

Titre: Développement d'outils d'évaluation de la distribution des temps de séjour et de génération de maillages pour la modélisation de l'écoulement de fluides dans des mélangeurs continus
Title:

Auteur: Julie Olmiccia
Author:

Date: 2013

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Olmiccia, J. (2013). Développement d'outils d'évaluation de la distribution des temps de séjour et de génération de maillages pour la modélisation de l'écoulement de fluides dans des mélangeurs continus [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/1164/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1164/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: François Bertrand, & Mourad Heniche
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉVELOPPEMENT D'OUTILS D'ÉVALUATION DE LA DISTRIBUTION
DES TEMPS DE SÉJOUR ET DE GÉNÉRATION DE MAILLAGES POUR LA
MODÉLISATION DE L'ÉCOULEMENT DE FLUIDES DANS DES
MÉLANGEURS CONTINUS

JULIE OLMICCIA

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)

AOÛT 2013

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

DÉVELOPPEMENT D'OUTILS D'ÉVALUATION DE LA DISTRIBUTION DES TEMPS DE
SÉJOUR ET DE GÉNÉRATION DE MAILLAGES POUR LA MODÉLISATION DE
L'ÉCOULEMENT DE FLUIDES DANS DES MÉLANGEURS CONTINUS

présenté par : OLMICCIA Julie

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. TAVARES Jason R., Ph.D., président

M. BERTRAND François, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. HENICHE Mourad, Ph. D., membre et codirecteur de recherche

M. DUFOUR Steven, Ph.D., membre

REMERCIEMENTS

Au terme de ces 3 années de travail à Polytechnique Montréal et plus précisément, au sein du laboratoire de l'URPEI, j'aimerais remercier, de tout cœur, toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à la réalisation de cette Maîtrise.

À commencer par mon directeur et mon co-directeur, les professeurs François Bertrand et Mourad Heniche, qui m'ont donné l'opportunité de réaliser ce projet. Leur disponibilité ainsi que leurs conseils et leur expérience ont été indispensables à l'aboutissement de ce travail. Un grand merci au professeur François Bertrand pour son encadrement, tout au long de celui-ci, ainsi que pour ses encouragements. Un grand merci également au Professeur Mourad Heniche qui m'a guidée dans l'avancement de ce projet ainsi que pour son soutien continu.

Je remercie également les membres du jury: les Professeurs Jason R. Tavares et Steven Dufour pour avoir accepté d'évaluer mon mémoire.

Je remercie aussi l'ensemble des membres de l'URPEI: Vincent, Cyrille, Hamed, Ebrahim, Inci, Benoit, Bruno, Mohammad, Selim, Yoann, Florian, Christopher pour l'ambiance chaleureuse et stimulante qu'ils ont contribué à créer.

Un grand merci à mes parents, pour avoir été à mes côtés dans tous les choix que j'ai faits et les décisions que j'ai prises et pour m'avoir appris à ne jamais baisser les bras. Merci aussi à ma sœur Élodie et à ma marraine pour l'écoute et l'attention qu'elles ont manifestées à mon égard.

À mes amis de France: Audrey, pour sa présence continuelle, malgré la distance, son réconfort et son aide en mathématiques. Amélie, Anne et Marie sur qui je peux toujours compter, depuis toutes ces années.

Et à mes amis montréalais, Masa, Rachid, Isha, Colleen, Christian, Catherine, Estel, Felix, Etienne, Erika & Rudy, pour leur aide dans les moments difficiles, pour leur soutien et pour tous les bons moments partagés.

RÉSUMÉ

Pour optimiser les procédés de mélange, la compréhension de la mécanique des fluides est indispensable. Des outils numériques permettant de caractériser le mélange dans les procédés opérant en continu ont été développés. Une des méthodes les plus fréquemment rencontrées en simulation numérique pour quantifier le mélange dans ce type de système, est la distribution des temps de séjour (DTS). Elle permet, entre autres, d'analyser l'homogénéité de l'âge du fluide sur une section de contrôle. Elle s'obtient en combinant une technique de résolution des équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement par éléments finis, servant à établir le champ de vitesse, avec une méthode de lâcher de particules sans masse. Ces dernières sont uniformément réparties sur la surface d'entrée et récupérées à la sortie, permettant ainsi de déterminer l'âge du fluide. Un des problèmes fréquemment rencontrés avec ces techniques est le phénomène de perte de particules. Pour atténuer ce phénomène, une technique consistant à évaluer une région proche de la paroi dans laquelle aucune particule n'est injectée est présentée. De même, une méthodologie qui permet de mieux approximer le temps de séjour moyen et d'améliorer l'allure des courbes de DTS est également développée. Les premiers tests ont été faits en considérant le cas d'un écoulement entre deux plaques puis le cas d'une conduite circulaire. Les résultats ont montré une concordance avec la théorie permettant d'étendre la méthodologie au cas d'un mélangeur statique. Par contre, la précision de ce type de résultats est grandement dépendante du maillage du domaine d'écoulement. Cela est particulièrement vrai pour des géométries complexes, comme c'est le cas pour une extrudeuse bi-vis. Or, l'étape de maillage est délicate à cause de la présence de parties mobiles et de petits entrefers dont la position varie dans le temps. Il est alors essentiel de trouver une stratégie de maillage flexible. Dans ce contexte, une technique pour mailler le fourreau d'une bi-vis à l'aide de tétraèdres a été développée. Elle consiste à créer un maillage de la surface transversale du fourreau à partir d'un nuage de points connectés pour former des éléments triangulaires. Ce maillage est ensuite extrudé pour former le volume du domaine d'écoulement avec des éléments prismes, à 6 noeuds, qui sont à leur tour divisés en tétraèdres. L'avantage de cette technique est qu'elle permet le raffinement local du maillage, ce qui est souvent très difficile à réaliser avec des logiciels commerciaux. Le volume du maillage a été évalué et comparé au volume théorique de la géométrie du fourreau pour valider le maillage obtenu. Par la suite, la modélisation de l'écoulement dans un fourreau vide a été faite avec des maillages issus de notre mailleur et du logiciel commercial Gambit (Ansys)

