Ludovic® (1D) et par XimeX® (3D) pour différentes épaisseurs des éléments malaxeurs

2.3 Lâcher de particules

À partir de la simulation 3D de l'écoulement présenté précédemment (§ 2.2), on peut effectuer des lâchers de particules afin de disposer de marqueurs pour le calcul de critères de caractérisation du mélange (§1.1).

À chaque pas de temps, on doit interpoler sur chaque particule la vitesse calculée par éléments finis, la vitesse hors domaine étant choisie nulle. Pour cela, on repère la position de la particule dans le maillage représentant l'écoulement, à l'aide d'une méthode d'interpolation hiérarchique par méthode octree, puis on déduit la vitesse au point occupé par la particule en moyennant les vitesses aux nœuds environnant du maillage. Ensuite, à partir de cette vitesse et d'un schéma d'intégration, on peut calculer la position de la particule au pas suivant.

2.3.1 Première méthode d'intégration

Pour nos premiers calculs, nous nous étions limités aux schémas à pas unique, étant donnée la nature de l'écoulement. En effet, au-delà de deux pas de temps, les positions d'une particule autour d'éléments malaxeurs, qui est soumise à des vitesses et des changements de directions violents, semblent avoir peu de chances d'être fortement corrélées. Nous avons également choisi d'utiliser une méthode explicite car nous avons constaté que, dans le cas d'une sortie du domaine de calcul de la particule, les schémas prédicteur-correcteurs pouvaient aboutir à une non-convergence du calcul. Prenons par exemple un schéma d'Adams-Moulton d'ordre 2 :

$$\begin{cases} \mathbf{k}_1 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t_i) \\ \mathbf{k}_2 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_{i+1}^k, t_{i+1}) \\ \mathbf{x}_{i+1}^{k+1} = \mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \end{cases} \quad (2.11)$$

où k est le numéro de l'itération de calcul, \mathbf{x}_i la position de la particule au temps t_i , Δt le pas de temps et $\mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t_i)$ la vitesse au point \mathbf{x}_i et au temps t_i .

Une fois une particule sortie du domaine de calcul, elle se déplace avec une vitesse nulle. Dans ce cas, on se rend compte lors de la correction itérative de la position d'une particule piégée à l'extérieur du domaine par le schéma d'Adams-Moulton, qu'on aboutit souvent à une solution également hors domaine, voire à une non convergence, la position oscillant entre l'intérieur et l'extérieur du domaine. En effet, si, au cours des itérations, une position intermédiaire $\mathbf{x}^k(t_{n+1})$ se retrouve en dehors du domaine, la vitesse en ce point (nécessaire dans le schéma implicite) sera la même que pour la première itération hors domaine : $\mathbf{v}(\mathbf{x}^k(t_{n+1})) = \mathbf{v}(\mathbf{x}^{hd}(t_{n+1}))$, avec hd la première itération hors domaine. Le calcul itératif repartira donc à son point de départ, et ce même avec un schéma correcteur d'ordre plus élevé [Fig. 2.10].

Dans le cas d'une extrudeuse bivis, le problème se poserait pour les sorties du fourreau, la vitesse à l'extérieur de celui-ci étant, dans le cas de la sortie de domaine d'une particule au cours des itérations, fixée à zéro dans nos calculs.

On a donc choisi de tester l'efficacité de différents schémas explicites à pas unique. Pour cela, on s'est placé dans un cas stationnaire (afin de gagner en temps de calcul) présentant une géométrie permettant de visualiser le comportement de ces schémas lorsque les particules sont soumises à de brusques changements de forme du champ de vitesse. Nous avons créé un tube de

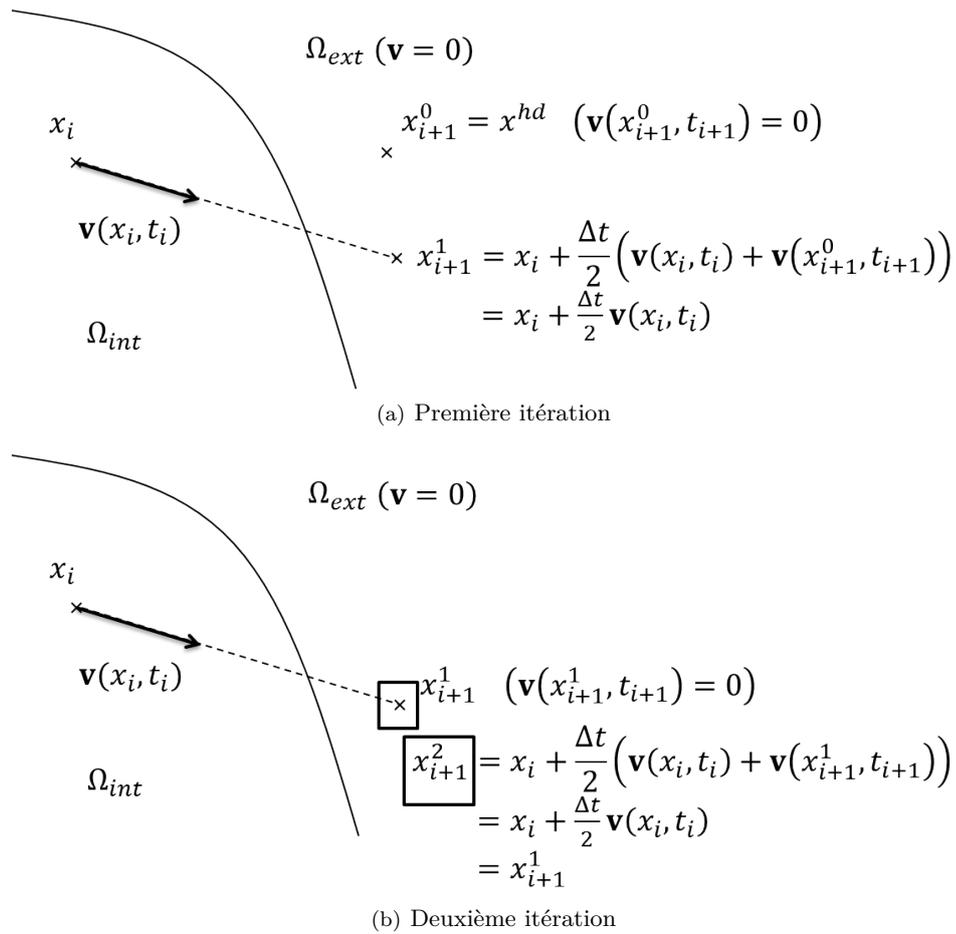


FIGURE 2.10 – Illustration du comportement des schémas de type Adams-Moulton en cas de sortie de domaine

diamètre 20 u.L. (unités de longueur), présentant des coudes et des bifurcations (un « obstacle » tous les 50 u.L. environ), d'une longueur non déroulée de 800 u.L. [Fig. 2.11].

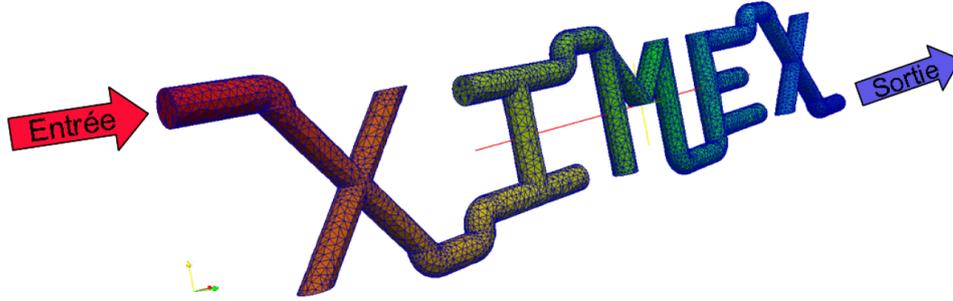


FIGURE 2.11 – Géométrie de l'écoulement choisi pour les tests de sensibilité des méthodes de calcul à la taille de maille et au pas de temps

La vitesse maximale calculée dans ce tube (à l'incertitude de calcul liée à la taille de maille près) est de 35 u.L./u.T., ce qui veut dire qu'en prenant un pas de temps de 1 u.T., une particule soumise au champ de vitesse maximal suivant une direction rencontrera un obstacle au minimum tous les deux pas de temps.

En gardant ces ordres de grandeur, on espère se situer dans des conditions d'écoulements aussi « difficiles » en terme de calcul de positions de particules que le sont les écoulements rencontrés dans une extrudeuse baxis, avec des problèmes de sortie de domaines. Nous avons donc examiné les schémas de Runge-Kutta d'ordre 2 (eqs. 2.12, 2.13) et d'ordre 4 (eq. 2.14).

Schéma de Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2) :

$$\begin{cases} \mathbf{k}_1 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t_i) \\ \mathbf{k}_2 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i + \Delta t \mathbf{k}_1, t_i + \Delta t) \\ \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \end{cases} \quad (2.12)$$

Variante du schéma de Runge-Kutta d'ordre 2 ou méthode de la tangente améliorée (TA) :

$$\begin{cases} \mathbf{k}_1 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t_i) \\ \mathbf{k}_2 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{k}_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}) \\ \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \Delta t (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \end{cases} \quad (2.13)$$

Schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t_i) \\ \mathbf{k}_2 = \mathbf{v}\left(\mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{k}_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ \mathbf{k}_3 = \mathbf{v}\left(\mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{k}_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ \mathbf{k}_4 = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i + \Delta t\mathbf{k}_3, t_i + \Delta t) \\ \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \end{array} \right. \quad (2.14)$$

On peut d'ores et déjà noter que la méthode de la tangente améliorée (TA) donne nécessairement une position hors domaine à la particule si la position intermédiaire $\mathbf{x}_i + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{k}_1$ est hors domaine.

À pas de temps égal, la méthode de Runge-Kutta 4 (RK4) est censée être la plus précise, étant d'ordre supérieur. Cependant, on constate que cette méthode, ainsi que la méthode de la tangente améliorée (TA), nécessitent de connaître la vitesse à un temps $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, ce qui reviendrait, dans notre cas d'écoulement instationnaire en extrusion bivis, à diviser le pas de temps par deux dans le calcul de la vitesse, c'est à dire à augmenter le temps de calcul. Si l'on veut comparer ces méthodes à pas de temps minimal égal, pour avoir une idée de leur efficacité en termes de précision et de temps de calcul global, il faut donc prendre un pas de temps Δt pour la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2) égal à la moitié du pas de temps Δt pour les deux autres méthodes. Il est dans ce cas moins évident que RK4 offre une meilleure précision que RK2.

On compare de cette manière ces méthodes dans notre écoulement stationnaire [Fig. 2.12]. On effectue des calculs de déplacement de particules par les 3 méthodes de Runge-Kutta pour différents pas de temps (pas de temps minimal (RK2) : 0,25, 0,5, 1, 2 u.T.) et différentes tailles de mailles (1,5, 3, 6 u.L.). En changeant la taille de maille, on évalue l'influence de la précision du calcul de vitesse sur le calcul de déplacement de particules.

On constate, comme attendu, que la qualité du transport augmente avec la diminution de la taille de maille (c'est à dire avec l'augmentation de la précision du calcul de vitesse) et du pas de temps dans tous les cas, mais que les méthodes de la tangente et RK4 n'amènent pas d'améliorations significatives par rapport à RK2. Sur le cas stationnaire, la méthode influe donc peu sur le résultat, pourvu que le couple (pas de temps, taille de maille) soit suffisamment bien choisi.

Nous avons donc choisi d'utiliser une méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 pour nos lâchers de particules.



(a) Pour un pas de temps minimal (RK2) égal à 2 u.T. (RK4 et TA : 4 u.T.) et une taille de maille de 1,5 u.L.



(b) Pour un pas de temps minimal (RK2) égal à 1 u.T. (RK4 et TA : 2 u.T.) et une taille de maille de 1,5 u.L.



(c) Pour un pas de temps minimal (RK2) égal à 0.5 u.T. (RK4 et TA : 1 u.T.) et une taille de maille de 1,5 u.L.



(d) Pour un pas de temps minimal (RK2) égal à 0.5 u.T. (RK4 et TA : 1 u.T.) et une taille de maille de 3 u.L.



(e) Pour un pas de temps minimal (RK2) égal à 0.5 u.T. (RK4 et TA : 1 u.T.) et une taille de maille de 6 u.L.

FIGURE 2.12 – Position des particules au bout de 150 u.T. avec : RK2 en bleu, TA en jaune et RK4 en rouge (la solution attendue est une accumulation de tous les points uniformément sur la section de sortie)

2.3.2 Visualisation du « blocage » des particules et nouvelle méthode d'intégration

Nous avons dans un premier temps effectué des lâchers de particules à partir des calculs de vitesses effectués à l'aide du maillage adaptatif et en utilisant une méthode de Runge-Kutta d'ordre 2. Environ 19 000 particules sont lâchées sous la forme d'une sphère de 1 mm de rayon dans le chenal avant la zone de test (à 48 mm du début de l'écoulement) [Fig. 2.13].

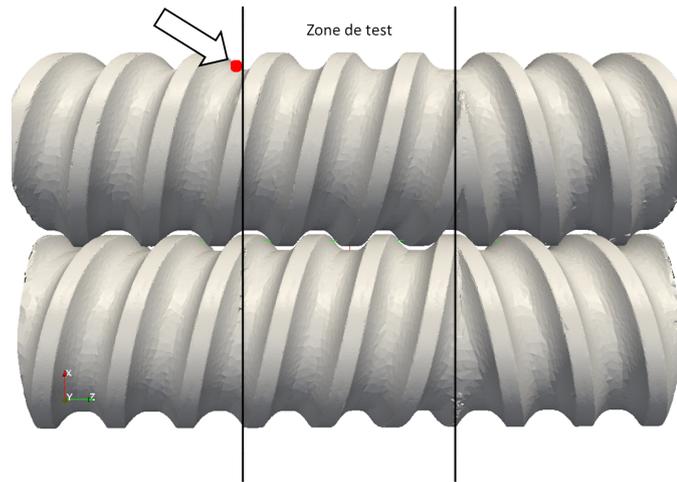


FIGURE 2.13 – Position initiale de la sphère de particules

Pour des raisons de temps de calcul, le pas de temps a été choisi plus grand que le pas de temps idéal pour la taille de maille obtenue après remaillage. En effet, avec une taille de maille (arête) minimale d'environ 0,02 mm dans le cas d'une vitesse de rotation de 200 tr/min et d'un rayon de vis de 24 mm, on devrait imposer un pas de temps de l'ordre de 0,04 ms pour être cohérents avec la taille de maille. Or, on a un temps de calcul par pas de temps de 8 minutes, car l'interpolation d'un maillage (les particules) sur un autre (l'écoulement) n'est pas parallélisé dans la bibliothèque de calcul CimLib, et le calcul est donc effectué sur un seul processeur. Avec un débit imposé de 20 kg/h, le temps de séjour théorique des particules dans la zone de test est d'environ 7 secondes. Si l'on veut continuer le calcul jusqu'à 10 secondes, on obtient un temps de calcul total des positions de particules d'environ 6 mois. De plus, il faut appliquer le même pas de temps au calcul des vitesses, ce qui correspondrait à 312 jours environ si l'on garde la stratégie algorithmique actuelle [43] (que l'on pourrait optimiser). Au final, on aurait un temps de calcul de 17 mois, ce qui est beaucoup trop long pour notre étude et a fortiori pour une utilisation industrielle. On s'est donc contenté d'un pas de temps de 1,5 ms ce qui nous amène quand même à une durée de calcul des positions des particules d'environ 5 semaines pour 10 s d'écoulement, à ajouter à 8 jours du calcul des vitesses, soit environ un mois et demi.

Nous avons constaté, en traçant les distributions de temps de séjours à 100 mm (début du pas inverse), que la grande majorité (96,3 %) des particules ne sortait pas de la zone de test [Fig. 2.14]. Comme cela est parfois rapporté dans la littérature [22, 23], nous avons attribué ce comportement à la capture des particules par le milieu solide, due à l'imprécision de calcul. En effet, si une particule se retrouve au cours d'un pas de temps dans le milieu solide à cause d'une imprécision de calcul, elle sera ensuite déplacée en utilisant la vitesse interpolée en ce

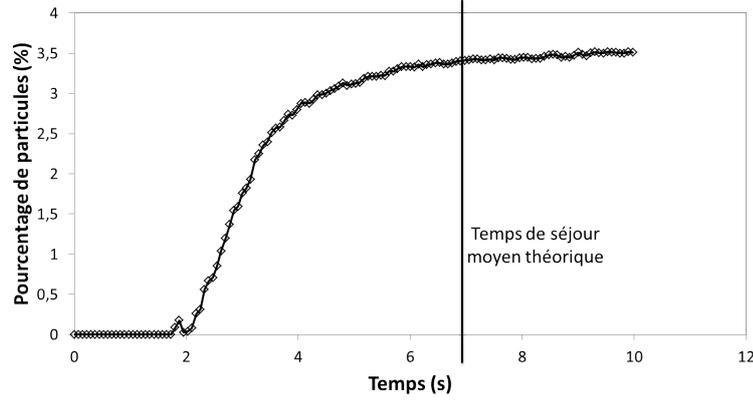


FIGURE 2.14 – Temps de séjours cumulés des particules en sortie de la zone de test [Fig. 2.13] dans le cas où la zone de test est composée d'éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm décalés de $+30^\circ$, avec un débit de 20 kg/h et une vitesse de rotation de 200 tr/min et pour un schéma d'intégration Runge-Kutta d'ordre 2 (eq. 2.12)

point, c'est-à-dire une vitesse nulle si elle est dans le fourreau et une vitesse de rotation dans une section constante perpendiculaire à l'écoulement si elle est dans une vis. Elle risque ainsi de se retrouver bloquée dans le milieu solide. Dans ce cas, Bravo *et al.* [23] réintègrent la particule dans l'écoulement, tandis que Alsteens *et al.* [22] ne prennent pas en compte les particules qui ne sont pas sorties de l'écoulement au bout de 40 fois le temps de séjour théorique. La plupart des autres études comportant des lâchers de particules dans des écoulements complexes ne précisent pas si elles rencontrent des problèmes de perte de particules.

Nous avons donc cherché à améliorer le calcul des positions de particules, étant donné que l'on est limité par le temps de calcul dans le choix de la taille de maille et du pas de temps, et qu'on a déjà cherché à améliorer le calcul de l'écoulement par le remaillage adaptatif. On a donc testé deux schémas d'intégration explicites, l'un à pas unique (eq. 2.15), l'autre sur deux pas de temps (eq. 2.16).

Schéma itératif 1 :

$$\begin{cases} \mathbf{x}_i^0 = \mathbf{x}(t_i) \\ \mathbf{x}_i^k = \mathbf{x}_i^{k-1} + \frac{\Delta t}{N} \mathbf{v}_i^{k-1}(t_i) \\ \mathbf{x}(t_{i+1}) = \mathbf{x}_i^N(t_i) \end{cases} \quad (2.15)$$

avec $N = 10$, et où $\mathbf{v}_i^k = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i^k)$ et $0 \leq k \leq N$ est le pas d'itération.

Schéma itératif 2 :

$$\begin{cases} \mathbf{x}_i^0 = \mathbf{x}(t_i) \\ \mathbf{x}_i^k = \mathbf{x}_i^{k-1} + \frac{\Delta t}{N} \left(\frac{N-i}{N} \mathbf{v}_i^{k-1}(t_i) + \frac{i}{N} \mathbf{v}_i^{k-1}(t_{i+1}) \right) \\ \mathbf{x}(t_{i+1}) = \mathbf{x}_i^N(t_i) \end{cases} \quad (2.16)$$

On a dû abandonner le second schéma à cause du temps de calcul trop élevé qu'il nécessite

(1h par pas de temps) et qui est dû à la deuxième interpolation sur la vitesse au pas suivant pour chaque itération.

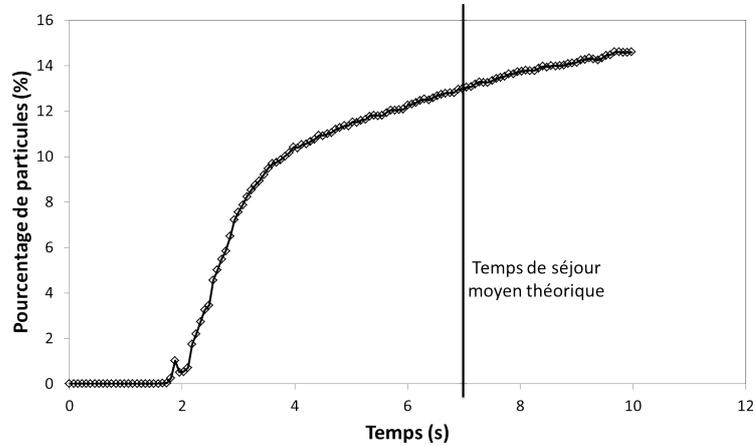


FIGURE 2.15 – Temps de séjours cumulés des particules en sortie de la zone de test [Fig. 2.13] dans le cas où la zone de test est composée d'éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm décalés de $+30^\circ$ avec un débit de 20 kg/h et une vitesse de rotation de 200 tr/min et pour un schéma d'intégration itératif (eq. 2.15)

Le premier schéma quant à lui donne de meilleurs résultats en terme de temps de séjours cumulés que le schéma de Runge-Kutta 2 [Fig. 2.15], étant donné que l'on obtient un plus grand nombre de particules qui sortent de la zone de test dans un temps raisonnable, et ce pour un temps de calcul de 10 minutes par pas de temps. En effet, cette fois-ci 14,5 % des particules sont sorties en fin de calcul. Cependant, il reste toujours beaucoup de particules qui ne sortent pas de l'écoulement et que l'on suppose bloquées dans les vis. On a donc décidé de rajouter une variable attachée aux particules qui indique si celles-ci se trouvent dans le domaine solide ou dans le domaine fluide. On peut ainsi quantifier exactement le nombre de particules bloquées au dernier pas de temps et on pourra ainsi ne pas prendre en compte ces particules bloquées dans notre évaluation de la qualité de mélange. Avec le nouveau schéma d'intégration, on obtient 81,3 % de particules bloquées, contre 95,9 % avec Runge-Kutta 2. Si l'on trace les temps de séjours cumulés des particules en sortie de la zone de test [Fig. 2.13], en ne prenant en compte que les particules « libres », on obtient un résultat qui semble satisfaisant pour le schéma itératif : 72,2 % des particules libres sont sorties [Fig. 2.16].

Cependant, on note en observant la distribution des temps de séjour que le temps de séjour moyen des particules « libres » est de 3,6 s avec un écart type de 4,1 s, ce qui est plus petit que le temps de séjours théorique, bien que l'ordre de grandeur soit bon si l'on prend l'écart type comme marge d'erreur [Fig. 2.17]. On entrevoit donc que, même en sélectionnant les particules « libres », il y a un problème de précision de calcul de la vitesse des particules dans la direction de l'écoulement. Cette imprécision peut être due à la fois au pas de temps trop élevé, à un mauvais choix de schéma d'intégration et à une mauvaise précision de calcul de vitesse dans la direction de l'écoulement. En effet, la composante de la vitesse dans la direction d'écoulement est faible et il est possible que l'approximation de calcul, même avec le remaillage, soit trop pauvre pour espérer obtenir des vitesses réalistes. Cela se vérifie en prenant des cas plus sévères en terme de difficulté

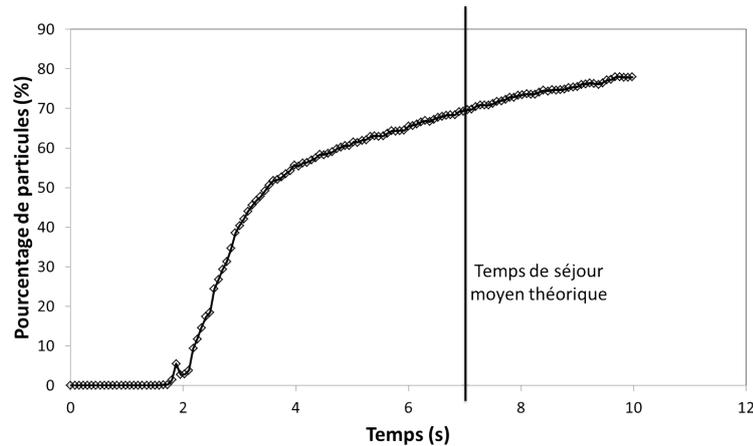


FIGURE 2.16 – Temps de séjours cumulés des particules « libres » uniquement en sortie de la zone de test [Fig. 2.13] dans le cas où la zone de test est composée d'éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm décalés de $+30^\circ$ avec un débit de 20 kg/h et une vitesse de rotation de 200 tr/min et pour un schéma d'intégration itératif (eq. 2.15)

de conservation du débit, c'est-à-dire des cas de type « pas inverse ». Si l'on reprend le même cas que précédemment mais avec des éléments malaxeurs décalés de -60° , on obtient une situation où les éléments malaxeurs contribuent négativement au débit. Dans ce cas, on constate en traçant les temps de séjours cumulés à 100 mm que, bien que 4,7 % des particules soient libres, aucune ne sort de l'écoulement, ce qui est visible également sur une image du lâcher de particules [Fig. 2.18].

De même, dans le cas où les éléments malaxeurs sont décalés de 90° , les particules n'atteignent pas la sortie de l'écoulement en moins de 10 s. Il semble donc qu'il ne soit pas possible, pour des temps de calcul raisonnables et dans l'état actuel de puissance de calcul de nos processeurs, d'obtenir des positions de particules fiables d'un bout de l'écoulement à l'autre, du moins suivant la direction d'écoulement, et ce sans doute en partie à cause des imprécisions de calcul dès les calculs de vitesse qui utilisent les techniques présentées dans l'article [43]. Certaines améliorations ont été apportées à cette méthode depuis, mais leur mise en place ne faisait pas partie des objectifs de ce travail. Comme nous le verrons en conclusion, il existe des alternatives au calcul de position sur l'ensemble de l'écoulement, mais elles ne seront pas étudiées dans cette thèse.

Afin de tout de même comparer les critères de mélange entre eux et aux résultats présents dans la littérature pour des configurations similaires, on a sélectionné quelques écoulements ne présentant pas trop de perte de particules et dont les distributions des temps de séjours restent dans des ordres de grandeur compatibles avec la théorie.

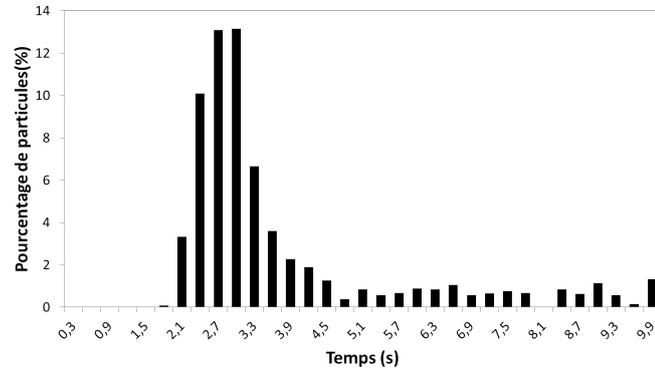


FIGURE 2.17 – Distribution des temps de séjours des particules « libres » uniquement, en sortie de la zone de test [Fig. 2.13], dans le cas où la zone de test est composée d'éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm, décalés de $+30^\circ$ avec un débit de 20 kg/h et une vitesse de rotation de 200 tr/min et pour un schéma d'intégration itératif (eq. 2.15)

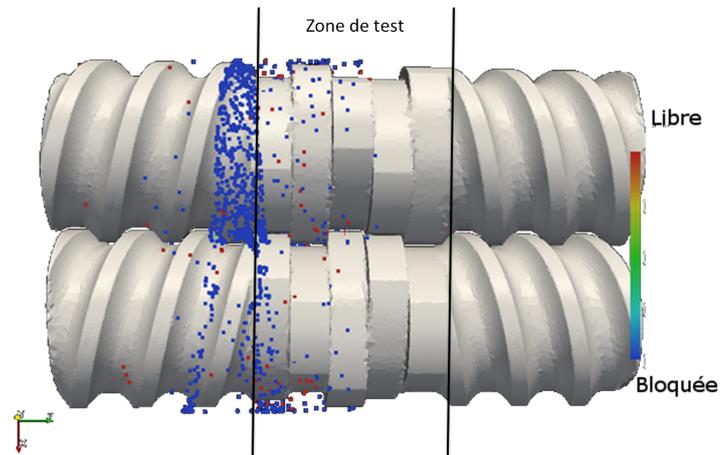


FIGURE 2.18 – Positions des particules au bout de 10 s d'écoulement dans le cas où la zone de test est composée d'éléments malaxeurs d'épaisseur 10 mm, décalés de -60° , avec un débit de 20 kg/h et une vitesse de rotation de 200 tr/min et pour un schéma d'intégration itératif (eq. 2.15). Les particules en rouge sont « libres » et celles en bleu sont bloquées dans les vis ou dans le fourreau

2.4 Caractérisation du mélange et étude de cas

2.4.1 Méthodes de caractérisation

Afin de déterminer si un mélange est bon du point de vue distributif, on a choisi d'utiliser l'entropie de Shannon comme critère de caractérisation. Nous introduisons également deux autres critères : l'allongement moyen et la différence normalisée entre entropies de Shannon et entropie de Rényi, qui permet de préciser s'il existe des zones à forte concentration.

Allongement moyen

La distribution des charges dans la matrice nécessite de les éloigner. Une mesure de la capacité d'un procédé à mélanger est donc la mesure de sa capacité à éloigner deux particules initialement proches [19]. On peut mesurer cet allongement $\lambda = \frac{dx}{dX}$ le long de l'écoulement en évaluant la distance entre des particules que l'on a « couplées » [Fig. 2.19].

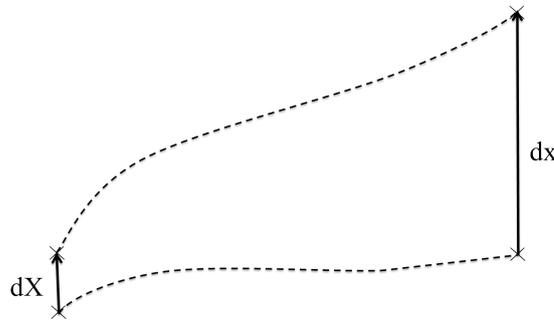


FIGURE 2.19 – Illustration schématique de l'éloignement de deux particules

En effectuant une moyenne de cet allongement sur l'ensemble des particules, on obtient une mesure du mélange dont on peut suivre l'évolution au cours du procédé simulé.

Différence normalisée entre entropies de Shannon et de Rényi

La différence normalisée $\delta S = \frac{S-S(\beta)}{S}$ entre entropies de Shannon et de Rényi donne une indication supplémentaire sur le type de mélange : à entropie de Shannon égale, s'il y a des zones à forte concentration, l'entropie de Rényi (à β donné) sera plus faible que dans un cas sans zones à forte concentration. Ainsi, plus la différence normalisée entre les deux entropies est grande, plus on se rapproche d'une configuration de type petites zones à forte concentration [Fig. 2.20]. Tout comme pour l'allongement moyen et l'entropie de Shannon, on peut suivre l'évolution de cette différence le long de l'écoulement.

Dans la pratique, pour le calcul des entropies, l'écoulement est découpé en « boîtes » de volumes équivalents [Fig.2.21], et le calcul de la probabilité de présence d'une particule se fait à partir du comptage du nombre de particules dans chaque « boîte » :

$$p_j = \frac{c_j}{MC}, \quad c_i = \frac{n_i}{V_i}, \quad C = \frac{\sum_{m=1}^M c_m}{M} \quad (2.17)$$

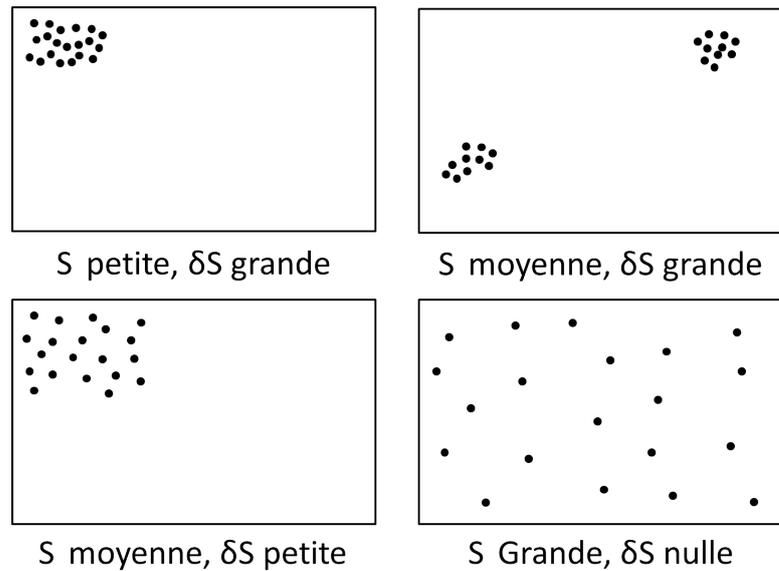


FIGURE 2.20 – Entropie de Shannon S et différence normalisée δS entre entropie de Shannon et de Rényi pour quatre configurations types de mélange distributif

avec p_j la probabilité de trouver une particule dans la « case » j , c_j la concentration en particules dans la « boîte » j , C la concentration moyenne sur l'ensemble des « boîtes », V_j le volume de la « boîte » j et M le nombre total de « boîtes ».

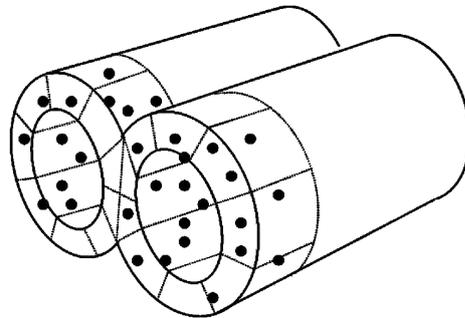
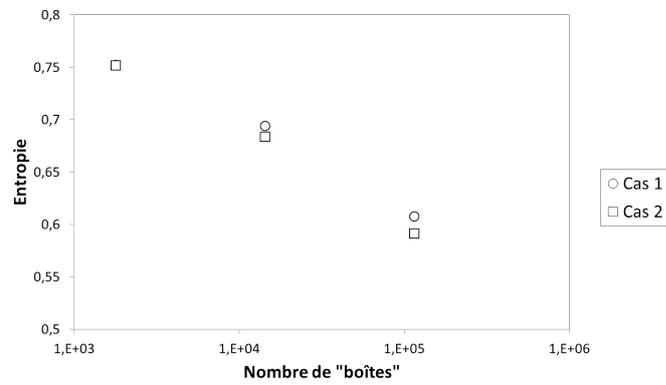


FIGURE 2.21 – Illustration de la découpe de la zone d'écoulement pour le calcul de l'entropie

Les entropies de Shannon et de Rényi, et donc la différence normalisée entre ces entropies, dépendent du nombre de « boîtes » en lequel est découpé l'écoulement [Fig. 2.22]. Pour comparer deux écoulements, il faut donc avoir le même nombre de « boîtes ».

On dispose donc de deux critères décrivant le mélange de manière globale (allongement moyen, entropie de Shannon) et d'un critère permettant de préciser s'il existe des zones à forte concentration (différence normalisée entre entropies de Shannon et de Rényi).



(a) Entropie de Shannon

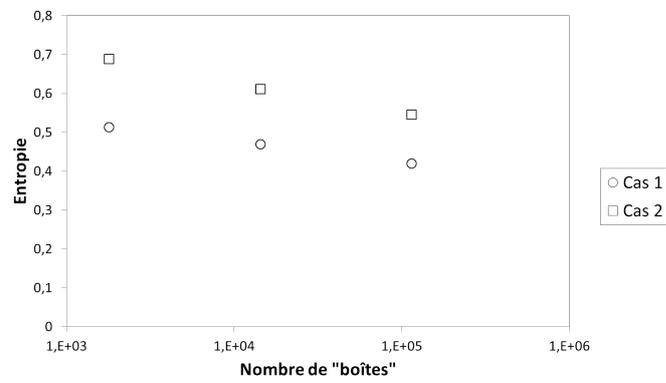
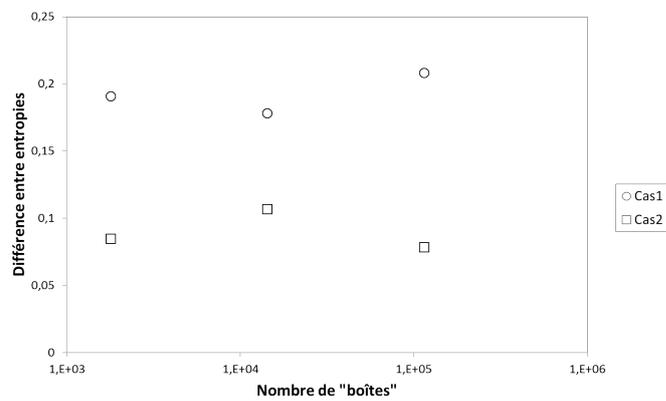
(b) Entropie de Rényi ($\beta = 5$)(c) Différence normalisée entre entropies de Shannon et de Rényi ($\beta = 5$)

FIGURE 2.22 – Dépendance des différentes entropies au nombre des « boîtes » utilisées pour le calcul

2.4.2 Capacité de mélange de différentes configurations de vis

Comme nous l'avons vu plus tôt (§ 2.1), il est très difficile de tirer des conclusions à partir de la littérature sur les capacités de mélanges des différents dispositifs existant en extrusion bivis, ainsi que sur l'influence des conditions d'écoulement. En effet, les conclusions des différentes études ne peuvent pas être comparées facilement et sont souvent contradictoires, ou ne présentent que des écarts faibles entre les capacités de mélange des différents dispositifs étudiés. Il est probable que les différents auteurs ont rencontré des difficultés similaires aux nôtres, c'est-à-dire des blocages des particules dans le milieu solide et une mauvaise évaluation de la vitesse dans la direction de l'écoulement, due à de trop pauvres approximations dans les calculs de vitesse et de positions des particules. Il sera donc difficile de comparer nos propres résultats à ceux obtenus précédemment dans d'autres études.

Comme on l'a constaté (§ 2.3.2), la plupart de nos lâchers de particules ne donnent pas de résultats satisfaisants. Pour avoir tout de même une idée du type de résultats de caractérisation du mélange que l'on peut obtenir à l'aide de nos critères, on a choisi quelques cas de type « pas direct » présentant moins de problèmes de précision de calcul dans la direction de l'écoulement. Les cas sont toujours de la forme : pas direct – zone de test – pas inverse [Fig. 2.4] où chacun des trois éléments a une longueur de 50 mm. Les différentes zones de test sont présentées dans le tableau [Tab. 2.2]. Dans tous les cas, le débit est de 20 kg/h et la vitesse de rotation est de 200 tr/min, les autres cas n'ayant pas donné de résultats de lâchers de particules satisfaisants. À noter que l'on a tout de même des problèmes de temps de séjours, en particulier pour les cas décalés de 60°, et que les résultats sont donc à prendre avec une grande vigilance.

	Type d'élément	Pas ou Angle de décalage	Nombre de filets ou de lobes	Nombre d'éléments	Longueur ou épaisseur d'un élément (mm)	% de particules libres à $t = 10$ s	% des particules libres sorties de la zone de test (100 mm) à $t = 10$ s
Cas A [Fig. 2.5(a)]	Vis	33,3 mm	2	1	50	16,2	95,6
Cas B [Fig. 2.5(b)]	Malaxeur	+30°	2	5	10	18,7	72,2
Cas C [Fig. 2.5(c)]	Malaxeur	+30°	2	10	5	9,2	46,2
Cas D [Fig. 2.5(d)]	Malaxeur	+60°	2	5	10	11,5	15,9
Cas E [Fig. 2.5(e)]	Malaxeur	+60°	2	10	5	18,5	0,03

TABLE 2.2 – Description des différentes zones de test simulées et de la qualité des lâchers de particules

À partir des lâchers de particules effectués sur ces cas, nous avons évalué l'allongement moyen entre des particules initialement proches, l'entropie de Shannon et la différence normalisée entre entropies de Shannon et de Rényi. Nous avons arbitrairement choisi un paramètre β égal à 5 et nous avons découpé la géométrie d'écoulement en 14 336 cases pour les calculs d'entropie.

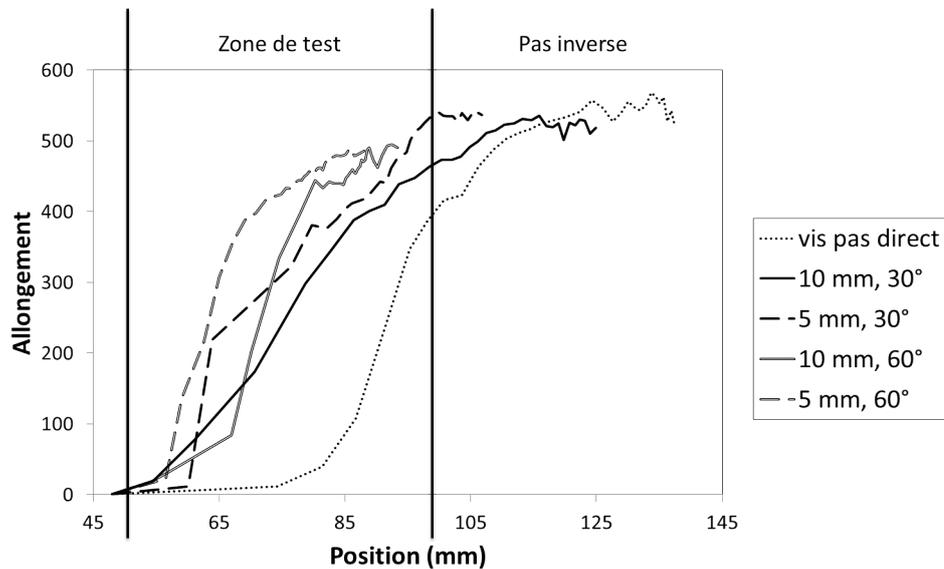


FIGURE 2.23 – Allongement moyen entre deux particules initialement proches en fonction de la position moyenne des particules dans la direction de l'écoulement pour les différentes configurations de la zone de test

On constate tout d'abord, en comparant allongement moyen et entropie de Shannon dans la zone de test, que les deux critères donnent la même tendance générale : le mélange est plus rapide avec les malaxeurs [Figs. 2.23, 2.24]. On retrouve visuellement ce résultat en observant les images des lâchers de particules [Figs. 2.26, 2.27, 2.28, 2.29]. Les courbes de différences normalisées entre entropies de Shannon et de Rényi présentent d'importantes oscillations, ce qui était prévisible étant donné que l'entropie de Rényi est plus sensible à la présence de défauts de mélange [Fig. 2.25]. Bien que les différentes courbes soient proches, et que l'on ne puisse pas les comparer pour les dernières positions, on peut noter que les profils à éléments malaxeurs décalés de $+60^\circ$ semblent mieux éliminer les défauts de mélange, puisque la différence entre les entropies diminue dans la zone de test. Globalement, on peut dire que les différentes configurations, hormis l'élément de vis à pas direct, donnent des résultats comparables en termes de mélange, ce qui est cohérent avec le fait que les précédentes études n'aient pas fait clairement ressortir de configuration permettant un meilleur mélange.