pour comparer les résultats et vérifier ainsi la fonctionnalité du mailleur. Finalement, une étude de l'écoulement d'un fluide visqueux dans le fourreau avec les vis en rotation a été réalisée. Pour ce faire, la méthode des éléments finis virtuels (VFEM) a été utilisée pour modéliser les parties mobiles par des points de contrôle. La méthodologie développée pour mailler le fourreau de l'extrudeuse bi-vis s'est avérée utile pour simuler l'écoulement en régime transitoire avec des vis en mouvement. En effet, elle a conduit à des maillages fonctionnels, générés de façon systématique et quasi-instantanée. De plus, il est maintenant possible de pouvoir raffiner localement le maillage pour mettre plus d'éléments dans les entrefers, ce que nous n'avions pu faire avec les logiciels commerciaux.

ABSTRACT

A detailed understanding of fluid mechanics is required in order to optimize mixing processes. In this thesis numerical tools that allow the characterization of mixing in different continuous processes were developed. One of the methods often used in numerical simulations to quantify the level of mixing in these types of systems is Residence Time Distribution (RTD). One capability of this method is that it can analyze the uniformity of the time that elements of the fluid have spent in a control volume. RTD is obtained by combining the calculation of the velocity field through solving the equations of mass and momentum balance via the finite element method and the injection of massless particles. These particles are injected uniformly on the entry surface and are gathered at the exit, allowing the determination of their residence time. One of the problems encountered, when using this technique, is the loss of particles. To overcome the problem, a solution was presented that estimates the thickness of the near wall region, where no particles are injected. Also, a methodology was developed that allows a better approximation of the average residence time and improves the shape of RTD curves. The primary tests were carried out on the case of flow between two plates and in a circular conduit. The results showed good agreement with theory and permitted the application to a static mixer. It is worth noting that the precision of the generated results greatly depends on the mesh generation for the flow domain. This is particularly significant in the case of complex geometries such as flow in a twin-screw extruder, where the mesh generation step is a very delicate matter due to the presence of moving parts and small gaps with changing position in time. Thus, finding a flexible mesh generation strategy is essential. In this context, a technique to generate a mesh for the barrel utilizing tetrahedrons was developed. It consists of creating a mesh over the transversal surface of the barrel from a network of points interconnected to form triangular elements. This surface mesh is extruded to form the volume of the flow domain with prism elements holding six nodes, which are later on divided into tetrahedrons. The advantage of this technique is that it allows local refinement the mesh, something that cannot always be achieved easily using commercial software. The obtained mesh is validated by evaluation of its volume and comparison to the theoretical volume. Afterwards, flow inside an empty barrel is modeled using our mesh generation technique, and the commercial software Gambit to compare the results from the two and verify the functionality of our mesh generator. Finally, a study was carried out on the flow of a viscous fluid inside the barrel while the screws were rotating. In order to carry out this

study, the Virtual Finite Elements Method (VFEM) was applied to model the moving parts using control points. The methodology developed to mesh the barrel of a twin-screw extruder was found useful to simulate the flow with moving screws in transitory state. In fact, it generates functional meshes in a systematic and quasi-instantaneous manner. In addition, it is now possible to refine locally a mesh in order to place more elements in gaps, which was something we were not able to do with commercial software.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	III
RÉSUMÉ.....	IV
ABSTRACT	VI
TABLE DES MATIÈRES	VIII
LISTE DES TABLEAUX.....	XI
LISTE DES FIGURES.....	XII
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	XVI
LISTE DES ANNEXES.....	XX
CHAPITRE 1 INTRODUCTION.....	1
1.1 Le mélange industriel	1
1.2 Les types de mélangeurs	3
1.2.1 Les extrudeuses bi-vis	4
1.2.2 Les mélangeurs statiques.....	5
1.3 Caractérisation du mélange	6
1.4 Motivations de l'étude	8
1.5 Objectif général	8
1.6 Plan du mémoire.....	8
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	10
2.1 Outils numériques pour évaluer la distribution des temps de séjour dans des systèmes continus	10
2.2 Modélisation numérique de l'écoulement des fluides dans des systèmes contenant des parties mobiles.....	15
CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE.....	25

3.1	Principes de la distribution des temps de séjour	25
3.1.1	Dynamique des fluides numériques	25
3.1.2	Lâcher de particules	28
3.1.3	Évaluation de la Distribution des Temps de Séjour	29
3.2	Méthodologie sur le maillage du fourreau	36
3.2.1	Motivations.....	36
3.2.2	Génération du maillage surfacique.....	39
3.2.3	Génération du maillage volumique	44
3.2.4	Autres fonctionnalités connexes.....	47
3.2.5	Avantages et inconvénients de la technique de maillage proposée.....	47
CHAPITRE 4 APPLICATIONS ET VALIDATION DE LA DTS		49
4.1	Application sur un écoulement Poiseuille.....	49
4.1.1	Géométrie et propriétés du fluide.....	49
4.1.2	Calcul de l'épaisseur de la région proche des parois	49
4.1.3	Résultats de la DTS	51
4.2	Application sur un mélangeur statique: le Kenics.....	56
4.2.1	Géométrie et propriétés du fluide.....	57
4.2.2	Évaluation de l'épaisseur de la région proche des parois	59
4.2.3	Résultats	61
CHAPITRE 5 RESULTATS SUR LA BI-VIS		68
5.1	Géométries et maillages	68
5.1.1	Détails de la géométrie et du fluide.....	68
5.1.2	Présentation des maillages obtenus	69
5.2	Validation du maillage du fourreau: écoulement sans vis.....	77