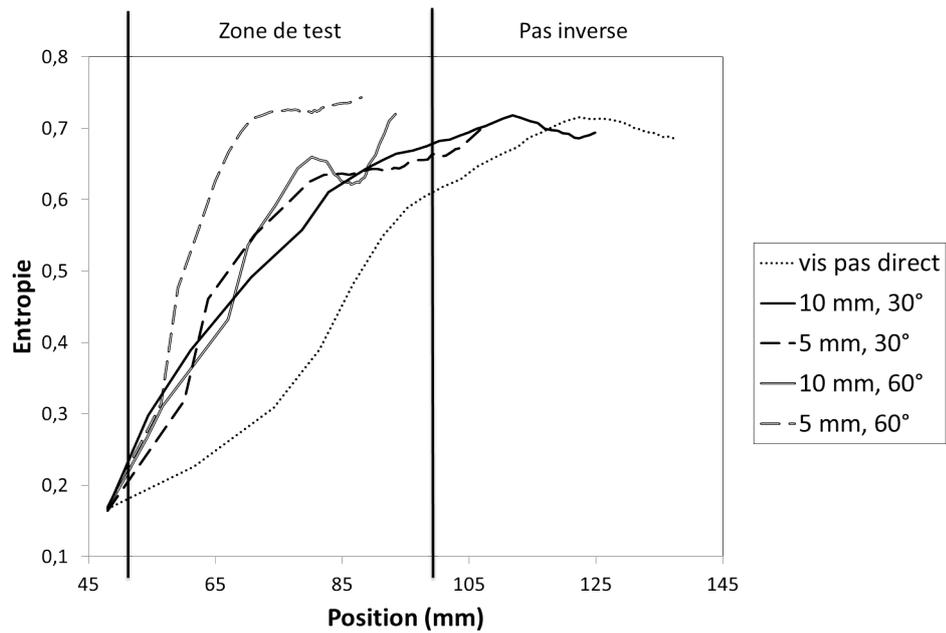


FIGURE 2.24 – Entropie de Shannon des particules en fonction de la position moyenne des particules dans la direction de l'écoulement pour les différentes configurations de la zone de test

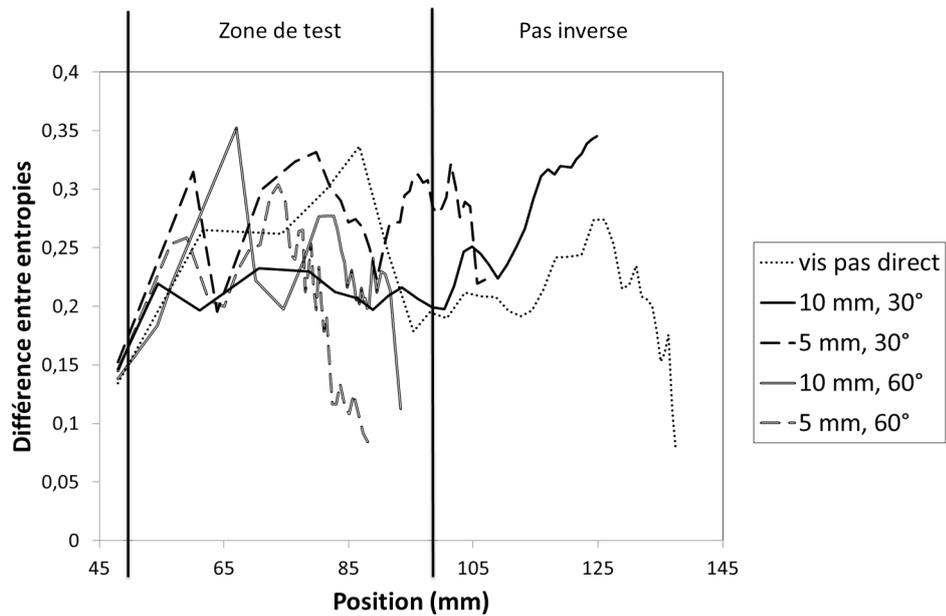


FIGURE 2.25 – Différence normalisée entre entropies de Shannon et de Rényi ($\beta = 5$) des particules, en fonction de la position moyenne des particules dans la direction de l'écoulement pour les différentes configurations de la zone de test

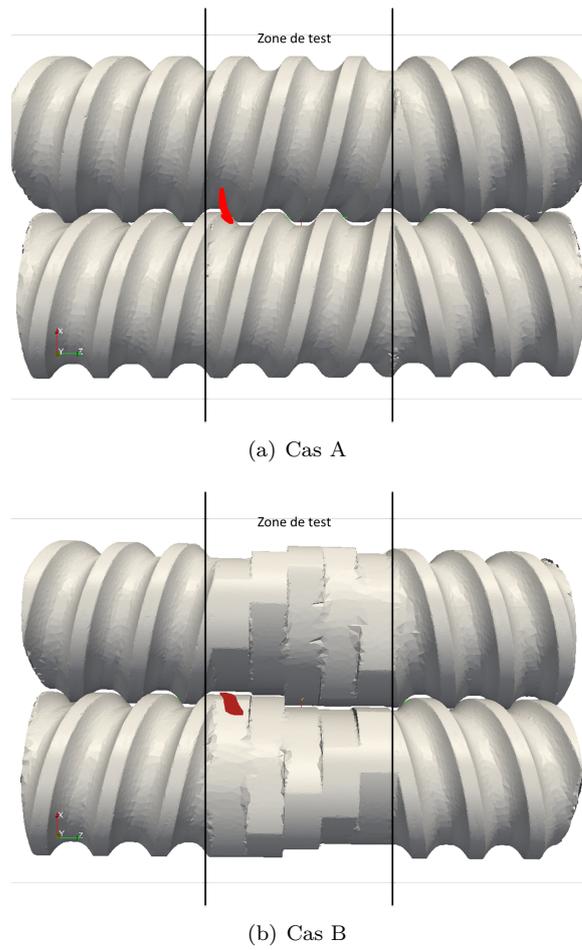


FIGURE 2.26 – Lâcher de particules dans le cas d'une vis simple (a) et d'éléments malaxeurs (b) (+30°, 10 mm) [Tab. 2.2] : capture à 0,15 secondes

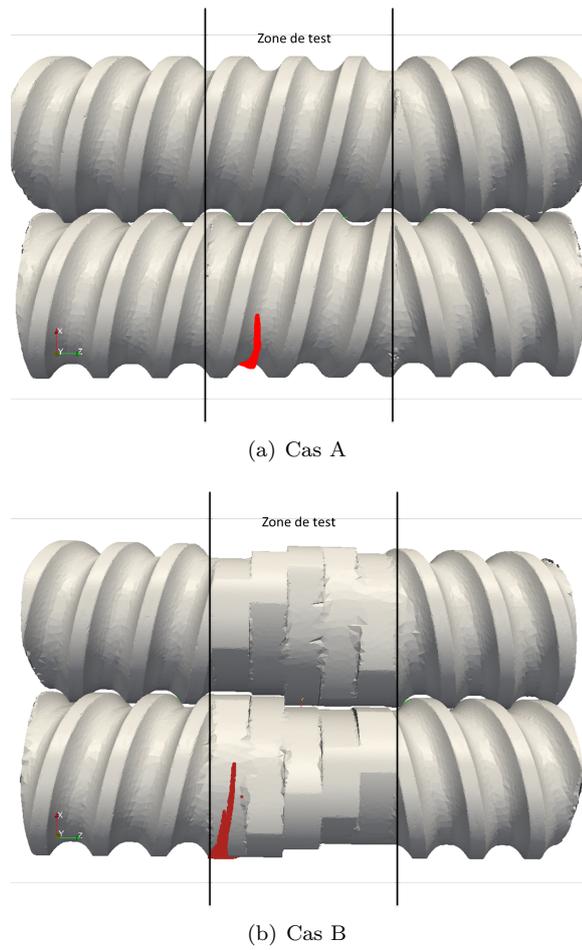


FIGURE 2.27 – Lâcher de particules dans le cas d’une vis simple (a) et d’éléments malaxeurs (b) (+30°, 10 mm) [Tab. 2.2] : capture à 0,3 secondes

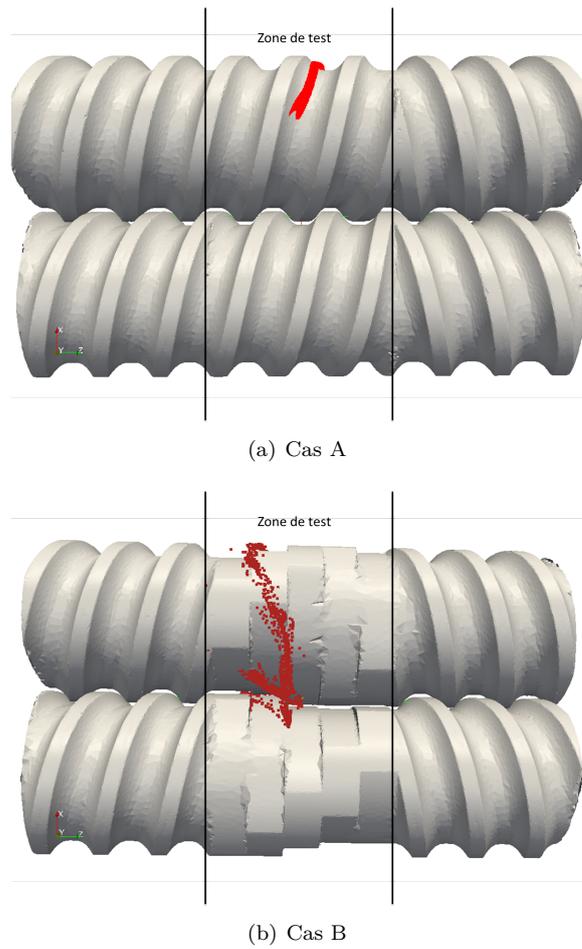


FIGURE 2.28 – Lâcher de particules dans le cas d'une vis simple (a) et d'éléments malaxeurs (b) (+30°, 10 mm) [Tab. 2.2] : capture à 0,75 secondes

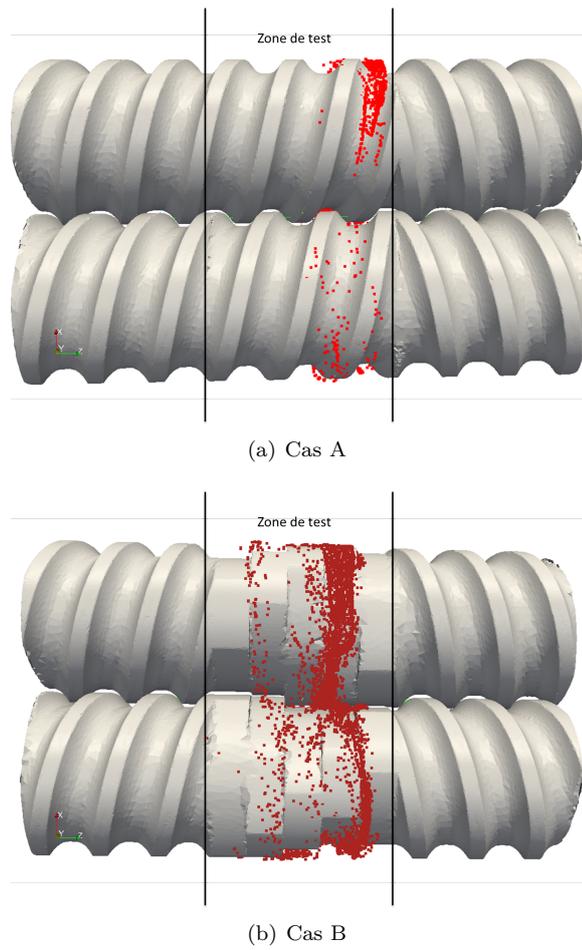


FIGURE 2.29 – Lâcher de particules dans le cas d'une vis simple (a) et d'éléments malaxeurs (b) (+30°, 10 mm) [Tab. 2.2] : capture à 1,5 secondes

2.5 Conclusion et perspectives

Ce qui ressort principalement de cette étude est l'importance des problèmes rencontrés dans la simulation de particules lâchées dans un écoulement d'extrusion bivis. Pour résumer, la lourdeur des calculs et le temps nécessaire pour les effectuer sont si importants qu'à l'heure actuelle, on est obligé d'effectuer des calculs avec des pas de temps insuffisamment petits pour obtenir la précision nécessaire à un lâcher de particule. Bien que la méthode de calcul (§ 2.2) [41–43] donne de bons résultats pour d'autres grandeurs comme la pression, la SME ou la position des surfaces libres par exemple (§ 2.2.3), elle ne permet pas d'obtenir une précision satisfaisante pour la vitesse du fluide dans la direction de l'écoulement. En effet, cette grandeur étant petite devant les autres vitesses, elle ne tolère pas une erreur aussi grande. À cause de ce problème, la vitesse des particules dans la direction de l'écoulement est très imprécise et cela conduit à une non-avancée des particules dans les cas où la configuration des vis n'aide pas au convoyage (pas neutre ou inverse). Par ailleurs, les vis solides tournant à grande vitesse « capturent » un grand nombre de particules, et ce également à cause d'un manque de précision de calcul, provenant sans doute à la fois du calcul de vitesse et du schéma d'intégration utilisé pour le calcul de la position des particules.

La simulation directe d'un lâcher de particules en tant qu'expérience numérique trouve ici ses limites. En effet, l'intégration des trajectoires du début à la fin des blocs étudiés voit sa précision s'appauvrir au cours du temps, parce qu'on se restreint à des pas de temps trop grands pour des raisons utilitaires et parce que la taille de maille et la méthode de calcul (§ 2.2) ne capturent pas toute la complexité de la cinématique (reflux aux éléments inverses) [Fig. 2.30]. Il existe cependant des modifications de la méthode de calcul et de remaillage qui permettraient de résoudre, au moins en partie, le problème d'imprécision de calcul de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement. En partant du principe que seules les vitesses dans la direction de l'écoulement sont trop petites devant l'erreur de calcul, on peut considérer que les vitesses le long des chenaux sont correctes. Une solution possible pour garder une méthode de lâcher de particules pour caractériser le mélange serait donc de corriger les valeurs des vitesses selon la direction d'écoulement, de manière à les faire correspondre en moyenne au débit imposé. On peut également tenter d'améliorer la précision de la vitesse dans la direction de l'écoulement en prenant pour cible du remaillage, non pas les variations du taux de cisaillement, mais les variations non-linéaires de la vitesse dans l'épaisseur du chenal [Fig. 2.30]. Une autre option est de résoudre directement les déformations et de caractériser le mélange à partir des tenseurs de déformations obtenus, comme cela a été proposé durant le stage de Master de Joseph Ajouri [55] dans le cas d'un écoulement de Couette excentré périodique. Pour cela, on peut utiliser la relation entre l'allongement d'un segment de matière au cours de l'écoulement $\lambda = \frac{|dx|}{|dX|}$ et les valeurs propres du tenseur de Cauchy-Green gauche \mathbf{B} , ainsi que l'équation d'évolution de \mathbf{B} :

$$\dot{\mathbf{B}}^{-1} = -\nabla \mathbf{u}^T \mathbf{B}^{-1} - \mathbf{B}^{-1} \nabla \mathbf{u} \quad (2.18)$$

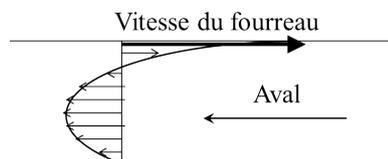


FIGURE 2.30 – Champs de vitesse dans l'épaisseur du chenal d'un élément de vis à pas inverse

Chapitre 3

Modélisation du mélange dispersif en extrusion bivis. Application à la casse de fibre

Notations

a :	demi-longueur d'une fibre
A, B, C, D :	sommets d'un élément malaxeur
\mathbf{A} :	tenseur d'orientation du second ordre
\mathbb{A} :	tenseur d'orientation du quatrième ordre
\mathcal{A} :	paramètre du calcul de Jeffery
a_1, a_2, a_3 :	demi-axes d'un ellipsoïde
A_b :	section transversale du fourreau
A_s :	section transversale de la vis
b :	rayon d'une fibre
\mathbf{B} :	matrice de distribution
B_E :	coefficient d'Einstein / viscosité intrinsèque
B_p :	pas de vis
C_B :	coefficient de casse
C_I :	coefficient de diffusion
C_l :	entraxe
c_p :	chaleur spécifique
d :	diamètre d'une fibre
\mathbf{D} :	matrice de fragmentation
D_r :	diffusion en rotation
E :	module d'Young
\mathbf{E} :	tenseur des vitesses de déformation
$\hat{\mathbf{E}}$:	tenseur des taux de déformation sans dimension
E_{act} :	énergie d'activation
E_p :	épaisseur de l'élément malaxeur
F_0 :	charge initiale
f_A :	mesure scalaire de l'orientation
F_B :	force induite par le cisaillement intégrée sur une demi-fibre cylindrique de Burgers

F_{dc} :	facteur de forme correctif
F_{EF}^c :	charge critique déterminée par éléments finis
f_f :	forces locales dues à l'écoulement
F_f :	force compressive cumulée
F_i :	force de compression au centre d'une fibre de longueur l_i de Dinh-Armstrong
F_i^{crit} :	force de compression avant flambement au centre d'une fibre de longueur l_i
F_p :	forces ponctuelles appliquées aux extrémités d'une fibre
F_{pc} :	facteurs de forme correctif
f_r :	taux de remplissage
F_r :	fonction de répartition des longueurs de fibres en nombre
h :	déflexion initiale d'une fibre en son centre
\mathbf{H} :	matrice de comportement du matériau
h_{T_b} :	coefficient de transfert thermique du fourreau
h_{T_s} :	coefficient de transfert thermique des vis
$H(\Theta)$:	profondeur du chenal
I :	moment d'inertie d'une fibre
\mathbf{I} :	matrice identité
k :	conductivité thermique
K :	paramètre de la loi puissance
k', k'', k''' :	constantes de taux de casse associées au nombre de tours de vis, à la déformation et à l'énergie
k_f :	constante de taux de casse
\mathbf{k}_l :	matrice de rigidité linéaire
KS :	coefficient de Kolmogorov-Smirnov
\mathbf{k}_u :	matrice de déplacement initial
\mathbf{k}_λ :	matrice des forces suiveuses
\mathbf{k}_σ :	matrice de rigidité géométrique
l :	longueur d'une fibre
L :	longueur moyenne des fibres
\mathbf{L} :	tenseur de Green-Lagrange
\mathbf{L}_l :	partie linéaire du tenseur de Green-Lagrange
l_n :	longueur en dessous de laquelle une fibre ne peut plus casser
\mathbf{L}_{nl} :	partie non-linéaire du tenseur de Green-Lagrange
L_o :	longueur axiale d'un élément considéré
L_w :	longueur moyenne en masse
L_∞ :	longueur de fibre en dessous de laquelle il n'y a plus de flambement
m :	moment fléchissant local
\mathbf{m} :	vecteur des fractions de masse
M :	facteur d'orientation
m_f :	nombre de filets de vis
m_i :	fraction de masse représentée par les fibres de longueurs l_i
M_{ij} :	transfert de masse de la classe des fibres de longueur L_j à la classe des fibres de longueur L_i
M_o :	moment de flexion
m_W :	paramètre de forme de la distribution de Weibull
n :	nombre de classes de longueur de fibre
N :	nombre de segments de fibres
n_1, n_2 :	nombre total de fibres dans les distributions 1 et 2
N_i :	nombre de fibres de longueur l_i
n_p :	paramètre de la loi puissance

N_r :	vitesse de rotation des vis (en tr/s)
$\mathcal{N}(\nu, \sigma_N)$:	loi normale de probabilité avec une moyenne ν et une déviation standard σ_N
p :	champ de pression
\mathbf{P} :	direction d'un axe de l'ellipsoïde
p_0 :	constante de pression
P_{ij} :	probabilité pour une fibre de longueur L_j en train de casser de générer une fibre de longueur L_i
P_{KS} :	probabilité que deux « séries » de longueurs de fibres suivent la même loi de distribution
$P_l(x)$:	probabilité de casse locale au point x de la fibre
P_T :	probabilité pour une fibre de casser pendant une rotation de période T
$P_W(\sigma)$:	probabilité de Weibull de casse d'une fibre sous une contrainte σ
$P\left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m}\right)$:	probabilité de casse d'une fibre pour un paramètre de flambement $\frac{\sigma_B}{\sigma_m}$
Q :	débit massique total
Q_C :	débit volumétrique longitudinal le long de la chambre en C
Q_Θ :	débit dans la direction Θ
$\{r, \Theta, Z\}$:	référentiel dans la chambre en C
R :	rayon de courbure d'une fibre
\mathbf{R} :	matrice de rotation
R_c :	constante des gaz parfaits
R_e :	rayon extérieur du chenal
R_F :	part du rayon de courbure due à l'action des forces
R_i :	rayon intérieur du chenal
R_{ik} :	taux de génération de fibres « enfants » de longueur l_i à partir de « parents » de longueur l_k
$R(\Theta)$:	rayon intérieur d'un élément malaxeur
S :	paramètre du modèle de Tucker <i>et al.</i>
\mathbf{S} :	matrice de casse
S_b :	surface d'échange thermique du fourreau
SME :	énergie spécifique
S_s :	surface d'échange thermique des vis
T :	période de rotation de Jeffery
\bar{T} :	température moyenne sur l'épaisseur du chenal
T_0 :	température initiale des granulés
T_b :	température du fourreau
\bar{T}_i :	température d'un sous-élément i
T_m :	température de fusion
T_r :	effort tranchant
T_{ref} :	température de référence
t_s :	temps de séjour moyen
T_s :	température des vis
\mathbf{u} :	champ de vitesse
\mathbf{U}_0 :	solutions nodales du problème linéaire simple de la charge d'une poutre
V :	volume de matériau
\bar{V} :	vitesse moyenne dans la direction du chenal
V_o :	volume libre de l'élément considéré
V_p :	volume de la particule
W :	largeur du chenal
W' :	largeur de remplissage du chenal
W^* :	largeur de la zone d'interpénétration
\dot{W} :	puissance dissipée

\dot{W}_p :	puissance dissipée due à une particule ellipsoïdale dans un fluide en cisaillement
\dot{W}_t :	puissance dissipée pour cisailer un volume V de matériau
\dot{W}_{TOT} :	puissance dissipée intégrée sur le profil entier
$\{xyz\}$:	référentiel de la fibre
$\{x'y'z'\}$:	référentiel se déplaçant en translation avec la fibre
$\{x'y'\}$:	plan de cisaillement
y, δ :	déflexion d'une fibre
Y :	part de la déflexion d'une fibre due à l'action des forces
y_0 :	déflexion initiale d'une fibre
Y_t :	déflexion totale au centre de la fibre
α_k :	paramètre de conservation de la masse
α, n :	paramètre de Carreau-Yasuda
α_s :	angle définissant l'angle du filet
β :	rapport d'aspect
β_e :	rapport d'aspect équivalent
$\dot{\gamma}$:	taux de cisaillement
$\hat{\gamma}$:	taux de cisaillement sans dimension
$\bar{\gamma}$:	taux de cisaillement moyen dans la chambre en C
$\mathbf{\Gamma}$:	tenseur gradient de vitesse
$\mathbf{\Gamma}'$:	tenseur gradient de vitesse dans le référentiel se déplaçant en translation avec la fibre
Δt :	temps passé par la fibre selon l'orientation \mathbf{P}
ΔH :	enthalpie de fusion
δ_{ij} :	tenseurs unité de dimension 2
Δp_C :	différence de pression le long de la chambre en C
$\Delta p'_C$:	baisse de pression d'un élément de vis à par inverse le long de la chambre en C
$\delta \mathbf{U}$:	vecteur déplacement des nœuds du maillage
$\Delta \Theta_C$:	angle définissant la chambre en C
$\Delta \Theta_C^*$:	angle définissant zone d'interpénétration
ϵ_0 :	coefficient d'efficacité
ε^{ikl} :	symbole de Levi-Cita
η :	viscosité apparente
η^*, F_p^* :	viscosité et facteur de forme calculés en prenant en compte la géométrie locale
η_0 :	viscosité à cisaillement nul à la température de référence
$\eta_0(T)$:	viscosité à cisaillement nul en fonction de la température
η_p :	viscosité estimée à la paroi
η_r :	viscosité apparente relative
$(\eta\dot{\gamma})_{crit}$:	contrainte de cisaillement avant casse
θ :	angle entre la fibre et l'axe z' perpendiculaire au plan de cisaillement
$\{\theta_e, \phi_e, \psi_e\}$:	angles d'Euler
λ :	valeur propre
λ_0 :	temps caractéristique de Carreau-Yasuda à la température de référence
$\lambda(T)$:	temps caractéristique de Carreau-Yasuda en fonction de la température
μ_0 :	viscosité du fluide environnant
ξ :	paramètre de l'équation de Jeffery
Π :	énergie du système fibre dans un écoulement en cisaillement
Π_{ext} :	contribution à l'énergie des forces extérieures
Π_{int} :	énergie de déformation interne du système

ρ :	densité du polymère fondu
σ :	contrainte
$\boldsymbol{\sigma}$:	tenseur des contraintes dans la fibre
σ_0 :	facteur d'échelle de la distribution de Weibull
σ_B :	contrainte induite par le cisaillement intégrée sur une demi-fibre cylindrique
σ_c :	résistance en traction d'une fibre
σ_{cis} :	contrainte de cisaillement
$\boldsymbol{\sigma}_h$:	tenseur des contraintes sur la surface d'un ellipsoïde
σ_m^{DT} :	contrainte avant flambement de DeTeresa
σ_m^e :	contrainte avant flambement de Euler
σ_m^{FM} :	contrainte avant flambement de Forgacs et Mason
σ_s :	contrainte en traction à la surface d'une fibre en flexion
σ_t :	résistance en traction du matériau composite
σ_u :	contrainte minimale pour qu'une fibre casse
ζ_t :	coefficient de trainée
τ_i :	taux de casse des fibres de longueur l_i
τ_I :	résistance de l'interface fibre-matrice
τ_j :	taux de casse des fibres de longueur L_j
ϕ :	angle entre la projection de la fibre dans le plan de cisaillement et l'axe y'
Φ :	angle du filet
ϕ_0 :	fraction volumique du polymère
ϕ_i :	angle d'interpénétration
ϕ_m :	paramètre de Krieger-Dougherty
ϕ_v :	fraction volumique de fibres
χ, χ', χ'' :	paramètres du calcul de Jeffery
ψ :	distribution d'orientation
Ψ :	angle entre tangente à la fibre courbée et axe de la fibre non-déformée
$\Psi(\sigma_i)$:	probabilité pour le segment de fibre i de casser sous la contrainte σ_i
Ω :	vitesse de rotation des vis (en rad/s)
$\boldsymbol{\Omega}$:	tenseur de vortacité
$\boldsymbol{\omega}_p$:	vitesse angulaire d'un ellipsoïde

3.1 Introduction et bibliographie

Lorsque l'on ajoute des particules (silice, noir de carbone, ...) dans un polymère pour augmenter ses propriétés mécaniques, on cherche à augmenter la surface de contact entre les particules et la matrice afin d'optimiser l'interaction entre celles-ci. Pour cela, on doit disperser les agglomérats de charges en éléments les plus petits possibles, en appliquant des contraintes sur les agglomérats au cours du mélange afin de « casser » les interactions. Dans le cas de l'ajout de fibres (naturelles ou de verre), on a le problème inverse. En effet, afin de garder les propriétés mécaniques apportées par des fibres longues, on cherche à éviter les trop fortes contraintes qui amènent à une forme de dispersion particulière : la casse. C'est au problème de la casse de fibres rigides, et en particulier de fibres de verre, que nous nous sommes intéressés dans cette étude.

Dans un premier temps, nous allons rappeler le principe et les méthodes de renfort par ajout de fibre, puis nous reviendrons sur la littérature concernant le comportement de fibres en suspension, depuis les caractéristiques d'une suspension de fibre en régime dilué dans un écoulement simple jusqu'à la modélisation de la casse de fibres dans les procédés industriels. Nous poserons ensuite les bases théoriques d'un modèle de casse de fibre dans un écoulement de cisaillement. Nous présenterons ensuite une méthode de simulation de la casse de fibre dans une extrudeuse bivis basée sur l'utilisation de résultats de simulation d'un écoulement en extrusion bivis ramené à une dimension (Ludovic®). Puis, nous testerons cette méthode sur des cas réels afin de comparer nos résultats à ceux fournis par l'expérience.

3.1.1 Renfort par ajout de fibres

L'ajout de fibres à un polymère permet de fortement améliorer ses propriétés mécaniques et ainsi d'élargir son utilisation à des domaines dans lesquels, jusqu'alors, seuls les métaux étaient utilisés. Les propriétés d'un matériau renforcé de fibres dépendent de l'interaction entre ces fibres et la matrice polymère. Cette interaction peut être améliorée par l'ajout d'agents de couplages et par l'augmentation de la surface de contact entre fibres et matrice, c'est-à-dire par la bonne dispersion des « fagots » contenant les fibres [56]. L'augmentation des longueurs de fibres permet, à surface spécifique égale, de limiter les singularités aux extrémités qui fragilisent la structure.

L'amélioration des propriétés mécaniques des polymères chargés de fibres est due à la capacité d'une fibre à supporter une plus grande proportion des charges mécaniques que la matrice qu'elle remplace. Les fibres discrètes offrent des propriétés mécaniques moindres par rapport à des fibres continues. En effet, les extrémités des fibres (plus nombreuses pour des fibres courtes à concentration de fibres donnée) forment des points où se concentrent les contraintes. Les fibres discrètes donnent une résistance 5 % plus faible que les fibres continues à causes des sites créés à leurs extrémités. Cependant, la mise en forme du matériau composite (l'injection par exemple) amenant de la casse de fibre, on est au final ramené à des fibres discrètes.

La relation entre la résistance en traction d'une fibre et la force de cisaillement interfacial entre la fibre et la matrice conduit à un rapport d'aspect critique de la fibre, en dessous duquel la capacité maximale de renforcement de la fibre n'est pas utilisée :

$$\left(\frac{a}{b}\right)_c = \frac{\sigma_c}{2\tau_I} \quad (3.1)$$

avec a la demi-longueur de la fibre, b son rayon, σ_c la résistance de la fibre (contrainte à la rupture) et τ_I la résistance de l'interface fibre-matrice, fortement influencée par les conditions de

mise en forme et le degré d'adhésion entre le polymère et la fibre.

Le rapport d'aspect critique est une valeur « idéale ». Dans la pratique, à cause du chevauchement des fibres, celles-ci doivent être au moins dix fois plus longues que la longueur critique pour parvenir au maximum de renforcement possible. En dessous du rapport d'aspect critique, les fibres apportent un renfort mécanique mais affaiblissent la structure en apportant des « défauts » à leurs extrémités (comme le ferait une particule isotrope). Entre la valeur critique du rapport d'aspect et dix fois cette valeur, les fibres apportent un renforcement partiel.

Le renforcement peut aussi être limité par le mouillage partiel des fibres par la matrice. Pour éviter ce problème, on cherche à séparer les fibres les unes des autres et on utilise des agents de couplage.

La résistance d'un polymère chargé de fibres courtes, c'est à dire sa contrainte à la rupture, s'écrit :

$$\sigma_t = \sigma_0 \phi_0 + \sigma_c \phi_v \epsilon_0 \epsilon_1 \quad (3.2)$$

avec σ_t la résistance en traction du matériau composite, σ_0 celle de la matrice, σ_c celle de la fibre, ϕ_0 la fraction volumique de polymère, ϕ_v la fraction volumique de fibres, ϵ_0 le coefficient d'efficacité dépendant de l'orientation des fibres ($\epsilon_0 = 1$: orientées uniaxialement ; $\epsilon_0 = 0,33$: orientées aléatoirement dans un plan ; $\epsilon_0 = 0,167$: orientées aléatoirement en 3D) et ϵ_1 le facteur d'efficacité traduisant la qualité du renforcement : mouillage, rapport d'aspect,...

Les fibres doivent être correctement distribuées dans la matrice afin d'obtenir des propriétés homogènes dans le matériau final. Généralement, les fibres sont mélangées avec le polymère lors d'une première opération, à l'aide de différents procédés tels que l'extrusion monovis [56], l'extrusion bivis [56–61] ou le malaxeur Buss [60–62]. La plupart du temps, le composite est ensuite utilisé dans des procédés de moulage [36, 56, 63–75]. Toutes ces opérations génèrent de la casse de fibre, dégradant ainsi les potentielles propriétés de la pièce finale. Un enjeu important est donc de limiter cette casse de fibre, la longueur de fibre étant le dernier « levier » permettant d'améliorer l'interaction fibre-matrice une fois les agents de couplage choisis et la dispersion des « fagots » optimisée.

3.1.2 Rhéologie des suspensions de particules

Dans le cas visqueux généralisé, il existe une fonction viscosité $\eta(\dot{\gamma})$ telle que :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\eta(\dot{\gamma})\mathbf{E} \quad (3.3)$$

avec p la pression, \mathbf{I} la matrice identité, \mathbf{E} le tenseur des taux de déformation et $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes. Dans le cas newtonien, $\eta(\dot{\gamma}) = \eta$ avec η une constante physique.

Pour les suspensions, la viscosité η est souvent normalisée par la viscosité du liquide environnant μ_0 et reportée comme la viscosité apparente relative $\eta_r = \eta/\mu_0$.

La rhéologie d'une suspension de particules est une fonction complexe de ses propriétés physiques et des processus qui interviennent à l'échelle des particules en suspension. Les facteurs les plus importants sont la fraction volumique de particules ϕ_v , la forme des particules, les interactions entre particules, l'arrangement spatial des particules et la nature de l'écoulement

chargé. D'autres facteurs importants pour certaines suspensions de particules, mais ayant reçu moins d'attention, sont les distributions de taille et de forme des particules et les forces inter-particulaires (par exemple les effets électro-visqueux). Ce dernier facteur est plus pertinent pour les colloïdes et les systèmes aqueux.

La plupart des recherches sont concentrées sur les suspensions de sphères. Cependant, l'anisotropie des particules introduit d'importants effets supplémentaires : l'écoulement local autour d'une particule non-sphérique est différent de celui autour d'une particule sphérique, donc la contribution de la particule à la viscosité de la suspension est différente. Les particules non-sphériques sont orientables et leur contribution à la viscosité de la suspension dépend de leur orientation. Les interactions des particules sont beaucoup influencées par leur forme. En général, pour une même fraction volumique de particules, le degré d'interaction entre particules non-sphériques sera plus grand qu'entre particules sphériques.

En général, on distingue trois régimes de comportement pour les suspensions.

Le régime dilué est le régime pour lequel les interactions hydrodynamiques entre particules sont peu importantes. Pour des suspensions de sphères, on considère que l'on se situe dans ce régime si le comportement de la suspension reste newtonien (pour un fluide environnant newtonien) et que la variation de la viscosité relative en fonction de la fraction volumique de particules est à peu près linéaire. Les valeurs expérimentales de la fraction volumique de particules en dessous de laquelle on est en régime dilué sont de l'ordre de 0,01, ce qui revient à dire que les sphères doivent être distantes de plus de 3,5 fois leur diamètre environ. Pour des particules non-sphériques (avec un axe de symétrie rotationnelle : cylindre, ellipsoïde, . . .), on considère que l'on est en régime dilué pour des distances moyennes entre particules supérieures à la longueur d'une particule, ce qui correspond à une fraction volumique $\phi_v < (d/l)^2$ où d est le diamètre et l la longueur de la particule.

Le régime semi-dilué est le régime pour lequel les interactions hydrodynamiques entre particules sont importantes. Pour des particules sphériques, la fraction volumique influence plus fortement le comportement de la suspension qui reste cependant newtonien. La valeur expérimentale de la fraction volumique de sphères en dessous de laquelle on est en régime semi-dilué est environ 0,25, ce qui revient à dire que les sphères doivent être distantes de plus de 1,5 fois leur diamètre environ. Pour des particules non-sphériques, la distance limite entre particules pour être en régime semi-dilué est comprise entre le diamètre et la longueur d'une particule, ce qui correspond à une fraction volumique $(d/l)^2 < \phi_v < d/l$.

Pour une concentration en particules supérieure à celle du régime semi-dilué, on est en régime concentré. Dans ce cas, les contacts entre particules sont importants. Pour des sphères, l'augmentation de la concentration en particules entraîne l'augmentation de la viscosité apparente ainsi que l'apparition de comportements non-newtoniens tels que la fluidification ou l'existence d'une contrainte seuil.

Le comportement de suspensions de sphères en régime dilué a d'abord été étudié théoriquement par Einstein [76, 77]. Il trouve une solution analytique pour l'hydrodynamique autour d'une sphère isolée qui conduit à :

$$\eta_r = 1 + B_E \phi_v \quad (3.4)$$

où la constante B_E est appelée « coefficient d'Einstein » ou « viscosité intrinsèque » et prend la

valeur 2,5.

Les travaux sur le régime semi-dilué se sont concentrés sur la recherche des coefficients des termes supérieurs de l'équation, négligés par Einstein. On a des relations du type :

$$\eta_r = 1 + B_E \phi_v + B_{E_1} \phi_v^2 + \dots \quad (3.5)$$

avec $B_E = 2,5$ et $7,35 \leq B_{E_1} \leq 14,1$ déduits de considérations sur les interactions entre particules [78].

Cette relation polynomiale ne convient pas bien à la description du régime concentré. La relation qui jusque-là décrit le mieux les données expérimentales en régime concentré prend en compte un nouveau paramètre ϕ_m qui est la fraction volumique maximale. Krieger et Dougherty [79] considèrent la contribution de paquets successifs de suspensions à la fraction totale de particules et à la viscosité de la suspension. Ils obtiennent l'équation suivante :

$$\eta_r = \left(1 - \frac{\phi_v}{\phi_m}\right)^{-B_E \phi_m} \quad (3.6)$$

Cette relation est souvent choisie pour être ajustée aux données expérimentales [80]. Dans ce cas, B_E et ϕ_m sont les paramètres ajustables.

D'autres approches du régime concentré ont été proposées : Frankel et Acrivos [81] supposent dans leur modèle que la viscosité des suspensions concentrées est contrôlée par l'énergie de dissipation dans les petites espaces entre particules. Hoffman [82] suppose, dans son modèle prenant en compte les effets non-newtoniens, qu'à haute concentration, les particules s'organisent en feuillets qui s'écoulent les uns au-dessus des autres.

Des explications de l'apparition d'effets non-newtoniens à forte concentration ont été proposées, prenant en compte les effets du mouvement brownien, de l'inertie, du couplage entre phases solide et liquide et des interactions entre particules [83].

Les particules non-sphériques ayant un axe de symétrie rotationnelle peuvent être caractérisées par leurs rapports d'aspects $\beta = l/d$ où l est la longueur de l'axe de symétrie et d est le diamètre maximal perpendiculaire à l'axe de symétrie. Brenner [84] a montré que l'on pouvait traiter ces particules comme des ellipsoïdes ayant un rapport d'aspect équivalent $\beta_e \propto \beta$, le rapport entre β et β_e devant être déterminé expérimentalement. Comme nous le verrons plus tard (§ 3.1.3), le mouvement d'une particule ellipsoïdale et du fluide qui l'entoure dans un écoulement de cisaillement a été résolu analytiquement par Jeffery [85]. Il en a déduit une équation de la puissance volumique \dot{W}_p due à la présence d'une particule ellipsoïdale dans un fluide en cisaillement. Par ailleurs, la puissance volumique \dot{W}_t qui doit être produite pour cisailer un volume V de matériau est relié à la viscosité apparente η du matériau par [86] :

$$\dot{W}_t = \eta \dot{\gamma}^2 V \quad (3.7)$$

Si le matériau est un élément de fluide dans lequel une particule est en suspension, la puissance volumique totale est la somme de la puissance volumique fournie pour cisailer le volume équivalent de fluide sans particule \dot{W}_f et de la puissance volumique supplémentaire due à la présence de la particule \dot{W}_p . On a alors :

$$\eta = \frac{\dot{W}_f + \dot{W}_p}{\dot{\gamma}^2 V} \quad (3.8)$$

Pour un fluide environnant newtonien, le premier terme du membre de droite est équivalent à la viscosité newtonienne du fluide μ_0 . La viscosité relative de la suspension est donc :

$$\eta_r = 1 + \frac{\dot{W}_p}{\mu_0 \dot{\gamma}^2 V_p} \phi_v \quad (3.9)$$

où V_p est le volume de la particule et $\phi_v = V_p/V$ la fraction volumique de particules. Cette équation à la même forme que l'équation d'Einstein (eq. 3.4) avec $B_E = \dot{W}_p/\mu_0 \dot{\gamma}^2 V_p$.

À partir de l'expression de la puissance volumique trouvée par Jeffery et de l'équation (eq. 3.9), on peut déduire la contribution instantanée de la particule à la viscosité d'une suspension diluée. Quand une fibre est perpendiculaire au plan de cisaillement ($\theta = 0$) [Fig. 3.1], elle « roule » dans l'écoulement avec un mouvement stationnaire et la contribution de la particule à la viscosité est constante. Pour les autres orbites, sa contribution varie avec la position de la fibre et donc avec la déformation. Quand la particule est dans le plan de cisaillement (variations maximales du travail) et parallèle à la direction d'écoulement, la déformation des lignes de courant est minimale et le fluide ne doit fournir que peu de travail supplémentaire pour s'écouler autour de la particule, donc B_E est minimal. Quand la particule est perpendiculaire à la direction d'écoulement (toujours dans le plan de cisaillement), la particule tourne très rapidement, se mouvant quasiment à la vitesse du fluide environnant et, par conséquent, la perturbation des lignes de courant est de nouveau minimale et B_E également. Quand la fibre est orientée selon une direction $\pi/4$, elle présente une large profil à l'écoulement tout en bougeant plus lentement que celui-ci, donc la déformation des lignes de courant est maximale, et B_E également. Comme les fibres passent beaucoup plus de temps alignées dans la direction de l'écoulement, la contribution moyenne en temps à la viscosité est plus proche de la valeur minimale que de la valeur maximale.

L'équation (eq. 3.9) peut être utilisée pour calculer la viscosité d'une suspension de particules avec une distribution d'orientation [80]. En régime dilué, les particules n'interagissant pas, leurs contributions individuelles à la viscosité peuvent être calculées par intégration sur une orbite complète et être moyennées pour obtenir la viscosité de la suspension.

En régime dilué, Jeffery prédit que les particules vont migrer au cours du temps vers l'orientation qui minimise le travail fourni pour faire tourner la particule, c'est-à-dire vers la position perpendiculaire au plan de cisaillement pour une particule allongée. Cette hypothèse a été confirmée expérimentalement par Anczurowski et Mason [87]. En effet, la viscosité pour des grandes déformations est inférieure à celle attendue pour des particules orientées aléatoirement. Le comportement des particules en régime semi-dilué a été considéré expérimentalement par Stover *et al.* [88]. Ils trouvent que la distribution des orbites de particules reste proche de l'aléatoire au cours du temps, ce qui indique que les interactions hydrodynamiques entre particules conduisent à une diffusion rotative des orientations de particules qui empêche la dérive prévue par Jeffery. Ces résultats sont confortés par l'étude numérique de Rahnema *et al.* [89]. Ferec *et al.* [90] ont étudié numériquement le comportement des particules en régime concentré et ont montré que les interactions de contact entre particules entraînent une viscosité plus élevée que celle prédite pour des particules orientées aléatoirement. Les expériences en régime concentré ont montré que la variation de la viscosité est linéaire avec l'augmentation de la concentration uniquement pour les concentrations les plus basses. Ensuite, l'équation d'Einstein (eq. 3.4) n'est plus valable. La relation entre viscosité relative et fraction volumique de particules est également très dépendante du rapport d'aspect des particules : la dépendance de la viscosité à la concentration est plus importante quand le rapport d'aspect augmente pour des particules allongées.

3.1.3 Mouvement d'une particule isolée et forces dues à l'écoulement

En 1922, Jeffery [85] propose des équations décrivant les forces subies par un ellipsoïde isolé dans un fluide newtonien soumis à un écoulement stationnaire \mathbf{u} linéaire loin de sa surface, ainsi que le mouvement de cet ellipsoïde [Fig. 3.1]. Le tenseur gradient de vitesse $\mathbf{\Gamma} = \nabla \mathbf{u}$ de cet écoulement est homogène suffisamment loin de la particule.