5.2.1	Résultats en vitesse et pression	77
5.2.2	Observations sur les maillages issus de notre mailleur	87
5.3	Écoulement dans un système fourreau et vis fixes.....	89
5.4	Résultats de l'écoulement avec les vis en mouvement	96
5.4.1	Étude des résultats en pression.....	97
5.4.2	Étude de la vitesse	100
CHAPITRE 6	CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS	103
RÉFÉRENCES	106
ANNEXES	112

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1: Évaluation du temps de séjour moyen d'un écoulement de Poiseuille pour plusieurs valeurs de N déterminées selon diverses méthodes	52
Tableau 4.2: Évaluation du temps de séjour moyen d'un écoulement de Poiseuille avec une valeur de N optimale pour des fluides suivant une loi de puissance.....	53
Tableau 4.3: Étude de la précision de la prédiction des temps de séjour moyens selon le δ utilisé.	60
Tableau 4.4: Prédiction du temps de séjour moyen avec une valeur de N optimale pour un mélangeur Kenics de type RR.....	64
Tableau 5.1: Comparaison des régularités obtenues en fonction du critère utilisé pour plusieurs maillages.....	73
Tableau 5.2: Comparaison des différents paramètres des maillages selon le mailleur utilisé	78
Tableau 5.3: Comparaison des profils de vitesses au centre de la géométrie pour différents maillages (en ordre croissant) obtenus avec Gambit et avec notre mailleur (selon la numérotation des maillages du Tableau 5.2).....	79
Tableau 5.4: Comparaison des écarts relatifs ε_{AP} sur la perte de charge en fonction du mailleur utilisé, de la taille de maille et de l'élément fini utilisé (MINI ou P1 ⁺ -P0)	86
Tableau 5.5: Détails des maillages étudiés.....	91
Tableau 5.6: Données de perte de charge, puissance et cisaillement moyen selon le maillage	99

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: Représentation des différentes échelles de mélange: a) Micro-mélange b) Macro-mélange c) Méso-mélange. (Patterson et al., 2004, p766)	2
Figure 1.2: Schéma représentant le mélange distributif et dispersif (Todd, 2004, p989)	3
Figure 1.3: Les principales configurations d'une extrudeuse bi-vis (Vergnes & Chapet, 2001,p3).4	4
Figure 1.4: Photo d'un mélangeur statique de type SMX (Sulzer Chemtech Ltd, 2013, p8)	5
Figure 2.1: Techniques de décomposition (a) conforme et (b) non conforme des éléments. (Bertrand et al., 2003, p494).	20
Figure 2.2: Exemple de procédure de raffinement de maillage non conforme à 4 niveaux dans les entrefers d'une extrudeuse bi-vis. (Bertrand et al., 2003, p498).	21
Figure 2.3: Modèle de subdivision d'un tétraèdre, basé sur la Red Green Refinement Technique, selon le nombre de nœuds étranglés contenus sur une face (Giguère et al., 2006, p459-460).23	23
Figure 3.1: Élément fini MINI ($P1^+ - P1$)	27
Figure 3.2: Élément fini $P1^+ - P0$	28
Figure 3.3: Profil de vitesse entre deux plaques parallèles	34
Figure 3.4: Influence de l'épaisseur de la paroi proche du mur sur la courbe cumulative $F(t)$ de la DTS.	36
Figure 3.5 : Superposition de splines	37
Figure 3.6: Extrusion du maillage surfacique pour obtenir un maillage tridimensionnel avec des prismes	39
Figure 3.7: Paramètres importants dans la lunette d'un fourreau	40
Figure 3.8: Position des nœuds dans les lunettes du fourreau.....	40
Figure 3.9: Schématisation de la formation des éléments surfaciques.....	41
Figure 3.10: Démonstration du calcul de l'aire du fourreau (équation (3.38)).....	44
Figure 3.11: Division du prisme en 3 tétraèdres	45

Figure 3.12: Discontinuité des faces entre la face du dessous du prisme du haut et celle du dessus du prisme du bas.....	46
Figure 4.1: Variation du δ en fonction de l'indice de loi de puissance, n , pour un écoulement de Poiseuille, en comparaison avec la constante proposée par Nauman (Nauman, 2008b, p553) et représentée par une ligne droite.....	50
Figure 4.2: Convergence de T_h en fonction de la taille de maille pour un écoulement de Poiseuille	51
Figure 4.3: Influence de la méthode utilisée pour évaluer le nombre de classes N sur les courbes $f(t)$ de la DTS pour un écoulement de type Poiseuille d'un fluide newtonien.....	53
Figure 4.4: Influence de l'indice de loi de puissance, n , sur la fonction $f(t)$ de la DTS pour un écoulement de type Poiseuille.	54
Figure 4.5: Représentation spatiale de la DTS sur une carte Poincaré d'un écoulement de Poiseuille pour un fluide a) newtonien et b) d'indice de loi de puissance $n=0,5$	56
Figure 4.6: Géométrie du mélangeur statique RR-Kenics	57
Figure 4.7: Écoulement transversal à la sortie d'un mélangeur statique Kenics de type RR pour a) un fluide newtonien, b) un fluide suivant une loi de puissance tel que $n=0,5$	58
Figure 4.8: Influence de l'indice de loi de puissance, n , sur la perte de charge dans un mélangeur statique Kenics de type RR	59
Figure 4.9: Influence du paramètre δ sur la courbe de la DTS pour un fluide newtonien dans un mélangeur statique Kenics de type RR (Olmiccia et <i>al.</i> ,2011)	61
Figure 4.10: Influence du type de pondération utilisée sur les courbes $f(t)$ de la DTS pour l'écoulement d'un fluide newtonien dans un mélangeur Kenics de type RR.....	62
Figure 4.11: Influence du type de pondération choisie sur les courbes $f(t)$ de la DTS pour un écoulement de Poiseuille.	63
Figure 4.12: Influence de l'indice de loi de puissance sur la fonction cumulative de la DTS pour un écoulement dans un Kenics de type RR	64

Figure 4.13: Représentation spatiale de la DTS sur une section Poincaré pour un écoulement dans un Kenics de type RR avec un fluide: a) newtonien et b) suivant une loi de puissance d'indice $n=0,5$	66
Figure 5.1: a) Représentation latérale d'une vis (tiré d'un document de la SNPE- Société Nationale des Poudres et Explosifs) b) Visualisation de la configuration de la bi-vis	69
Figure 5.2: Image d'un maillage complet du fourreau	70
Figure 5.3: Exemples de maillage de la zone centrale avec la première (à gauche) et la seconde version (à droite) du mailleur	72
Figure 5.4: Comparaison visuelle entre les maillages surfaciques générés par les 4 critères par rapport au maillage #1	74
Figure 5.5: Visualisation des maillages surfaciques obtenus avec le critère 1 pour les maillages a) #2 et b) #3.....	76
Figure 5.6: Norme de la vitesse sur l'axe horizontal au centre des lunettes du fourreau (tel que représenté au dessus des graphiques) pour les maillages a) issus de Gambit et b) issus de notre mailleur	82
Figure 5.7: Zoom sur les éléments centraux des maillages a) #4 ($h=2,63$ mm) et b) #1 ($h=3,96$ mm)	83
Figure 5.8: Visualisation d'un maillage surfacique Gambit utilisé (Maillage #1)	84
Figure 5.9: Graphique représentant l'erreur sur la vitesse moyenne sur le plan d'entrée en fonction de la taille de maille et du mailleur utilisé	85
Figure 5.10: Maillages surfaciques raffinés localement: a) le plus grossier b) le plus fin.....	88
Figure 5.11: Comparaison des erreurs relatives sur la vitesse moyenne à l'entrée entre des maillages raffinés localement et des maillages réguliers issus de Gambit et de notre mailleur pour l'élément MINI.	88
Figure 5.12: Comparaison des ΔP entre des maillages raffinés localement et des maillages réguliers générés par Gambit et par notre mailleur pour des simulations avec l'élément MINI.....	89

Figure 5.13: Coupe du champ de vitesse (en $m.s^{-1}$) au centre de la longueur du fourreau pour le maillage raffiné localement le plus fin	92
Figure 5.14: Comparaison des ΔP entre des maillages raffinés localement et des maillages réguliers générés par Gambit et par notre mailleur pour l'écoulement avec des vis fixes	92
Figure 5.15: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse à une hauteur donnée de la lunette du fourreau, au centre de la longueur d'écoulement des vis, selon le type de mailleur utilisé	94
Figure 5.16: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse à une hauteur donnée de la lunette du fourreau, au centre de la longueur d'écoulement des vis pour différents maillages raffinés localement	95
Figure 5.17: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse à une hauteur donnée de la lunette du fourreau au centre de la longueur d'écoulement des vis pour différents maillages non raffinés localement issus de notre mailleur	96
Figure 5.18: Variation de la pression moyenne après 2s sur un plan en fonction de la distance de l'entrée du fourreau qui est divisée selon les 6 zones de la géométrie de la vis. 1: zone d'entrée, 2: première zone de transport, 3: première zone de malaxage, 4: seconde zone de malaxage, 5: seconde zone de transport, 6: zone de sortie.....	98
Figure 5.19: Évolution de la pression dans le temps au niveau de l'apex dans la seconde zone de malaxage.....	100
Figure 5.20: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse pour différents maillages raffinés localement à la mi-longueur pour 2 axes dans le fourreau au centre de la première lunette	101
Figure 5.21: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse pour différents maillages raffinés localement à la mi-longueur pour 2 axes dans le fourreau à la jonction des 2 lunettes	102

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Sigles	Signification
CFD	Computational Fluid Dynamics
DTS	Distribution du Temps de Séjour
FDM	Méthode des Domaines Fictifs
MG	Maillages Gambit
MNRL	Maillages non raffinés localement issus de notre mailleur
MRL	Maillages raffinés localement issus de notre mailleur
URPEI	Unité de Recherche en Procédés d'Écoulements Industriels
VFEM	Méthode des Éléments Finis Virtuels
Symboles	Signification
a	Longueur d'arête (m)
\bar{a}	Longueur moyenne d'une arête (m)
A_{fourreau}	Surface théorique du fourreau (m^2)
A_{maillage}	Surface du maillage transversale de la géométrie (m^2)
Entraxe	Distance entre les 2 centres des lunettes du fourreau (m)
$f(t)$	Fonction de densité de la DTS
$F(t)$	Fonction cumulative de la DTS
f_i	Fonction discrétisée de $f(t)$
g	Accélération de la pesanteur (9.81 m/s^2)
h	Taille de maille (m)
h_{max}	Longueur de la plus grande arête du triangle (m)
H	Hauteur de la géométrie (m)
IQR	Écart interquatile sur les temps de séjour