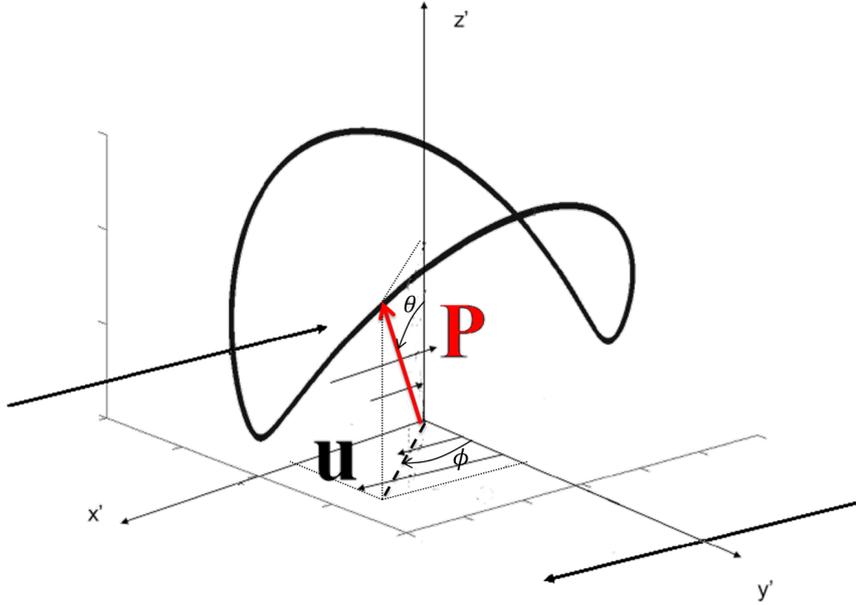


FIGURE 3.1 – Trajectoire de l'extrémité d'un axe \mathbf{P} d'un ellipsoïde de révolution dans un écoulement de cisaillement $u_{x'} = \dot{\gamma}y'$

Les équations du mouvement sont approximées en négligeant les termes d'inertie. Les équations de l'écoulement sont donc réduites aux équations de Stokes et à l'équation de continuité :

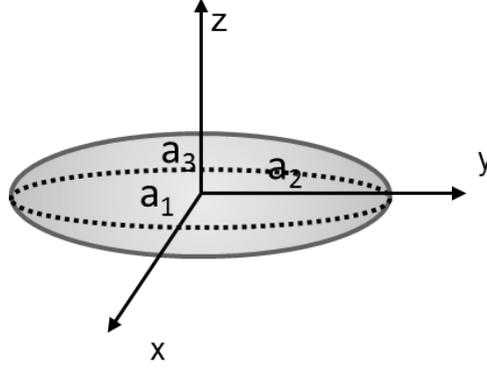
$$\begin{cases} \eta \Delta \mathbf{u} = \nabla p \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

où \mathbf{u} est le champ de vitesse, η la viscosité et p la pression.

Le centre de l'ellipsoïde se déplaçant à la vitesse du fluide est choisi comme référence. Comme on néglige l'effet d'inertie, on fait l'approximation quasi-stationnaire, c'est-à-dire que l'on considère que la vitesse et la pression sont constantes en temps. Jeffery [85] obtient la contrainte sur la surface de l'ellipsoïde, réécrite sous forme tensorielle par Blaser [91] :

$$\boldsymbol{\sigma}_h = -p_0 \mathbf{I} - 4\eta \sum_{j=1}^3 \chi_j \mathcal{A}_j^j \mathbf{I} + \frac{8\eta}{a_1 a_2 a_3} \mathcal{A}^T \quad (3.11)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité, p_0 la constante de pression, a_1, a_2, a_3 les demi-axes de l'ellipsoïde ($a = a_1 > a_2 = a_3 = b$ avec a la demi-longueur et b le rayon dans le cas d'un ellipsoïde de

FIGURE 3.2 – Ellipsoïde d'axes a_1 , a_2 et a_3

révolution) [Fig. 3.2],

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}_k^i = \frac{3\chi_i'' E_i^i - \sum_{l=1}^3 \chi_l'' E_l^l}{6(\chi_1'' \chi_2'' + \chi_1'' \chi_3'' + \chi_2'' \chi_3'')} \quad \text{pour } i = k, \\ \mathcal{A}_k^i = \frac{\chi_i'' E_k^i - a_k^2 \sum_{l=1}^3 \varepsilon^{ikl} \chi_l' (\varepsilon^{ikl} \Omega_k^i + \omega_p^l)}{2(a_k^2 \chi_k + a_i^2 \chi_i) \sum_{l=1}^3 |\varepsilon^{ikl}| \chi_l'} \quad \text{pour } i \neq k, \end{array} \right. \quad (3.12)$$

$\mathbf{E} = 1/2 (\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}^T)$ est le tenseur vitesse de déformation, $\mathbf{\Omega} = 1/2 (\mathbf{\Gamma} - \mathbf{\Gamma}^T)$ est le tenseur de vorticité, ε^{ikl} le symbole de Levi-Civita (tenseur antisymétrique d'ordre 3 pouvant prendre pour valeur -1, 0 ou 1), ω_p la vitesse angulaire de l'ellipsoïde,

$$\chi_i = \int_0^\infty \frac{d\xi}{(a_i^2 + \xi) \sqrt{(a_1^2 + \xi)(a_2^2 + \xi)(a_3^2 + \xi)}}, \quad (3.13)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_i' = \frac{\sum_{k,l=1}^3 \varepsilon^{ikl} (\chi_l - \chi_k)}{3 \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon^{ikl} (a_k^2 - a_l^2)}, \\ \chi_i'' = \frac{\sum_{k,l=1}^3 \varepsilon^{ikl} (a_k^2 \chi_k - a_l^2 \chi_l)}{3 \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon^{ikl} (a_k^2 - a_l^2)}. \end{array} \right. \quad (3.14)$$

On note que le champ de contrainte (eq. 3.11) est homogène.

Si la particule n'est soumise à aucune force, exceptées celles exercées par le fluide sur sa surface, le couple résultant sur la particule est alors nul à chaque instant. Jeffery en déduit les équations décrivant la vitesse angulaire de l'ellipsoïde $\boldsymbol{\omega}_p = (\omega_p^1, \omega_p^2, \omega_p^3)$ [91] :

$$\begin{cases} \omega_p^1 = \Omega_3^2 \frac{a_2^2 - a_3^2}{a_2^2 + a_3^2} E_3^2 \\ \omega_p^2 = \Omega_1^3 \frac{a_3^2 - a_1^2}{a_3^2 + a_1^2} E_1^3 \\ \omega_p^3 = \Omega_2^1 \frac{a_1^2 - a_2^2}{a_1^2 + a_2^2} E_2^1 \end{cases} \quad (3.15)$$

dans le référentiel attaché à la particule. Dans le référentiel se déplaçant en translation avec la fibre, le tenseur gradient de vitesse s'écrit $\boldsymbol{\Gamma}'$ et $\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{R}\boldsymbol{\Gamma}'\mathbf{R}^T$ avec \mathbf{R} la matrice de rotation.

Si l'on décrit la position de l'ellipsoïde par les angles d'Euler [Fig. 3.3], on obtient l'évolution de ces angles au cours du temps [91] :

$$\begin{cases} \dot{\theta}_e = \omega_p^1 \cos \psi_e - \omega_p^2 \sin \psi_e \\ \dot{\phi}_e = \frac{\omega_p^1 \sin \psi_e + \omega_p^2 \cos \psi_e}{\sin \theta_e} \\ \dot{\psi}_e = \omega_p^3 - \dot{\phi}_e \cos \theta_e \end{cases} \quad (3.16)$$

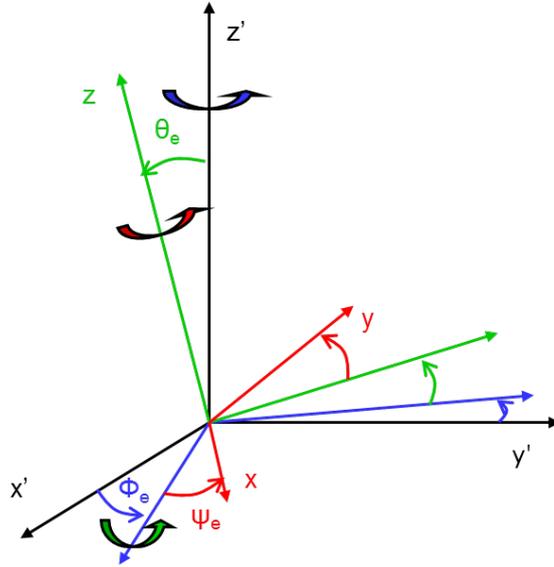


FIGURE 3.3 – Description de l'orientation d'une fibre par les angles d'Euler. Le référentiel associé à la fibre est $\{xyz\}$ et celui se déplaçant en translation avec la fibre est $\{x'y'z'\}$

Dans le cas d'un ellipsoïde de révolution, on peut aussi écrire les équations d'Euler de manière simplifiée en ne suivant que la direction d'un axe de l'ellipsoïde :

$$\dot{\mathbf{P}} = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{P} + \xi (\mathbf{E} \cdot \mathbf{P} - (\mathbf{E} : \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}) \mathbf{P}) \quad (3.17)$$

avec $\xi = \frac{\beta^2 - 1}{\beta^2 + 1}$ et $\beta = \frac{a}{b}$ le rapport d'aspect où a est le demi grand axe et b le demi petit axe.

La période de rotation d'un ellipsoïde de révolution dans un écoulement de cisaillement simple est :

$$T = \frac{2\pi (a^2 + b^2)}{ab\dot{\gamma}} \quad (3.18)$$

avec $\dot{\gamma}$ le taux de cisaillement.

L'extrémité de l'ellipsoïde décrit une orbite invariante dans le temps [Fig. 3.1], dont la position dépend de l'angle θ initial entre la fibre et le plan de cisaillement dans le référentiel lié à la fibre [Fig. 3.4]. Pour un angle initial $\theta = 0$, la fibre reste perpendiculaire au plan et « roule » dans l'écoulement. Pour un angle initial $\theta = \pi/2$, la fibre tourne dans le plan de cisaillement. Dans les cas intermédiaires, la fibre décrit un mouvement qui ressemble à celui d'une double rame de kayak, avec une rotation très lente quand elle est orientée dans la direction de l'écoulement ($\phi = \pi/2$) et très rapide quand elle est orientée dans la direction perpendiculaire à l'écoulement ($\phi = 0$).

En 1938, Burgers [92] adapte ces équations pour des particules cylindriques. Pour cela, il fait une analyse des effets d'un ellipsoïde allongé et d'un cylindre sur un écoulement en cisaillement et montre que, pour deux particules de même longueur, la perturbation causée par un cylindre de rapport d'aspect β sera produite par un ellipsoïde de rapport d'aspect β_e . Il trouve un rapport d'aspect équivalent $\beta_e = 0,74\beta$ (avec $\beta = a/b$ et a et b la demi-longueur et le rayon du cylindre cette fois-ci) à remplacer dans les équations de mouvement de Jeffery (eq. 3.17) pour des fibres cylindriques. Il obtient également la force induite par le cisaillement intégrée sur une demi-fibre cylindrique :

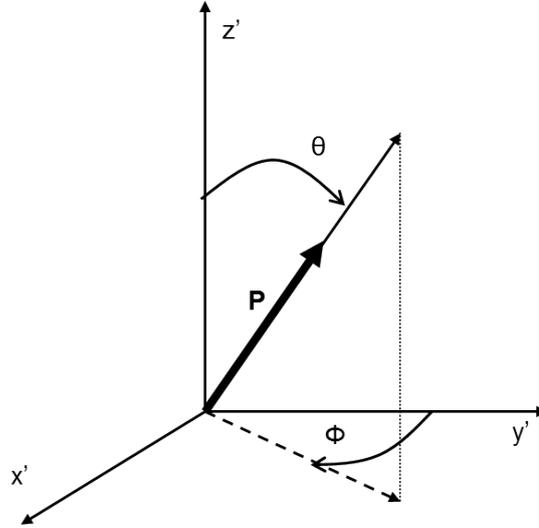
$$F_B = \frac{\pi\dot{\gamma}\eta a^2 M}{\ln 2\beta - 1,75} \quad (3.19)$$

avec $M = \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi$ un facteur d'orientation dans le référentiel polaire lié à la fibre [Fig. 3.4].

Sous une forme adimensionnelle, la contrainte relative intégrée sur une demi-fibre cylindrique peut s'écrire :

$$\frac{\sigma_B}{\eta\dot{\gamma}} = M \frac{\beta^2}{\ln 2\beta - 1,75} \quad (3.20)$$

En 1951, Trevelyan et Mason [93] mesurent la période de rotation de cylindres dans un fluide visqueux (sirop de maïs blanc) soumis à un écoulement de cisaillement et la comparent à la formule de la période donnée par Jeffery (eq. 3.18). Ils trouvent ainsi des rapports d'aspect équivalents compris entre $0,57\beta$ et $0,72\beta$, ce qui correspond à l'ordre de grandeur prédit par Burgers. Ils vérifient également que les orbites observées correspondent bien à celle prédites par Jeffery, une fois le rapport d'aspect des cylindres remplacé par leurs rapports d'aspect équivalents dans les équations.

FIGURE 3.4 – Description de l'orientation \mathbf{P} d'une fibre en coordonnées polaires

3.1.4 Simulation de l'orientation des fibres en régime non-dilué

Dans les procédés réels de mise en forme des polymères chargés, les fibres ne sont pas isolées. Les écoulements sont en régime concentré ($\phi_v \beta > 1$) et les interactions entre les fibres ne sont pas négligeables si l'on veut connaître précisément leurs orientations et la rhéologie de la suspension. Folgar et Tucker [94] introduisent en 1984 un terme de diffusion décrivant les interactions fibre-fibre dans l'équation de rotation de Jeffery (eq. 3.17). Pour cela, ils décrivent l'orientation des fibres par une fonction distribution d'orientation ψ , définie telle que la probabilité de trouver une fibre orientée entre \mathbf{P}_1 et $\mathbf{P}_1 + d\mathbf{P}$ soit :

$$P(\mathbf{P}_1 \leq \mathbf{P} \leq \mathbf{P}_1 + d\mathbf{P}) = \psi(\mathbf{P}_1) d\mathbf{P} \quad (3.21)$$

L'intégrale sur la sphère unité des orientations est :

$$\oint d\mathbf{P} = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.22)$$

ψ est périodique :

$$\psi(\mathbf{P}) = \psi(-\mathbf{P}) \quad (3.23)$$

normalisée :

$$\oint \psi(\mathbf{P}) d\mathbf{P} = 1 \quad (3.24)$$

et la condition de continuité donne :

$$\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \cdot (\psi \dot{\mathbf{P}}) \quad (3.25)$$

où $\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}}$ est l'opérateur gradient sur la surface unité.

Ils supposent ensuite que chaque interaction entre deux fibres produit un changement d'orientation de chacune de ces fibres. Ces réorientations sont supposées être indépendantes et aléatoirement distribuées autour d'une valeur moyenne de zéro. Dans une suspension concentrée, il est supposé qu'il y a interaction chaque fois qu'une fibre passe à une distance $2a$ d'une autre fibre. Il peut être montré que la fréquence d'interaction est proportionnelle au taux de déformation. En s'inspirant de la diffusion par réorientation due au mouvement brownien pour des suspensions de petites particules, ils introduisent un terme de diffusion, traduisant les interactions entre fibres, dans les équations de Jeffery (eq. 3.17) :

$$\dot{\mathbf{P}} = (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{P}) + \xi (\mathbf{E} \cdot \mathbf{P} - (\mathbf{E} : \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}) \mathbf{P}) - D_r \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{P}} \quad (3.26)$$

avec $D_r = C_I \dot{\gamma}$ la diffusion en rotation, C_I le coefficient de diffusion déterminé expérimentalement et $\dot{\gamma} = (2\mathbf{E} : \mathbf{E})^{1/2}$.

Dans le cas de fibres longues ($\beta > 10$), on peut considérer que $\xi = \frac{\beta^2 - 1}{\beta^2 + 1}$ tend vers 1.

En introduisant (eq. 3.26) dans l'équation de continuité (eq. 3.25), ils obtiennent l'équation d'évolution de la fonction de distribution d'orientation dans le plan de cisaillement pour une fibre longue :

$$\frac{d\psi}{dt} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \left(\psi (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{P}) + \xi \psi (\mathbf{E} \cdot \mathbf{P} - (\mathbf{E} : \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}) \mathbf{P}) - D_r \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{P}} \right) \quad (3.27)$$

En 1987, Advani et Tucker [95] proposent une nouvelle description de l'orientation des fibres dans un écoulement. Comme la description de l'orientation des fibres par la fonction de distribution d'orientation est coûteuse en temps de calcul (une valeur pour chaque orientation dans chaque position et pour chaque temps de l'écoulement), ils choisissent d'utiliser des tenseurs d'orientation qui représentent les différents moments de la distribution ψ . Le tenseur de second ordre s'écrit :

$$\mathbf{A} = \oint \psi \mathbf{P} \otimes \mathbf{P} d\mathbf{P} \quad (3.28)$$

avec $\oint \psi d\mathbf{P}$ la moyenne sur toutes les directions possibles de \mathbf{P} , pondérée par la fonction distribution d'orientation ψ .

Ce tenseur est symétrique ($A_{ij} = A_{ji}$) et sa trace vaut 1 : $A_{11} + A_{22} + A_{33} = 1$.

Le tenseur du quatrième ordre s'écrit :

$$\mathbb{A} = \oint \psi \mathbf{P} \otimes \mathbf{P} \otimes \mathbf{P} \otimes \mathbf{P} d\mathbf{P} \quad (3.29)$$

L'équation d'évolution de \mathbf{A} est :

$$\dot{\mathbf{A}} = (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\Omega}) + \xi (\mathbf{E} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{E} - 2\mathbb{A} : \mathbf{E}) + 2D_r (\mathbf{I} - 3\mathbf{A}) \quad (3.30)$$

Si l'on suppose que la diffusion rotative D_r vaut $C_I \dot{\gamma}$, cette équation est équivalente à l'équation de Folgar-Tucker (eq. 3.27).

Pour résoudre cette équation, il faut une relation de fermeture. La plus courante car la plus simple à utiliser est la relation quadratique :

$$\mathbb{A} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{A} \quad (3.31)$$

Advani et Tucker [65] ont choisi une relation de fermeture hybride (quadratique et linéaire) pour approximer \mathbb{A}_{ijkl} :

$$\mathbb{A}_{ijkl} = (1 - f_A) \left[-\frac{1}{35} (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \frac{1}{7} (A_{ij}\delta_{kl} + A_{ik}\delta_{jl} + A_{il}\delta_{jk} + A_{kl}\delta_{ij} + A_{jl}\delta_{ik} + A_{jk}\delta_{il}) \right] + f_A A_{ij} A_{kl} \quad (3.32)$$

avec $f_A = 2A_{ij}A_{ji} - 1$ une mesure scalaire de l'orientation (0 pour une orientation aléatoire et 1 pour des fibres parfaitement alignées), et δ_{ij} des tenseurs unité de dimension 2.

D'autres améliorations de la description de Folgar et Tucker de l'orientation des fibres ont été proposées plus récemment [96]. Phelps et Tucker [97] remplacent le coefficient de diffusion rotative D_r par un tenseur anisotrope qui permet de rendre compte de l'influence de l'orientation des fibres sur les interactions inter-fibres et donc sur la réorientation.

Une autre possibilité d'approche pour la description de l'orientation des fibres est de partir d'une description des interactions entre fibres, comme l'ont fait Dinh et Armstrong [98]. Ils parviennent ainsi à une équation d'état pour la suspension de fibre. Récemment, Férec *et al.* [90] ont repris la méthode de Dinh et Armstrong et l'ont améliorée, en prenant eux aussi en compte l'anisotropie de la diffusion rotative dans le calcul de l'orientation.

L'orientation des fibres dans la pièce finale influence ses propriétés mécaniques. En effet, le matériau composite est plus rigide et résistant dans la direction de plus grande orientation des fibres, et plus flexible et fragile dans la direction de moindre orientation. De plus, l'orientation des fibres a une influence sur les phénomènes de retrait et de gauchissement durant le procédé de moulage. Par conséquent, beaucoup de simulations de l'orientation de fibres ont été effectuées pour les procédés de moulage par injection [66, 67, 69, 71, 74, 75] et de moulage par compression [65, 68, 73]. Ces simulations sont en général couplées avec des calculs d'écoulements effectués suivant différentes méthodes numériques. La plupart de ces calculs d'orientation utilisent, et parfois tentent d'améliorer, le modèle de Folgar-Tucker et la description d'Advani et Tucker.

3.1.5 Théorie de la casse par flambement

En 1959, Forgacs et Mason [99] proposent une explication du phénomène de casse de fibres rigides dans les écoulements visqueux en cisaillement, en supposant que les forces d'écoulement induisent le flambage et par conséquent la casse des fibres en rotation lorsque celles-ci sont orientées favorablement [Fig. 3.5]. Plusieurs études expérimentales et théoriques ont depuis renforcé cette hypothèse. Czarnecki et White [100] étudient expérimentalement et théoriquement la casse de fibres d'aramide, de verre et de cellulose dans du polystyrène en extrusion. Ils trouvent des longueurs finales pour les fibres de verre et des longueurs entre « craquelures » pour les fibres d'aramide correspondant à une longueur minimale en dessous de laquelle les fibres ne peuvent pas flamber. Ils en déduisent un modèle de casse basé sur la théorie de Forgacs et Mason. Salinas et Pittman [101] observent le flambement et la casse de fibres de verre dans du sirop de glucose en écoulement de Couette et mesurent le rayon de courbure avant casse. Ils obtiennent des résultats en adéquation avec la théorie de Forgacs et Mason. Von Turkovich et Erwin [102] étudient la

casse de fibres de verre dans du polyéthylène haute densité en extrusion et constatent que les contraintes sont suffisantes dans la zone de convoyage fondu pour casser les fibres. Ils remarquent également que les longueurs finales sont les mêmes en régime dilué qu'en régime concentré et en déduisent que le mécanisme de casse par flambement d'une fibre isolée suffit à décrire la casse de fibre, même en régime concentré. DeTeresa [103] compare une version corrigée des calculs de Forgacs et Mason avec les expérimentations qu'il trouve dans la littérature, soit celles de Forgacs et Mason (fibres de rayonne, dacron et nylon dans un écoulement de Couette avec du sirop de maïs ou de l'huile de ricin), de Czarnecki et White et de Salinas et Pittman. Il trouve une bonne adéquation entre sa théorie (dérivée de celle de Forgacs et Mason) et l'expérience, sauf dans le cas des expériences de Salinas et Pittman. Enfin, Hernandez *et al.* [104] effectuent une simulation par éléments de frontière (BEM) de la déformation d'un fluide visqueux en cisaillement avec une fibre en suspension et observent l'importante contrainte en compression s'exerçant sur une fibre orientée à -45° dans le plan de l'écoulement, ce qui renforce l'hypothèse de Forgacs et Mason [Fig. 3.5].

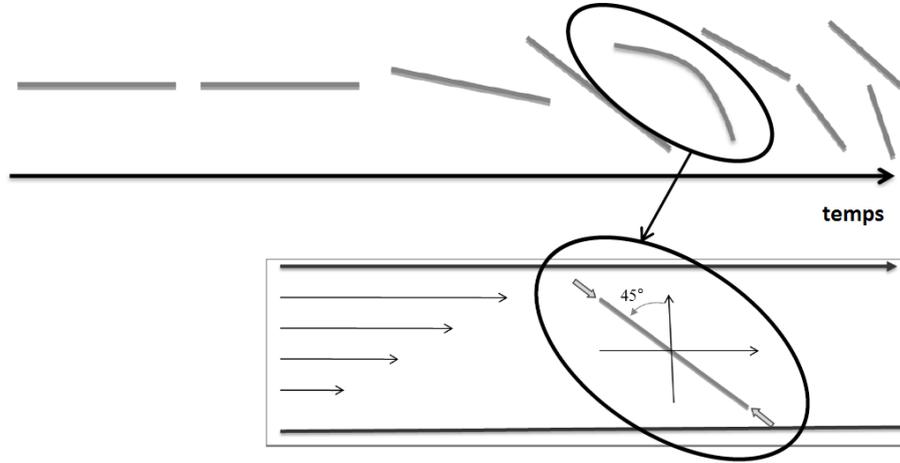


FIGURE 3.5 – Mécanisme de casse de fibre par flambement en rotation dans un écoulement en cisaillement

Forgacs et Mason supposent que les forces $f_f(x)$ dues à l'écoulement sont distribuées linéairement le long de la fibre. L'expression des forces locales est donc :

$$f_f(x) = \alpha x \quad (3.33)$$

En partant de cette hypothèse et de l'expression de la force compressive intégrée sur une demi-fibre cylindrique donnée par Burgers (eq. 3.19), Forgacs et Mason cherchent l'expression de la force résultante sur la fibre en x , afin de pouvoir faire un nouveau calcul de flambement. Les calculs ci-dessous sont plus explicités que dans la publication afin de faire apparaître plus clairement les différences avec la correction de DeTeresa qui vient ensuite.

On écrit la force compressive en x (en partant de l'extrémité de la fibre) :

$$F_f(x) = - \int_a^x f_f(\zeta) d\zeta = - \int_a^x \alpha \zeta d\zeta \quad (3.34)$$

Ce qui donne :

$$F_f(0) = \frac{\alpha}{2}a^2 \quad (3.35)$$

Or, d'après Burgers (eq. 3.19) :

$$F_f(0) = F_B = \frac{M\pi\eta\dot{\gamma}a^2}{\ln(2\beta) - 1,75} \quad (3.36)$$

Ainsi, on trouve $\alpha = \frac{2F_B}{a^2}$, ainsi que :

$$f_f(x) = \frac{M\pi\eta\dot{\gamma}x}{\ln(2\beta) - 1,75} = \frac{2F_B}{a^2}x \quad (3.37)$$

La force résultante en x est donc :

$$F_f(x) = \frac{M\pi\eta\dot{\gamma}}{(\ln(2\beta) - 1,75)} (a^2 - x^2) = F_B \frac{a^2 - x^2}{a^2} \quad (3.38)$$

Forgacs et Mason remplacent ensuite directement par cette expression de la force résultante en x (eq. 3.38) les forces ponctuelles F_p appliquées aux extrémités d'une poutre dans le calcul du flambement d'Euler (détaillé § 3.2.2, [105], [Fig. 3.10]), ce qui constitue une erreur d'après De Teresa [103] :

$$EIy'' \approx F_p y \quad (3.39)$$

devient :

$$EIy'' \approx F_f(x) y \quad (3.40)$$

avec y la déflexion de la fibre en x , E son module d'Young, I son moment d'inertie ($I = \frac{\pi b^4}{4}$ pour un cylindre). Ils obtiennent ainsi :

$$y'' + \omega^2 (a^2 - x^2) y = 0 \quad (3.41)$$

avec $\omega^2 = -\frac{4}{a^2 b^2} \frac{\sigma_B}{E}$ où σ_B est définie par l'expression (eq. 3.20).

Pour résoudre cette équation, ils effectuent un changement de variable : $x = z/\sqrt{\omega}$. Ils obtiennent ainsi :

$$\frac{d^2 y}{dz^2} + (\omega a^2 - z^2) y = 0 \quad (3.42)$$

En posant ensuite $y = \xi \exp(-z^2/2)$, ils trouvent :

$$\frac{d^2 \xi}{dz^2} - 2z \frac{d\xi}{dz} + (\omega a^2 - 1) \xi = 0 \quad (3.43)$$

Cette équation différentielle a pour solutions les polynômes d'Hermite si ωa^2 est de la forme $2p + 1$. Le premier mode de flambement correspond à $p = 0$. On a donc $\omega a^2 = 1$ et la contrainte critique relative nécessaire pour atteindre le premier mode de flambement est :

$$\frac{\sigma_m^{FM}}{E} = -\left(\frac{1}{2\beta}\right)^2 \quad (3.44)$$

La solution de l'équation (eq. 3.41) est $y = \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$.

En 1993, DeTeresa [103] affirme qu'il y a une erreur dans le calcul de Forgacs et Mason. En effet, ceux-ci utilisent l'approche d'Euler pour déterminer les conditions critiques conduisant au flambement élastique d'un cylindre soumis à une distribution de forces. Cette procédure nécessite normalement de faire le bilan des moments en tout point de la fibre en flambement (eq. 3.45). Cependant, ils utilisent directement l'équation différentielle finale (eq. 3.39) sans vérifier que le bilan des moments reste le même que pour des forces ponctuelles. Les calculs ci-dessous sont de nouveau plus détaillés que dans la publication afin de bien montrer la différence avec les calculs de Forgacs et Mason présentés plus haut.

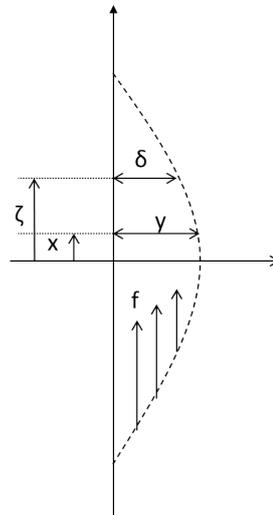


FIGURE 3.6 – Schéma d'une fibre en flexion soumise à des forces locales

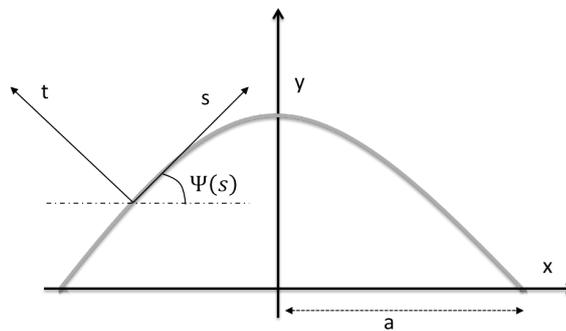
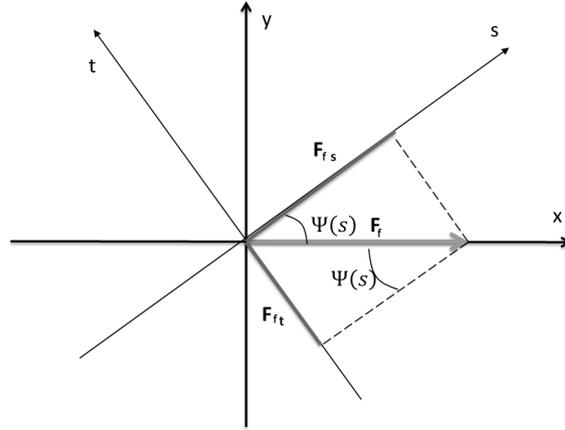


FIGURE 3.7 – Fibre en flexion

On fait le bilan des moments en configuration non déformée :

$$M'_o + T_r + m = 0 \quad (3.45)$$

FIGURE 3.8 – Composantes de la force \mathbf{F}_f sur les axes t et s

avec M_o le moment de flexion, T_r l'effort tranchant et m le moment fléchissant local.

On voit que, comme des forces locales $f_f(x)$ sont appliquées le long de la fibre, le moment fléchissant local m est non nul, contrairement au cas du flambement d'Euler où il n'y a pas de forces locales le long de la fibre puisque les forces sont ponctuelles et appliquées aux extrémités. On a donc ici :

$$m(x, \zeta) = (y(x) - \delta(\zeta)) f_f(\zeta) \quad (3.46)$$

avec $\delta(\zeta)$ la déflexion au point ζ où la force locale f_f est appliquée [Fig. 3.6].

L'effort tranchant exercé par la partie droite (à partir de s [Fig. 3.7]) sur la partie gauche de la fibre est égal à la résultante de la force F_{ft} appliquée dans la direction perpendiculaire à la fibre [Fig. 3.8]. Dans le cas des forces linéairement réparties, cette force dépend de x (ou s) :

$$T_r(s) = F_{ft}(s) = -F_f(s) \sin(\Psi(s)) \quad (3.47)$$

On voit géométriquement [Fig. 3.7] que :

$$\sin(\Psi(s)) = y'(x) \quad (3.48)$$

On a donc :

$$T_r(x) = -F_f(x) y'(x) \quad (3.49)$$

D'après DeTeresa [103], la force résultante en x ($F_f(x)$) n'entre pas en compte dans le calcul du moment de flexion M_o en x puisque cette force passe par le point où l'on calcule le moment. On ne prend donc pas en compte l'effort tranchant T_r dans le calcul du moment M_o . D'après le bilan des moments (eq. 3.45), on a alors :

$$M_o' = -m \quad (3.50)$$

Donc, d'après l'équation du moment ponctuel m (eq. 3.46), on a :

$$M_o = \int_a^x (-(y(x) - \delta(\zeta)) f_f(\zeta) d\zeta) \quad (3.51)$$

Si l'on remplace (eq. 3.37) dans (eq. 3.51), on retrouve finalement l'expression du moment de flexion donnée par DeTeresa [103] :

$$M_o = -\frac{2F_B}{a^2} \int_x^a y(\zeta) \zeta d\zeta + \frac{F_B}{a^2} (a^2 - x^2) y \quad (3.52)$$

Dans le cas où l'on fait l'approximation des forces appliquées aux extrémités de la fibre (Euler), on peut calculer le flambement pour différents domaines de déformation. Cependant, l'expression du moment de flexion étant ici plus compliquée, DeTeresa n'a calculé que le seuil de flambement.

Pour les petites déformations, la formule du moment de flexion dû aux forces s'écrit :

$$M_o = \frac{EI}{R} \approx EIy'' \quad (3.53)$$

où R est le rayon de courbure de la fibre.

En dérivant, on obtient :

$$M'_o = EIy''' \quad (3.54)$$

En dérivant (eq. 3.52) et en le remplaçant dans (eq. 3.54), on trouve une nouvelle équation différentielle décrivant la déformation de la fibre :

$$y''' + \omega^2 (a^2 - x^2) y' = 0 \quad (3.55)$$

avec $\omega^2 = -\frac{4}{a^2 b^2} \frac{\sigma_B}{E}$.

DeTeresa utilise la méthode de Timoshenko et Gere [106] pour résoudre numériquement l'équation différentielle. Les solutions de l'équation (eq. 3.55) sont les séries trigonométriques : $y = \sum_p a_p \sin\left(\frac{p\pi(x+a)}{2a}\right)$. Il trouve également la contrainte relative critique avant flambement :

$$\frac{\sigma_m^{DT}}{E} = -\frac{1,28}{\beta^2} \quad (3.56)$$

Cette contrainte est environ cinq fois plus grande que la contrainte trouvée par Forgacs et Mason (eq. 3.44).

À partir de de l'expression de Burgers (eq. 3.19), Forgacs et Mason constatent que la force maximale de compression (en valeur absolue car négative) subie par la fibre arrive pour une orientation $\phi = -45^\circ$ dans le plan de cisaillement ($\theta = 90^\circ$). Ils partent donc du principe que les fibres cassent dans cette orientation particulière et ils remplacent dans tous leurs calculs le facteur d'orientation M par sa valeur dans cette orientation, c'est-à-dire $-1/2$. DeTeresa fait de même dans ses calculs. Ils trouvent au final des valeurs limites de contrainte de cisaillement avant casse :

$$(\eta\dot{\gamma})_{crit} \cong \frac{E(\ln(2\beta) - 1,75)}{2\beta^4} \quad (3.57)$$

pour Forgacs et Mason et :

$$(\eta\dot{\gamma})_{crit} \cong \frac{2,56E (\ln(2\beta) - 1,75)}{\beta^4} \quad (3.58)$$

pour DeTeresa.

3.1.6 Prédiction de la casse de fibre

En 2010, Tucker *et al.* [36] proposent un modèle quantitatif de prédiction de l'évolution de la distribution des longueurs de fibres rigides dans un écoulement, basé sur l'hypothèse de la casse en flambement de Forgacs et Mason [99]. Pour cela, ils discrétisent la distribution des longueurs de fibre en n longueurs incrémentées de Δl . Ils écrivent ensuite l'équation de conservation :

$$\frac{dN_i}{dt} = -\tau_i N_i + \sum_k R_{ik} N_k \quad (3.59)$$

où N_i est le nombre de fibres de longueur l_i , τ_i est le taux de casse des fibres de longueur l_i et R_{ik} est le taux de génération de fibres « enfants » de longueur l_i à partir de « parents » de longueur l_k .

En supposant qu'un parent donne deux enfants en cassant, il faut que $\sum_j R_{ji} = 2\tau_i$. Comme il n'y a pas d'apport ou de perte de fibre dans l'écoulement calculé, on a également :

$$\frac{d\left(\sum N_i l_i\right)}{dt} = 0 \quad (3.60)$$

Tucker *et al.* utilisent ensuite le modèle de Dinh-Armstrong [98] pour décrire l'effet des forces hydrodynamiques dues aux fibres sur la viscosité en volume, et calculent ainsi la force de compression au centre d'une fibre de longueur l_i orientée dans une direction \mathbf{P} :

$$F_i(\mathbf{P}) = -\frac{\zeta_t \eta_s l_i^2}{8} (-\mathbf{E} : \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}) \quad (3.61)$$

avec ζ_t un coefficient de traînée sans dimension et η_s la viscosité de la suspension déterminée expérimentalement.

Cette valeur est comparée à la force appliquée aux extrémités d'une fibre nécessaire pour la faire flamber, telle que calculée par la méthode d'Euler. Cette force est celle qui permet d'atteindre le premier mode de flambement. Elle est calculée à partir de l'équation (eq. 3.39). On a, pour une fibre cylindrique :

$$F_i^{crit} = -\left(\frac{\pi}{2a_i}\right)^2 EI = -\frac{\pi^3 E d^4}{64l_i^2} \quad (3.62)$$

avec d le diamètre, supposé égal pour toutes les fibres.

La fibre flambe si $F_i \geq F_i^{crit}$, c'est-à-dire si :

$$\frac{F_i(\mathbf{P})}{F_i^{crit}} = \hat{\gamma} \left(-2\hat{\mathbf{E}} : \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}\right) \geq 1 \quad (3.63)$$

avec $\hat{\mathbf{E}} \equiv \mathbf{E}/\dot{\gamma}$ le tenseur taux de déformation sans dimension et $\hat{\gamma} \equiv \frac{4\zeta_t \eta_s \dot{\gamma} \beta_i^4}{\pi^3 E}$ le taux de cisaillement sans dimension.

Comme $(-2\hat{\mathbf{E}} : \mathbf{P} \otimes \mathbf{P})$ est maximal et égal à 1 en $\phi = -45^\circ$, il faut obligatoirement que $\hat{\gamma} \geq 1$ pour que la fibre flambe et donc casse. Tucker *et al.* supposent ensuite que le taux de casse est proportionnel au taux de cisaillement et à la proportion de fibres pour lesquelles $\hat{\gamma} \geq 1$. Ils simulent donc l'orientation d'un échantillon de fibres dans un écoulement en cisaillement à partir d'une version discrète du modèle de Folgar-Tucker [94] et évaluent la proportion de fibres susceptibles de flamber. Ils approximent ensuite ces données par une expression du taux de casse :

$$\tau_i = C_B \hat{\gamma} [1 - \exp(1 - \hat{\gamma})] \quad (3.64)$$

avec C_B un coefficient de proportionnalité appelé coefficient de casse.

Ils supposent que le taux de génération de fibres « enfants » suit une loi de probabilité normale \mathcal{N} pour la variable l_i , avec une moyenne en $\nu = l_k/2$ et une déviation standard $\sigma_N = Sl_k$:

$$R_{ik} = \alpha_k \mathcal{N}(\nu, \sigma_N(l_i)) \quad (3.65)$$

où α_k est choisi de manière à respecter la conservation de la longueur totale ($\sum N_i l_i$).

Au final, ils ont donc trois paramètres : C_B , ζ_t et S .

Le calcul est effectué en post-traitement d'une simulation de moulage par injection et la conservation de la longueur totale doit être calculée en chaque point. Comme la longueur totale est fixe pour le volume, l'équation (eq. 3.59) s'écrit :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla N_i = -\tau_i N_i + \sum_k R_{ik} N_k \quad (3.66)$$

Cette simulation du procédé fournit également le taux de cisaillement nécessaire au calcul. La distribution des longueurs de fibre est mise à jour par une intégration explicite en temps. Tucker *et al.* comparent ces résultats à une expérience d'injection de polypropylène chargé à 40 % en masse de fibres de verre courtes et trouvent des paramètres ajustés C_B , ζ et S de grandeurs raisonnables.

Avant d'être moulés, les fibres et le polymère sont mélangés. Un enjeu important est donc de contrôler la longueur des fibres dans les procédés de mélange afin d'ensuite mouler des composites contenant assez de longues fibres pour obtenir une bonne distribution finale de longueurs. En 2005, Shon *et al.* [61] développent un modèle empirique décrivant l'évolution de la longueur moyenne des fibres dans différents procédés continus de mélange, incluant l'extrusion bivis et le malaxeur Buss :

$$\frac{dL}{dt} = -k_f (L - L_\infty) \approx -k_f L \quad (3.67)$$

avec k_f la constante de taux de casse et L_∞ la longueur de fibre en dessous de laquelle il n'y a plus de flambement. Ce calcul ne fournit pas d'information sur la distribution de longueurs de fibre, bien que la présence de quelques longues fibres puisse changer de manière importante les propriétés finales du matériau.

Dans notre étude, nous proposons une méthode simple de simulation de l'évolution de la distribution de longueur de fibres rigides au cours du mélange par extrusion bivis. Cette méthode est basée sur la conservation de la masse des fibres, comme la méthode proposée par Tucker en

2010 [36], et utilise les résultats de calcul des taux de cisaillement moyen, des viscosités et des temps de séjour par section calculés par le logiciel de simulation du procédé d'extrusion bivis Ludovic[®]. La simulation peut être effectuée très rapidement sur un ordinateur individuel et peut être adaptée à un autre procédé si l'on dispose des conditions de l'écoulement. De plus, contrairement aux modèles existants, notre modèle ne nécessite pas de données phénoménologiques en entrée. Nous allons dans un premier temps présenter la théorie qui supporte cette méthode de simulation de la casse de fibre, puis nous allons détailler les hypothèses et les équations utilisées par le logiciel Ludovic[®] pour simuler les grandeurs moyennes dans l'écoulement d'un polymère dans une extrudeuse bivis. Ensuite, nous détaillerons la méthode et les hypothèses mises en place pour simuler la casse de fibre, puis nous comparerons des résultats de simulations à des distributions de longueur de fibre mesurées sur des échantillons prélevés sur une extrudeuse bivis de laboratoire [107].

3.2 Modèles théoriques de flambement et de casse d'une fibre soumise à une contrainte de cisaillement

3.2.1 Bases théoriques

Notre première hypothèse est de supposer que l'écoulement dans lequel nous cherchons à simuler la casse de fibre, c'est-à-dire un écoulement dans une extrudeuse bivis, est majoritairement un écoulement de cisaillement. On considère également que les fibres sont petites devant les dimensions de l'écoulement, ce qui implique que l'on néglige le rôle des parois et des vis dans la casse de fibre. Notre modèle est basé sur l'hypothèse que la casse de fibre est uniquement due au flambement, comme décrit par Forgacs et Mason [99]. Selon cette théorie, une fibre rigide en rotation dans un écoulement en cisaillement peut casser si elle est orientée de manière à subir une force compressive. Au-delà d'une force critique, qui dépend des propriétés mécaniques de la fibre et de sa longueur, la fibre flambe et par conséquent casse [Fig. 3.5].

Le phénomène de casse apparaît à cause de l'importante contrainte en traction σ_s appliquée sur la surface extérieure de la fibre quand celle-ci fléchit [Fig. 3.9].

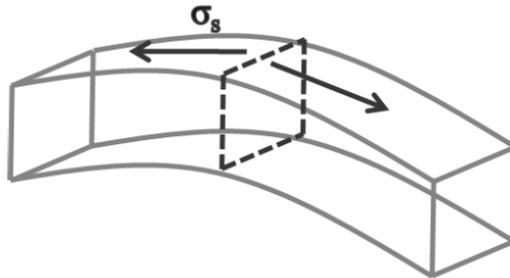


FIGURE 3.9 – Contrainte de traction sur la surface extérieure d'une fibre de section carrée en flexion

Cette contrainte dépend du rayon b de la fibre, de son module d'Young E et du rayon de courbure R :

$$\sigma_s(x) = -\frac{Eb}{R(x)} \quad (3.68)$$

Quand la contrainte σ_s sur la surface atteint la valeur locale de résistance à la traction de la fibre σ_c , celle-ci casse. Comme le rayon de courbure est lié à la déformation de la fibre, le phénomène de casse dépend directement de cette déformation. Nous supposons dans cette approche que, quand il y a flambage, la fibre casse systématiquement car la contrainte critique sera toujours atteinte en surface. Nous verrons plus tard que cette hypothèse est vérifiée pour notre domaine d'application (§ 3.2.2).