J	Fonction minimisant la prédiction du temps de séjour moyen
K	Indice de consistance de la loi de puissance ($\text{Pa}\cdot\text{s}^n$)
l	Longueur parcourue par la particule (m)
L	Longueur de la géométrie (m)
n	Indice de loi de puissance
n_p	Nombre de particules
N	Nombre de classes
NELT	Nombre d'éléments du maillage
p	Pression (Pa)
P_0	Pression à l'entrée du système (Pa)
P_L	Pression à la sortie du système (Pa)
P_k	Demi-périmètre du triangle (m)
Q	Débit volumique (m^3/s)
Q_k	Rapport de forme d'un triangle
r	Position radiale (m)
R	Rayon (m)
s	Écart-type sur les temps de séjour
S_{IELT}	Surface d'un élément triangulaire (m^2)
S_{in}	Surface d'entrée de l'écoulement du système sur laquelle les conditions frontières sont imposées (m^2)
S_k	Aire de l'élément (m^2)
t	Temps (s)
t_0	Temps initial (s)
t_{max}	Temps de séjour maximal (s)
t_{min}	Temps de séjour minimal (s)

T	Temps de séjour moyen (s)
T_{exact}	Temps de séjour moyen théorique (s)
T_h	Temps de séjour moyen prédit (s)
v	Champ de vitesse (m/s)
\bar{v}	vitesse moyenne (m/s)
v_{in}^*	Champ de vitesses imposée sur la surface d'entrée du système (m/s)
v_{max}	Vitesse maximale (m/s)
v_x	Composante x de la vitesse (m/s)
v_z	Composante z de la vitesse (m/s)
$\langle v_z \rangle$	Vitesse moyenne de la composante en z (m/s)
V_{fourreau}	Volume du fourreau théorique (m ³)
V_{MP}	Volume du maillage avec les prismes (m ³)
V_{MT}	Volume du maillage avec les tétraèdres (m ³)
V_{prisme}	Volume d'un prisme (m ³)
$V_{\text{tétraèdre}}$	Volume d'un tétraèdre (m ³)
w_i^j	Fonction de pondération des temps de séjour
W	Épaisseur de la géométrie (m)
x_i, y_i, z_i	Coordonnées du nœud i (m)
$X(t)$	Position de la particule au temps t (m)
y	Position verticale (m)

Lettres grecques:

Symboles Signification

β	Coefficient de normalisation
$\dot{\gamma}$	Taux de cisaillement (s ⁻¹)

δ	Épaisseur proche des parois (m)
Δl_θ	Espacement selon la position angulaire (m)
ΔP	Perte de charge (Pa)
Δr	Espacement selon la position radiale (m)
Δt	Pas de temps (s)
$\varepsilon_{\Delta P}$	Écart relatif sur la perte de charge
η	Viscosité (Pa·s)
θ	Angle (radians)
ξ_P, η_P	Coordonnées du nœud P dans l'élément de référence (m)
ρ	Masse volumique (kg/m ³)
σ	Tenseur des contraintes (Pa)
σ_L	Écart-type sur les longueurs d'arête d'un élément
τ	Contrainte de cisaillement (Pa)
φ_i	Fonction de forme
Ω	Volume d'écoulement (m ³)

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE 1 – Titre de l'article: A Particulate Method for Determining Residence Time in
Viscous Flow Processes.....111

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Les travaux effectués pour ce mémoire s'inscrivent dans les recherches effectuées au sein du laboratoire de l'Unité de Recherche en Procédés d'Écoulements Industriels (URPEI). Un des objectifs du groupe de recherche est d'étudier les phénomènes liés à l'écoulement de fluides complexes dans des systèmes de mélange en cuves agitées ou en continu. Afin de mieux maîtriser le phénomène central qu'est le mélange dans ces systèmes, des méthodes expérimentales et de la modélisation numérique des procédés sont utilisées.

1.1 Le mélange industriel

Le mélange est défini comme la réduction des inhomogénéités dans un volume. Ces inhomogénéités peuvent être des concentrations, des phases ou des températures. C'est une des opérations unitaires clés dans l'industrie des procédés. Elle est présente dans un très grand nombre d'industries (pharmaceutique, plastique, alimentaire...). En effet, assurant l'augmentation de la surface d'échange, le mélange permet un meilleur transfert de masse et/ou de chaleur. Par exemple, dans un contexte de réacteurs, le mélange est essentiel à l'obtention de la meilleure conversion possible. Il permet de mettre en contact tous les réactants dans le volume de réaction. Tout comme dans le cas d'ajout d'additifs aux polymères, il permet d'améliorer plusieurs propriétés telles que la qualité (aspect visuel) et les caractéristiques physiques (résistance à la déformation et à la chaleur...) du matériau. Si l'additif n'est pas uniformément réparti dans le polymère, le matériau n'aura pas les mêmes caractéristiques partout, le rendant inapte à l'usage souhaité.