Le principe théorique du calcul de flambement d'une fibre dans un écoulement de cisaillement est le suivant. Pour déterminer quand le flambement (et donc la casse) apparaît, nous devons connaître les forces appliquées sur la fibre et, pour calculer ces forces, nous devons connaître l'orientation de cette fibre. Pour cela, on calcule l'orientation \mathbf{P} d'une fibre en utilisant l'équation de Jeffery [85] (eq. 3.17) qui décrit le mouvement d'un ellipsoïde de révolution isolé dans un écoulement de cisaillement [Fig. 3.1]. Comme les fibres de verres sont des cylindres, on remplace

le rapport d'aspect β de l'ellipsoïde par un rapport d'aspect équivalent $\beta_e = 0,74\beta$, théoriquement déterminé par Burgers [92] (§ 3.1.3). Ensuite, on peut calculer les forces exercées sur la fibre grâce à l'équation de Burgers (eq. 3.19) et en déduire quand le flambement a lieu par un calcul de structure (flambement d'Euler).

Par ailleurs, nous avons voulu vérifier, non seulement que les fibres de verres peuvent casser en flexion à cause des contraintes de cisaillement qu'elles subissent dans une extrudeuse bivis, mais aussi que l'on peut faire l'approximation qu'elles cassent systématiquement et seulement lorsqu'elles flambent (pour des fibres sans défauts). Pour cela, nous avons effectué des calculs théoriques permettant d'accéder à la contrainte de flambement ainsi qu'à la déformation due aux forces de cisaillement en deçà et au-delà du seuil de flambement. Ces calculs sont basés sur l'approximation selon laquelle les forces sont appliquées ponctuellement aux extrémités de la fibre. Le seuil de flambement est déterminé sous l'approximation des petites déformations et en supposant que la fibre est parfaitement droite. À partir du résultat de ce calcul, on peut déterminer la déformation en dessous du seuil de flambement, en supposant cette fois-ci que la fibre est légèrement déformée, ainsi que la déformation au-delà du seuil de flambement, en considérant alors le cas de grandes déformations.

On comparera cette méthode à celle de Forgacs et Mason [99], basée sur l'approximation selon laquelle les forces sont linéairement réparties le long de la fibre, et dont le résultat est très utilisé dans la littérature, mais qui ne permet pas un accès aussi facile à la déformation de la fibre. Nous verrons enfin, à travers les résultats d'un calcul éléments finis des contraintes subies par une fibre dans un écoulement de cisaillement, que les résultats des deux méthodes (forces ponctuelles et linéairement réparties) encadrent le résultat numérique.

3.2.2 Hypothèse des forces ponctuelles : flambement d'Euler

On suppose que les forces compressives F_p sont uniquement appliquées aux extrémités de la fibre et dans la direction de son axe [Fig. 3.10].

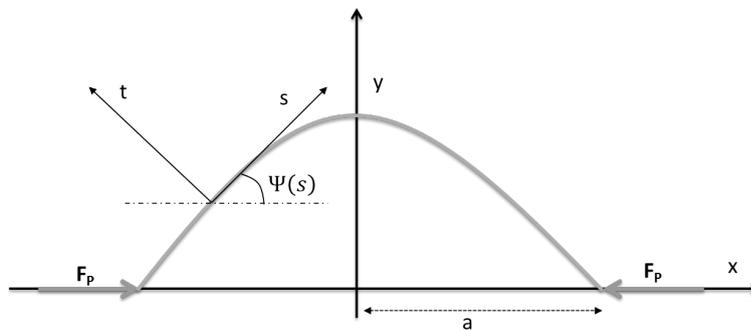


FIGURE 3.10 – Flambement d'Euler : forces appliquées aux extrémités d'une fibre

On écrit le bilan des moments en configuration non déformée (eq. 3.45) :

$$M'_o + T_r + m = 0$$

avec M_o le moment de flexion, T_r l'effort tranchant et m le moment fléchissant local.

Les forces étant appliquées aux extrémités, il n'y a pas de forces locales, donc le moment fléchissant local est nul :

$$\mathbf{m}(s, \xi) = \mathbf{r}(s, \xi) \wedge \mathbf{f}(\xi) = \mathbf{0} \quad (3.69)$$

avec $\mathbf{r}(s, \xi)$ le vecteur reliant le point s où est considéré le moment local et le point ξ où est appliquée la force locale.

Comme nous l'avons vu plus tôt (§ 3.1.5), l'effort tranchant exercé par la partie droite (à partir de s) sur la partie gauche de la fibre est égal à la résultante de la force appliquée dans la direction perpendiculaire à la fibre [Fig. 3.8] :

$$T_r(s) = F_{pt} \quad (3.70)$$

C'est-à-dire :

$$T_r(s) = -F_p \sin(\Psi(s)) \quad (3.71)$$

Comme précédemment (§ 3.1.5), on trouve par des considérations géométriques :

$$T_r(x) = -F_p y'(x) \quad (3.72)$$

En utilisant (eq. 3.45), (eq. 3.69) et (eq. 3.72), on écrit :

$$M_o' - F_p y'(x) = 0 \quad (3.73)$$

d'où

$$M_o = \int_a^x F_p y'(l) dl = F_p y(x) - F_p y(a) \quad (3.74)$$

et donc

$$M_o = F_p y(x) \quad (3.75)$$

Comme les seules forces appliquées sont supposées ponctuelles et que la force due au cisaillement intégrée sur une demi-fibre donnée par Burgers est F_B (eq. 3.19), on a $F_p = F_B$ et le bilan des moments de flexion pour une configuration non-déformée est :

$$M_o = F_B y(x) \quad (3.76)$$

À partir de cette équation, on peut obtenir la déflexion en dessous du seuil de flambement et au-delà du seuil de flambement. Mais, avant tout, on calcule le seuil de flambement sous l'hypothèse des « petites » déformations (flambement d'Euler).

Seuil de flambement

Dans un premier temps, on cherche le seuil de flambement. Pour cela, on fait l'hypothèse que la fibre est parfaitement droite et que les déformations subies sont petites. La formule de la déformation de flexion due aux forces dans l'hypothèse des « petites » déformations s'écrit (eq. 3.53) :

$$M_o = \frac{EI}{R} \approx EI y''$$

avec I le moment quadratique ($I = \frac{\pi b^4}{4}$ dans le cas d'un cylindre).

En combinant (eq. 3.76) et (eq. 3.53), on obtient une équation différentielle homogène d'ordre deux décrivant la déflexion de la fibre :

$$y'' + k^2 y = 0 \quad (3.77)$$

avec $k^2 = -\frac{4}{b^2} \frac{\sigma_B}{E}$ et où σ_B est la contrainte intégrée sur une demi-fibre cylindrique par Burgers (eq. 3.20).

Sa solution est de la forme :

$$y = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad (3.78)$$

En satisfaisant la condition $y'(0) = 0$, on obtient la forme :

$$y = A \cos(kx) \quad (3.79)$$

Si l'on veut satisfaire la condition limite $y(a) = 0$, on a deux solutions : la première est triviale ($y = 0$) et correspond au cas où la fibre reste droite, l'autre correspond au cas où il y a flambement, c'est à dire lorsque le seuil de contrainte à partir duquel on sort de l'hypothèse des petites déformations est atteint.

On cherche la valeur de k pour laquelle la fibre flambe. En compression ($\sigma_B < 0$), on trouve une solution non-triviale ($y(x) \neq 0$) :

$$ka = p \frac{\pi}{2} \quad (3.80)$$

avec p un entier strictement positif.

On suppose que la fibre est fragile (fibre de verre) et qu'elle casse dès qu'elle commence à flamber. Comme elle n'est pas contrainte, elle flambe selon le premier mode de flexion. On pose donc $p = 1$. On obtient la contrainte relative maximale avant flambement :

$$\frac{\sigma_m^e}{E} = - \left(\frac{\pi}{4\beta} \right)^2 \quad (3.81)$$

En dessous de cette contrainte, la fibre est droite, au-dessus, elle plie violemment et nous faisons l'hypothèse qu'elle casse rapidement.

Avec l'hypothèse des petites déformations seule, on n'a pas accès à l'équation de la déformation en dessous ou au-dessus du seuil de flambement permettant de valider l'hypothèse d'équivalence entre flambement et casse. En effet, il faut vérifier qu'une fibre fléchie sous le seuil de flambement peut résister à la contrainte induite en surface, et inversement pour une fibre fléchie au-delà du seuil de flambement. Pour accéder à la déformation, il faut ajouter une déformation initiale de la fibre en dessous du seuil de flambement ou sortir du cadre des petites déformations au-dessus du seuil de flambement.

Flambement en petites déformations

En dessous du seuil de flambement, une fibre parfaitement droite ne peut pas se déformer. Pour obtenir la déformation de la fibre, et donc la contrainte qu'elle subit en surface afin de savoir si elle casse, on doit supposer que la fibre n'est pas parfaitement droite. On peut donc calculer la déflexion en dessous du seuil de flambement en fixant une déflexion initiale $y_0 = h \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$ afin de sortir de la position d'équilibre.

On a donc une équation de la déformée totale qui est :

$$y = Y + y_0 \quad (3.82)$$

avec Y la partie de la déformée due à l'action des forces.

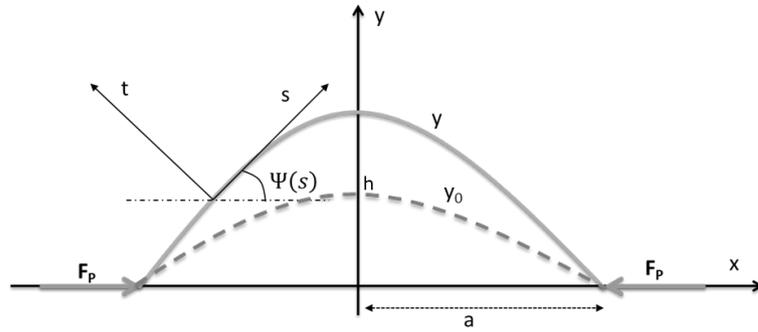


FIGURE 3.11 – Illustration du flambement d'Euler avec déformation initiale

Le raisonnement sur le bilan des moments en configuration non déformée est le même que précédemment. En effet, même avec la déformation initiale, on trouve toujours géométriquement [Fig. 3.11] que :

$$\sin(\Psi(s)) = [Y + y_0]' = y'(x) \quad (3.83)$$

L'expression du moment fléchissant reste donc la même (eq. 3.76) :

$$M_o = F_B y(x)$$

c'est-à-dire :

$$M_o = F_B (Y + y_0) \quad (3.84)$$

ou :

$$M_o = F_B \left(Y + h \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \right) \quad (3.85)$$

La formule de la déformation de flexion due aux forces s'écrit :

$$M_o = \frac{EI}{R_F} \approx EIY'' \quad (3.86)$$

avec R_F la partie du rayon de courbure due à la force de compression, l'autre partie étant due à la déflexion initiale y_0 .

En combinant (eq. 3.85) et (eq. 3.86), on obtient une équation différentielle d'ordre deux avec second membre décrivant la déflexion due aux forces :

$$Y'' + k^2 Y = -k^2 h \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.87)$$

avec $k^2 = -\frac{4}{b^2} \frac{\sigma_B}{E}$.

La solution générale d'une équation différentielle d'ordre deux avec second membre est la somme de la solution générale de l'équation homogène associée à l'équation différentielle (eqs. 3.77 et 3.78) et d'une solution particulière de l'équation différentielle.

Pour trouver la solution particulière, on postule qu'elle est de la forme :

$$Y = C \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) + D \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.88)$$

On obtient la solution particulière :

$$Y = \frac{h}{\left(\frac{\pi}{2ka}\right)^2 - 1} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.89)$$

Pour avoir la solution générale, on additionne les solutions générales et particulières :

$$Y = A \cos(kx) + B \sin(kx) + \frac{h}{\left(\frac{\pi}{2ka}\right)^2 - 1} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.90)$$

En satisfaisant les conditions limites ($Y'(0) = 0$, $Y(a) = 0$), on obtient l'équation de la déflexion due à l'action des forces :

$$Y = \frac{h}{\left(\frac{\pi}{2ka}\right)^2 - 1} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.91)$$

On en déduit l'équation de la déflexion totale :

$$y = Y + y_0 = h \left(1 + \frac{1}{\left(\frac{\pi}{2ka}\right)^2 - 1}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = Y_t \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.92)$$

avec Y_t la déflexion totale à $x = 0$.

Après quelques arrangements, on trouve une écriture simplifiée :

$$\frac{Y_t}{h} = \frac{1}{1 - \sigma_B/\sigma_m^e} \quad (3.93)$$

À partir des expressions (eq. 3.92), (eq. 3.93), et de l'équation $\sigma_s(x) = -Eb/R(x) = -Eby''$ (eq. 3.68), on déduit l'expression de la contrainte de traction σ_s appliquée sur la surface externe de la fibre en dessous du seuil de flambement :

$$\frac{\sigma_s(x)}{E} = \frac{Y_t}{b} \left(\frac{\pi}{2\beta}\right)^2 \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = \frac{h}{b} \left(\frac{\pi}{2\beta}\right)^2 \frac{Y_t}{h} = \frac{1}{1 - \sigma_B/\sigma_m^e} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.94)$$

Flambement en grandes déformations

Avec l'hypothèse des petites déformations, on n'a pas accès à la déformation au-dessus du seuil de flambement. On ne peut donc pas vérifier directement que les fibres subissent une contrainte suffisante en surface pour casser. Pour cela, on doit supposer que la déformation est importante au-delà du seuil de flambement et on la calcule en résolvant une équation différentielle non-linéaire.

Dans le cas des grandes déformations, c'est-à-dire au-delà de la contrainte critique de flambement, on ne néglige plus la pente y' devant 1 :

$$M_o = \frac{EI}{R} = EI \frac{y''}{(1 + y'^2)^{3/2}} \quad (3.95)$$

L'équation du moment de flexion restant la même : $M_o = F_B y(x)$ (eq. 3.76), on obtient l'équation différentielle décrivant la déflexion de la fibre :

$$\frac{y''}{(1 + y'^2)^{3/2}} + k^2 y = 0 \quad (3.96)$$

avec $k^2 = -\frac{4}{b^2} \frac{\sigma_B}{E}$.

La déflexion totale Y_t à $x = 0$ est donnée par [105] :

$$\frac{Y_t}{a} = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1} \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \right] \quad (3.97)$$

On suppose comme précédemment que l'équation de la déformée est :

$$y = Y_t \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (3.98)$$

D'après cette expression et l'équation de la contrainte sur la surface de la fibre due au rayon de courbure (eq. 3.99), on déduit l'expression de la contrainte de traction σ_s appliquée sur la surface extérieure de la fibre au-delà de la limite de flambement.

N.B. Cette fois-ci, l'équation de la contrainte en surface doit être celle des grandes déformations, c'est-à-dire :

$$\sigma_s(x) = -\frac{Eb}{R(x)} = -Eb \frac{y''}{(1 + y'^2)^{3/2}} \quad (3.99)$$

On a donc :

$$\frac{\sigma_s(x)}{E} = \frac{\frac{\pi\sqrt{2}}{\beta} \sqrt{\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1} \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \right] \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)}{\left(1 + 8 \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \right]^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \right)^{3/2}} \quad (3.100)$$

Paramètre de flambement

En comparant la contrainte σ_B (eq. 3.20) induite sur la fibre par l'écoulement avec la contrainte maximale avant flambement σ_m^e (eq. 3.81), on obtient un paramètre de flambement :

$$\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} = - \left(\frac{4}{\pi} \right)^2 M \frac{\beta^4}{\ln(2\beta) - 1,75} \frac{\eta \dot{\gamma}}{E} \tag{3.101}$$

qui est supérieur à 1 pour une fibre en flambement. On remarque que le paramètre de flambement varie linéairement avec la contrainte relative de cisaillement $\eta \dot{\gamma}/E$ mais dépend beaucoup plus fortement du rapport d'aspect β . Ceci est illustré à la figure 3.12, où l'on a effectué une application numérique, en utilisant les grandeurs typiques rencontrées dans le procédé étudié.

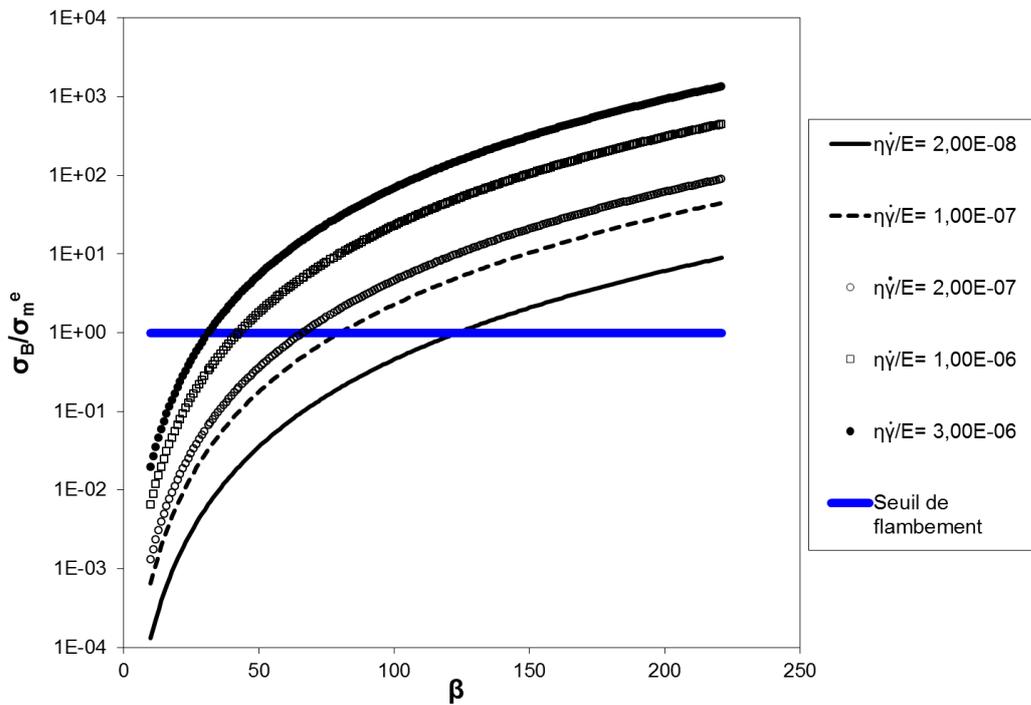


FIGURE 3.12 – Variation du paramètre de flambement σ_B/σ_m^e en fonction du rapport d'aspect β pour différentes contraintes de cisaillement relative $\eta \dot{\gamma}/E$, les autres paramètres étant fixés : $\phi = -45^\circ$; $\theta = 90^\circ$ (position de la fibre dans l'écoulement). À titre indicatif, les fibres de verres utilisées plus loin dans cette étude ont un module d'Young E égal à 72,4 GPa

Paramètre de casse

En comparant la contrainte de traction σ_s (eqs. 3.94, 3.100) avec la résistance à la traction σ_c de la fibre, on obtient un paramètre de casse :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\sigma_s(x)}{\sigma_c} = \frac{h}{b} \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^2 \left(\frac{1}{1 - \frac{\sigma_B}{\sigma_m^e}} \right) \cos \left(\frac{\pi x}{2a} \right) \frac{E}{\sigma_c} \quad \text{pour } \frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} < 1 \\ \frac{\sigma_s(x)}{\sigma_c} = \frac{\frac{\pi\sqrt{2}}{\beta} \sqrt{\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1} \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \right] \cos \left(\frac{\pi x}{2a} \right)}{\left(1 + 8 \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} - 1 \right) \right]^2 \sin^2 \left(\frac{\pi x}{2a} \right) \right)^{3/2}} \frac{E}{\sigma_c} \quad \text{pour } \frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} > 1 \end{array} \right. \quad (3.102)$$

qui dépend du paramètre de flambement σ_B/σ_m^e et qui est supérieur à 1 lorsque une fibre parfaite atteint un rayon de courbure suffisamment petit pour casser en x . À noter que le paramètre de casse ne dépend pas simplement du rapport d'aspect en $1/\beta^2$ car on retrouve β dans σ_B/σ_m^e (eq. 3.101) [Fig. 3.13], ici aussi les grandeurs utilisées sont représentatives du procédé étudié.

On note également que le paramètre de casse varie en $\cos(\pi x/2a)$ le long de la fibre tant que celle-ci ne flambe pas, mais qu'une correction en $1/(1 + \sin^2(\pi x/2a))^{3/2}$ apparaît quand elle flambe, accentuant la contrainte au milieu de la fibre [Fig. 3.14].

Dans la figure [Fig. 3.15], on trace le paramètre de casse $\sigma_s(0)/\sigma_c$ au milieu de la fibre (car c'est là qu'il est maximal) en fonction du paramètre de flambement σ_B/σ_m^e pour différentes valeurs de la contrainte de cisaillement relative $\eta\dot{\gamma}/E$ et du rapport d'aspect β . Dans la zone (1), les fibres n'ont ni atteint le seuil de flambement, ni le seuil de casse. Dans la zone (2) seul le seuil de casse est atteint, c'est-à-dire que les fibres cassent sans flamber (fibres très fragiles). Dans la zone (3), seul le seuil de flambement est atteint, c'est-à-dire que les fibres flambent sans casser (fibres très souples). Enfin, dans la zone (4), les deux seuils sont atteints, c'est-à-dire que les fibres cassent en flambant. On remarque que les courbes décrivant le comportement des fibres passent presque uniquement par les zones (1) et (4), c'est à dire que les fibres cassent ($\sigma_s(0)/\sigma_c > 1$) quasiment toujours au moment où elles flambent ($\sigma_B/\sigma_m^e > 1$) pour des paramètres ayant des ordres de grandeur comparables à ceux du problème industriel, ce qui justifie **l'approximation faite précédemment de considérer qu'une fibre casse quand elle flambe**. Pour qu'une fibre puisse flamber sans casser, il faudrait qu'elle soit plus souple ($E/\sigma_c \lesssim 10$) et pour qu'elle casse sans flamber, il faudrait qu'elle soit initialement très déformée ($h/b \gtrsim 0,1$), ce qui n'est pas le cas des fibres de verre utilisées dans cette étude [Fig. 3.16].

Prenons l'exemple présent sur la figure [Fig. 3.15] d'une fibre de verre de longueur $2a = 1$ mm et de diamètre $2b = 10 \mu\text{m}$ ($\beta = 100$), avec un module d'Young $E = 70$ GPa et une contrainte à la rupture $\sigma_c = 2,3$ GPa ($E/\sigma_c = 30$). Si l'on fait l'hypothèse que la déflexion initiale de la fibre h est d'environ un centième de son rayon b ($h/b = 0,01$), on trouve un paramètre de casse $\sigma_s(0)/\sigma_c$ (eq. 3.102) au milieu de la fibre ($x = 0$) et en petites déformations qui vaut environ 0,74 pour un paramètre de flambement σ_B/σ_m^e égal à 0,9999, c'est-à-dire très proche du seuil de flambement (une variation du taux de cisaillement de $1,1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ suffit à l'atteindre (eq. 3.101)). Pour cette valeur, le seuil de casse n'est pas encore atteint, on est dans la zone (1) [Fig. 3.15]. De même, en

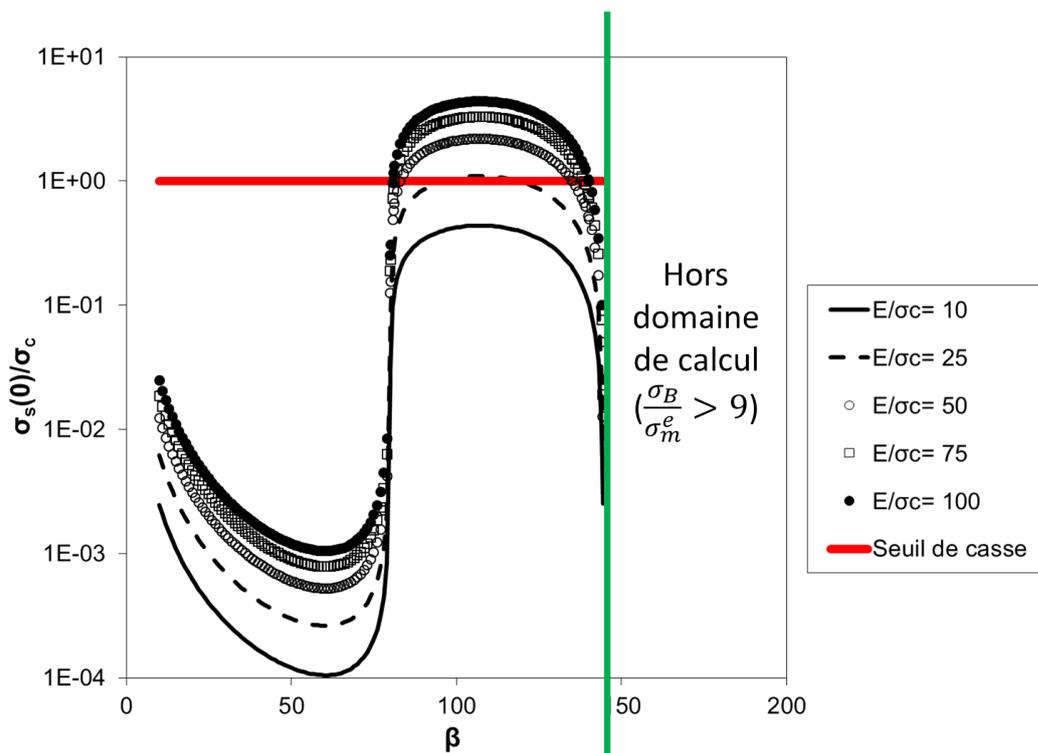


FIGURE 3.13 – Variation du paramètre de casse σ_s/σ_c en fonction du rapport d'aspect β pour différentes souplesses de la fibre E/σ_c , les autres paramètres étant fixés : $x/a = 0$ (milieu de la fibre) ; $h/b = 0,01$ (déflexion initiale relative dans le cas des petites déformations) ; $\phi = -45^\circ$; $\theta = 90^\circ$ (position de la fibre dans l'écoulement) ; $\eta\dot{\gamma}/E = 10^{-7}$ (contrainte de cisaillement relative)

grandes déformations ($\sigma_B/\sigma_m^e > 1$), on trouve un paramètre de casse $\sigma_s(0)/\sigma_c$ qui vaut environ 1,02 pour un paramètre de flambement σ_B/σ_m^e égal à 1,7, c'est-à-dire assez proche du seuil de flambement (une variation du taux de cisaillement de $0,80 \text{ s}^{-1}$ permet de l'atteindre). Pour cette valeur, le seuil de casse est atteint (zone (4)) après un très court passage par un flambement sans casse dans la zone (3) [Fig. 3.15].

Au cours de leur trajet dans une extrudeuse bivis, les fibres sont dans un premier temps longues, ce qui implique une viscosité élevée de la suspension. On a donc un paramètre de flambement et un paramètre de casse élevés, et on est, sur la figure [Fig. 3.15] dans la zone (4) « flambement et casse » (rapport d'aspect β grand, contrainte de cisaillement relative $\eta\dot{\gamma}/E$ grande). Ensuite, leur taille diminue et la viscosité également. On a donc un paramètre de flambement et un paramètre de casse plus faibles, et on peut atteindre la zone (1) « ni flambement, ni casse » (rapport d'aspect β petit, contrainte de cisaillement relative $\eta\dot{\gamma}/E$ petite). À noter que l'évolution de la contrainte relative $\eta\dot{\gamma}/E$ avec le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ n'est pas linéaire pour un fluide ayant un comportement rhéologique de type loi de puissance ($\eta(\dot{\gamma}) = K|\dot{\gamma}|^{n-1}$), par exemple un polymère fondu.

On remarque, en traçant cette fois-ci le paramètre de casse $\sigma_s(0)/\sigma_c$ en fonction du paramètre de flambement σ_B/σ_m^e pour différents angles θ avec l'axe z' et différentes valeurs du rapport

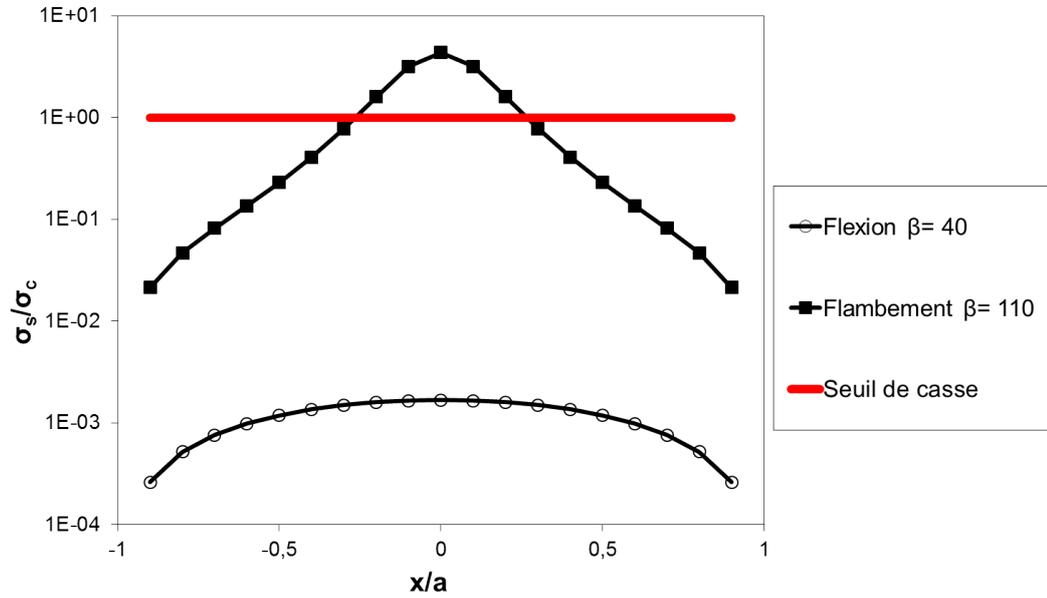


FIGURE 3.14 – Variation du paramètre de casse σ_s/σ_c le long d'une fibre (x/a) en flexion simple et en flambement (rapports d'aspect $\beta = 40$ ($\frac{\sigma_B}{\sigma_m} = 0,08 < 1$) et $\beta = 110$ ($\frac{\sigma_B}{\sigma_m} = 3,26 > 1$)), les autres paramètres étant fixés : $x/a = 0$ (milieu de la fibre) ; $h/b = 0,01$ (déflexion initiale relative dans le cas des petites déformations) ; $\phi = -45^\circ$; $\theta = 90^\circ$ (position de la fibre dans l'écoulement) ; $\eta\dot{\gamma}/E = 10^{-7}$ (contrainte de cisaillement relative) ; $E/\sigma_c = 30$ (souplesse de la fibre)

d'aspect β [Fig. 3.17], que les fibres cassent (zone 4) même si l'angle θ entre elles et l'axe z' [Fig. 3.4] est moins important que $\pi/2$ (fibre hors du plan de cisaillement). De plus, les fibres passent un long moment dans la direction de l'écoulement durant une rotation suivant l'orbite de Jeffery et l'angle entre l'axe z' et la fibre à ce moment est maximal [Fig. 3.1]. Donc, l'angle entre la plupart des fibres et l'axe z' est presque tout le temps proche de $\theta = \pi/2$. Par conséquent, on peut fixer $\theta = \pi/2$ dans un calcul de la casse de fibre, en supposant que, même si quelques fibres sont légèrement hors du plan de cisaillement, elles casseront également.

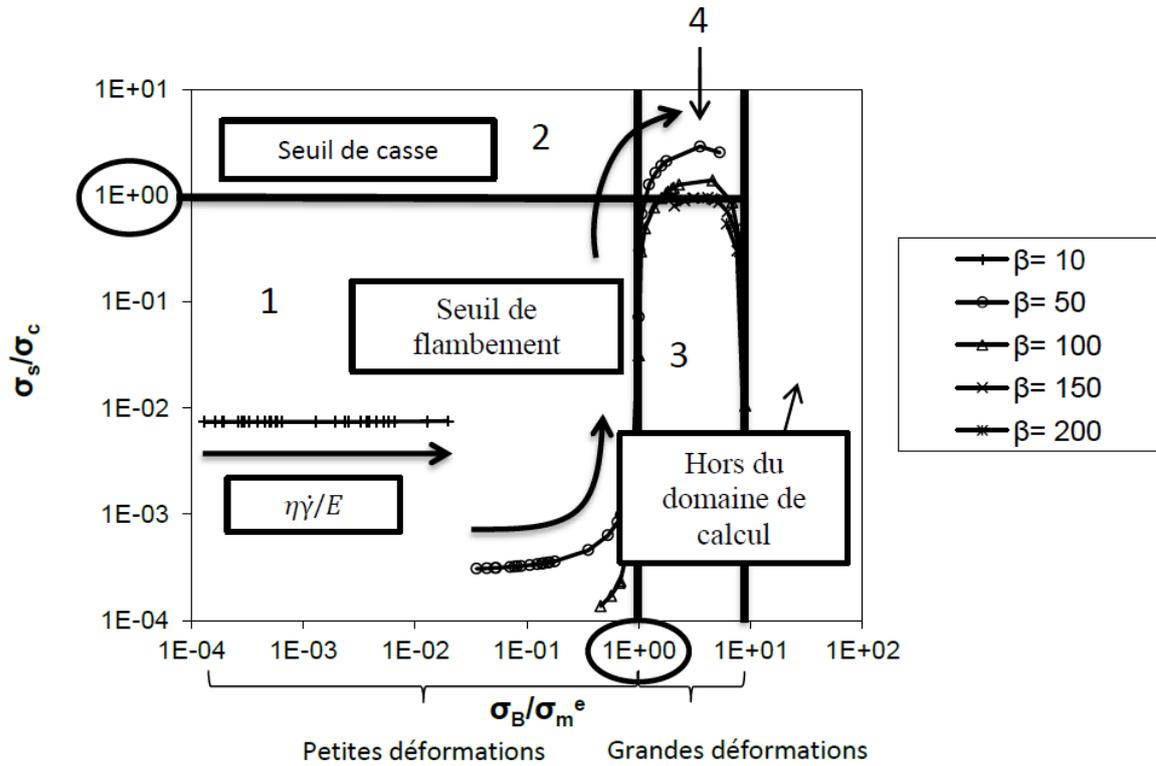


FIGURE 3.15 – Corrélation entre flambement et casse pour différents rapports d'aspect β (en faisant varier la contrainte de cisaillement relative $\eta\dot{\gamma}/E$ de $2 \cdot 10^{-8}$ à $300 \cdot 10^{-8}$), les autres paramètres étant fixés : $x/a = 0$ (milieu de la fibre) ; $h/b = 0,01$ (déflexion initiale relative dans le cas des petites déformations) ; $\phi = -45^\circ$; $\theta = 90^\circ$ (position de la fibre dans l'écoulement) ; $E/\sigma_c = 30$ (résistance de la fibre))

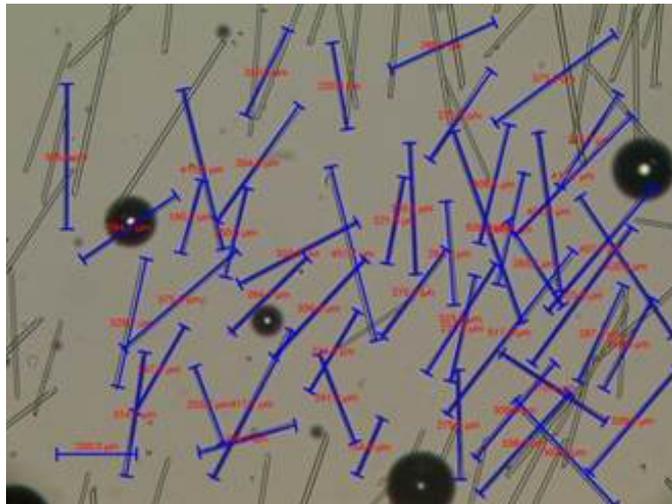


FIGURE 3.16 – Photographies des fibres de verres avec mesures de longueurs. On peut voir que les fibres sont très droites

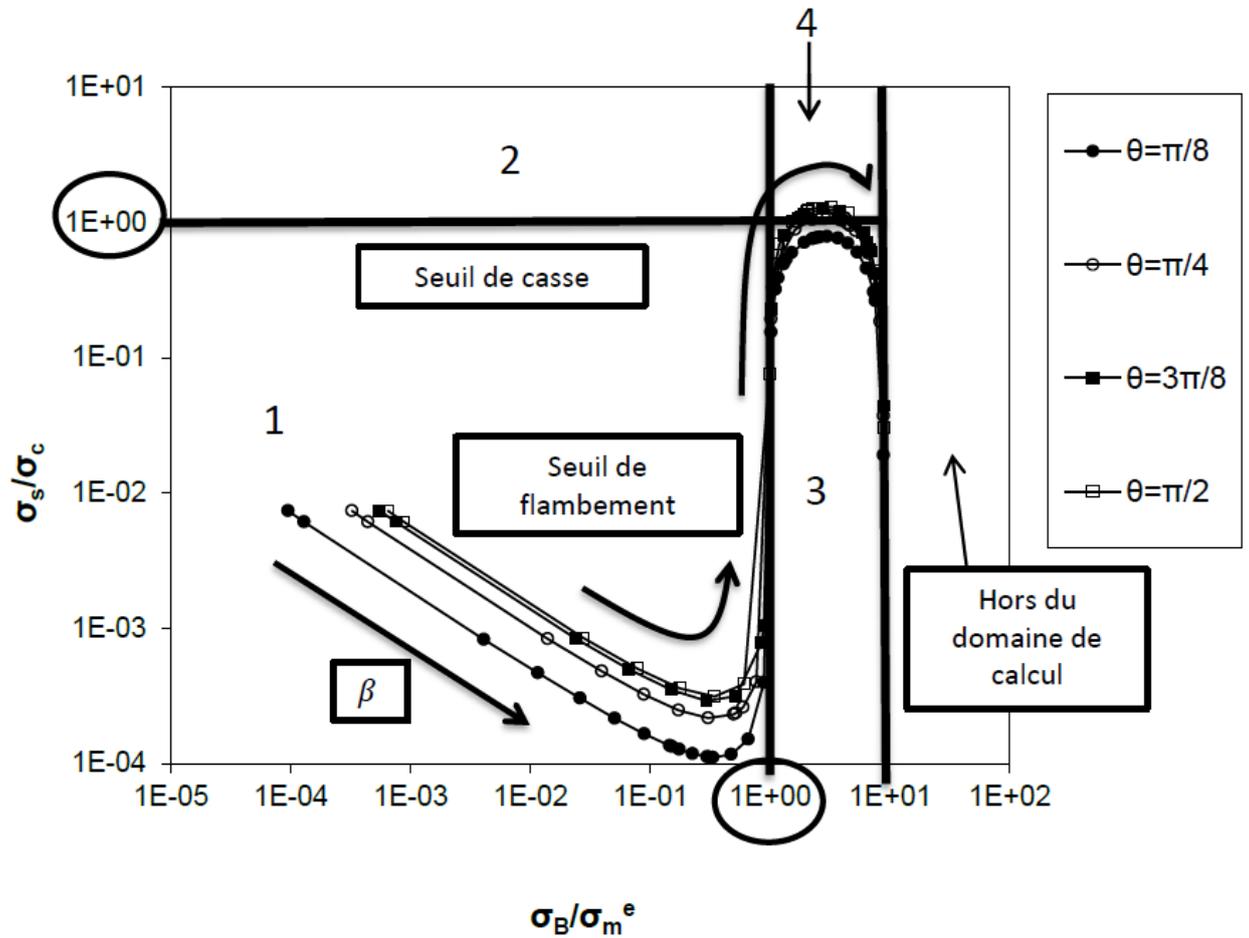


FIGURE 3.17 – Corrélation entre flambement et casse pour différents angles θ avec l'axe z' (perpendiculaire au plan de cisaillement [Fig. 3.4]) (en faisant varier le rapport d'aspect β de 10 à 600), les autres paramètres étant fixés : $x/a = 0$ (milieu de la fibre); $h/b = 0,01$ (déflexion initiale relative dans le cas des petites déformations); $\phi = -45^\circ$; $\eta\dot{\gamma}/E = 10^{-7}$ (contrainte de cisaillement relative); $E/\sigma_c = 30$ (résistance de la fibre)

3.2.3 Hypothèse des forces distribuées linéairement

Une autre possibilité est de supposer que les forces sont distribuées linéairement le long de la fibre, comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent §3.1.5. Forgacs et Mason [99] trouvent (eq. 3.44) :

$$\frac{\sigma_m^{FM}}{E} = - \left(\frac{1}{2\beta} \right)^2$$

et DeTeresa [103] trouve, après correction du calcul de Forgacs et Mason (eq. 3.56) :

$$\frac{\sigma_m^{DT}}{E} = - \frac{1,28}{\beta^2}$$

On remarque que le calcul de DeTeresa avec des forces linéairement réparties donne une contrainte limite avant flambement environ deux fois supérieure à celle calculée pour des forces ponctuelles (eq. 3.81). Comme l'expression du moment de flexion (eq.3.52) est nettement plus compliqué que dans le cas de forces appliquées aux extrémités, DeTeresa se contente de calculer le seuil de flambement.

3.2.4 Simulation numérique d'une fibre dans un écoulement de cisaillement

Dans le cadre du post-doctorat de Pascal De Micheli au sein du projet Fonlimics, un modèle 3D éléments finis a été créé afin de mesurer les forces appliquées par un fluide en cisaillement sur une particule rigide et cylindrique. Une boîte de 1 mm de côté représente le domaine fluide, avec un « trou » au milieu représentant la particule. À noter que les extrémités de la fibre ont été arrondies afin de régulariser le problème. Sur la surface extérieure de la boîte, des conditions limites sont appliquées pour imposer un écoulement de cisaillement simple. Sur la surface interne, c'est-à-dire sur la surface de la fibre, des conditions limites correspondant à un mouvement de corps rigide sont appliquées. Ce mouvement de corps rigide est calculé de manière itérative en minimisant les moments linéaires et angulaires correspondant à l'action du fluide sur la surface de la fibre. La translation est négligée (seule la rotation est prise en compte) car elle ne modifie pas la répartition de la force axiale compressive due au fluide sur la particule.

Le maillage initial est créé en utilisant le logiciel libre Gmesh[®]. Le calcul est effectué à l'aide de la librairie parallèle CimLib[®] [108], développée au Cemef. Les équations de Stokes sont résolues en se servant d'éléments tétraédriques mixtes P1+P1 vitesse pression [109]. Afin de définir précisément la géométrie de la fibre et de bien saisir la complexité de l'écoulement à proximité de la particule, un maillage adaptatif est utilisé pour raffiner le maillage près de sa surface : les tailles de mailles sont de l'ordre de 0,1 mm près de la surface extérieure de la boîte et de 0,002 mm près de la particule [Fig. 3.18]. Le maillage total contient dans ce cas-là à peu près 330 000 nœuds pour une fibre de longueur 0,3 mm et de diamètre 0,01 mm. Plusieurs rapports d'aspect et taux de cisaillement sont simulés afin de rendre compte des conditions industrielles de mélange de polymères chargés de fibres. Le diamètre est pris égal à 0,01 mm, ce qui est une valeur classique pour les fibres de verre, et la longueur a été choisie entre 0,1 mm et 0,3 mm, c'est-à-dire de l'ordre de grandeur des fibres en sortie du procédé de mélange. Le fluide est supposé newtonien, avec une viscosité η de 1 000 Pa.s. Enfin, le taux de cisaillement est compris entre 50 s⁻¹ et 500 s⁻¹, ce qui est consistant avec le taux de cisaillement moyen présent dans une extrudeuse bivis.