Le mélange à l'échelle moléculaire (mélange parfait) est difficile à réaliser dû à la difficulté de contrôler la matière à cette échelle. De ce fait, selon les applications industrielles, la qualité du mélange est définie selon trois échelles:

- le mélange à l'échelle macroscopique: le mélange est homogène au niveau de la plus large échelle du procédé (Figure1-b).
- le mélange à l'échelle microscopique: les propriétés de la solution sont homogènes sur une échelle qui correspond à la plus petite échelle de mouvement de fluide (les plus petits tourbillons) et à l'échelle de diffusion moléculaire (souvent de l'ordre du micromètre). Par

exemple, le micro-mélange est important lors de la conception de réacteurs chimiques pour des réactions rapides car il est le facteur limitant (Figure 1.1-a).

- le mélange à l'échelle mésoscopique: le mélange est homogène à une échelle intermédiaire entre la macroscopique et la microscopique. La diffusion visqueuse et moléculaire sont prépondérantes à cette échelle. Par exemple, le méso-mélange est important à l'échelle de la conduite d'alimentation d'un réacteur semi-batch lorsque l'alimentation en fluide est plus importante que le taux de mélange local (Figure 1.1-c).

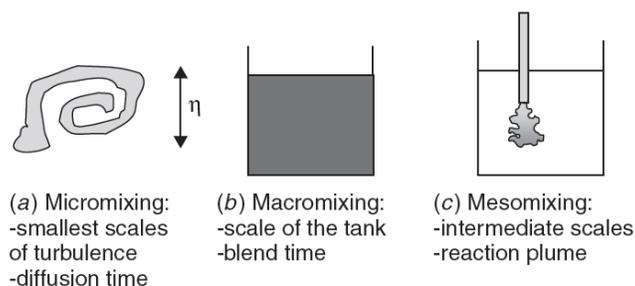


Figure 1.1: Représentation des différentes échelles de mélange: a) Micro-mélange b) Macro-mélange c) Méso-mélange. (Patterson et al., 2004, p766)

En général, le mélange peut se faire selon trois mécanismes:

- La diffusion moléculaire qui est guidée par la différence de concentration dans l'espace des espèces présentes dans le mélange. C'est un processus qui se fait spontanément mais qui peut s'avérer long.
- La diffusion tourbillonnaire: en régime turbulent, la présence de tourbillons dans le fluide induit du déplacement, du cisaillement et un étirement permettant l'incorporation des deux phases l'une dans l'autre.
- La convection qui correspond à la mise en mouvement des espèces afin de les répartir dans tout le volume.

Dans ce type d'opération, la notion de rhéologie du fluide est centrale pour comprendre la physique associée au mélange qui a lieu. Dans le cas des fluides à rhéologie complexe, pour lesquels les forces visqueuses sont plus importantes que les forces d'inertie, le mélange par turbulence est quasi, voire impossible à obtenir (puissance mécanique très élevée et énergivore) et, s'il est atteint, cela résulte souvent en un important dégagement de chaleur.

Le mélange de fluides très visqueux se fait donc en régime laminaire. La diffusion moléculaire pour ces fluides étant très lente, le mécanisme prédominant de mélange est la convection. En régime laminaire, le fluide se déplace par couches adjacentes qui glissent les unes sur les autres, sans s'interpénétrer. Il se fait alors en 3 étapes: l'étirement des couches de fluides créé par les gradients de vitesse, le pliage et la cassure de ces couches par l'agitateur. Elles se recombinent ensuite et le même processus se répète de manière à diminuer l'épaisseur des couches. Le mélange se fait principalement aux abords de l'agitateur qui doit donc toucher le plus grand volume possible. En général, le mélange des fluides nécessite l'utilisation de l'action dispersive et distributive (Figure 1.2). Le mélange distributif, ou extensif, permet de répartir uniformément les composants, dans tout l'espace. En ce qui concerne le mélange dispersif, ou intensif, il permet de réduire la taille des composants cohésifs en cassant les agglomérats. Il a donc une action plus localisée. Le mélange dispersif résulte des contraintes mécaniques appliquées sur le fluide (Todd, 2004).

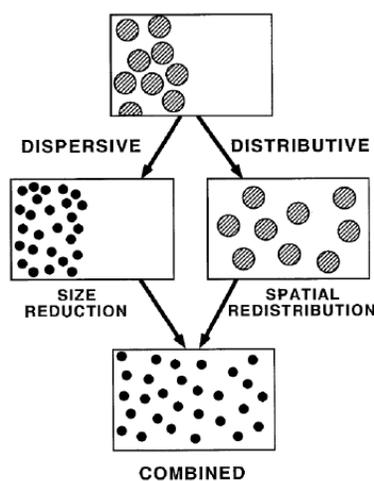


Figure 1.2: Schéma représentant le mélange distributif et dispersif (Todd, 2004, p989)

1.2 Les types de mélangeurs

Une grande variété de mélangeurs existe. Deux grandes familles sont à distinguer: ceux qui assurent un fonctionnement en continu (mélangeurs statiques, extrudeuses mono ou bi-vis par exemple) et les procédés discontinus ou batch (cuve contenant un agitateur tel qu'un ruban hélicoïdal, une ancre, une turbine Rushton...). Pour ce mémoire, une attention particulière est portée aux mélangeurs continus: les extrudeuses bi-vis et les mélangeurs statiques.

1.2.1 Les extrudeuses bi-vis

Les extrudeuses bi-vis sont souvent rencontrées dans différentes industries qui manient des fluides visqueux (plastiques, alimentaires...). Elles sont composées de deux vis, parallèles, en rotation, contenues dans un fourreau ayant la forme d'un huit. La géométrie des vis varie d'un procédé à l'autre; plusieurs types d'éléments peuvent être enfilés autour de l'arbre de la vis selon les fonctions désirées (convoyage, mélange distributif, mélange dispersif, fusion...). Elles servent à la fois à transporter et mettre en pression le fluide avant sa mise en forme mais assurent aussi le rôle de mélangeur afin de l'homogénéiser. En plus de fonctionner en continu, elles ont comme avantage d'avoir une diversité de conditions opératoires et de possibilité de conception. En effet, il est possible de faire tourner les vis dans le même sens (co-rotatives) ou en sens inverse (contra-rotatives). En plus, les vis peuvent ou non s'interpénétrer (Figure 1.3).

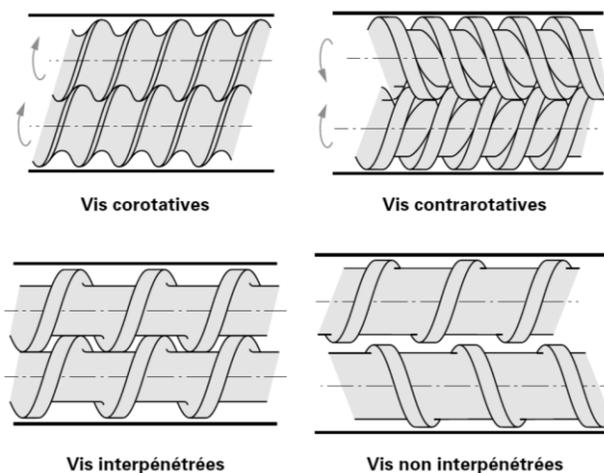


Figure 1.3: Les principales configurations d'une extrudeuse bi-vis (Vergnes & Chapet, 2001,p3)

La combinaison la plus fréquemment rencontrée est l'interpénétrée co-rotative car la géométrie des vis est plus flexible (possibilité d'ajouter des éléments de malaxage) et permet un mélange dispersif et distributif. De plus, elle a la particularité d'être autonettoyante, ce qui limite l'apparition de zones stagnantes, zones dans lesquelles le fluide est immobile et qui, par conséquent, nuisent à la qualité du mélange. Les extrudeuses bi-vis interpénétrées contra-rotatives sont meilleures pour le mélange distributif. Les extrudeuses bi-vis tangentes (ou non interpénétrées) contra-rotatives assurent un bon mélange distributif mais pas dispersif car elles créent moins de cisaillement que les extrudeuses interpénétrées (Vergnes & Chapet, 2001).

1.2.2 Les mélangeurs statiques

Les mélangeurs statiques sont des mélangeurs continus qui ne contiennent pas de parties mobiles. Leur principe consiste en l'ajout d'une série d'obstacles, dans des conduites, qui assurent le mélange (Figure 1.4). Dû à la perte de charge engendrée, ils requièrent la présence d'une pompe pour fournir l'énergie nécessaire à pousser le fluide à travers le mélangeur. Il existe une grande variété de mélangeurs statiques: Kenics, SMX, HEV (High Efficiency Vortab)... Certains sont adaptés pour des écoulements laminaires ou des écoulements turbulents, tandis que d'autres ont une échelle plus large de fonctionnement.

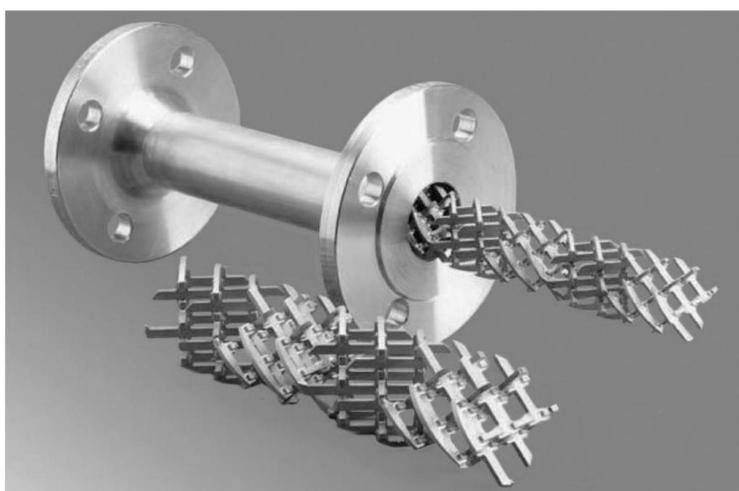


Figure 1.4: Photo d'un mélangeur statique de type SMX (Sulzer Chemtech Ltd, 2013, p8)

En régime laminaire, les éléments du mélangeur statique forcent le fluide à se diviser et à se recombiner, créant un mélange dans la direction transversale à l'écoulement.

En régime turbulent, la forme et la position des éléments créent des tourbillons qui favorisent le mélange.

Ils sont utilisés pour du transfert thermique, dans des procédés de réaction (comme la polymérisation), pour homogénéiser les concentrations, pour la dispersion pour des fluides polyphasiques (générer des interfaces). Ils sont présents dans l'industrie du plastique, pétrochimique, dans des procédés de traitement des eaux, etc.

Ce type de mélangeurs présente de nombreux avantages vu qu'ils permettent un bon transfert de masse et d'énergie. Par contre, ils engendrent une perte de charge importante, sont assez chers et peuvent s'encrasser facilement entraînant alors l'apparition de zones de fluide stagnant.