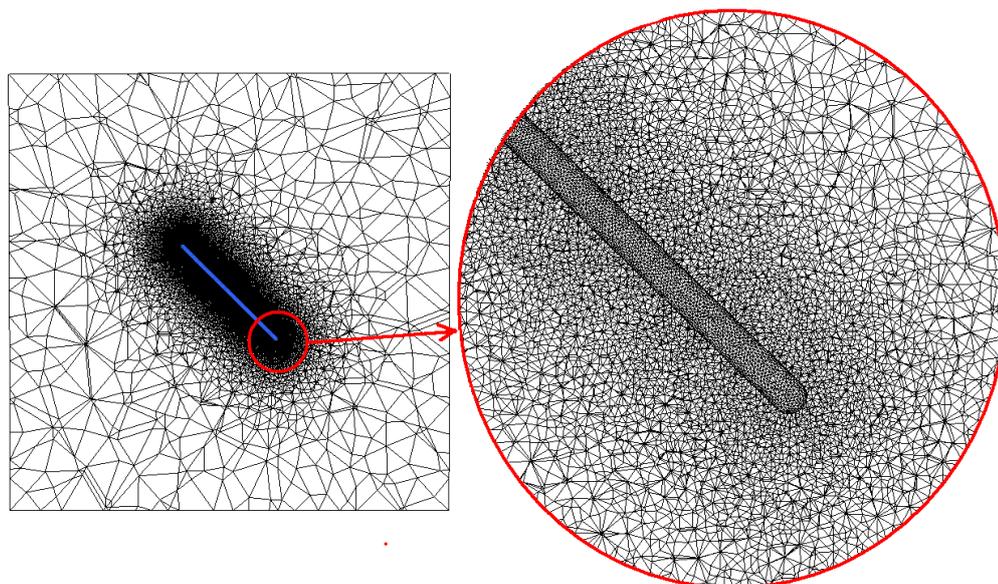


FIGURE 3.18 – Maillage du domaine vu en plan de coupe et zoom sur l'extrémité du « trou » représentant la fibre

		$\dot{\gamma} = 50 \text{ s}^{-1}$	$\dot{\gamma} = 100 \text{ s}^{-1}$	$\dot{\gamma} = 200 \text{ s}^{-1}$	$\dot{\gamma} = 500 \text{ s}^{-1}$
$\beta = 10$ ($l = 0,1 \text{ mm}$)	F_c	0,155	0,311	0,615	1,56
	F_B	0,158	0,315	0,615	1,60
	F_c/F_B	0,981	0,987	0,976	0,975
$\beta = 30$ ($l = 0,3 \text{ mm}$)	F_c	0,744	1,50	2,99	7,47
	F_B	0,754	1,51	3,02	7,54
	F_c/F_B	0,987	0,993	0,990	0,991

TABLE 3.1 – Comparaison de la force sommée sur une demi-fibre à la prédiction de Burgers

Les forces appliquées par le fluide sur la particule sont post-traitées à l'aide de Scilab[®]. La somme des forces sur la surface d'une demi-fibre est d'abord calculée, afin de comparer nos valeurs F_c avec celles de Burgers F_B [92] (eq. 3.19) pour tous les paramètres étudiés. Dans tous les cas, la fibre est orientée dans la direction de compression maximale ($\phi = -45^\circ$, $\theta = 90^\circ$), et on obtient un écart entre la prédiction de Burgers et le calcul éléments finis inférieur à 2% [Tab. 3.1].

Puis, la répartition des forces sur la fibre est étudiée en divisant la demi-fibre en n sections et en sommant les forces sur chaque section [Fig. 3.19].

L'étude éléments finis des forces appliquées sur la fibre montre que, dans la gamme de paramètres étudiés, la distribution des forces ne change pas beaucoup. La force par section, normalisée par la force totale appliquée sur une fibre est représentée [Fig. 3.20] et [Fig. 3.21] pour des rapports d'aspect de 10 et 30, respectivement. Pour une même longueur de fibre, si le fluide est newtonien, on vérifie bien que la distribution des forces normalisées par la force totale appliquée sur la fibre est exactement la même pour les différents taux de cisaillement testés [Figs. 3.20, 3.21].

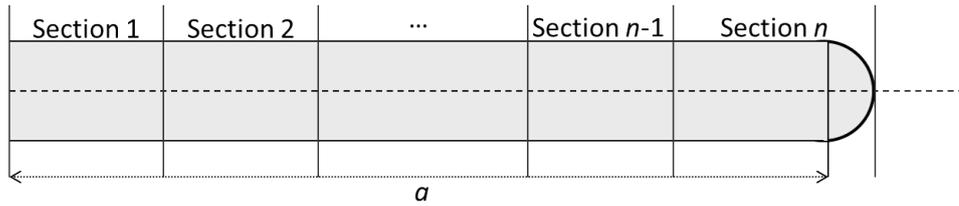


FIGURE 3.19 – Calcul de la distribution de force sur n sections d'une demi-fibre. Chaque section à une longueur égale à a/n , exceptée la dernière dont la longueur est $a/n + b$, b étant le rayon de la fibre

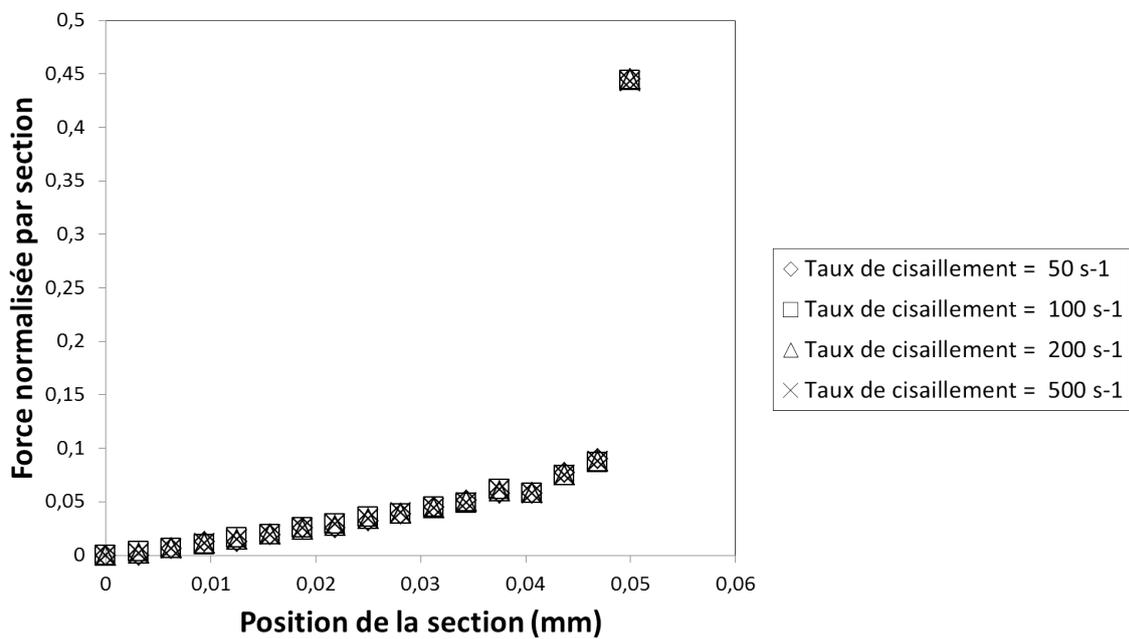


FIGURE 3.20 – Distribution des forces sur une demi-fibre de rapport d'aspect 10 (longueur 0,1 mm) pour différents taux de cisaillement. La demi-fibre est divisée en 16 sections d'environ 0,003 mm

Il est plus difficile de comparer les distributions de forces sur deux fibres de rapports d'aspect différents. Cependant, il existe une similarité qualitative. Dans tous les cas, on peut observer que la répartition des forces le long de la fibre est approximativement linéaire, avec un important pic de force sur la dernière section [Figs. 3.20, 3.21]. Cette distribution des forces est en bon accord avec les résultats de Hernandez [104, 110], dans lesquels la distribution des forces sur une fibre de rapport d'aspect 100 dans la position de compression maximale dans un écoulement de cisaillement est étudiée par une méthode éléments finis de frontière. Des différences quantitatives peuvent être observées entre les deux cas. Pour la fibre de rapport d'aspect 10 [Fig. 3.20], environ 44% de la force totale appliquée sur la fibre est localisée à ses extrémités, contre 21% dans le cas de la fibre de rapport d'aspect 30. Sur la dernière section de la fibre (avant l'extrémité), on trouve environ 9% de la force totale appliquée sur la fibre pour la fibre de rapport d'aspect 10

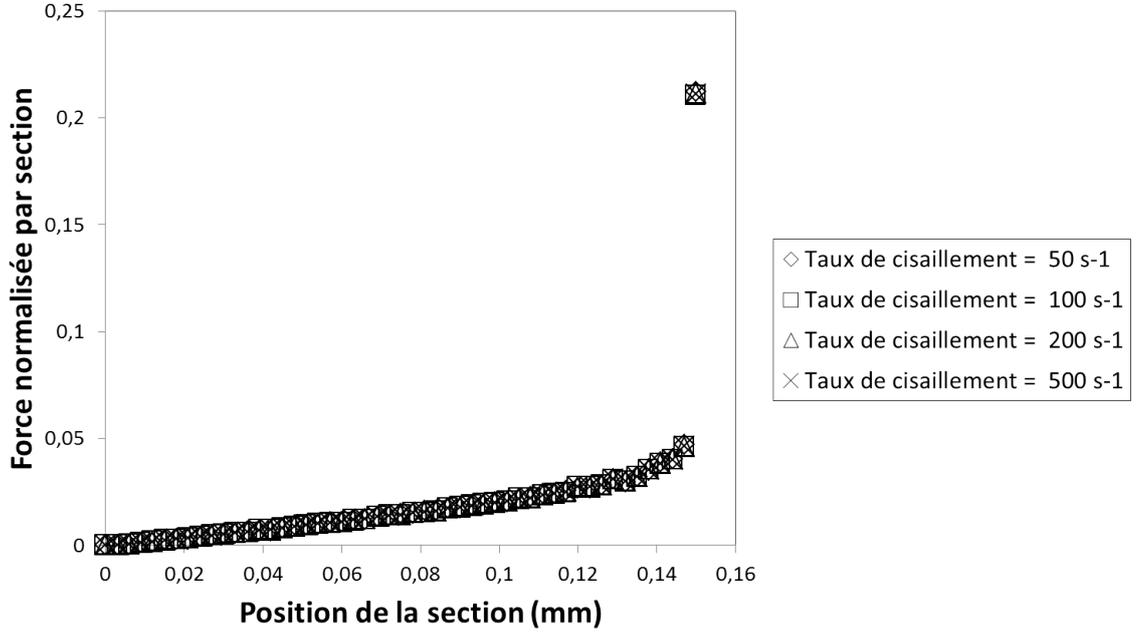


FIGURE 3.21 – Distribution des forces sur une demi-fibre de rapport d'aspect 30 (longueur 0,3 mm) pour différents taux de cisaillement. La demi-fibre est divisée en 50 sections de 0,003 mm

contre 4,5% pour la fibre de rapport d'aspect 30. Il semble donc que, pour un rapport d'aspect plus petit, la contrainte se concentre plus sur les extrémités de la fibre.

Un programme d'analyse des résultats de calcul éléments finis a été implémenté sous SciLab[®] afin d'étudier le flambement sous charge pour la distribution de contrainte obtenue à partir de la simulation de la fibre dans un écoulement de cisaillement. Le principe de cette analyse est de déterminer la charge critique avant flambement. Soit Π l'énergie du système. On suppose que le système est en équilibre, donc $\delta\Pi = 0$. Cependant, cet équilibre est instable, donc $\delta^2\Pi < 0$. En dérivant deux fois l'expression de l'énergie de déformation interne du système :

$$\Pi_{int} = \frac{1}{2} \int_V \mathbf{L}\boldsymbol{\sigma}^T dV \quad (3.103)$$

avec \mathbf{L} le tenseur de Green-Lagrange et $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{H}\mathbf{L}$, on obtient l'expression :

$$\delta^2\Pi_{int} = \int_v (\delta\mathbf{L}_l\mathbf{H}\delta\mathbf{L}_l^T + \delta\mathbf{L}_l\mathbf{H}\delta\mathbf{L}_{nl}^T + \delta\mathbf{L}_{nl}\mathbf{H}\delta\mathbf{L}_l^T + \delta^2\mathbf{L}_{nl}\boldsymbol{\sigma}^T) dV \quad (3.104)$$

où \mathbf{L}_l et \mathbf{L}_{nl} sont respectivement les parties linéaire et non-linéaire du tenseur de Green-Lagrange \mathbf{L} . On suppose que les déformations sont « petites », ce qui veut dire que la déformation pour une charge nodale $\lambda\mathbf{F}_0$ est λ fois la déformation pour une charge nodale \mathbf{F}_0 . On rajoute la contribution à l'énergie des forces extérieures Π_{ext} et on réécrit $\delta^2\Pi$ en fonction du vecteur déplacement de tous les nœuds $\delta\mathbf{U}$, de la matrice de rigidité linéaire \mathbf{k}_l , de la matrice de déplacement initial \mathbf{k}_u , de la matrice de rigidité géométrique \mathbf{k}_σ et de la matrice des forces suiveuses (par exemple la

	Euler (eq. 3.81)	Forgacs et Mason (eq. 3.44)	DeTeresa (eq. 3.56)	Éléments finis (eq. 3.107)
$\beta = 10$	35,1 mN	14,2 mN	72,8 mN	49,5 mN
$\beta = 30$	3,90 mN	1,58 mN	8,09 mN	6,48 mN

TABLE 3.2 – Comparaison entre la force critique déduite de la répartition des forces obtenue par éléments finis avec différents modèles existants

pression) \mathbf{k}_λ , et on obtient :

$$\delta^2\Pi = \delta^2\Pi_{int} - \delta^2\Pi_{ext} = (\delta\mathbf{U}^T (\mathbf{k}_l + \lambda (\mathbf{k}_u + \mathbf{k}_\sigma)) \delta\mathbf{U}) - (\lambda \delta\mathbf{U}^T \mathbf{k}_\lambda \delta\mathbf{U}) \quad (3.105)$$

Les matrices \mathbf{k}_u , \mathbf{k}_σ et \mathbf{k}_λ sont d'abord construites à partir des solutions nodales \mathbf{U}_0 du problème linéaire simple de la charge d'une poutre en utilisant une charge nodale \mathbf{F}_0 . Puis, le problème des valeurs propres d'inconnu λ est résolu à partir de $\delta^2\Pi = 0$:

$$\mathbf{k}_l \delta\mathbf{U} = -\lambda (\mathbf{k}_u + \mathbf{k}_\sigma + \mathbf{k}_\lambda) \delta\mathbf{U} \quad (3.106)$$

Finalement, la charge critique correspondante, notée F_{EF}^c peut être déterminée par le produit de la charge initiale F_0 par la plus petite valeur propre λ_{min} :

$$F_{EF}^c = \lambda_{min} F_0 \quad (3.107)$$

Dans notre cas, à cause du faible déplacement initial en compression et parce que nous supposons que l'influence de la pression est faible, on néglige les matrices \mathbf{k}_u et \mathbf{k}_λ , comme cela est généralement fait pour les cylindres fins et rigides. On utilise la distribution de force pour calculer les charges critiques avant flambement pour des fibres de verre ayant un module d'Young E de 72,4 GPa et l'on compare ces forces critiques à celles existant dans la littérature [Tab. 3.2]. Pour rappel, la méthode d'Euler suppose que les forces sont appliquées ponctuellement aux extrémités de la fibre, alors que Forgacs et Mason [99] (et DeTeresa [103]) supposent que les forces sont linéairement réparties le long de la fibre.

On constate que l'ordre de grandeur obtenu par les différents modèles est le même que celui obtenu par le calcul éléments finis. En faisant l'hypothèse que les forces sont appliquées aux extrémités, la méthode d'Euler sous-estime la force critique nécessaire au flambement, et en supposant les forces linéairement réparties, c'est-à-dire en négligeant la forte concentration de charge aux extrémités de la fibre, DeTeresa la surestime. Il semble que la bonne valeur se situe donc entre ces deux prédictions. Nous avons choisi de nous servir par la suite des résultats de calculs obtenus par la méthode d'Euler, étant donné que l'utilisation systématique de simulations éléments finis serait beaucoup trop lourde à mettre en place et que l'on s'est servi de la méthode d'Euler pour vérifier nos hypothèses (§ 3.2.2). On gardera à l'esprit par la suite que cette méthode a tendance à surestimer la casse de fibre.

3.3 Calcul simplifié de l'écoulement en extrusion bivis. Utilisation du logiciel Ludovic[®]

Ludovic[®] [54] est un logiciel de calcul global pour les écoulements de polymères dans les extrudeuses bivis corotatives autonettoyantes. Basé sur une approche d'approximation de la lubrification hydrodynamique, il a été validé par comparaison à des expériences et à des modèles numériques plus sophistiqués. Il permet d'obtenir, pour n'importe quel profil de vis incluant des éléments de vis à pas direct et indirect et des éléments malaxeurs, l'évolution des principales variables d'écoulement le long de la vis, telles que la pression, la température moyenne, le temps de séjour et le taux de remplissage. Grâce aux approximations faites, ce modèle peut être facilement et rapidement utilisé sur un ordinateur personnel ou une station de travail.

Nous allons présenter dans cette section les bases théoriques du modèle utilisé dans ce logiciel.

3.3.1 Écoulement dans un élément de vis

L'écoulement dans un élément de vis est traité classiquement en 1D ou 2D avec le "groove model" [111] dans lequel les chenaux de vis sont mis à plat, avec un fourreau glissant au-dessus. Dans notre cas, on utilise les coordonnées cylindriques dans lesquelles on considère que la section du chenal est perpendiculaire au filet de vis [Fig. 3.22].

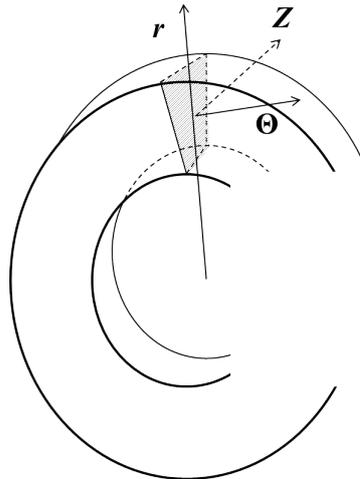


FIGURE 3.22 – Configuration d'un élément de vis (chambre en C) et système de coordonnées cylindriques

On s'intéresse essentiellement à l'écoulement principal le long du chenal de vis dans la direction Θ . L'écoulement le long de la vis forme une sorte de 8, qui est composé d'une succession d'écoulements le long des chambres en C et à travers la zone d'interpénétration entre les vis adjacentes. On doit donc développer la relation vitesse/débit pour ces deux catégories d'écoulement. Dans une approche 1D simplifiée, la section du chenal est considérée comme un rectangle, avec une largeur constante W . On suppose que l'écoulement est localement newtonien et isotherme. Cela signifie que l'on utilise les équations d'écoulement newtonien, mais avec une viscosité spécifique η qui peut être définie, dans chaque chambre en C ou zone d'interpénétration, comme une

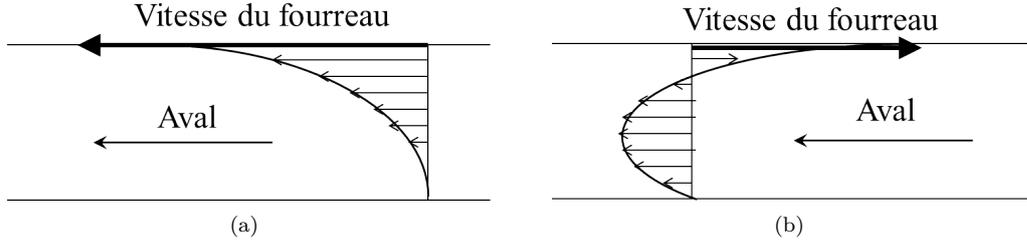


FIGURE 3.23 – Configuration de l'écoulement longitudinal dans la section d'un chenal de vis, dans un élément de vis à pas direct (a) et à pas inverse (b)

fonction des valeurs locales du taux de cisaillement et de la température. Avec cette hypothèse, le débit volumétrique longitudinal Q_C le long de la chambre en C peut s'écrire [112] :

$$Q_C = F_{dc} W R_e \left[1 - \frac{R_i^2}{R_e^2 - R_i^2} \ln \left(\frac{R_e}{R_i} \right)^2 \right] \frac{\Omega R_e}{2} \cos \Phi - F_{pc} \frac{1}{8\eta} \frac{\Delta p_C}{\Delta \Theta_C} W (R_e^2 - R_i^2) \left[1 - \left(\frac{2R_i R_e}{R_e^2 - R_i^2} \ln \frac{R_e}{R_i} \right)^2 \right] \quad (3.108)$$

où R_i et R_e sont respectivement les rayons intérieur et extérieur du chenal, Φ est l'angle du filet, W est la largeur du chenal, Ω est la vitesse de rotation des vis (en rad/s), η est la viscosité et Δp_C la différence de pression le long de la chambre en C, définie par l'angle $\Delta \Theta_C$. Classiquement, le débit est exprimé comme la somme d'un terme de cisaillement (positif, dû au déplacement relatif du fourreau) et d'un terme de pression (généralement négatif, correspondant à la capacité de pompage de l'élément de vis). F_{dc} et F_{pc} sont deux facteurs de forme correctifs, utilisés pour rendre compte de la géométrie réelle du chenal. Ils peuvent être définis en comparant les résultats de modèles 1D et 2D [113, 114]. L'équation (eq. 3.108) peut être étendue aux fluides non newtoniens, en supposant que la viscosité η est une fonction du taux de cisaillement moyen $\dot{\gamma}$ dans la chambre en C. Cela signifie que le taux de cisaillement est évalué en prenant en compte à la fois l'écoulement longitudinal (dans la direction Θ) et l'écoulement transverse (dans la direction Z). On suppose que la composante radiale u de la vitesse est négligeable et que les composantes v et w (dans les directions Θ et Z) sont uniquement fonctions de la position radiale r . Par exemple, pour un fluide suivant une loi puissance, on a :

$$\eta = K \dot{\gamma}^{n_p - 1} \quad (3.109)$$

avec :

$$\dot{\gamma} = \frac{2}{R_e^2 - R_i^2} \int_{R_e}^{R_i} r \left[\left(\frac{dv}{dr} - \frac{v}{r} \right)^2 + \left(\frac{dw}{dr} \right)^2 \right]^{1/2} dr \quad (3.110)$$

où K et n_p sont les paramètres de la loi puissance. Cette procédure permet d'utiliser n'importe quel type de loi de viscosité (puissance, Carreau, Carreau-Yasuda, Casson...) dans le modèle sans modifier les équations de base de l'écoulement.

L'analyse ci-dessus peut être appliquée aussi bien aux éléments de vis à pas direct qu'à ceux à pas inverse. Comme montré [Fig. 3.23], dans un élément à pas direct, la vitesse relative du fourreau a la même direction que la direction principale d'écoulement et le gradient de pression

est généralement positif. Au contraire, dans un élément de vis à pas inverse, la vitesse du fourreau est opposée à l'écoulement et tend à entraîner le fluide vers l'amont. Par conséquent, cet élément doit obligatoirement générer une chute de pression, ou un gradient de pression négatif, pour pouvoir pousser le polymère vers l'aval. Donc, pour appliquer l'équation (eq. 3.108) au calcul de la baisse de pression $\Delta p'_C$ d'un élément de vis à pas inverse le long de la chambre en C, on doit garder le membre de droite identique et juste changer le signe du débit (membre de gauche). De la même manière, l'écoulement dans un élément à pas direct partiellement rempli peut être prédit par l'équation (eq. 3.108), en imposant $\Delta p_C = 0$ et en remplaçant W par la largeur de remplissage du chenal W' . À cause de leur écoulement particulier, les éléments de vis à pas inverse sont toujours totalement remplis.

Dans la zone d'interpénétration entre les deux vis, la géométrie et la cinématique sont toutes les deux très complexes, ce qui justifierait un calcul 3D complet. Dans une approche simplifiée, on considère seulement cette zone comme une restriction locale, dans laquelle il est supposé n'y avoir qu'un écoulement de pression. Cela veut dire que l'on néglige le déplacement relatif des surfaces de vis, qui agissent dans des directions opposées dans cette zone. On doit également définir une géométrie approchée, rendant compte de la restriction de l'écoulement. On définit une section transversale approximative à partir des paramètres caractéristiques principaux de la géométrie vis/fourreau. La largeur de cette aire est définie par :

$$W^* = W - \alpha_s R_e \sin \Phi \quad (3.111)$$

avec α_s l'angle définissant l'épaisseur du filet, donné par [115] :

$$\alpha_s = \frac{\pi}{m_f} - 2\psi_i \quad (3.112)$$

où m_f est le nombre de filets de vis et ψ_i est l'angle d'interpénétration, défini par Booy comme :

$$\cos \psi_i = \frac{C_l}{2R_e} \quad (3.113)$$

où C_l est l'entraxe.

Même si cette définition de la section n'est pas exacte, il a été montré en comparant des profils de pression théoriques et expérimentaux [112] que c'est une approximation raisonnable.

Pour des raisons de simplicité, on utilise pour la relation pression/débit la même expression que dans l'équation (eq. 3.108). Cela donne donc :

$$Q_C = F_{pc}^* \frac{1}{8\eta^*} \frac{\Delta p^*}{\Delta \Theta^*} W^* (R_e^2 - R_i^2) \left[1 - \left(\frac{2R_i R_e}{R_e^2 - R_i^2} \ln \frac{R_e}{R_i} \right)^2 \right] \quad (3.114)$$

où η^* et F_{pc}^* sont les valeurs de la viscosité et le facteur de forme calculés en prenant en compte la géométrie locale. Comme la longueur de la chambre en C est définie par un angle $\Delta \Theta_C = 2\pi - 2\psi_i$, la zone d'interpénétration est supposée correspondre au complément, c'est-à-dire que l'angle $\Delta \Theta_C^*$ est égal à $2\psi_i$.

3.3.2 Écoulement dans les éléments malaxeurs

Différents types d'éléments malaxeurs sont communément utilisés en extrusion bivis. Dans la suite, on se focalise sur le matériel le plus courant : les éléments malaxeurs bilobes. Les éléments

trilobes peuvent être facilement extrapolés à partir de ce calcul. Il existe des descriptions pour les autres malaxeurs dans la littérature [112, 116, 117].

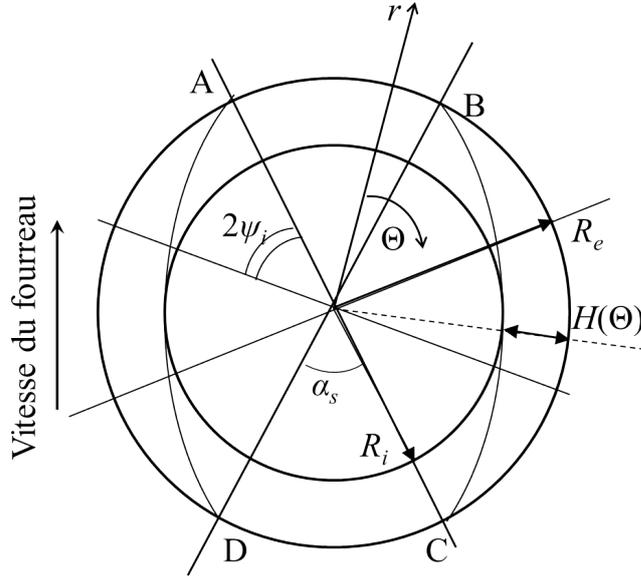


FIGURE 3.24 – Géométrie d'un élément malaxeur bilobe

Dans ce modèle, on s'intéresse à une approche très simple directement dérivée de l'analyse originale de Werner [118]. Pour expliquer le mécanisme de convoyage dans les éléments malaxeurs, Werner considère uniquement l'écoulement selon la direction Θ autour du disque [Fig. 3.24]. À cause de la géométrie et de la vitesse relative du fourreau, cet écoulement est caractérisé par un pic de pression localisé juste avant le sommet du disque (point A, [Fig. 3.24]). Comme les sommets des disques adjacents sont décalés, les profils de pression sont aussi décalés, ce qui crée un gradient de pression axial, parallèle à l'axe de la vis et qui pousse le matériau selon cette direction. On considère cet écoulement autour de l'élément malaxeur et on applique l'approximation de la lubrification hydrodynamique, c'est-à-dire que l'on considère seulement la composante v de la vitesse dans la direction Θ , qui est uniquement fonction de la position radiale r . La relation fondamentale de la dynamique pour un fluide newtonien isotherme donne :

$$\frac{1}{\eta} \frac{dp}{d\Theta} = r \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} rv \right) \quad (3.115)$$

En intégrant deux fois l'équation (eq. 3.115) avec les conditions limites appropriées (pas de glissement sur la surface du disque et sur le fourreau en mouvement), on obtient une relation entre le gradient de pression dans la direction Θ et le débit correspondant Q_Θ :

$$\frac{dp}{d\Theta} = \frac{\frac{Q_\Theta}{E_p} + \Omega R_e^2 \left(\frac{r(\Theta)^2}{R_e^2 - R(\Theta)^2} \ln \frac{R_e}{R(\Theta)} - \frac{1}{2} \right)}{\frac{1}{8\eta} \left[\frac{4R(\Theta)^2 R_e^2}{R_e^2 - R(\Theta)^2} \left(\ln \frac{R_e}{R(\Theta)} \right)^2 - (R_e^2 - R(\Theta)^2) \right]} \quad (3.116)$$

où E_p est l'épaisseur de l'élément malaxeur, R_e est son rayon extérieur (fourreau) et $R(\Theta)$ est le rayon intérieur, défini par :

$$R(\Theta) = R_e - H(\Theta) \quad (3.117)$$

$H(\Theta)$ est obtenu par l'analyse de Booy [115] :

$$H(\Theta) = R_e (1 + \cos \Theta) - \sqrt{C_l^2 - R_e^2 \sin^2 \Theta} \quad (3.118)$$

L'intégration numérique de l'équation (eq. 3.116) le long de la direction Θ entre 0 et π , en utilisant (eq. 3.117) et (eq. 3.118), conduit au profil de pression $p(\Theta)$ autour de l'élément malaxeur. Pour des raisons de symétrie, la pression est identique aux points B et D [Fig. 3.24]. Cette nouvelle condition limite permet de déterminer les valeurs du débit Q_Θ dans la direction Θ , qui est indépendant du niveau de pression autour du malaxeur (c'est-à-dire de la vraie pression en B et D). Une fois le profil de pression dans la direction Θ connu, le gradient de pression axial $\frac{dp}{dz}$ est déterminé en décalant les éléments malaxeurs adjacents et en ajustant le niveau de pression pour correspondre au débit imposé dans la direction axiale [119].

3.3.3 Le modèle global

Les modèles élémentaires précédents doivent maintenant être reliés pour obtenir une description globale de l'écoulement le long de l'extrudeuse. Cependant, quelques questions préliminaires doivent d'abord être étudiées. Comme une extrudeuse monovis, une extrudeuse bavis est composée de trois zones fonctionnelles successives, allant de la trémie d'alimentation à la filière. Une section de convoyage solide précède la zone de fusion, qui correspond au changement d'état du matériau, et la zone de convoyage fondu, qui a été étudiée dans les paragraphes précédents. Comme les vis sont généralement faiblement remplies, le convoyage solide n'est pas crucial comme en extrusion monovis. Comme montré expérimentalement [114, 119, 120], des granules solides sont convoyés dans les parties hautes et basses de la zone d'interpénétration et progressent ainsi vers l'aval avec une vitesse égale à $N_r B_p$, où N_r est la vitesse de rotation des vis (en tour/s) et B_p le pas de vis. Dans le modèle global, le temps de séjour dans la section solide est calculé en utilisant cette expression de la vitesse :

$$t_s = \frac{L_o}{N B_p} \quad (3.119)$$

où L_o est la longueur axiale du sous-élément considéré.

La fusion est une étape beaucoup plus importante, bien que pas encore parfaitement comprise. Toutes les études expérimentales [114, 119–121] confirment que la fusion se fait rapidement (comparée à l'extrusion monovis) quand les granules solides rencontrent un élément restrictif, c'est-à-dire un élément de vis à pas inverse ou un bloc d'éléments malaxeurs. Par conséquent, on suppose dans le modèle global que la fusion est instantanée et se déroule avant le premier élément restrictif du profil de vis, quand la pression commence à s'amplifier. Après cela, le matériau est considéré comme étant complètement fondu et peut remplir le chenal de vis, suivant la géométrie et les conditions d'écoulement.

Pour un sous-élément rempli (chambre en C par exemple), le temps de séjour moyen est simplement défini par :

$$t_s = \frac{\rho V_o}{Q} \quad (3.120)$$

où ρ est la densité du polymère fondu, Q est le débit massique total et V_o le volume libre de l'élément considéré, défini suivant l'analyse géométrique de Booy [115] comme :

$$V_o = (A_b - 2A_s) L_o \quad (3.121)$$

où L_o est la longueur axiale de l'élément, et A_b et A_s les sections transverses du fourreau et de la vis, respectivement [115] :

$$A_b = 2(\pi - \psi_i) R_e^2 + C_l R_e \sin \psi_i \quad (3.122)$$

$$A_s = m_f (\psi_i C_l^2 - C_l R_e \sin \psi_i) + \frac{m_f \alpha_s}{2} [R_e^2 + (C_l - R_e)^2] \quad (3.123)$$

Dans les chenaux de vis partiellement remplis, le polymère fondu est seulement entraîné par le mouvement relatif du fourreau. La vitesse moyenne dans la direction du chenal est :

$$\bar{V} = \pi N R_e \cos \Phi \quad (3.124)$$

En utilisant la relation entre l'angle de pas de vis Φ , le pas B_p et le rayon de vis R_e ($B_p = 2\pi R_e \tan \Phi$), le temps de séjour moyen pour une longueur axiale L s'écrit :

$$t_s = \frac{L_o}{\bar{V} \sin \Phi} = \frac{L_o}{N B_p} \frac{2}{\cos^2 \Phi} \quad (3.125)$$

Cette expression permet aussi de calculer le taux de remplissage dans les éléments. Le taux de remplissage f_r est défini comme le rapport entre le volume occupé par le polymère et le volume libre disponible. Donc on a :

$$f_r = \frac{Q t_s}{\rho V_o} \quad (3.126)$$

où V_o est défini par l'équation (eq. 3.121). En utilisant l'équation (eq. 3.120), il est facile de vérifier que f_r est égal à 1 dans les éléments remplis. En remplaçant l'équation (eq. 3.125) dans l'équation (eq. 3.126), f_r peut aussi s'écrire :

$$f_r = \frac{Q}{N_r} \frac{2L_o}{\rho V_o B_p \cos^2 \Phi} \quad (3.127)$$

Donc, pour une géométrie de vis fixée, le taux de remplissage est une fonction linéaire du rapport Q/N_r , qui combine les deux paramètres du procédé et qui est généralement utilisée en extrusion bivis.

L'extrusion bivis est un procédé hautement non-isotherme, donc, le calcul des variations de température est un point important du modèle global. On considère uniquement ici la température moyenne \bar{T} sur l'épaisseur du chenal, ce qui est le seul choix compatible avec une approche mécanique 1D. Dans les sections dédiées aux éléments de vis ou aux éléments malaxeurs, on a présenté les équations isothermes écrites pour de petits sous-éléments (chambre en C, par exemple). D'un sous-élément à un autre, on peut décrire le bilan thermique incluant la puissance dissipée \dot{W} et le transfert de chaleur vers le fourreau et les vis :

$$\rho c_p Q_C \Delta \bar{T} = h_{T_b} (T_b - \bar{T}) S_b + h_{T_s} (T_s - \bar{T}) S_s + \dot{W} \quad (3.128)$$

où c_p est la chaleur spécifique, h_{T_b} et h_{T_s} sont les coefficients de transfert thermique du fourreau et des vis de températures T_b et T_s respectivement. S_b et S_s sont les surfaces d'échange correspondantes. La puissance dissipée \dot{W} est calculée par intégration sur le volume V du sous-élément :

$$\dot{W} = \int_V \eta \dot{\gamma}^2 dV \quad (3.129)$$

où η et $\dot{\gamma}$ sont définis à l'aide des équations (eq. 3.109) et (eq. 3.110). Cela signifie que l'on ne considère que les écoulements le long du chenal et à travers la zone d'interpénétration comme des sources de dissipation thermique.

Connaissant la température \bar{T}_i d'un sous-élément, l'équation (eq. 3.128) permet de définir la température \bar{T}_{i+1} dans le prochain sous-élément par :

$$\bar{T}_{i+1} = \bar{T}_i + \Delta\bar{T}_i \quad (3.130)$$

Une des principales difficultés pour résoudre l'équation (eq. 3.128) est le choix des valeurs des coefficients de transfert thermique. Pour les surfaces de vis, des conditions adiabatiques ($h_{T_s} = 0$) sont généralement choisies quand les vis ne sont pas régulées thermiquement [116, 122, 123]. De plus, en l'absence d'informations réelles sur la température des vis, c'est l'hypothèse la plus pertinente. Pour la surface du fourreau, on peut choisir l'expression déterminée expérimentalement par Todd [124] :

$$h_{T_b} = 0,69 \frac{k}{R_e} \left[\frac{R_e^2 N \rho}{\eta} \right]^{0,28} \left[\frac{c_p \eta}{k} \right]^{0,33} \left[\frac{\eta}{\eta_p} \right]^{0,14} \quad (3.131)$$

où k est la conductivité thermique, η la viscosité moyenne et η_p la viscosité estimée à la paroi (pour le plus haut taux de cisaillement). On peut également utiliser des valeurs prises dans la littérature [125]. Pour des diamètres de vis entre 50 et 160 mm, des valeurs allant de 100 à 1500 W.m⁻².K⁻¹ semblent couvrir la gamme classique des conditions de procédé.

L'énergie spécifique fournie par le produit durant l'extrusion est un autre paramètre important du procédé. Elle est approchée dans le modèle par l'intégration le long du profil entier de la puissance dissipée (eq. 3.129) divisée par le débit en masse, à laquelle on ajoute les termes correspondant à la fusion et à l'échauffement solide :

$$SME = \frac{\dot{W}_{TOT}}{Q} + \Delta H + c_p (T_m - T_0) \quad (3.132)$$

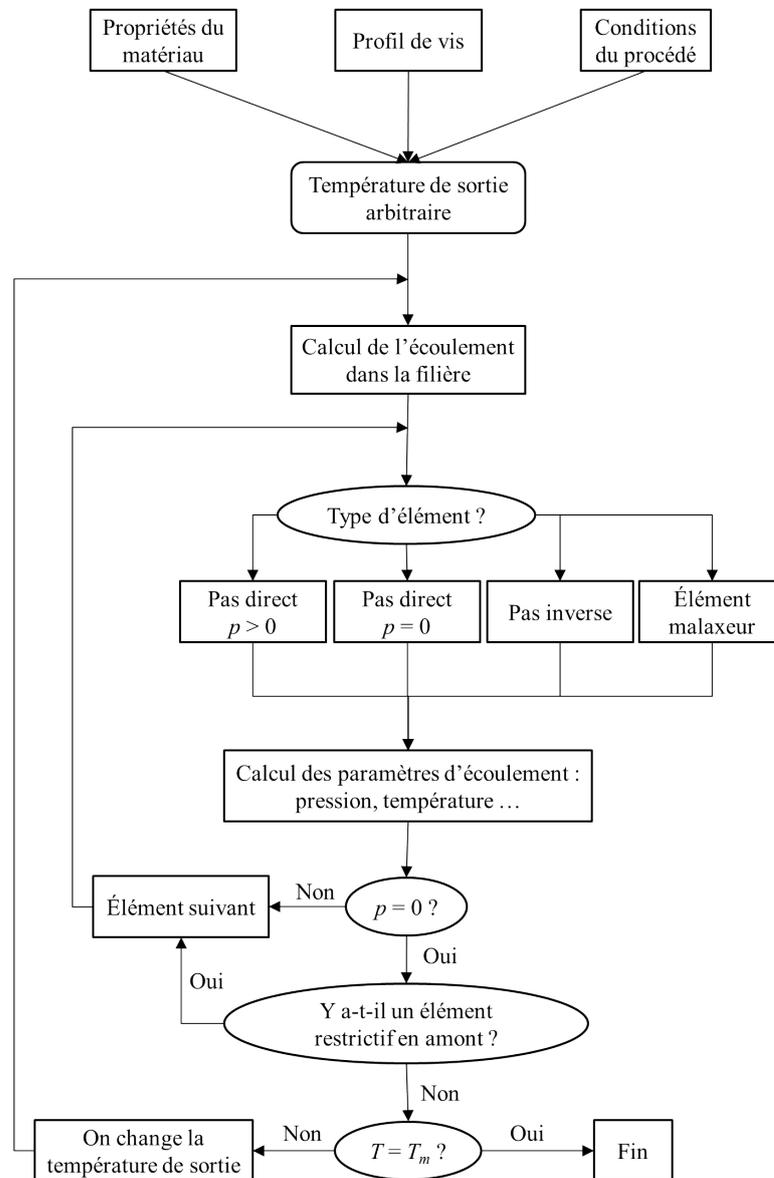
où ΔH est l'enthalpie de fusion, T_m la température de fusion et T_0 la température initiale des granulés.

On a maintenant défini tous les éléments nécessaires pour la construction du modèle global. Comme les vis sont en partie remplies, le taux de remplissage du système n'est pas connu. Il faut donc commencer le calcul en partant de la filière et procéder à reculons. Mais comme la température du produit final n'est pas connue, on doit utiliser une procédure itérative [Fig. 3.25] :

- on définit d'abord, en utilisant les fichiers de données appropriés, le profil de vis et les conditions du procédé (vitesse de rotation, débit, régulations thermique...);
- on choisit une température finale arbitraire;
- on calcule, pour la viscosité correspondante, l'écart de pression à travers la filière;

- sous-élément par sous-élément et en direction de l'amont, on calcule l'évolution de la pression et de la température en utilisant les équations vues précédemment ;
- quand la pression s'établit à zéro (section non-remplie), on vérifie s'il y a un élément restrictif en amont (élément à pas inverse ou éléments malaxeurs). Si c'est le cas, le calcul continue, avec une pression égale à zéro, jusqu'à ce qu'une nouvelle zone sous pression soit rencontrée ;
- quand le premier élément restrictif est atteint, on cherche la position en amont où la pression s'établit à zéro (où la fusion est supposée se dérouler). À cette position, on compare la température calculée à la température de fusion (ou de transition vitreuse pour un polymère amorphe). Le calcul est terminé quand les deux températures sont égales. Sinon, la température finale est modifiée et le calcul recommence. Le résultat final après convergence est indépendant du choix de la première température arbitraire. Suivant la précision requise, la convergence est généralement obtenue entre 10 et 50 itérations, ce qui correspond à quelques secondes en temps CPU sur un ordinateur personnel.

Après convergence, on obtient l'évolution le long des vis des principaux paramètres du procédé, comme la pression, la température, le taux de remplissage, le temps de séjour, le taux de cisaillement et la viscosité.

FIGURE 3.25 – Algorithme général du logiciel Ludovic[©]

3.4 Méthode de simulation de la casse de fibre

Afin de transformer la théorie présentée au paragraphe §3.2 en méthode de simulation, on doit introduire quelques outils tels que la distribution de probabilité et la matrice de fragmentation.

3.4.1 Distribution de probabilité

Étant donné que le rayon de courbure minimum d'une fibre en flexion se situe en son milieu une fibre parfaite cédera toujours en ce point (eq. 3.68). Cependant, une vraie fibre présente toujours des défauts et peut donc casser en un point faible, et ce en dessous de la contrainte critique avant casse σ_s . On doit donc introduire une distribution statistique de la probabilité de casse le long de la fibre pour représenter la présence de défauts. La loi de probabilité de casse usuelle pour les matériaux renforcés de fibres de verres est la distribution de Weibull [126] :

$$P_W(\sigma) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma - \sigma_u}{\sigma_0} \right)^{m_W} \right] \quad (3.133)$$

où σ est la contrainte, σ_u est la contrainte minimale pour que la fibre casse, σ_0 est un facteur d'échelle et m_W est un paramètre de forme. Une limitation est que cette loi est uniquement valide pour un chargement en contraintes homogène le long de la fibre, c'est-à-dire, par exemple, pour une fibre en traction, comme on peut le voir en étudiant une des étapes de raisonnement conduisant à la loi de Weibull. Après avoir remarqué que la probabilité pour une fibre de casser est la probabilité qu'au moins un des segments la composant casse, c'est-à-dire la probabilité du contraire de l'événement « aucun segment ne casse », on arrive à :

$$P_W(\sigma) = 1 - \prod_{i=1}^N (1 - \Psi(\sigma_i)) \quad (3.134)$$

où les segments composant la fibre sont numérotés de i à N , et où $\Psi(\sigma_i)$ est la probabilité pour le segment i de casser sous la contrainte σ_i .

Weibull suppose ensuite que la contrainte est homogène sur la fibre, c'est-à-dire que pour tout i , $\sigma_i = \sigma$, et obtient :

$$P_W(\sigma) = 1 - \prod_{i=1}^N (1 - \Psi(\sigma)) = 1 - (1 - \Psi(\sigma))^N \quad (3.135)$$

Au final, Weibull arrive par approximation à l'équation (eq. 3.133). Dans le cas d'une fibre en flexion, la contrainte n'est pas homogène le long de la fibre (eq. 3.68) et on ne peut donc pas passer par l'étape (eq. 3.135). On reste alors limité à une expression discrète de la probabilité de casse d'une fibre.

Pour remédier à cela, nous proposons de décorrélérer la probabilité de casse de la fibre et la distribution de la probabilité locale de casse le long de la fibre.

La loi choisie pour décrire la probabilité de casse est [Fig. 3.26] :

$$\begin{cases} \text{si } \frac{\sigma_B}{\sigma_m^e} < 1 & P\left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e}\right) = \frac{1 - \exp\left(-\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e}\right)}{1 - \exp(-1)} \\ \text{sinon} & P\left(\frac{\sigma_B}{\sigma_m^e}\right) = 1 \end{cases} \quad (3.136)$$

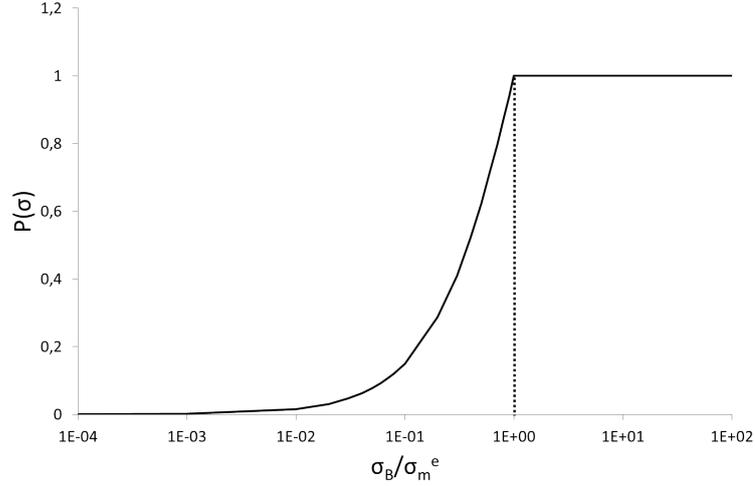


FIGURE 3.26 – Probabilité de casse d’une fibre en fonction du paramètre de flambement σ_B/σ_m^e (eq. 3.101)

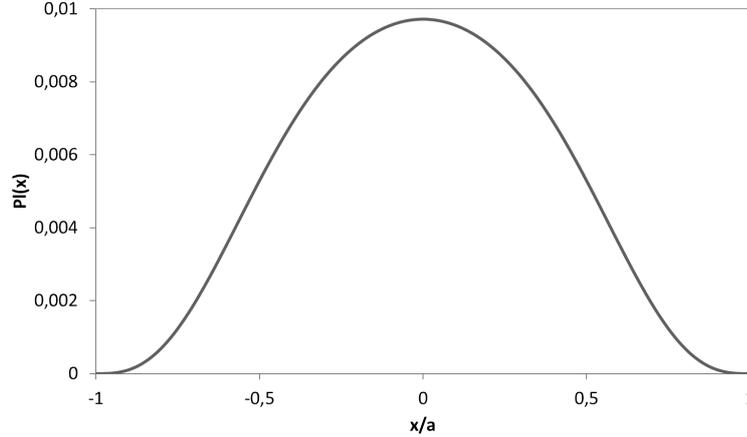
Cette loi de probabilité permet à une fibre de casser en dessous du seuil de flambement, ce qui simule la présence de défauts. La fibre casse nécessairement une fois ce seuil atteint, en accord avec les résultats théoriques vus précédemment [Fig. 3.15].

On a choisi de décrire la distribution de probabilité de casse locale le long de la fibre par un distribution de « type » Weibull, mais il est possible de choisir un autre type de distribution, comme une distribution normale par exemple [36](eq. 3.65).

La distribution de probabilité de casse locale le long de la fibre est alors [Fig. 3.27] :

$$P_l(x) = \frac{1 - \exp\left[-\left(1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2\right)^{m_W}\right]}{\int_{-1}^1 1 - \exp\left[-\left(1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2\right)^{m_W}\right] d\left(\frac{x}{a}\right)} \quad (3.137)$$

où le paramètre m_W permet de changer la forme de la distribution. Dans cette première approche, nous avons décidé de le fixer arbitrairement égal à 3. Comme la théorie le veut (eq. 3.68), la probabilité de casse est maximale au milieu de la fibre ($x = 0$).

FIGURE 3.27 – Distribution de probabilité de casse locale sur la fibre (x/a) avec $m_W = 3$

3.4.2 Matrice de fragmentation

Afin de décrire l'évolution de la totalité de la distribution de longueurs de fibre, on se sert d'une matrice de fragmentation dont le calcul est basé sur le principe de conservation de la masse [127]. D'abord, on distribue les fibres en n classes suivant leur longueur. On choisit de fixer la plus petite longueur accessible l_n inférieure à la longueur de fibre en dessous de laquelle une fibre ne peut plus flamber. Cette longueur correspond au rapport d'aspect β pour lequel le paramètre de flambement (eq. 3.101) est supérieur à 1. Pour trouver ce rapport d'aspect, on résout :

$$1 + \left(\frac{4}{\pi}\right)^2 M \frac{\beta^4}{\ln 2\beta - 1,75} \frac{\eta\dot{\gamma}}{E} = 0 \quad (3.138)$$

avec le paramètre d'orientation M fixé égal à $-1/2$.

On obtient une borne minimale de flambement $\beta = 2,88$ indépendante de la contrainte de cisaillement relative $\eta\dot{\gamma}/E$ ainsi qu'une solution qui dépend de la contrainte de cisaillement relative $\eta\dot{\gamma}/E$. Ainsi, pour toute contrainte de cisaillement relative, une fibre dont le rapport d'aspect est inférieur à $\beta = 2,88$ ne peut pas flamber et, à contrainte de cisaillement relative donnée, il existe un autre rapport d'aspect ($> 2,88$) qui dépend de cette contrainte et en dessous duquel les fibres ne peuvent pas flamber.

On choisit une longueur l_n de 0,02 mm pour un rayon b de 5 μm , soit un rapport d'aspect β égal à 2 et inférieur à la borne minimale de flambement $\beta = 2,88$. On représente ensuite le transfert de masse des classes de fibres longues vers les classes de fibres courtes [Fig. 3.28] en utilisant un système d'équations que l'on peut écrire sous la forme d'une matrice et résoudre avec Matlab®.

Le système d'équation représentant le transfert de masse est :

$$dm_i = \sum_{j=1}^n [\tau_j P_{ij} M_{ij} dt] - \tau_i m_i dt \quad \forall 1 < i < n \quad (3.139)$$

où m_i est la fraction de masse représentée par les fibres de longueurs l_i , P_{ij} est la probabilité pour une fibre de longueur l_j en train de casser de générer une fibre de longueur l_i , M_{ij} est le

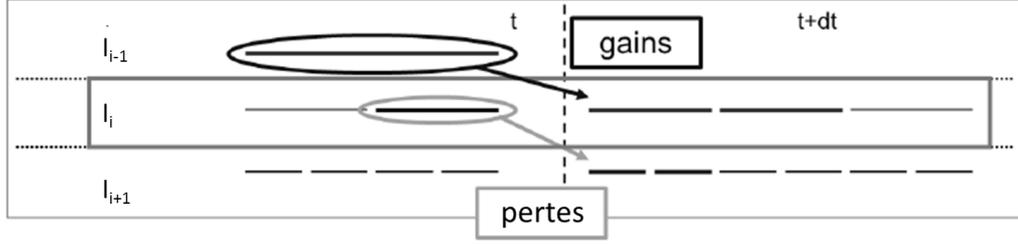


FIGURE 3.28 – Transfert de masse depuis les classes de fibres longues vers les classes de fibres plus courtes du point de vue de la classe l_i

transfert de masse de la classe des fibres de longueur l_j à la classe des fibres de longueur l_i (si une fibre casse au bon endroit pour générer un fibre de longueur l_i) (eq. 3.140), et τ_j est le taux de casse des fibres de longueur l_j , que l'on assimile à la probabilité de casse d'une fibre de longueur l_j par unité de temps. Les grandeurs P_{ij} , M_{ij} et m_i sont sans dimension et le taux de casse τ_j s'exprime en s^{-1} .

Le second terme du membre de droite représente la fraction de masse perdue par la classe i pendant le temps dt , c'est-à-dire le nombre de fibres de longueur l_i ayant cassé durant cet intervalle de temps multiplié par leur masse et divisé par la masse totale de fibres (pertes [Fig. 3.28]). Le premier terme du membre de droite représente la fraction de masse gagnée par la classe i pendant le temps dt , c'est-à-dire le nombre de fibres de longueurs l_i générées par la casse de fibres plus longues multiplié par leur masse et divisé par la masse totale de fibres (gains [Fig. 3.28]).

Quand une fibre de longueur l_j casse en générant une fibre de longueur l_i , elle donne à la classe i une partie de la masse de la classe j . Le transfert de masse entre classes M_{ij} s'écrit :

$$M_{ij} = \frac{l_i}{l_j} m_j \quad (3.140)$$

On a donc :

$$dm_i = \sum_{j=1}^n \left[\tau_j P_{ij} \frac{l_i}{l_j} m_j dt \right] - \tau_i m_i dt \quad 1 < i < n \quad (3.141)$$

Ce système d'équation peut s'écrire sous la forme d'une matrice de fragmentation \mathbf{D} . On a alors :

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \mathbf{D}\mathbf{m} = [(\mathbf{B} - \mathbf{I})\mathbf{S}]\mathbf{m} \quad (3.142)$$

où \mathbf{B} est la matrice de distribution (eq.3.144) et \mathbf{S} la matrice de casse (eq. 3.143).

On note que, une fibre n'ayant aucune chance de générer une fibre plus longue qu'elle-même ou de longueur égale à elle-même, on a $P_{ij} = 0$ pour $l_i \geq l_j$ c'est-à-dire pour $i \leq j$. De plus, les fibres les plus petites possibles étant celles de la classe n , elles ne peuvent pas casser, donc $\tau_n = 0$ et $P_{nn} = 1$. Enfin, les fibres de la dernière classe au-dessus ne peuvent pas casser qu'en générant des

fibres de longueur l_n , donc $P_{nn-1} = 1$. On a donc :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \tau_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \tau_2 & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \tau_i & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \tau_{n-1} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.143)$$

et :

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ P_{21} \frac{l_2}{l_1} & \ddots & \ddots & & & & & \vdots \\ P_{31} \frac{l_3}{l_1} & P_{32} \frac{l_3}{l_2} & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ P_{i1} \frac{l_i}{l_1} & P_{i2} \frac{l_i}{l_2} & \cdots & P_{ij} \frac{l_i}{l_j} & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & P_{n-1n-2} \frac{l_{n-1}}{l_{n-2}} & 0 & 0 \\ P_{n1} \frac{l_n}{l_1} & P_{n2} \frac{l_n}{l_2} & \cdots & P_{nj} \frac{l_n}{l_j} & \cdots & P_{nn-2} \frac{l_n}{l_{n-2}} & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.144)$$

Comme la distribution de probabilité de casse locale sur une fibre est symétrique par rapport au centre de la fibre [Fig. 3.27], la probabilité P_{ij} pour une fibre de longueur l_j en train de casser de générer une fibre de longueur l_i est deux fois la probabilité P_l (eq. 3.137) de casser en un des deux points possibles [Fig. 3.29], ce qui donne :

$$P_{ij} = 2P_l(x_i) \quad (3.145)$$

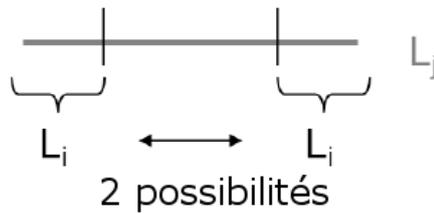


FIGURE 3.29 – Une fibre de longueur l_j en train de casser a deux manières possibles de générer une fibre de longueur l_i

On considère que le taux de casse τ_j des fibres de longueur l_j est équivalent à la valeur de la probabilité P_T pour une fibre de longueur l_j de casser pendant une rotation de période T , divisée par cette période T (eq. 3.18). On calcule la probabilité de casse P_T pendant une rotation

en ajoutant les probabilités de casses P (eq. 3.136) pour chaque orientation \mathbf{P} successive de la fibre :

$$P_T(l_j) = \int_{orbiteC} P(\sigma_B(\mathbf{P})) \frac{dC}{\dot{C}T} \quad (3.146)$$

où la contrainte σ_B (eq. 3.20) dépend de l'orientation \mathbf{P} (ou du facteur d'orientation M), de la longueur l_j et du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$. C est l'abscisse curviligne sur l'orbite. Les orientations successives \mathbf{P} de la fibre pendant une rotation sont données par l'équation de Jeffery (eq. 3.17). On a donc $\tau_j = P_T(l_j)/T$.

3.4.3 Simulation de la casse de fibre

On s'intéresse à du polyamide 12 (PA12) chargé à 30 % de fibres de verres, dont le comportement a été mesuré au préalable, extrudé par une machine de laboratoire (ThermoFisher PTW 24). On fixe arbitrairement $m_W = 3$ comme paramètre pour la distribution de probabilité de casse locale (eq. 3.137). On choisit de fixer l'angle θ entre la fibre considérée et l'axe z' (perpendiculaire au plan de cisaillement [Fig. 3.4]) égal à $\pi/2$ afin de simplifier les calculs. Comme on l'a vu plus tôt §3.2.2, cette approximation est raisonnable dans notre domaine de valeurs. On part d'une distribution initiale de longueurs déterminée expérimentalement [107], puis on calcule le taux de cisaillement et le temps de séjour le long d'un profil d'extrudeuse bivis à l'aide du logiciel Ludovic® [Fig. 3.30] (§ 3.3).

On suppose ensuite que l'écoulement dans l'extrudeuse bivis est un écoulement de cisaillement simple et, afin d'alléger le calcul, on calcule le mouvement de rotation d'une seule fibre ayant une longueur égale à la longueur moyenne calculée sur l'échantillon. Pour cela, on utilise les paramètres calculés par Ludovic® sur le premier segment d'extrudeuse [Fig. 3.30], ainsi que l'équation de Jeffery (eq. 3.17), et l'on suppose que cette fibre « moyenne » tourne dans le plan de cisaillement. On obtient ainsi un ensemble d'orientations et de temps passés selon ces orientations sur une période de rotation.

Après cela, on calcule la contrainte σ_B (eq. 3.20) appliquée sur une fibre selon chacune des orientations et la contrainte limite avant flambement σ_m^e (eq. 3.81) pour chaque classe de longueur fibre. Ensuite, on calcule la probabilité de casse P d'une fibre (eq. 3.136) pour chaque classe de longueur et chaque orientation précédemment obtenues. À partir de là, on déduit la probabilité P_T de casser pendant une période de rotation pour chaque classe de longueur (eq. 3.146). En parallèle, on calcule la distribution de probabilité P_l de casse locale le long d'une fibre pour chaque classe de longueur (eq. 3.137) et on en déduit la probabilité P_{ij} pour une fibre de longueur l_j en train de casser de générer une fibre de longueur l_i (eq. 3.145).

En utilisant toutes ces valeurs, on génère une matrice de fragmentation \mathbf{D} (eq. 3.142). On résout le système d'équation avec Matlab® en utilisant une méthode de Dormand-Prince [128] et on réinjecte la distribution de masses obtenue au point de départ du calcul du prochain segment d'extrudeuse [Fig. 3.30]. On répète ensuite ce processus jusqu'à la sortie de la filière et l'on obtient ainsi l'évolution de la distribution de longueurs de fibre tout au long de l'écoulement.

L'algorithme de calcul est donné en figure [Fig. 3.31].

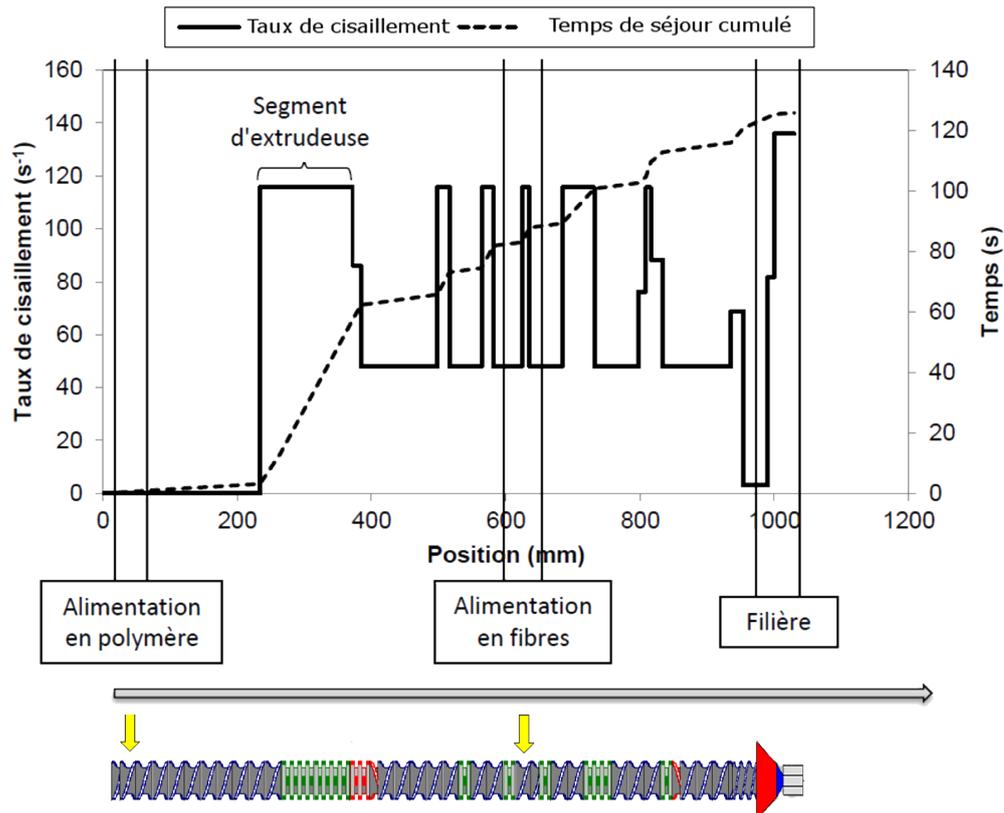


FIGURE 3.30 – Taux de cisaillement moyen et temps de séjour cumulé calculés avec Ludovic[®] le long d'une extrudeuse baxis

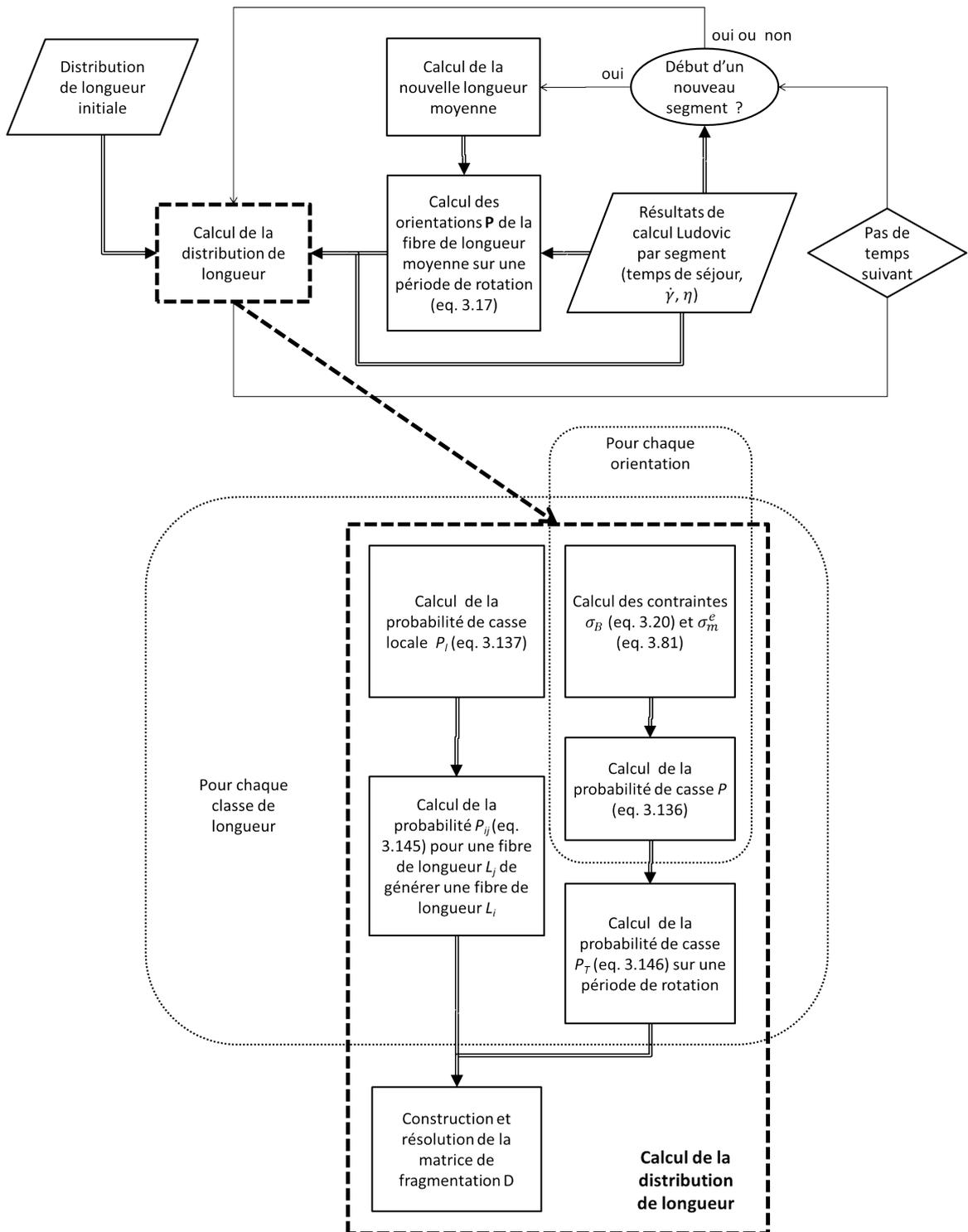


FIGURE 3.31 – Algorithme de la simulation de la casse de fibre

3.4.4 Sensibilité aux paramètres

Afin de vérifier dans quelle mesure une variation des paramètres de simulation influe sur les résultats de calcul, on teste leur influence sur un cas test. On cherche également à évaluer l'influence des paramètres du procédé (taux de cisaillement, viscosité, distribution et distribution initiale) sur le résultat afin d'éventuellement simplifier dans le futur l'algorithme de calcul en ne prenant en compte que les paramètres dominants. Le cas test choisi est la simulation de la casse de fibres de longueur initiale 1 mm (distribution monodisperse), de diamètre 0,01 mm dans un fluide newtonien en cisaillement avec un taux de cisaillement de 100 s^{-1} et une viscosité de 1 000 Pa.s. La longueur minimale fixée est de 0,02 mm ce qui est inférieur à la limite du domaine de flambement d'Euler ($\beta = 2,88$ eqs.3.81, 3.20). Le module d'Young est celui d'une fibre de verre ($E = 72,4 \text{ GPa}$). Le pas de temps entre deux résolutions du système non linéaire est de 0,1 s et la longueur moyenne utilisée pour le calcul de la rotation de Jeffery est réactualisée toutes les 10 secondes. On fait varier chacun de ces paramètres un par un afin de déterminer leur incidence sur le calcul.

Tout d'abord, on teste l'influence de la contrainte de cisaillement $\eta\dot{\gamma}$ en faisant varier la viscosité η . On constate que la distribution évolue jusqu'à un certain temps à partir duquel elle se stabilise [Figs. 3.32, 3.33]. On trouve comme attendu que plus la contrainte de cisaillement est élevée, plus les fibres obtenues en sortie sont courtes en moyenne et plus la distribution est resserrée car il y a moins de fibres longues « survivantes » [Fig. 3.34].

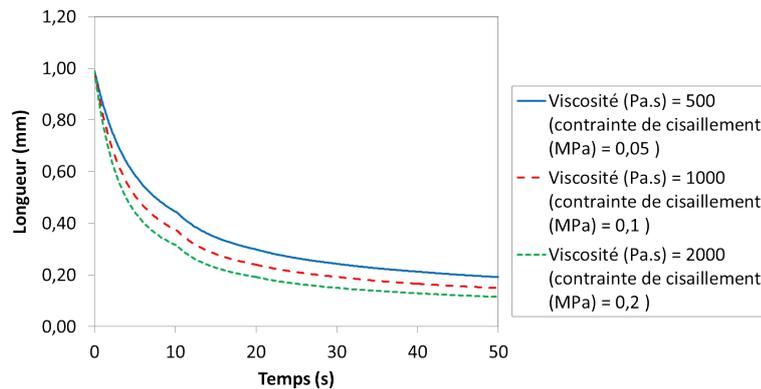


FIGURE 3.32 – Évolution au cours du temps de la longueur moyenne en masse de la distribution test pour différentes viscosités ou contraintes de cisaillement (à taux de cisaillement fixé)

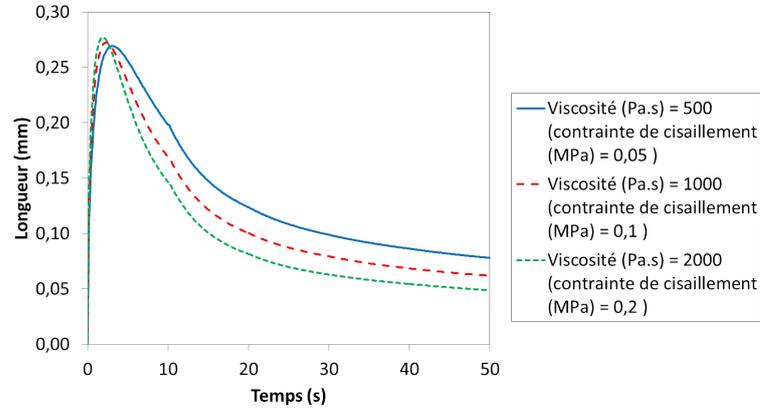


FIGURE 3.33 – Évolution au cours du temps de l'écart type (en masse) de la distribution test pour différentes viscosités ou contraintes de cisaillement (à taux de cisaillement fixé)

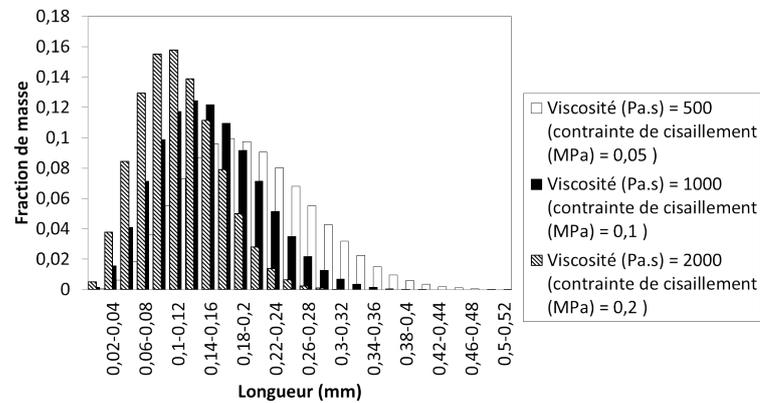


FIGURE 3.34 – Distribution de longueurs finale (à t=50 s) en fraction de masse pour différentes viscosités ou contraintes de cisaillement (à taux de cisaillement fixé)

On cherche maintenant à évaluer l'influence du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ sur le calcul, indépendamment de la contrainte de cisaillement $\eta\dot{\gamma}$. En effet, le taux de cisaillement intervient dans la contrainte de cisaillement de la même manière que la viscosité, mais il intervient également dans le calcul de la rotation de la fibre (eq. 3.18). On fixe donc la contrainte de cisaillement en jouant sur la viscosité η et on fait varier le taux de cisaillement, afin de n'étudier que sa contribution à travers le calcul de rotation de la fibre. Les distributions obtenues à différents temps pour les différents taux de cisaillements testés sont très proches les unes des autres (par exemple à $t = 50$ s [Fig. 3.35]).

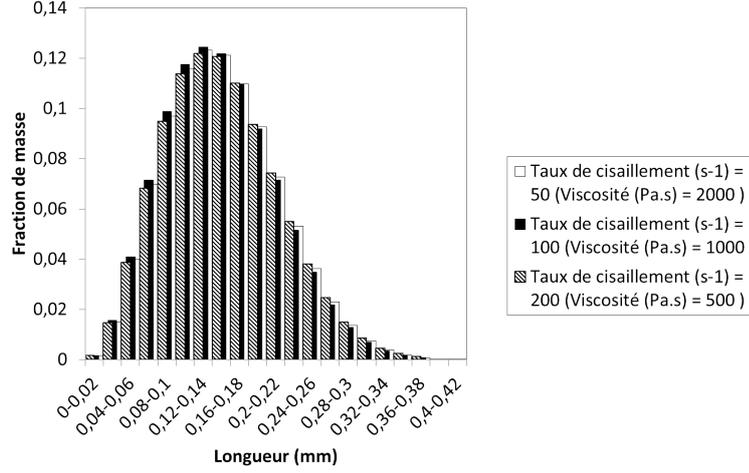


FIGURE 3.35 – Distribution de longueurs finale (à $t=50$ s) en fraction de masse pour différents taux de cisaillement (à contrainte de cisaillement fixée)

Afin de quantifier cette proximité, on cherche à comparer les distributions deux par deux. Pour cela, on transforme ces distributions en fractions de masses en distributions en nombre de fibres. À partir des fonctions de répartitions F_r correspondantes, on calcule des coefficients de Kolmogorov-Smirnov pour des paires de distributions [129] :

$$KS = \max_x |F_{r1}(x) - F_{r2}(x)| \sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}} \quad (3.147)$$

où n_1 et n_2 sont le nombre total de fibres dans les distributions 1 et 2 respectivement.

À partir de ce coefficient, on peut déterminer la probabilité que les deux « séries » de longueurs de fibres suivent la même loi de distribution :

$$P_{KS} = 2 \sum_{k=1}^K (-1)^{k-1} \exp(-2k^2 KS^2) \quad (3.148)$$

avec K fixé suffisamment grand pour que le K ème terme soit négligeables devant les autres termes k .

Il est à noter que ce critère de comparaison est très sévère. En effet, deux distributions, même très proches, qui ne sont pas issues de la même loi, obtiennent une probabilité quasiment nulle.

On constate ainsi que pour trois taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ différents, à contrainte de cisaillement $\eta\dot{\gamma}$ fixée, la probabilité pour que les trois distributions suivent la même loi est égale à 100 % sauf au temps $t=20$ s où elle est égale à 38,5 % environ [Fig. 3.36], ce qui est sans doute dû à l'extrême sensibilité du critère de Kolmogorov-Smirnov et à la présence d'une singularité. On en déduit que le taux de cisaillement dans le calcul de la vitesse de rotation de la fibre n'a pas beaucoup d'influence sur le calcul de la casse devant la contrainte de cisaillement $\eta\dot{\gamma}$. On pourra donc dans l'avenir tenter d'alléger l'algorithme en simplifiant cette partie de la simulation.

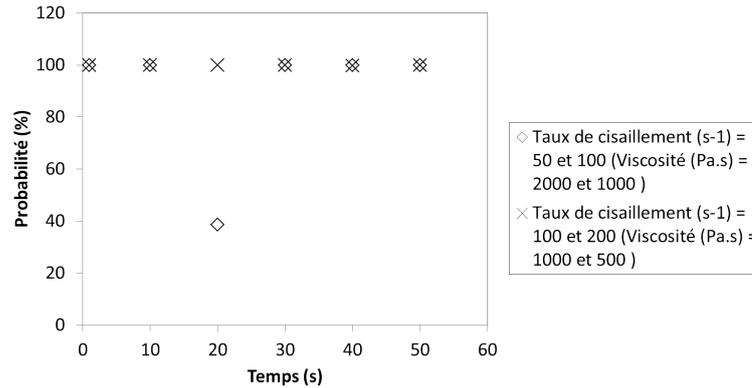


FIGURE 3.36 – Probabilités pour que les distributions de longueurs en nombre à différents instants du calcul suivent une même loi pour des taux de cisaillement différents (à contrainte de cisaillement fixée)

Le calcul de rotation de la fibre a tout de même une influence sur la simulation. En effet, lorsque l'on allonge le temps entre deux réévaluations de la longueur moyenne pour le calcul de la rotation, dans le but d'accélérer le calcul, on constate que si le temps devient trop long, c'est-à-dire si la longueur moyenne devient trop « fautive », on obtient des résultats différents [Figs. 3.37,3.38]. Entre les distributions finales pour 5 et 10 secondes, l'écart est faible (PKS=99,9 %), mais entre les distributions pour 10 et 15 secondes, l'écart est important (PKS=1,2 %). De plus, même si les distributions finales sont proches, il y a des écarts importants entre les distributions pour des temps intermédiaires pour les cas 5 et 10 secondes. Pour des simulations réelles avec des paramètres du même ordre de grandeur, il faudra donc au moins rester autour d'un temps de 10 secondes pour obtenir une bonne précision de la distribution finale.

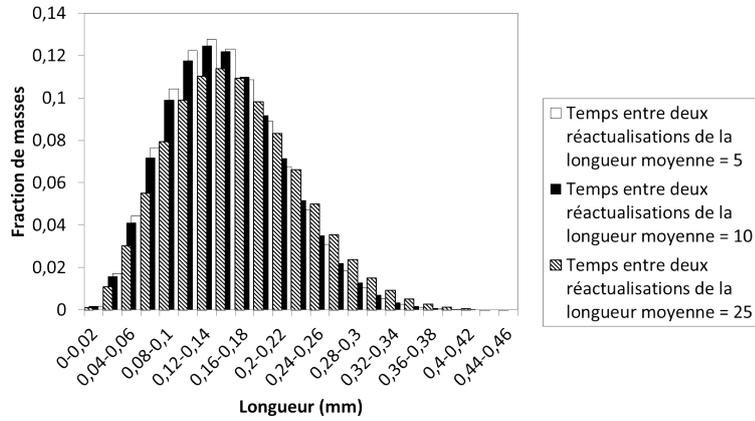


FIGURE 3.37 – Distribution de longueurs finale (à $t=50$ s) en fraction de masse pour des temps entre réactualisation de la longueur moyenne différents

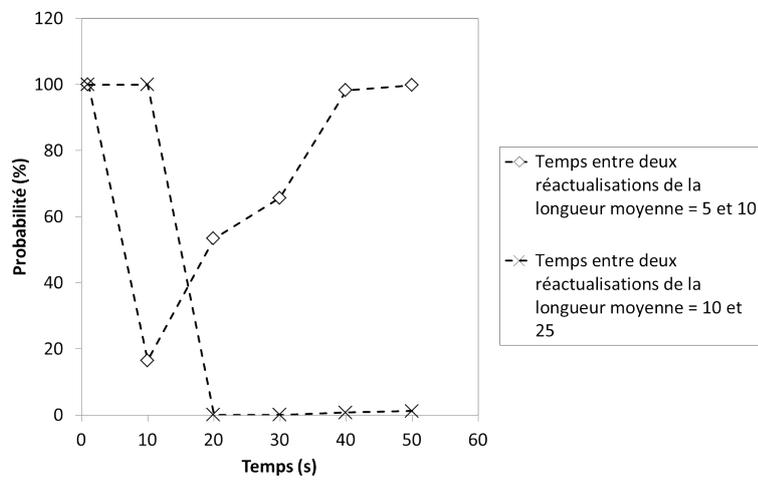


FIGURE 3.38 – Probabilités pour que les distributions de longueurs en nombre suivent une même loi à différents instants du calcul pour des temps entre réactualisations de la longueur moyenne différents

On veut également connaître la sensibilité de la simulation au pas de temps choisi entre deux calculs. Pour cela, on le fait varier et on constate, en comparant les distributions finales et en calculant les probabilités de Kolmogorov-Smirnov, que les résultats sont quasiment identiques d'une valeur du pas de temps à l'autre [Fig. 3.39].

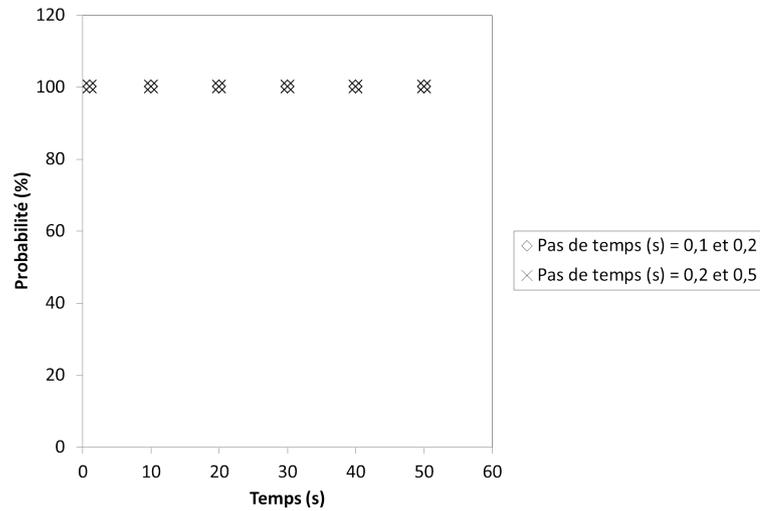


FIGURE 3.39 – Probabilités pour que les distributions de longueurs en nombre à différents instants du calcul suivent une même loi pour différents pas de temps à différents instants du calcul

On cherche maintenant à évaluer l'influence de la distribution initiale de longueurs de fibre sur les résultats de calcul. En effet, les données expérimentales nécessitant la mesure de beaucoup de fibres pour être parfaitement représentatives de l'échantillon considéré, il vaut mieux que la simulation ait une certaine tolérance à la variation des conditions initiales. Dans un premier temps, on garde des distributions monodisperses mais on change leur valeur. On constate que les distributions finales sont quasiment les mêmes pour toutes les longueurs initiales, mêmes s'il faut un certain temps de simulation pour qu'elles se rejoignent [Figs. 3.40, 3.41].

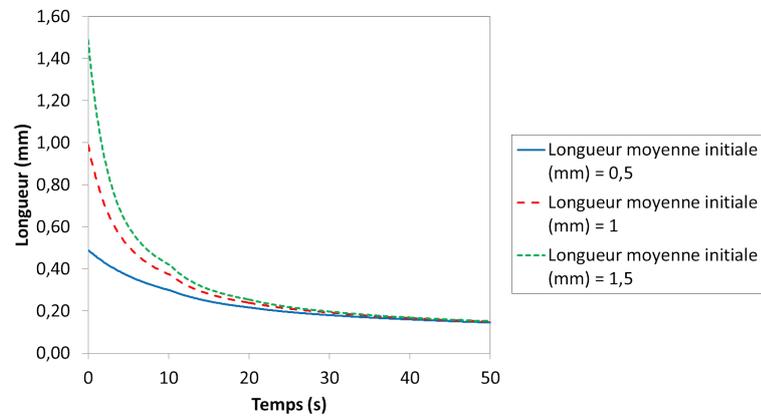


FIGURE 3.40 – Évolution au cours du temps de la longueur moyenne en masse de la distribution test pour différentes longueurs initiales de fibres

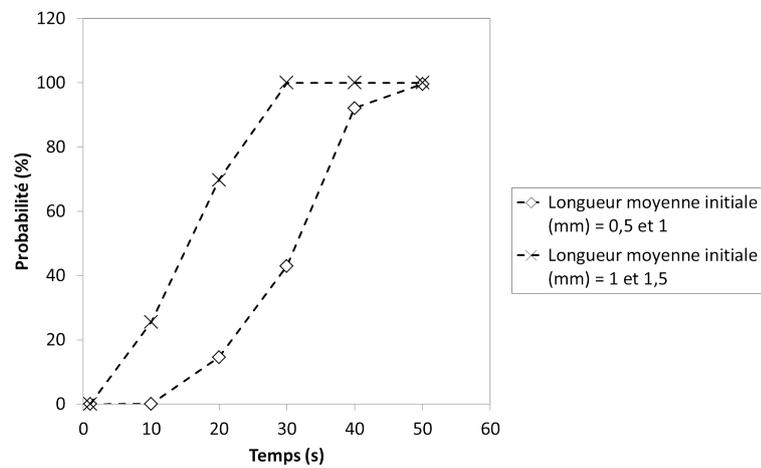


FIGURE 3.41 – Probabilités pour que les distributions de longueurs en nombre suivent une même loi pour des longueurs moyennes initiales différentes à différents instants du calcul

Dans un deuxième temps, on garde une même valeur de la longueur moyenne initiale mais on fait varier la forme de la distribution. On compare une distribution monodisperse, une distribution normale [Fig. 3.42] et une distribution simplement aléatoire [Fig. 3.43] ayant la même longueur moyenne. On constate que l'évolution de la longueur moyenne et la distribution finale simulées à partir de la distribution initiale normale sont très proches des résultats obtenus à partir de la distribution monodisperse. La distribution aléatoire donne des résultats seulement légèrement différents, malgré une probabilité de correspondance à $t = 50$ s de 3,7 % qui est due à l'extrême sensibilité du critère de Kolmogorov-Smirnov [Figs. 3.44, 3.45, 3.46]. Pour un temps de simulation suffisamment long, la simulation n'est donc pas très sensible à la forme de la distribution initiale et le résultat final n'est même pas très sensible à la longueur moyenne initiale. Au-delà de quelques dizaines de secondes, le résultat de calcul est donc quasi-indépendant de la distribution initiale de longueur des fibres. On obtiendra donc des résultats satisfaisants pour des temps de mélange suffisamment long même si l'on ne connaît pas précisément la distribution de longueur initiale des fibres que l'on veut étudier. Cependant, pour des temps courts, il peut être intéressant de connaître plus précisément la distribution initiale afin de prédire la persistance de longues fibres au cours du mélange.

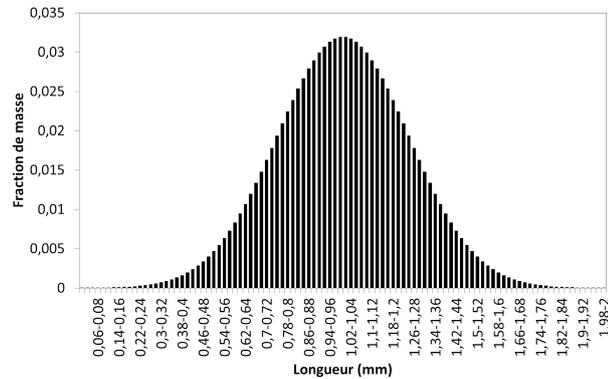


FIGURE 3.42 – Distribution de longueurs initiale (à $t = 0$ s) en fraction de masse : distribution normale

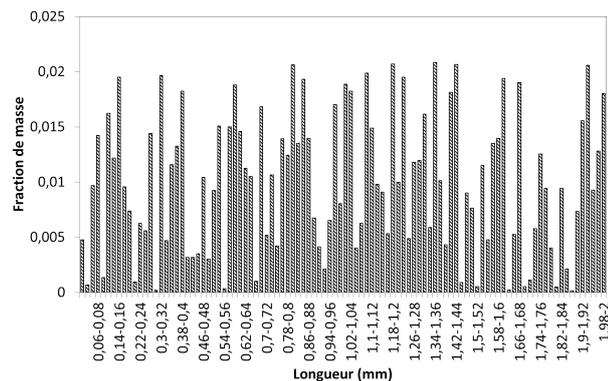


FIGURE 3.43 – Distribution de longueurs initiale (à $t = 0$ s) en fraction de masse : distribution aleatoire

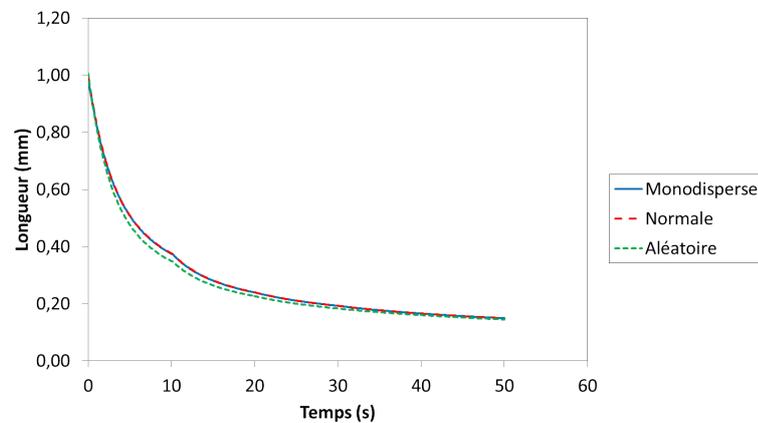


FIGURE 3.44 – Évolution au cours du temps de la longueur moyenne en masse de la distribution test pour différentes formes de distributions initiales

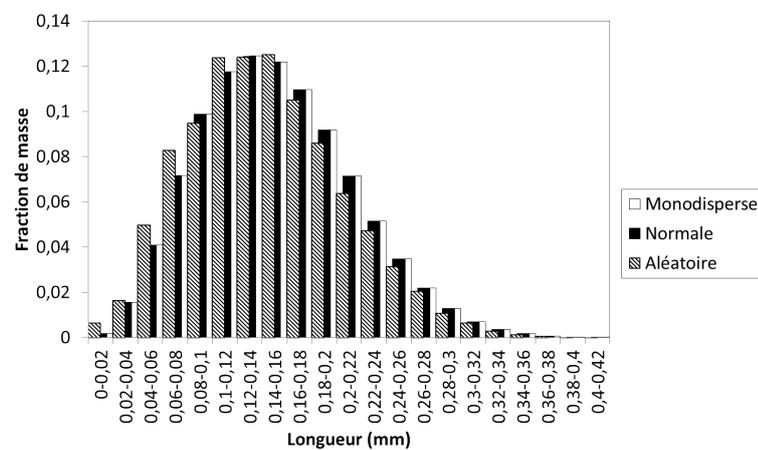


FIGURE 3.45 – Distribution de longueurs finale (à $t = 50$ s) en fraction de masse pour différentes formes de distributions initiales

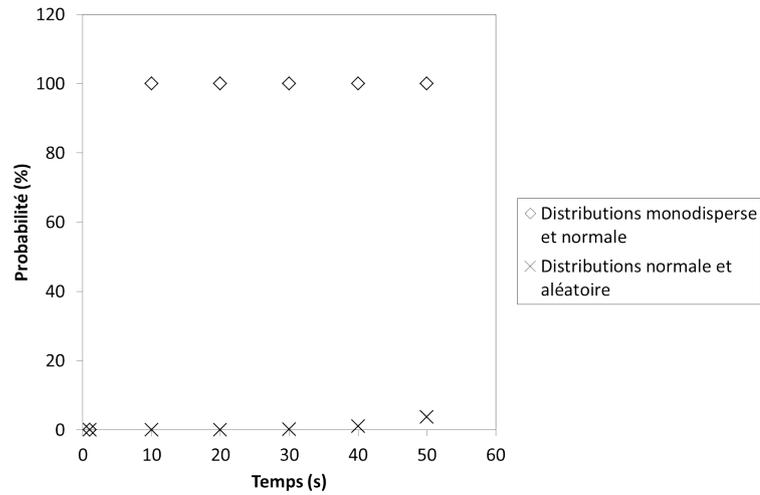


FIGURE 3.46 – Probabilités pour que les distributions de longueurs en nombre à différents instants du calcul suivent une même loi pour des formes de distributions initiales différentes

Pour ne pas fausser les résultats en introduisant une limite minimale arbitraire à la longueur des fibres, l'idéal serait d'imposer comme longueur minimale une longueur assez inférieure à la longueur théorique en dessous de laquelle les fibres ne peuvent pas flamber, c'est-à-dire dans notre cas 0,0288 mm (eq. 3.101). Ainsi, on permet aux fibres de casser quasiment n'importe où et on peut simuler la présence de très petits morceaux de fibres. Cependant, la diminution de cette longueur minimale allonge considérablement le temps de calcul. On a donc fixé la longueur minimale légèrement inférieure à la longueur minimale de flambement. (0,02 mm). En augmentant cette longueur minimale afin de vérifier la sensibilité du calcul, on constate que, de manière peu intuitive, la longueur finale moyenne en masse diminue [Fig. 3.47]. Cela est sans doute dû au fait qu'en permettant aux fibres de casser en deux avec une longueur minimale plus petite, on permet de générer une deuxième fibre plus grande qui peut éventuellement persister le long de l'écoulement. On ne peut donc pas trop faire varier la longueur minimale sans risquer de fausser les résultats, même si cela permettrait d'alléger considérablement les calculs en réduisant la taille du système à résoudre. Cette différence entre les résultats est également visible en traçant les distributions finales de longueur [Fig. 3.48] et les probabilités de Kolmogorov-Smirnov [Fig. 3.49].

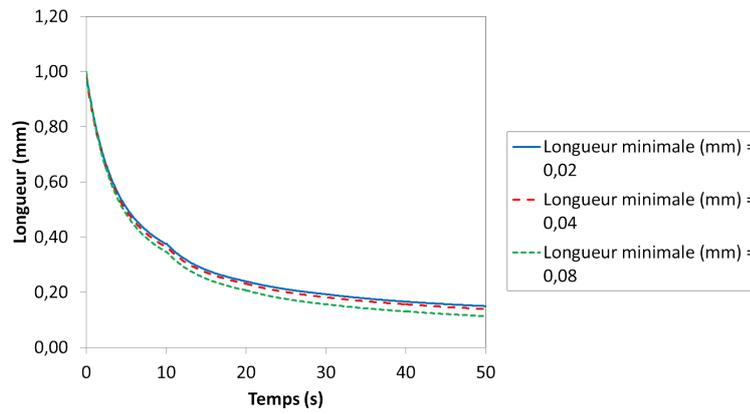


FIGURE 3.47 – Évolution au cours du temps de la longueur moyenne en masse de la distribution test pour différentes longueurs minimales de fibre

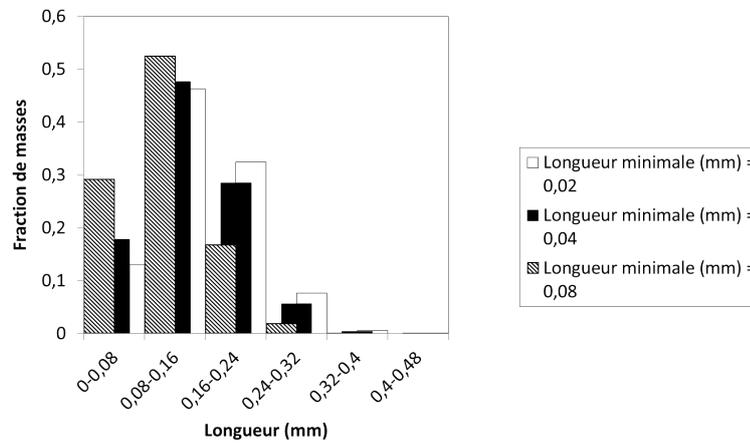


FIGURE 3.48 – Distribution de longueurs finale (à $t = 50$ s) en fraction de masse pour différentes longueurs minimales de fibre

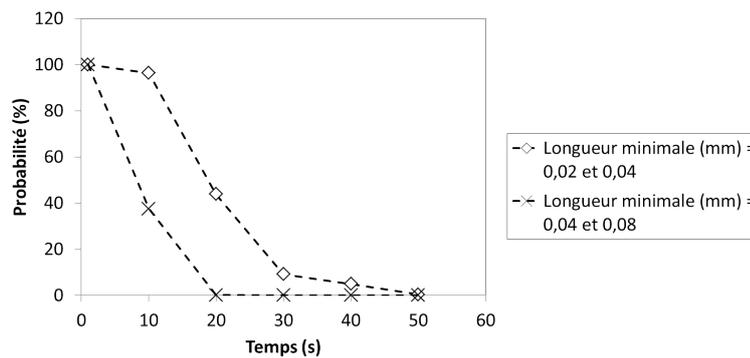


FIGURE 3.49 – Probabilités pour que les distributions de longueurs en nombre à différents instants du calcul suivent une même loi pour différentes longueurs minimales de fibre

3.5 Confrontation de la méthode de simulation à l'expérience

3.5.1 Étude expérimentale

Des mesures de longueurs de fibres le long et en sortie d'une extrudeuse bivis co-rotative de laboratoire ont été effectuées dans le cadre des post-doctorats de Funda Inceoglu et de Julien Ville. La matrice choisie pour cette étude est le polyamide 12 (PA12) fourni gracieusement par Arkema [107]. Sa température de fusion est de 183°C, sa masse molaire est de 37 kg/mol et son indice de polydispersité est de 1,85. Sa viscosité plateau mesurée par rhéométrie rotationnelle est de 495 Pa.s à 240°C. Avant d'être utilisés, les granulés ont été séchés dans un four à convection à 85°C. Des fibres de verre de type E ont aussi été fournies par Arkema. Leurs longueurs moyennes en nombre et en masse sont de 3,38 mm et 3,485 mm respectivement. Le diamètre des fibres est de 10 µm (rapport d'aspect moyen en nombre égal à 338). La distribution initiale de fibre est quasiment monodisperse (indice de polydispersité de 1,03), avec une longueur minimum autour de 1,35 mm et un maximum proche de 5,51 mm [Fig. 3.51]. Une extrudeuse bivis co-rotative de laboratoire (ThermoFisher PTW 24, diamètre de 24 mm, rapport longueur sur diamètre de 40) a été utilisée pour mélanger les fibres et le PA 12. La configuration des vis est présentée en [Fig. 3.50]. Il y a d'abord un premier bloc d'éléments malaxeurs pour fondre les granulés de PA12. Puis les fibres de verres sont introduites dans la zone 6 du fourreau par une trémie d'alimentation secondaire et mélangées avec le PA12 fondu dans les zones de mélange successives, constituées de disques malaxeurs décalés de 30°, la dernière étant suivie d'un élément de vis à pas inverse. La proportion fibres/polymère est de 30 % en masse. Le mélange est effectué à différentes vitesses de rotation des vis (200, 400 et 600 tr/min) et pour différents débits (5, 7, 9 kg/h). Les échantillons sont collectés le long de la vis en ouvrant l'extrudeuse, ainsi qu'en sortie de filière, puis rapidement trempés dans l'eau. Ils sont ensuite brûlés dans un four à 800°C durant une heure. Les fibres récupérées sont dispersées dans une solution eau-glycérol et placées entre des lames de microscope afin de mesurer leur longueur. Ces mesures sont effectuées à l'aide d'un microscope optique Leica DM 4 500 sur au moins 400 fibres pour chaque échantillon.

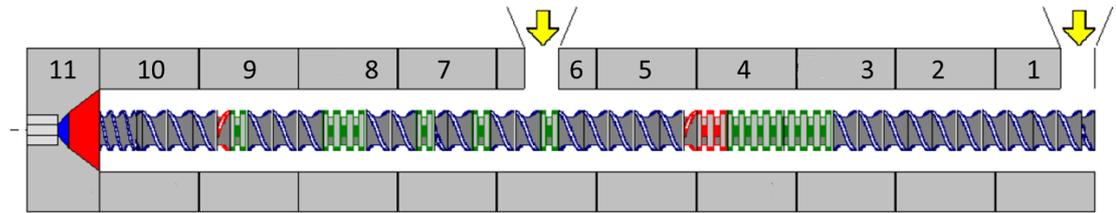


FIGURE 3.50 – Profil de de l'extrudeuse bivis de laboratoire avec les trémies d'alimentation utilisées pour le PA12 et pour les fibres

Les paramètres d'entrée du calcul Ludovic[®], dont les résultats de viscosité, taux de cisaillement et temps de séjour sont utilisés dans notre simulation, sont le comportement du polymère non chargé, soit une loi de Carreau-Yasuda thermodépendante :

$$\eta(T) = \eta_0(T) \left(1 + (\lambda(T) \dot{\gamma})^\alpha\right)^{\frac{n-1}{\alpha}} \quad (3.149)$$

où $\eta_0(T) = \eta_0 \exp\left(\frac{E_{act}}{R_c} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right)$, $\lambda(T) = \lambda_0 \exp\left(\frac{E_{act}}{R_c} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right)$

et où $\eta_0 = 363$ Pa.s, $\lambda_0 = 0,03$ s, $\alpha = 1,01$, $n = 0,82$, $E_{act} = 54$ kJ.mol⁻¹, $R_c = 8,34$ J.K⁻¹.mol⁻¹ et $T_{ref} = 513,15$ K, ainsi que celle du polymère chargé, soit une loi de Carreau-Yasuda thermodépendante (eq. 3.149) avec $\eta_0 = 4753$ Pa.s, $\lambda_0 = 88,9$ s, $\alpha = 3,7$ et $n = 0,77$. On a également besoin de la géométrie de l'extrudeuse bavis et des paramètres du procédé c'est-à-dire de la vitesse de rotation des vis, du débit et des températures de régulation du fourreau (260 °C).

Dans le calcul de l'évolution de la distribution de longueur des fibres, on prend aussi en compte les caractéristiques des fibres, c'est-à-dire leur module d'Young ($E = 72,4$ GPa), leur distribution de longueurs initiale et leur rayon ($b = 5$ μm).

3.5.2 Comparaison entre simulation et expérience

À partir d'une distribution de longueurs de fibres expérimentale mesurée sur un échantillon de fibres « neuves » [Fig. 3.51], on a simulé la casse de fibre pour les différentes conditions d'extrusions pour lesquelles nous disposons de mesures des longueurs de fibres le long de l'extrudeuse, puis nous avons comparé simulation et expérience.

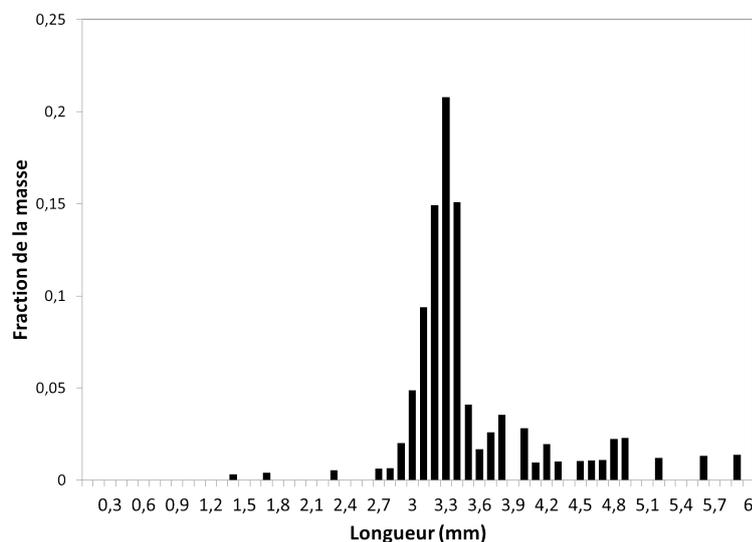


FIGURE 3.51 – Distribution initiale des longueurs de fibres en fraction de masse

La méthode de simulation est celle présentée plus haut, avec une longueur minimale fixée à 0,02 mm (en dessous de la limite du domaine de flambement), un pas de temps est de 0,1 s et un temps entre deux réévaluations de la longueur moyenne pour le calcul de rotation correspondant au temps entre deux changements de taux de cisaillement dans Ludovic (durée d'un « segment »). Ce temps varie entre 0,5 s et 11,5 s. On dispose de cinq séries de huit échantillons le long de l'écoulement : pour une vitesse de rotation des vis de 200 tr/min avec des débits de 5 kg/h, 7 kg/h et 9 kg/h et pour un débit de 5 kg/h avec une vitesse de rotation de 400 tr/min et 600 tr/min.

Il faut noter que les résultats expérimentaux pour différentes conditions de mélange sont très proches les uns des autres [Fig. 3.52] et qu'il faudra donc par la suite confronter la simulation à

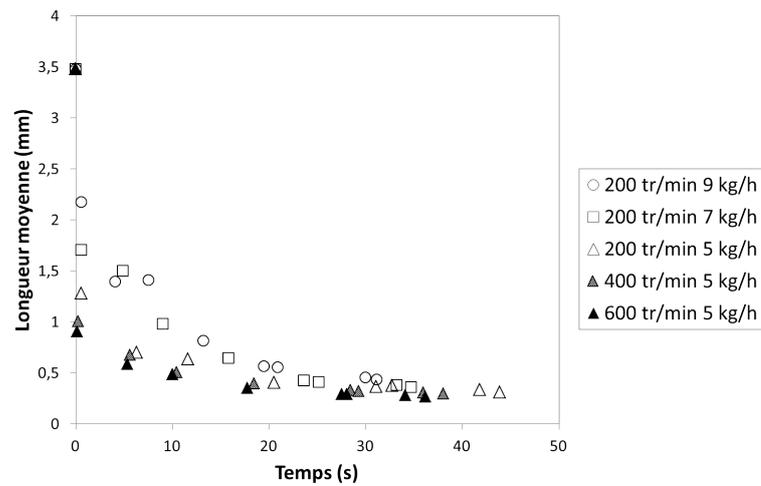
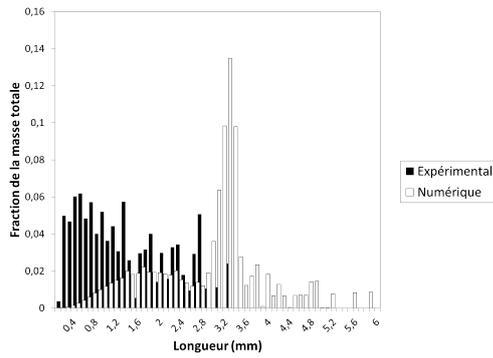


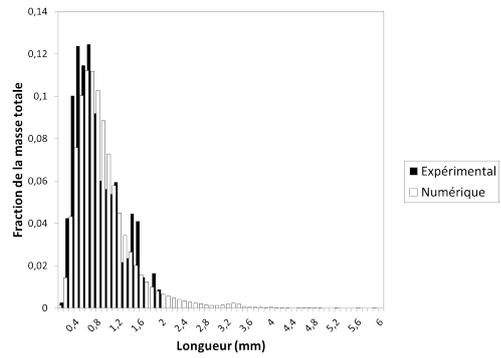
FIGURE 3.52 – Longueurs moyennes expérimentales des fibres le long de l’extrudeuse en fonction du temps de séjour pour différentes conditions de mélange

d’autres expériences, par exemple pour des profils de vis différents.

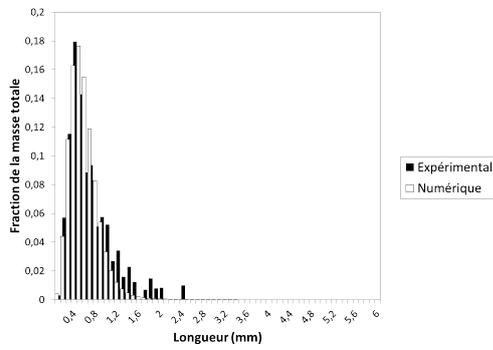
Nous donnons ci-dessous toutes les distributions obtenues par simulation que nous comparons aux distributions mesurées le long de l’extrudeuse pour les différentes conditions de mélange.



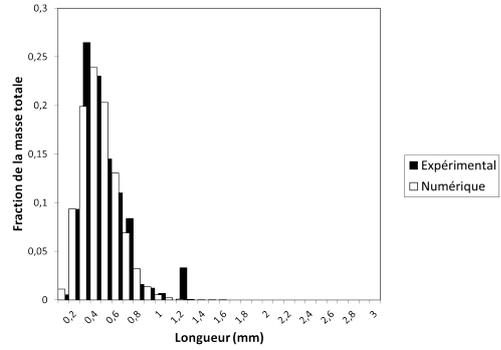
(a) Position : 2,4 cm \pm 0,5 cm (0,6 s \pm 0,5 s) de l'introduction des fibres



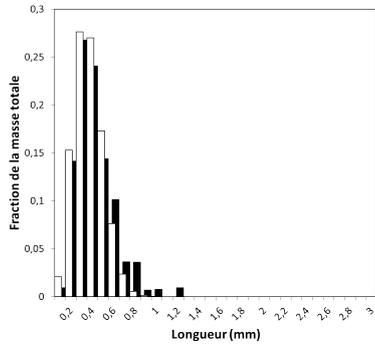
(b) Position : 6,6 cm \pm 0,5 cm (6,3 s \pm 0,5 s) de l'introduction des fibres



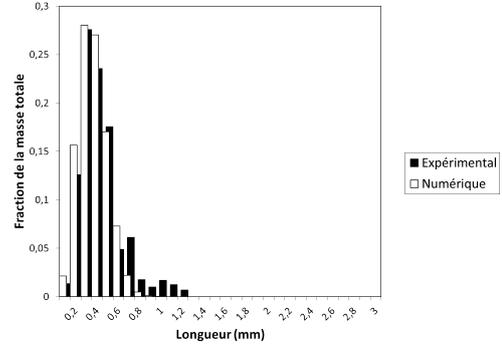
(c) Position : 12 cm \pm 0,5 cm (11,7 s \pm 0,3 s) de l'introduction des fibres



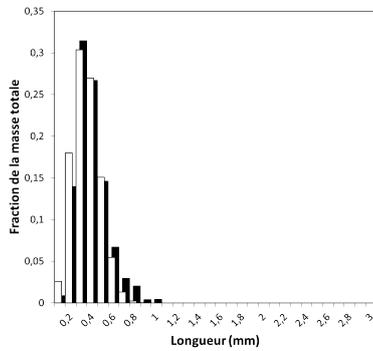
(d) Position : 21 cm \pm 0,5 cm (20,6 s \pm 0,4 s) de l'introduction des fibres



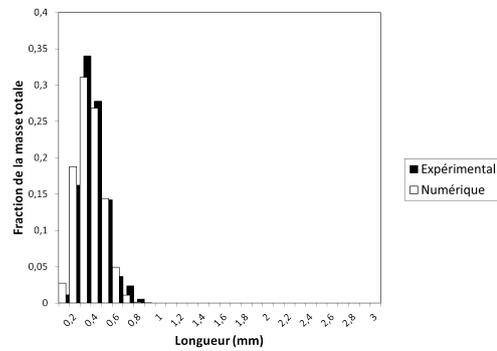
(e) Position : $25,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($31,1 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(f) Position : $31,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($32,8 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

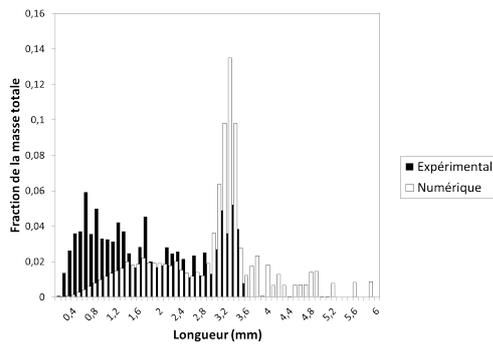


(g) Position : $40,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($41,8 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

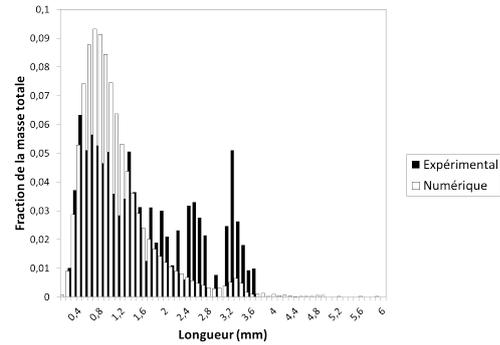


(h) Position : $44,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($43,9 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

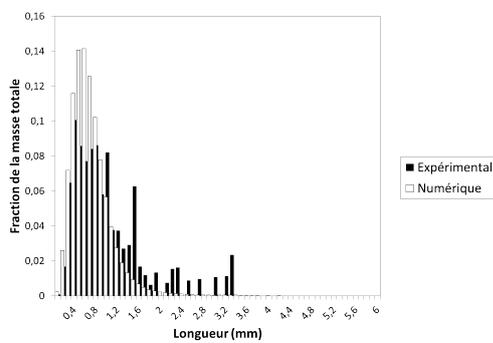
FIGURE 3.53 – Distributions de longueur mesurées et calculées pour une vitesse de rotation des vis de 200 tr/min et un débit de 5 kg/h



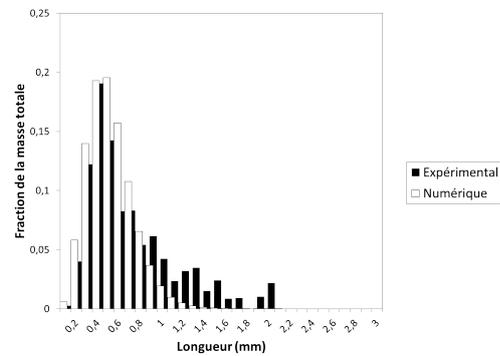
(a) Position : $2,4 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($0,6 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



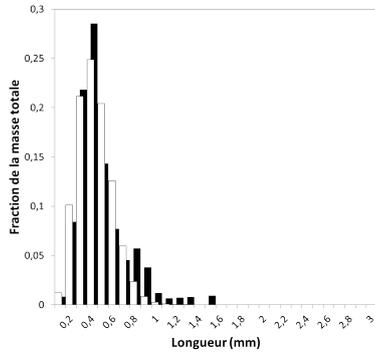
(b) Position : $6,6 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($4,9 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



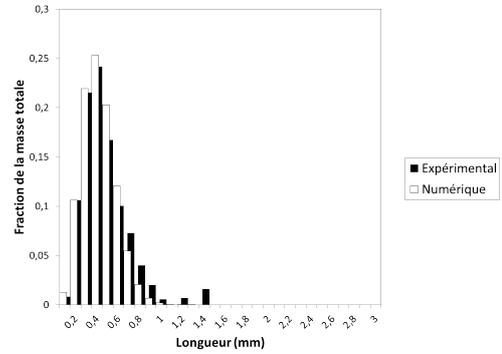
(c) Position : $12 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($9,0 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



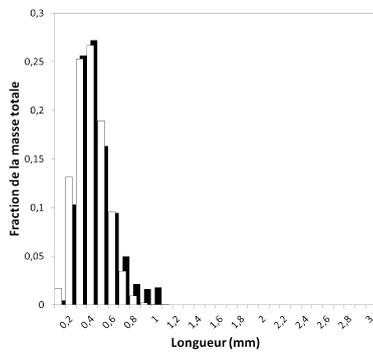
(d) Position : $21 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($15,9 \text{ s} \pm 0,3 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



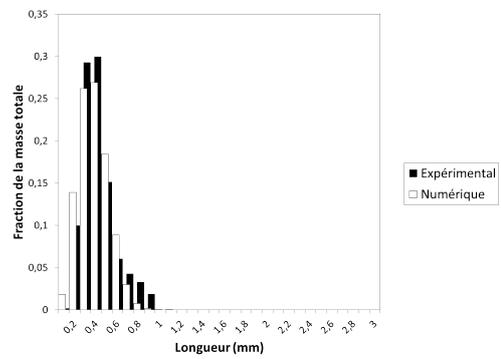
(e) Position : $25,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($23,7 \text{ s} \pm 0,3 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(f) Position : $31,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($25,2 \text{ s} \pm 0,3 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

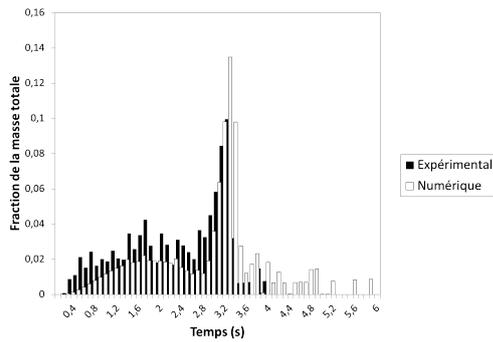


(g) Position : $40,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($33,2 \text{ s} \pm 0,3 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

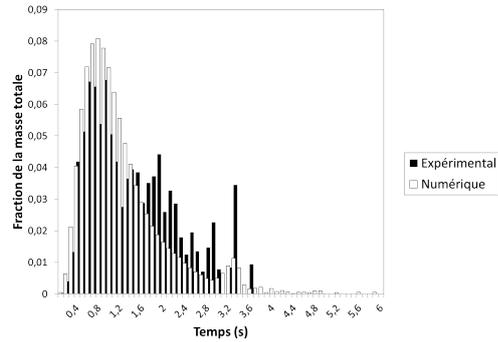


(h) Position : $44,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($34,7 \text{ s} \pm 0,1 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

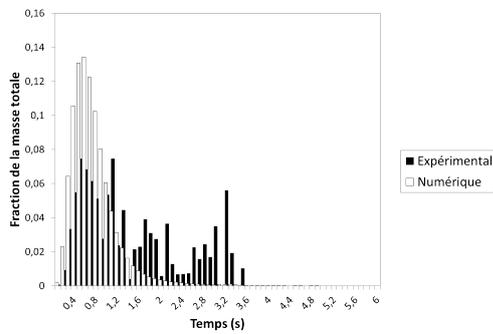
FIGURE 3.54 – Distributions de longueur mesurées et calculées pour une vitesse de rotation des vis de 200 tr/min et un débit de 7 kg/h



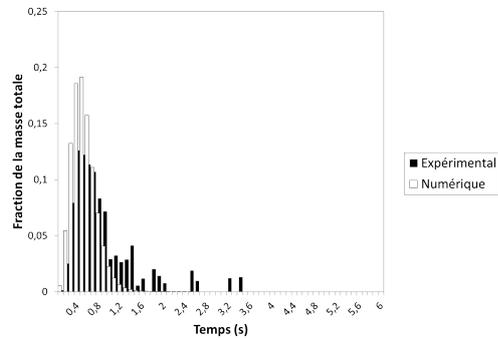
(a) Position : 2,4 cm \pm 0,5 cm (0,6 s \pm 0,3 s) de l'introduction des fibres



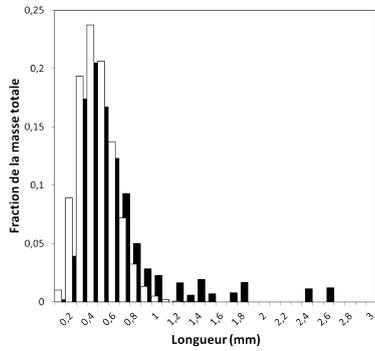
(b) Position : 6,6 cm \pm 0,5 cm (4,1 s \pm 0,3 s) de l'introduction des fibres



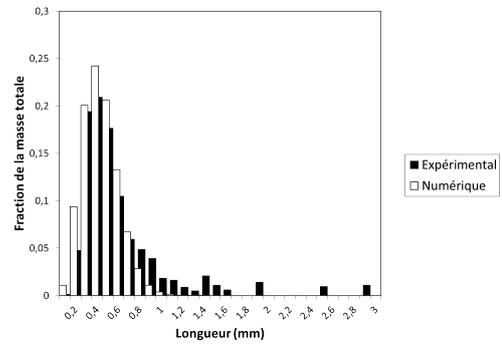
(c) Position : 12 cm \pm 0,5 cm (7,6 s \pm 0,3 s) de l'introduction des fibres



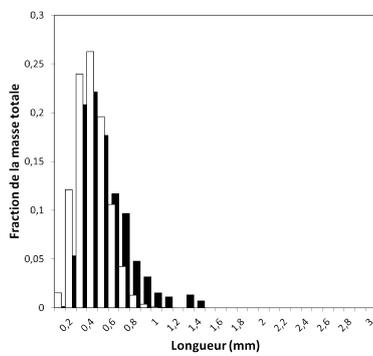
(d) Position : 21 cm \pm 0,5 cm (13,2 s \pm 0,3 s) de l'introduction des fibres



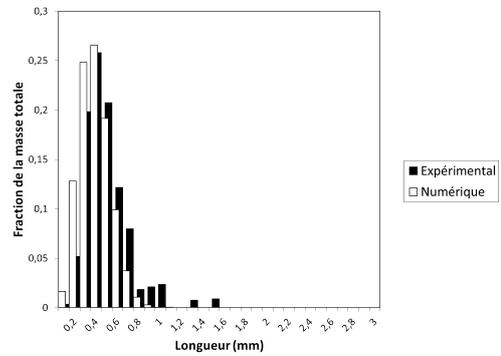
(e) Position : $25,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($19,5 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(f) Position : $31,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($21 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

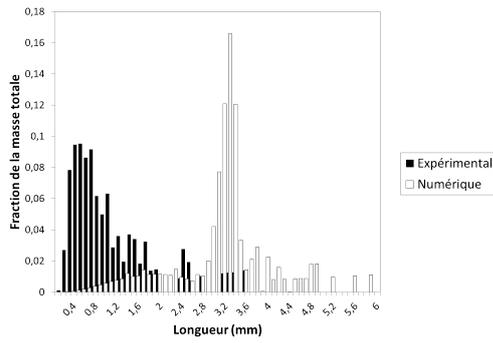


(g) Position : $40,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($30,0 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

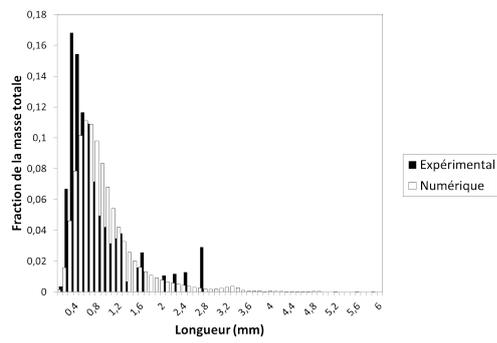


(h) Position : $44,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($31,2 \text{ s} \pm 0,1 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

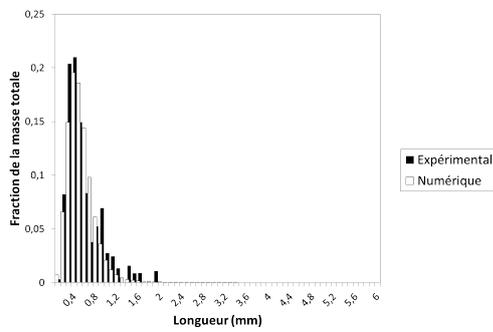
FIGURE 3.55 – Distributions de longueur mesurées et calculées pour une vitesse de rotation des vis de 200 tr/min et un débit de 9 kg/h



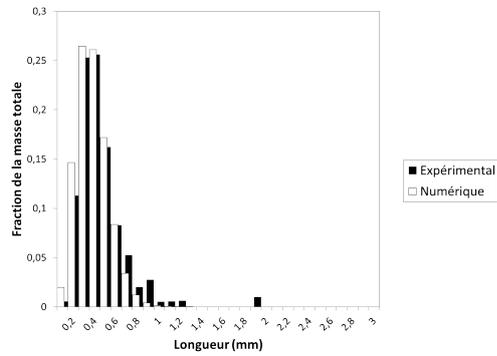
(a) Position : $2,4 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($0,3 \text{ s} \pm 0,5 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



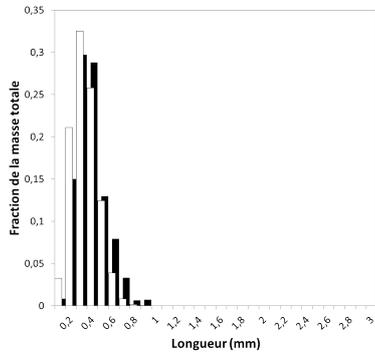
(b) Position : $6,6 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($5,6 \text{ s} \pm 0,6 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



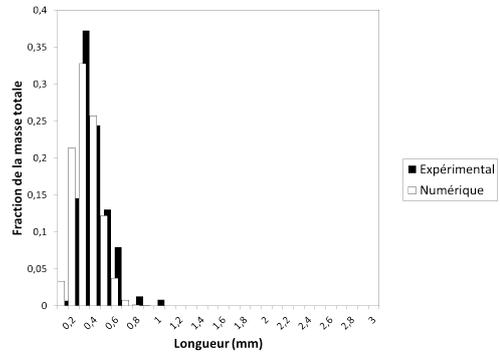
(c) Position : $12 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($10,5 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



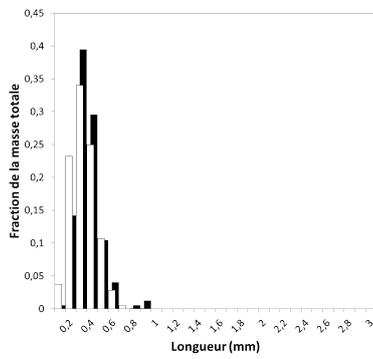
(d) Position : $21 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($18,5 \text{ s} \pm 0,3 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



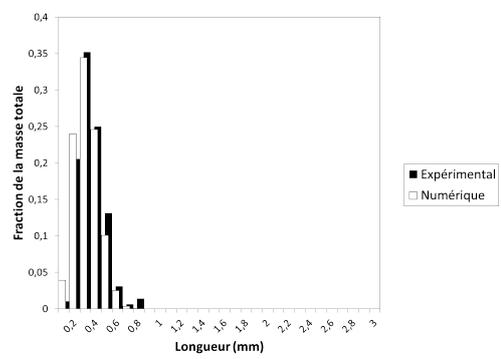
(e) Position : $25,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($28,5 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(f) Position : $31,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($29,3 \text{ s} \pm 0,4 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

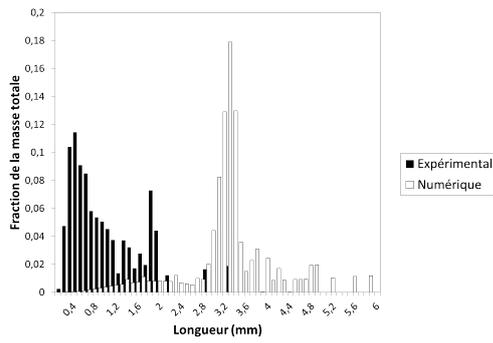


(g) Position : $40,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($36 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

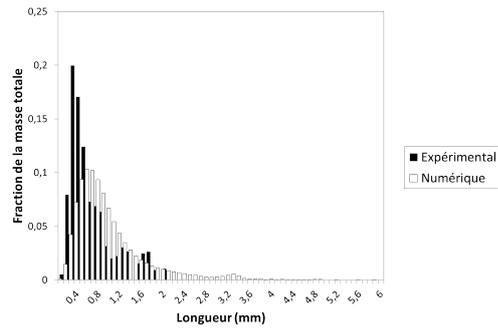


(h) Position : $44,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($38,1 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

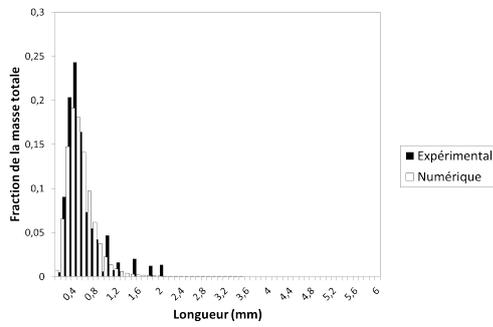
FIGURE 3.56 – Distributions de longueur mesurées et calculées pour une vitesse de rotation des vis de 400 tr/min et un débit de 5 kg/h



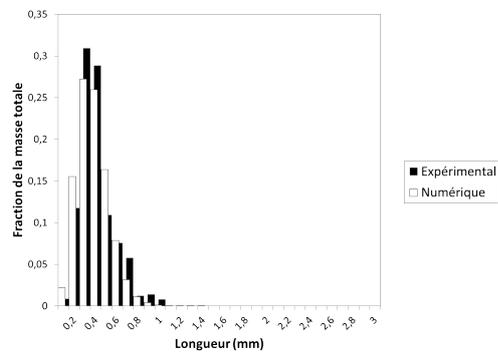
(a) Position : $2,4 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($0,2 \text{ s} \pm 0,5 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



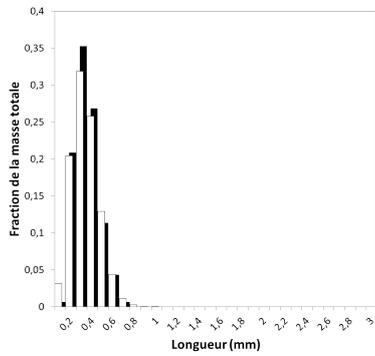
(b) Position : $6,6 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($5,4 \text{ s} \pm 0,6 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



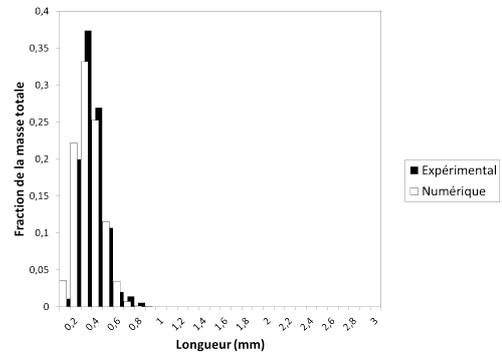
(c) Position : $12 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($10 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



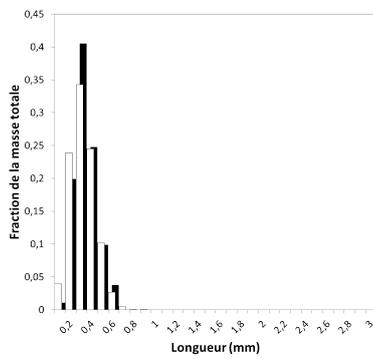
(d) Position : $21 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($17,8 \text{ s} \pm 0,3 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



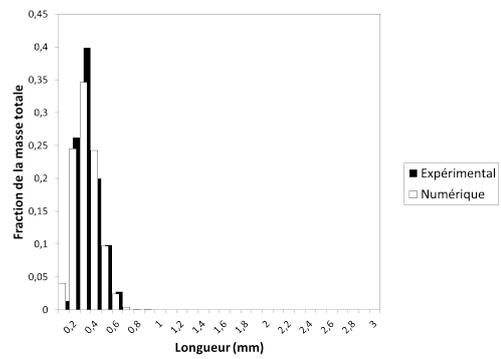
(e) Position : $25,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($27,6 \text{ s} \pm 0,5 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(f) Position : $31,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($28,1 \text{ s} \pm 0,5 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(g) Position : $40,2 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($34,1 \text{ s} \pm 0,5 \text{ s}$) de l'introduction des fibres



(h) Position : $44,8 \text{ cm} \pm 0,5 \text{ cm}$ ($36,2 \text{ s} \pm 0,2 \text{ s}$) de l'introduction des fibres

FIGURE 3.57 – Distributions de longueur mesurées et calculées pour une vitesse de rotation des vis de 600 tr/min et un débit de 5 kg/h

On constate que, dans l'ensemble, les distributions de longueurs prédites par la simulation sont proches de celles mesurées [Figs. 3.53, 3.54, 3.55, 3.56, 3.57]. On arrive bien à prédire la présence de deux modes dans les distributions quand une partie seulement des fibres a déjà cassé, comme on peut le voir sur la figure [Fig. 3.55(a)] par exemple. Afin d'évaluer la précision des prédictions de manière objective, on peut utiliser le coefficient de Kolmogorov-Smirnov (eq. 3.148) [Fig. 3.58]. Cependant, ce critère est très sévère, étant donné qu'il indique la probabilité que deux séries de données soient issues d'une même distribution de probabilité. Il arrive donc souvent que cette probabilité soit nulle, même pour des distributions qui semblent assez proches, comme par exemple dans le cas 200 tr/min, 5 kg/h [Fig. 3.53(g)] à 40,2 cm de l'insertion des fibres [Fig. 3.58]. C'est pourquoi on utilise aussi la différence maximale entre les deux fonctions de répartitions expérimentale et numérique comme critère de précision afin de pouvoir comparer la précision, de la simulation d'un cas à l'autre et d'une position à l'autre [Fig. 3.59].

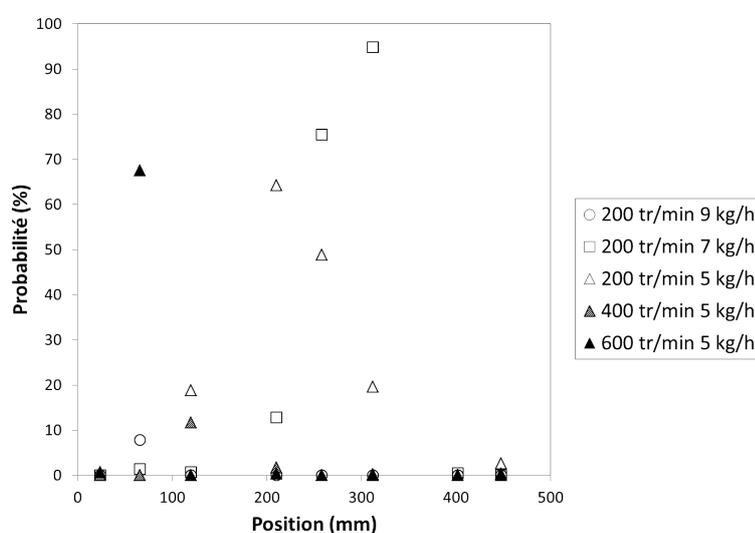


FIGURE 3.58 – Probabilité de Kolmogorov-Smirnov pour que les séries de données expérimentales et obtenues par la simulation (en nombre) soient issues de la même distribution

On remarque que c'est près de l'introduction des fibres que la précision est la moins bonne, ce qui est logique puisque c'est là que les fibres sont les plus longues et cassent donc le plus rapidement [Fig. 3.59]. Cette erreur est sans doute en grande partie due à la taille des échantillons prélevés (≈ 1 cm) qui génère une incertitude en temps. Une autre partie de l'erreur vient sans doute du fait que notre simulation casse de manière « continue » les fibres et n'est donc pas adaptée pour prédire la survivance de quelques fibres longues ayant échappé aux fortes contraintes ([Fig. 3.55(e)] par exemple). Cette part d'erreur est d'autant plus visible quand on représente les résultats en fraction de masse, puisque les fibres longues ont plus de « poids ».

Pour les longueurs finales des fibres, la fonction de répartition de la fraction de masse simulée approche la fonction de répartition expérimentale avec une erreur allant de 9 % (pour le cas 200 tr/min et 5 kg/h) à 18,1 % (pour le cas 200 tr/min et 9 kg/h) [Fig. 3.59].

Nous comparons aussi l'évolution de la longueur moyenne simulée à celle obtenue expérimentalement.

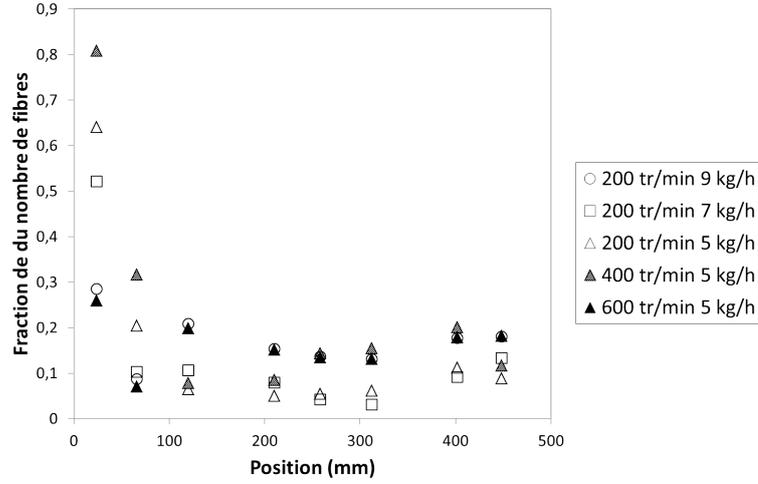


FIGURE 3.59 – Différence maximale entre les fonctions de répartition de la fraction de fibres obtenues expérimentalement et numériquement, en fonction de la position le long de l'extrudeuse et pour les différentes conditions d'écoulement

talement ainsi qu'à celle obtenue par des lois de type Shon-Liu-White (eq. 3.67) [61]. La longueur L_∞ en dessous de laquelle les fibres ne peuvent plus casser correspond au rapport d'aspect β pour lequel le paramètre de flambement est supérieur à 1 (eq. 3.101). Dans notre simulation par matrice de casse, on avait fixé comme rapport d'aspect minimal accessible un rapport inférieur à la borne limite de flambement $\beta = 2,88$ qui est indépendante de la contrainte relative $\frac{\eta\dot{\gamma}}{E}$ (§ 3.4.2). Mais pour la loi de Shon-Liu-White, cette valeur donne des longueurs de fibres finales trop petites et ce quelle que soit la valeur du coefficient k_f . On décide donc d'utiliser le rapport d'aspect en dessous duquel les fibres ne peuvent plus flamber et qui dépend de $\eta\dot{\gamma}/E$ pour déterminer L_∞ . Pour cela, on résout l'équation (eq. 3.138) en fixant $\eta\dot{\gamma}$ égal à la valeur maximale de la contrainte de cisaillement déterminée par Ludovic[®] pour chaque gamme de conditions d'écoulement. La contrainte de cisaillement augmente avec la vitesse de rotation des vis et ne dépend pas du débit dans le calcul Ludovic[®]. Par conséquent on obtient une même valeur de la longueur minimale de flambement $L_\infty = 0,382mm$ pour les trois cas à 200 tr/min (5kg/h, 7kg/h et 9kg/h), une valeur de $L_\infty = 0,335mm$ pour le cas 400 tr/min et 5kg/h et une valeur de $L_\infty = 0,317mm$ pour le cas 600 tr/min et 5kg/h.

On a donc une loi de Shon-Liu-White décrivant la longueur moyenne des fibres en fonction du temps :

$$L_w(t) = \left(L_0 - L_\infty \left(\frac{\eta\dot{\gamma}_{max}}{E} \right) \right) \exp(-k_f t) + L_\infty \left(\frac{\eta\dot{\gamma}_{max}}{E} \right) \quad (3.150)$$

Plusieurs valeurs de k_f ont été testées. Tout d'abord, on choisit :

$$k_f = k' \phi_v N_r \quad (3.151)$$

avec ϕ_v la fraction volumique de fibres, N_r la vitesse de rotation des vis et k' une constante. On a donc une décroissance exponentielle en fonction du nombre de tours ($N_r t$) effectué par les vis, c'est-à-dire en fonction d'une approximation de la déformation totale subie par la matrice

à un temps t . On choisit ensuite, comme Shon-Liu-White [61], d'utiliser une autre mesure de la déformation totale :

$$k_f = k'' \phi_v \int_0^t \dot{\gamma}(t) dt \quad (3.152)$$

Enfin, on teste l'utilisation d'une mesure de l'énergie volumique (normalisée) [107] :

$$k_f = k''' \phi_v \int_0^t \frac{\eta \dot{\gamma}^2(t)}{E} dt \quad (3.153)$$

Par ajustement aux points expérimentaux, on trouve : $k' = 0,37$, $k'' = 0,13$ et $k''' = 1,05 \cdot 10^4$.

Les longueurs moyennes obtenues par la simulation montrent une évolution proche des valeurs expérimentales, sauf au début du mélange, ce qui rejoint ce que l'on a dit plus tôt sur la précision près de l'introduction des fibres [Fig. 3.60]. Celles obtenues par les lois de types Shon-Liu-White sont quasi-identiques pour les différents paramètres k_f utilisés et montrent une décroissance de la longueur moyenne très rapide. On remarque que les longueurs moyennes obtenues à partir des lois de type Shon *et al.* sont parfois plus proches des points expérimentaux que celle obtenues à partir de la simulation. Cependant, ces méthodes nécessitent de calculer ou d'évaluer expérimentalement la longueur minimale accessible L_∞ , c'est-à-dire dans les faits la longueur finale au-delà d'un certain temps de mélange, ainsi que de déterminer une constante (k' , k'' , k''') à partir de mesures expérimentales. Enfin, elles ne donnent pas d'information sur l'évolution de la distribution de longueur.

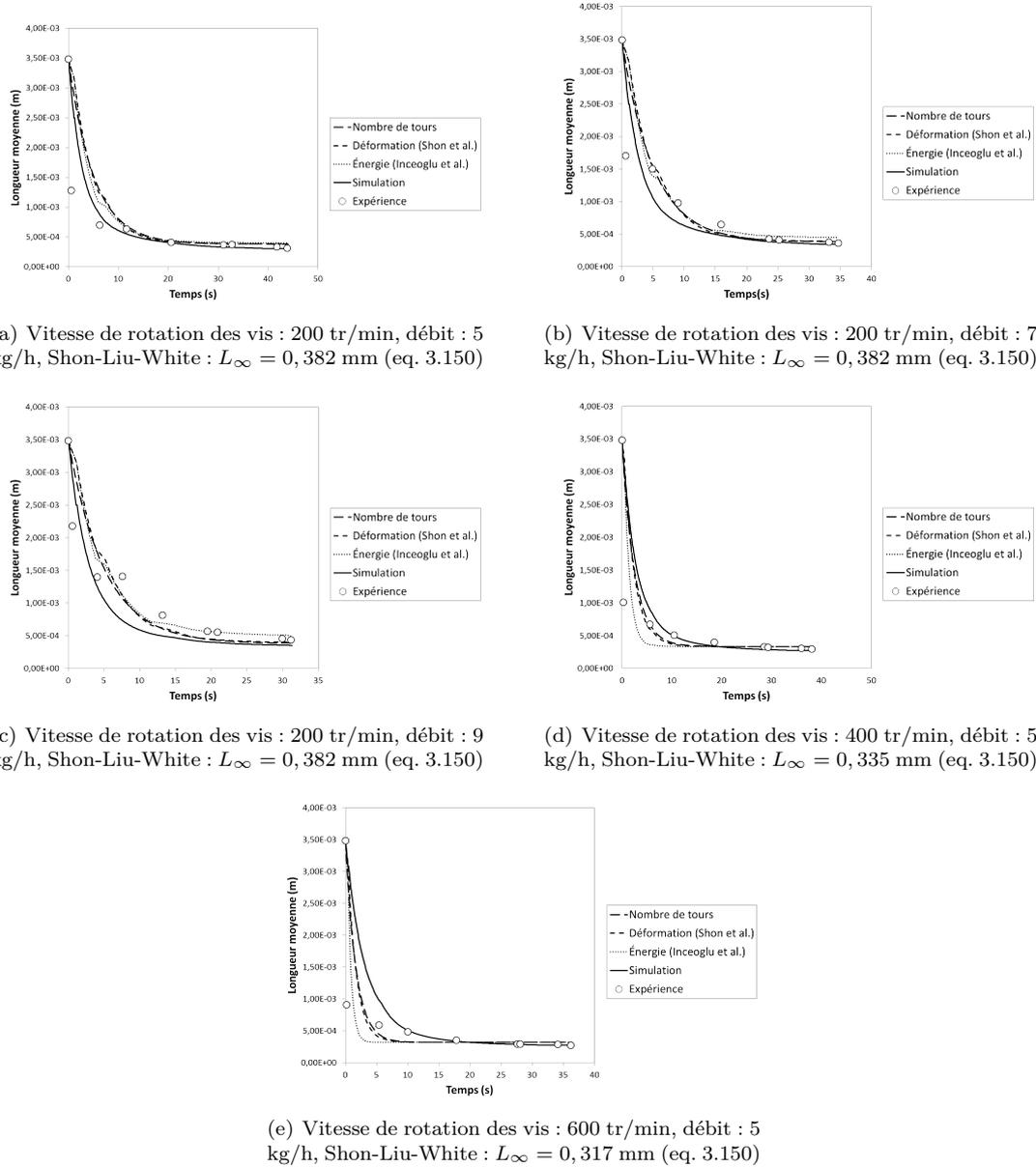


FIGURE 3.60 – Longueur moyenne en masse mesurée et calculée par notre méthode de simulation et par les lois de type Shon-Liu-White

3.6 Conclusion et perspectives

Nous avons proposé une méthode simple de simulation de la casse de fibres rigides dans une extrudeuse bavis, qui permet d'accéder à l'évolution de la distribution complète des longueurs de fibres et qui donne de bons résultats sans paramètres ajustables. De plus, cette méthode est adaptable à d'autres procédés si l'on dispose des conditions dans l'écoulement (taux de cisaillement), quitte à utiliser des méthodes de simulation de la rotation des fibres plus précises comme l'ont fait Tucker *et al.* [36]. Elle ne nécessite pas une capacité de calcul importante, ce qui permet d'effectuer de grandes séries de simulations en faisant varier les conditions d'écoulement ou la géométrie de vis dans Ludovic[®]. Bien que les résultats des premiers tests concordent avec les résultats d'expérience, il faudrait encore effectuer des batteries de tests pour des conditions d'écoulement et des géométries de vis différentes, les cas étudiés pour l'instant étant très proches les uns des autres. Dans l'avenir, avec des capacités de calculs supérieures à celles dont nous disposons pour l'instant, on pourra envisager d'étudier plus précisément le comportement et la casse des fibres dans un écoulement d'extrudeuse bavis simulé en 3D et ainsi affiner notre modèle en prenant mieux en compte le mouvement des fibres en milieu non dilué non-newtonien. On peut aussi envisager dans un avenir proche de coupler le calcul des conditions dans l'écoulement effectué par Ludovic[®] avec le calcul de la casse de fibre en faisant dépendre la viscosité de la distribution de longueur de fibre au cours du temps.

Chapitre 4

Conclusion générale

Au cours de cette étude qui prend place dans le projet Fonlimics du pôle de compétitivité Plastipolis, nous avons cherché à exploiter les ressources numériques et les logiciels dont nous disposons au Cemef pour mettre en place de nouvelles méthodes de caractérisation et de prédiction du mélange de polymères chargés en extrusion bivis. Nous avons testé dans des cas proches de ses limites la méthode de caractérisation du mélange distributif par lâcher de particules en utilisant la bibliothèque de calcul éléments finis du Cemef (CimLib[©]) à partir de laquelle le logiciel de simulation des procédés de mélange XimeX[®] est construit. Nous avons vu que la précision de calcul n'est pas suffisante pour prédire correctement la position des particules dans la direction de l'écoulement, et ce même pour des maillages raffinés. Nous en avons conclu que cette méthode nécessite au minimum des modifications, comme une correction des vitesses des particules, pour permettre une exploitation des résultats de lâchers de particules pour une quantification du mélange. Nous avons également proposé une nouvelle méthode de prédiction de l'évolution de longueur de fibres rigides au cours d'un mélange avec un polymère en extrusion bivis. Nous utilisons une matrice de fragmentation et des résultats de calcul du logiciel Ludovic[®] dans cette simulation. Cette méthode est opérationnelle et a été testée par comparaison à des mesures expérimentales de longueurs de fibres le long d'une extrudeuse de laboratoire. De plus, elle est adaptable à d'autres écoulements de mélange ou de mise en forme si l'on dispose des conditions de cisaillement dans le fluide.

Pour résumer, nous avons progressé dans la compréhension et la mise en place de méthodes numériques pour la simulation de deux aspects du mélange en extrusion bivis : le mélange distributif et la casse de fibres.

Bibliographie

- [1] I. Boudimbou. *Mécanismes élémentaires de dispersion de charges de silice dans une matrice élastomère*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 2011.
- [2] I. Manas-Zloczower, J.-F. Agassant, P. D. Anderson, K. Ban, M. Bousmina. *Mixing and Compounding of Polymers : Theory and Practice*. Hanser-Gardner Publications, Cincinnati, 2nd edition, 2009.
- [3] P. V. Danckwerts. The definition and measurement of some characteristics of mixtures. *Applied Scientific Research*, 3 (4) : 279–296, 1952.
- [4] P. G. M. Kruijt, O. S. Galaktionov, P. D. Anderson, G. W. M. Peters, H. E. H. Meijer. Analyzing mixing in periodic flows by distribution matrices : Mapping method. *AIChE Journal*, 47 (5) : 1005–1015, 2001.
- [5] C. L. Tucker, G. W. M. Peters. Global measures of distributive mixing and their behavior in chaotic flows. *Korea-Australia Rheology Journal*, 15 (4) : 197–208, 2003.
- [6] W. Wang, I. Manas-Zloczower, M. Kaufman. Characterization of distributive mixing in polymer processing equipment using Renyi entropies. *International Polymer Processing*, 16 (4) : 315–322, 2001.
- [7] T. Avalosse. Numerical simulation of distributive mixing in 3-D flows. *Macromolecular Symposia*, 112 : 91–98, 1996.
- [8] M. R. Mackley, R. M. C. Neves Saraiva. The quantitative description of fluid mixing using Lagrangian- and concentration-based numerical approaches. *Chemical Engineering Science*, 54 (2) : 159–170, 1999.
- [9] K. Funatsu, S. I. Kihara, M. Miyazaki, S. Katsuki, T. Kajiwara. 3-D numerical analysis on the mixing performance for assemblies with filled zone of right-handed and left-handed double-flighted screws and kneading blocks in twin-screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 42 (4) : 707–723, 2002.
- [10] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *The Bell System Technical Journal*, 27 : 379–423, 623–656, 1948.
- [11] A. Renyi. On measures of entropy and information. dans *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium Mathematics, Statistics and Probability 1960*, volume 1, page 574, 1961.
- [12] N. Domingues, A. Gaspar-Cunha, J. A. Covas, M. Camesasca, M. Kaufman, I. Manas-Zloczower. Dynamics of Filler Size and Spatial Distribution in a Plasticating Single Screw Extruder – Modeling and Experimental Observations. *International Polymer Processing*, 25 : 188–198, 2010.
- [13] N. Domingues, M. Camesasca, M. Kaufman, I. Manas-Zloczower, A. Gaspar-Cunha, J. A. Covas. Modeling of Agglomerate Dispersion in Single Screw Extruders. *International Polymer Processing*, 25 : 251–257, 2010.

- [14] H. Aref. Stirring by chaotic advection. *Journal of Fluid Mechanics*, 143 : 1–21, 1984.
- [15] J. M. Ottino. *The Kinematics of Mixing : Stretching, Chaos, and Transport*. Cambridge University Press, New York, 1989.
- [16] A. Poitou. *Approche Mécanique du Mélange par Extrusion*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1988.
- [17] T. Ishikawa, S. I. Kihara, K. Funatsu. 3-D non-isothermal flow field analysis and mixing performance evaluation of kneading blocks in a co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 41 (5) : 840–849, 2001.
- [18] T. Ishikawa, T. Amano, S. I. Kihara, K. Funatsu. Flow patterns and mixing mechanisms in the screw mixing element of a co-rotating twin-screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 42 (5) : 925–939, 2002.
- [19] H. F. Cheng, I. Manas-Zloczower. Distributive mixing in conveying elements of a ZSK-53 co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 38 (6) : 926–935, 1998.
- [20] T. Kajiwara, Y. Nagashima, Y. Nakano, K. Funatsu. Numerical study of twin-screw extruders by three-dimensional flow analysis - Development of analysis technique and evaluation of mixing performance for full flight screws. *Polymer Engineering & Science*, 36 (16) : 2142–2152, 1996.
- [21] M. Yoshinaga, S. Katsuki, M. Miyazaki, L. J. Liu, S. I. Kihara, K. Funatsu. Mixing mechanism of three-tip kneading block in twin screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 40 (1) : 168–178, 2000.
- [22] B. Alsteens, V. Legat, T. Avalosse. Parametric study of the mixing efficiency in a kneading block section of a twin-screw extruder. *International Polymer Processing*, 19 (3) : 207–217, 2004.
- [23] V. L. Bravo, A. N. Hrymak, J. D. Wright. Study of particle trajectories, residence times and flow behavior in kneading discs of intermeshing co-rotating twin-screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 44 (4) : 779–793, 2004.
- [24] J. Gao, G. C. Walsh, D. Bigio, R. M. Briber, M. D. Wetzel. Mean residence time analysis for twin screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 40 (1) : 227–237, 2000.
- [25] A. Poulesquen. *Contribution à la modélisation de l'extrusion réactive en machine bi-vis*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 2001.
- [26] G. E. Gasner, D. Bigio, C. Marks, F. Magnus, C. Kiehl. A new approach to analyzing residence time and mixing in a co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 39 (2) : 286–298, 1999.
- [27] O. S. Galaktionov, P. D. Anderson, G. W. M. Peters, H. E. H. Meijer. Mapping approach for 3D laminar mixing simulations : application to industrial flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40 (3-4) : 345–351, 2002.
- [28] C. C. Wang, I. Manas-Zloczower. Flow-field analysis of a cavity transfer mixer. *Polymer Engineering & Science*, 34 (15) : 1224–1230, 1994.
- [29] H. H. Yang, I. Manas-Zloczower. Flow field analysis of the kneading disk region in a co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 32 (19) : 1411–1417, 1992.
- [30] C. H. Yao, I. Manas-Zloczower. Influence of design on dispersive mixing performance in an axial discharge continuous mixer - LCMAX 40. *Polymer Engineering & Science*, 38 (6) : 936–946, 1998.

- [31] H. F. Cheng, I. Manas-Zloczower. Study of mixing efficiency in kneading discs of co-rotating twin-screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 37 (6) : 1082–1090, 1997.
- [32] I. Manas-Zloczower, H. F. Cheng. Influence of design on mixing efficiency in the kneading disc region of co-rotating twin screw extruders. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 17 (12) : 1076–1086, 1998.
- [33] G. Astarita. Objective and generally applicable criteria for flow classification. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 6 (1) : 69–76, 1979.
- [34] R. Larson. Flows of constant stretch history for polymeric materials with power-law distributions of relaxation-times. *Rheologica Acta*, 24 (5) : 443–449, 1985.
- [35] C.-H. Yao, I. Manas-Zloczower. Study of mixing efficiency in roll-mills. *Polymer Engineering and Science*, 36 (3) : 305–310, 1996.
- [36] C. L. Tucker, J. L. Phelps, A. I. Abd El-Rahman, V. Kunc, B. J. Frame. A study of fiber breakage during compounding of glass fiber reinforced composites. dans *Polymer Processing Society 26th Annual Meeting, July 4-8, 2010, Banff (Canada)*.
- [37] T. Ishikawa, S. I. Kihara, K. Funatsu. 3-D numerical simulations of nonisothermal flow in co-rotating twin screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 40 (2) : 357–364, 2000.
- [38] T. Ishikawa, S. I. Kihara, K. Funatsu, T. Amaiwa, K. Yano. Numerical simulation and experimental verification of non-isothermal flow in counter-rotating non-intermeshing continuous mixers. *Polymer Engineering & Science*, 40 (2) : 365–375, 2000.
- [39] V. L. Bravo, A. N. Hrymak, J. D. Wright. Numerical simulation of pressure and velocity profiles in kneading elements of a co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, 40 (2) : 525–541, 2000.
- [40] F. Bertrand, P. A. Tanguy, F. Thibault. A three-dimensional fictitious domain method for incompressible fluid flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 25 (6) : 719–736, 1997.
- [41] R. Valette, J. Bruchon, H. Digonnet, P. Laure, M. Leboeuf, L. Silva, B. Vergnes, T. Coupez. Fluid-structure interaction methods for multiscale simulation of mixing processes. *Mecanique & Industries*, 8 (3) : 251–258, 2007.
- [42] R. Valette, B. Vergnes, T. Coupez. Multiscale simulation of mixing processes using 3D-parallel, fluid-structure interaction techniques. *International Journal of Material Forming*, Suppl 1 : 1131–1134, 2008.
- [43] R. Valette, T. Coupez, C. David, B. Vergnes. A direct 3D numerical simulation code for extrusion and mixing processes. *International Polymer Processing*, 24 (2) : 141–147, 2009.
- [44] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114 (1) : 146–159, 1994.
- [45] P. Schneider, D. H. Eberly. *Geometric Tools for Computer Graphics*. Elsevier, New York, 2002.
- [46] N. A. Patankar, P. Singh, D. D. Joseph, R. Glowinski, T. W. Pan. A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26 (9) : 1509–1524, 2000.
- [47] P. Laure, G. Beaume, O. Basset, L. Silva, T. Coupez. Les méthodes numériques pour les écoulements de fluides chargés. dans *1er colloque du GDR interactions fluide-structure*, page 1. Ecole des Mines de Paris, CEMEF Sophia Antipolis, 2005.
- [48] T. Coupez, S. Marie. From a direct solver to a parallel iterative solver in 3-d forming simulation. *International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing*, 11 (4) : 277–285, 1997.

- [49] H. Dignonnet, T. Coupez. Object-oriented programming for “fast and easy” development of parallel applications in forming processes simulation. dans K. J. Bathe, editor, *Computational Fluid And Solid Mechanics 2003, Vols 1 And 2, Proceedings*, pages 1922–1924. MIT, Elsevier Science BV, 2003.
- [50] T. Coupez. Metric construction by length distribution tensor and edge based error for anisotropic adaptive meshing. *Journal of Computational Physics*, 230 (7) : 2391 – 2405, 2011.
- [51] H. Dignonnet, T. Coupez. Optimisation de la parallélisation de remaillage par permutation, extraction et recollement de sous maillages. dans *19ème Congrès français de mécanique, Marseille, du 24 au 28 août 2009 : guide du conférencier et recueil de résumés*, Marseille, France, 2009.
- [52] H. Dignonnet. *Repartitionnement dynamique, mailleur parallèle et leurs applications à la simulation numérique en mise en forme des matériaux*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 2001.
- [53] H.-C. Nguyen. A posteriori error estimation and anisotropic mesh adaptation. Rapport d’avancement de première année de thèse, 2010.
- [54] B. Vergnes, G. Della Valle, L. Delamare. A global computer software for polymer flows in corotating twin screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 38 (11) : 1548–2634, 1998.
- [55] J. Ajouri. *Étude d’un indicateur de mélange basé sur la déformation*. Stage de fin d’étude, Université de Nice-Sophia Antipolis / École nationale supérieure des mines de Paris, 2011.
- [56] D. M. Bigg. Effect of compounding on the properties of short fiber reinforced injection moldable thermoplastic composites. *Polymer Composites*, 6 (1) : 20 – 28, 1985.
- [57] D. Wall. The processing of fiber reinforced thermoplastics using co-rotating twin screw extruders. *Polymer Composites*, 10 (2) : 98 – 102, 1989.
- [58] J. Grillo, P. Andersen, E. Papazoglou. Experimental studies for optimizing screw and die design when compounding fiberglass strand on the co-rotating twin screw extruder. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 12 (3) : 311–326, 1993.
- [59] Y. Shimizu, S. Arai, T. Itoyama, H. Kawamoto. Experimental analysis of the kneading disk region in a co-rotating twin screw extruder : Part 2. Glass-fiber degradation during compounding. *Advances in Polymer Technology*, 16 (1) : 25 – 32, 1997.
- [60] K. Shon, J. L. White. A comparative study of fiber breakage in compounding glass fiber-reinforced thermoplastics in a buss kneader, modular co-rotating and counter-rotating twin screw extruders. *Polymer Engineering & Science*, 39 (9) : 1757 – 1768, 1999.
- [61] K. Shon, D. Liu, J. L. White. Experimental studies and modeling of development of dispersion and fiber damage in continuous compounding. *International Polymer Processing*, 20 (3) : 322 – 331, 2005.
- [62] K. Stade. Techniques for compounding glass fiber-reinforced thermoplastics. *Polymer Engineering & Science*, 17 (1) : 50 – 57, 1977.
- [63] R. A. Schweizer. Glass fiber length degradation in thermoplastics processing. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 18 (1), 1982.
- [64] V. B. Gupta, R. K. Mittal, P. K. Sharma, G. Mennig, J. Wolters. Some studies on glass fiber-reinforced polypropylene. Part II : Mechanical properties and their dependence on fiber length, interfacial adhesion, and fiber dispersion. *Polymer Composites*, 10 (1) : 16 – 27, 1989.

- [65] S. G. Advani, C. L. Tucker. A numerical simulation of short fiber orientation in compression molding. *Polymer Composites*, 11 (3) : 164 – 173, 1990.
- [66] R. S. Bay, C. L. Tucker. Fiber orientation in simple injection moldings. Part I : Theory and numerical methods. *Polymer Composites*, 13 (4) : 317 – 331, 1992.
- [67] M. Gupta, K. K. Wang. Fiber orientation and mechanical properties of short-fiber-reinforced injection-molded composites : Simulated and experimental results. *Polymer Composites*, 14 (5) : 367 – 382, 1993.
- [68] L. G. Reifschneider, H. U. Akay. Applications of a fiber orientation prediction algorithm for compression molded parts with multiple charges. *Polymer Composites*, 15 (4) : 261 – 269, 1994.
- [69] S. T. Chung, T. H. Kwon. Coupled analysis of injection molding filling and fiber orientation, including in-plane velocity gradient effect. *Polymer Composites*, 17 (6) : 859 – 872, 1996.
- [70] D. O'Regan, M. Akay. The distribution of fibre lengths in injection moulded polyamide composite components. *Journal of Materials Processing Technology*, 56 (1-4) : 282 – 291, 1996.
- [71] M. Vincent, E. Devillers, J. F. Agassant. Fibre orientation calculation in injection moulding of reinforced thermoplastics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 73 (3) : 317 – 326, 1997.
- [72] R. Singh, F. Chen, F. R. Jones. Injection molding of glass fiber reinforced phenolic composites. 2 : Study of the injection molding process. *Polymer Composites*, 19 (1) : 37 – 47, 1998.
- [73] G. Lielens, P. Pirotte, A. Couniot, F. Dupret, R. Keunings. Prediction of thermo-mechanical properties for compression moulded composites. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 29 (1-2) : 63 – 70, 1998.
- [74] R. Zheng, P. Kennedy, N. Phan-Thien, X. Fan. Thermoviscoelastic simulation of thermally and pressure-induced stresses in injection moulding for the prediction of shrinkage and warpage for fibre-reinforced thermoplastics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 84 (2-3) : 159–190, 1999.
- [75] M. Vincent, T. Giroud, A. Clarke, C. Eberhardt. Description and modeling of fiber orientation in injection molding of fiber reinforced thermoplastics. *Polymer*, 46 (17) : 6719 – 6725, 2005.
- [76] A. Einstein. Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 324 (2) : 289–306, 1906.
- [77] A. Einstein. Berichtigung zu meiner Arbeit : Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 339 (3) : 591–592, 1911.
- [78] G. K. Batchelor. The effect of brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 83 (01) : 97–117, 1977.
- [79] I. M. Krieger, T. J. Dougherty. A mechanism for non-newtonian flow in suspensions of rigid spheres. *Transactions of the Society of Rheology*, 3 : 111–136, 1959.
- [80] S. Mueller, E. W. Llewellyn, H. M. Mader. The rheology of suspensions of solid particles. *Proceedings of the Royal Society A*, 466 (2116) : 1201–1228, 2010.
- [81] N. A. Frankel, A. Acrivos. On the viscosity of a concentrated suspension of solid spheres. *Chemical Engineering Science*, 22 (6) : 847 – 853, 1967.
- [82] R. L. Hoffman. Discontinuous and dilatant viscosity behavior in concentrated suspensions. II. Theory and experimental tests. *Journal of Colloid and Interface Science*, 46 (3) : 491 – 506, 1974.

- [83] P. Coussot, C. Ancey. Rheophysical classification of concentrated suspensions and granular pastes. *Physical Review E*, 59 (4) : 4445–4457, 1999.
- [84] H. Brenner. Rheology of a dilute suspension of axisymmetric Brownian particles. *International Journal of Multiphase Flow*, 1 (2) : 195 – 341, 1974.
- [85] G. B. Jeffery. The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 102 (715) : 161–179, 1922.
- [86] J. Happel. Viscosity of suspensions of uniform spheres. *Journal of Applied Physics*, 28 (11) : 1288 –1292, 1957.
- [87] E. Anczurowski, S. G. Mason. The kinetics of flowing dispersions : III. Equilibrium orientations of rods and discs (experimental). *Journal of Colloid and Interface Science*, 23 (4) : 533 – 546, 1967.
- [88] C. A. Stover, D. L. Koch, C. Cohen. Observations of fiber orientation in simple shear-flow of semidilute suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 238 : 277–296, 1992.
- [89] M. Rahnama, D. L. Koch, E. S. G. Shaqfeh. The effect of hydrodynamic interactions on the orientation distribution in a fiber suspension subject to simple shear flow. *Physics of Fluids*, 7 : 487–506, 1995.
- [90] J. Férec, G. Ausias, M. C. Heuzey, P. J. Carreau. Modeling fiber interactions in semiconcentrated fiber suspensions. *Journal of Rheology*, 53 (1) : 49–72, 2009.
- [91] S. Blaser. Forces on the surface of small ellipsoidal particles immersed in a linear flow field. *Chemical Engineering Science*, 57 (3) : 515 – 526, 2002.
- [92] J. M. Burgers. *On the motion of small particles of elongated form, suspended in a viscous liquid. Second report on viscosity and plasticity*. Nordemann Publishing, New York, 1938.
- [93] B. J. Trevelyan, S. G. Mason. Particle motions in sheared suspensions. I. Rotations. *Journal of Colloid Science*, 6 (4) : 354 – 367, 1951.
- [94] F. Folgar, C. L. Tucker. Orientation behavior of fibers in concentrated suspensions. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 3 (2) : 98 – 119, 1984.
- [95] S. G. Advani, C. L. Tucker. The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites. *Journal of Rheology*, 31 (8) : 751 – 784, 1987.
- [96] J. Wang, C. L. Tucker, J. F. O’Gara. An objective model for slow orientation kinetics in concentrated fiber suspensions : Theory and rheological evidence. *Journal of Rheology*, 52 (5) : 1179 – 1202, 2008.
- [97] J. H. Phelps, C. L. Tucker. An anisotropic rotary diffusion model for fiber orientation in short- and long-fiber thermoplastics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 156 (3) : 165 – 176, 2009.
- [98] S. M. Dinh, R. C. Armstrong. A rheological equation of state for semiconcentrated fiber suspensions. *Journal of Rheology*, 28 (3) : 207–227, 1984.
- [99] O. L. Forgacs, S. G. Mason. Particle motions in sheared suspensions : IX. Spin and deformation of threadlike particles. *Journal of Colloid Science*, 14 (5) : 457 – 472, 1959.
- [100] L. Czarnecki, J. L. White. Shear flow rheological properties, fiber damage, and mastication characteristics of aramid-, glass-, and cellulose-fiber-reinforced polystyrene melts. *Journal of Applied Polymer Science*, 25 (6) : 1217 – 1244, 1980.
- [101] A. Salinas, J. F. T. Pittman. Bending and breaking fibers in sheared suspensions. *Polymer Engineering & Science*, 21 (1) : 23–31, 1981.

- [102] R. von Turkovich, L. Erwin. Fiber fracture in reinforced thermoplastic processing. *Polymer Engineering & Science*, 23 (13) : 743 – 749, 1983.
- [103] S. J. DeTeresa. On the elastic buckling of rod-shaped particles in sheared suspensions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 159 (2) : 400 – 404, 1993.
- [104] J. Hernandez, T. Raush, A. Rios, S. Strauss, T. Osswald. Analysis of fiber damage mechanisms during processing of reinforced polymer melts. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26 (7) : 621 – 628, 2002.
- [105] C. Massonet, S. Cescotto. *Mécanique des matériaux*. De Boeck & Larcier, Paris, 2ème édition, 1992.
- [106] S. P. Timoshenko, J. M. Gere. *Theory of elastic stability*. McGraw-Hill, New York, 1961.
- [107] F. Inceoglu, J. Ville, N. Ghamri, A. Durin, R. Valette, B. Vergnes. Correlation between processing conditions and fiber breakage during compounding of glass fiber-reinforced polyamide. *Polymer Composites*, 32 (11) : 1842–1850, 2011.
- [108] H. Dignonnet, L. Silva, T. Coupez. Cimlib : A fully parallel application for numerical simulations based on components assembly. dans *NUMIFORM '07 : Materials Processing and Design : Modeling, Simulation and Applications, Pts I and II*, volume 908 of *AIP Conference Proceedings*, pages 269–274, 2007.
- [109] E. Perchat. *Mini-éléments et factorisations incomplètes pour la parallélisation d'un solveur de stokes 2D : application au forgeage*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 2000.
- [110] J. P. Hernandez, T. Raush, A. Rios, S. Strauss, T. A. Osswald. Theoretical analysis of fiber motion and loads during flow. *Polymer Composites*, 25 (1) : 1–11, 2004.
- [111] C. Rauwendaal. *Polymer extrusion*. Hanser, Munich, 1986.
- [112] J. Tayeb, B. Vergnes, G. Della Valle. A basic model for a twin-screw extruder. *Journal of Food Science*, 54 (4) : 1047–1056, 1989.
- [113] M. L. Booy. Isothermal flow of viscous liquids in corotating twin screw devices. *Polymer Engineering & Science*, 20 (18) : 1220–1228, 1980.
- [114] I. Noé. *Étude des écoulements de polymères dans une extrudeuse bivis corotative*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 1992.
- [115] M. L. Booy. Geometry of fully wiped twin-screw equipment. *Polymer Engineering & Science*, 18 (12) : 973–984, 1978.
- [116] G. Della Valle, C. Barrès, J. Plewa, J. Tayeb, B. Vergnes. Computer simulation of starchy products' transformation by twin-screw extrusion. *Journal of Food Engineering*, 19 (1) : 1 – 31, 1993.
- [117] A. Kiani, P. Anderson, J. Curry, U. Burkhardt. Modelling of flow fields in distributive mixing elements. *SPE ANTEC Tech. Papers*, 1 (12) : 1310–1316, 1992.
- [118] H. Werner. *Das Betriebsverhalten der Zweiwelligen Knetscheiben Schneckenpresse von Type ZSK bei der Verarbeitung von Hochviskosen Flüssigkeiten*. Thèse de doctorat, Université de Munich, 1976.
- [119] L. Delamare. *Évolutions morphologiques d'un mélange de polymères incompatibles dans une extrudeuse bivis corotative*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 1995.
- [120] S. Bawiskar, J. L. White. Solids conveying and melting in a starve fed self-wiping corotating twin-screw extruder. *International Polymer Processing*, 10 (2) : 105–110, 1995.

- [121] B. Vergnes, G. Souveton, M. L. Delacour, A. Ainsier. Experimental and theoretical study of polymer melting in a co-rotating twin screw extruder. *International Polymer Processing*, 16 (4) : 351–362, 2001.
- [122] H. Potente, J. Ansahl, B. Klarholz. Design of tightly intermeshing co-rotating twin-screw extruders. *International Polymer Processing*, 9 (1) : 11–25, 1994.
- [123] W. Michaeli, A. Grefenstein. An analytical model of the conveying behaviour of closely intermeshing co-rotating twin screw extruders. *International Polymer Processing*, 11 (2) : 121–128, 1996.
- [124] D. B. Todd. *SPE ANTEC Tech. Papers*, 1 (34) : 54–58, 1988.
- [125] T. Domschke, C. Justus. Heat-transfer in single and twin-screw extruders. *International Polymer Processing*, 8 (4) : 294–307, 1993.
- [126] W. Weibull. A statistical distribution function of wide applicability. *Journal of Applied Mechanics*, 18 : 293–297, 1951.
- [127] P. Blazy, J. Yvon, E.-A. Jdid. Fragmentation : Généralités. Théorie. *Techniques de l'ingénieur*, JB3 (J3050), 2006.
- [128] J. R. Dormand, P. J. Prince. A family of embedded Runge-Kutta formulae. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 6 (1) : 19–26, 1980.
- [129] G. Shorack, J. Wellner. *Empirical Processes with Applications to Statistics*. Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2009.

Modélisation du mélange de polymères chargés et de la casse de fibres rigides en extrusion bivis

RÉSUMÉ : Dans cette thèse, nous avons voulu exploiter et étendre les outils de simulation à notre disposition pour proposer des méthodes de caractérisation et de prédiction du mélange à différentes échelles. À l'échelle locale d'écoulements macroscopiques, nous avons voulu exploiter les possibilités offertes par le logiciel de simulation 3D éléments finis XimeX® et y apporter des améliorations dans le but d'obtenir un outil d'étude du mélange distributif de particules dans un polymère par extrusion bivis. Nous avons ainsi enrichi la méthode éléments finis existante à l'aide de la bibliothèque éléments finis CimLib® du Cemef pour atteindre une plus grande précision de calcul, puis nous avons testé plusieurs méthodes de lâchers de particules afin de simuler le déplacement de charges dans la matrice polymère au cours du mélange. Nous avons ensuite appliqué quelques méthodes de caractérisations du mélange, dont une inédite, à ces lâchers de particules, et ce dans le cas de plusieurs géométries de vis. À l'échelle de la particule, on s'est intéressé aux mécanismes conduisant à la casse de fibres rigides, telles que les fibres de verre, lors du mélange avec un polymère en extrusion bivis. Nous avons choisi de faire des hypothèses assez importantes afin de simplifier ce problème extrêmement complexe et nous avons proposé une méthode de simulation de l'évolution de la distribution des longueurs de fibres le long de l'écoulement basée sur la conservation de la masse des fibres. Nous avons utilisé comme paramètres de cette simulation les résultats de calcul 1D obtenus par le logiciel Ludovic® qui repose sur des approches de type ALH. Nous avons ensuite comparé quelques résultats de calcul à des distributions de longueurs mesurées sur des échantillons prélevés le long d'une extrudeuse bivis.

Mots clés : Extrusion bivis, polymère, mélange distributif, charges, mélange dispersif, casse, fibres rigides.

Modelling filled polymers mixing and rigid fibres break-up in twin-screw extruders

ABSTRACT: In this thesis, we have attempted to use and to extend previously developed simulation tools to propose characterisation and mixing prediction methods at different scales. At a local macroscopic flow scale, we attempted to use the possibilities given by the 3D finite element software XimeX® and to improve it in order to obtain a tool for mixing simulation of filled polymers in twin-screw extruders. Thus we have enriched the existing finite element method using the Cemef finite element library CimLib® in order to achieve a greater computation accuracy. Then we have tested several particle tracking methods to predict the fillers displacement into the matrix during mixing. Furthermore, we have applied several characterisation methods to these particles tracking results for different screw geometries. At the particle scale, we have focused on the mechanisms leading to rigid fibres (such as glass fibres) breakage during mixing with polymer in twin-screw extruders. We have some assumptions in order to simplify this extremely complex problem. We then have proposed a simulation method of the evolution of the fibres length distribution along the flow. This method is based on the fibres mass conservation. We have used the results of the Ludovic® software 1D computations based on lubrication theory as impute parameters for this simulation. Then we have compared some computational results to length distributions measured on experimental samples taken along a twin-screw extruder.

Keywords : Twin-screw extruder, polymer, distributive mixing, fillers, dispersive mixing, break-up, rigid fibres