1.3 Caractérisation du mélange

Afin de caractériser les mécanismes de mélange dans un procédé, de nombreuses méthodes ont été développées, en particulier des méthodes basées sur la modélisation numérique d'écoulement des fluides. Ce type de modélisation se rattache à la dynamique des fluides numériques (CFD- Computational Fluid Dynamics) qui correspond à la prédiction des écoulements, du transfert de masse, transfert de chaleur et autres phénomènes obtenus par la résolution numérique des équations mathématiques qui les gouvernent. Grâce à la CFD, il est possible de tester des écoulements dans des conditions réelles qui sont parfois difficiles à reproduire, de changer les paramètres opératoires ou géométriques et d'analyser localement les variables dans tout le domaine sans modifier l'écoulement. Son utilisation permet de localiser et résoudre des problèmes dans un procédé, d'étudier l'impact de paramètres et d'optimiser la conception d'un procédé. Cette méthode est souvent utilisée en complément de méthodes expérimentales afin de vérifier ou compléter l'analyse.

Elle se divise en 3 étapes. Il faut d'abord mailler le domaine à l'étude, soit le représenter par une série de volumes de contrôle (ou éléments). C'est dans chaque élément que les équations sont résolues après avoir spécifié les conditions initiales et frontières du domaine. C'est pour cela que le maillage est une étape clé car la précision des résultats en dépend. Par la suite, les équations qui gouvernent le domaine sont discrétisées, en l'occurrence il s'agit ici des équations de quantité de mouvement et de conservation de masse afin d'obtenir des champs de vitesses et de pressions. Les champs de vitesse permettent de visualiser la direction de l'écoulement et repérer éventuellement les écoulements secondaires tandis que la pression est liée avec la vitesse au cisaillement, à la viscosité et autres phénomènes internes au fluide. Pour la discrétisation, plusieurs méthodes existent: les différences finies, les volumes finis, les éléments finis... Les équations sont résolues de manière itérative afin d'arriver à une convergence des résultats. En plus de la taille de maille, la convergence des résultats dépend, des paramètres du problème et de la précision du modèle choisi, en fonction des hypothèses posées. Une fois les résultats obtenus, il s'ensuit les études de post-traitement pour aider à l'analyse des résultats comme la quantification de l'efficacité du procédé de mélange.

Dans cette optique, de nombreuses méthodes peuvent être utilisées, dépendamment du type de mélange à étudier. Les plus répandues consistent à échantillonner et mesurer dans le temps et

l'espace des concentrations de composants. Dans ce groupe de méthodes se trouve l'intensité de ségrégation, le CoV (coefficient de variation) et la Distribution des Temps de Séjour (DTS). Cette dernière est une des plus utilisées, surtout en ce qui a trait aux mélangeurs statiques et aux extrudeuses bi-vis, et elle a fait l'objet de nombreux travaux, comme ce sera vu dans la revue de littérature. C'est pourquoi il a été décidé d'utiliser cette méthode pour évaluer la qualité du mélange dans des mélangeurs continus.

La DTS aide à caractériser l'écoulement de fluides et le mélange à l'échelle macro. Plus précisément, elle permet de faire une distribution des temps passés par des éléments de fluide dans le mélangeur et d'évaluer leur temps moyen pour traverser le système. Étant basée sur l'écoulement, elle permet, entre autres, de détecter d'éventuelles zones mortes. L'obtention de la DTS peut se faire de manière expérimentale ou numérique.

Expérimentalement, cela consiste à injecter un traceur inerte dans le système, le traceur peut être soit un traceur coloré, radioactif, des gaz inertes... Par la suite, il s'agit de mesurer l'évolution de leur concentration dans le temps et l'espace. Plusieurs méthodes existent pour cela (conductimétrie, colorimétrie, spectrométrie...). La méthode utilisée dépend, entre autres, du type de traceur injecté. L'injection doit se faire de manière à ne pas perturber l'écoulement et sur une période très courte, ce qui peut être difficile à réaliser.

Numériquement, c'est à l'étape de post-traitement qu'il est possible de prédire les temps de séjour nécessaires pour évaluer la DTS. Ils s'évaluent à partir du champ de vitesses obtenu et de la longueur de déplacement au cours du temps. Cette méthode peut être avantageuse car elle permet d'avoir plusieurs détails sur l'écoulement local tels que l'étude du temps de séjour selon l'endroit où la particule est injectée. Cependant, les résultats obtenus sont toujours accompagnés d'erreurs numériques et leur précision dépend à la fois de celle du modèle physique utilisé et du maillage du domaine. En effet, numériquement, il peut s'avérer difficile de faire converger les résultats pour modéliser l'écoulement pour des fluides très visqueux et de traiter les géométries complexes. Pour des géométries complexes, comme par exemple un domaine contenant des parties mobiles, comme c'est le cas pour les extrudeuses bi-vis, l'étape de maillage peut facilement devenir encombrante et limitante pour obtenir des résultats plus précis. Cela demande donc de s'arrêter sur le sujet.

1.4 Motivations de l'étude

De nombreuses interrogations, en ce qui concerne l'efficacité du mélange dans les extrudeuses bi-vis présentes en industrie, existent encore. Du fait de leur importance dans les procédés industriels et des nombreux paramètres qui entrent en jeu dans le système, des études plus approfondies sont souvent nécessaires pour comprendre et ainsi optimiser leur fonctionnement. Les études expérimentales peuvent s'avérer coûteuses et contraignantes du fait notamment du coût de l'équipement, de son installation et de la complexité de réalisation du plan expérimental.

L'étude basée sur l'utilisation d'un outil numérique offre plus de flexibilité car il est possible de jouer sur les paramètres géométriques ou opératoires du système. C'est pourquoi, elle est souvent utilisée en complémentarité avec l'étude expérimentale afin de restreindre le champ d'étude lié au problème. De plus, elle permet d'avoir une vision plus détaillée de la qualité du mélange en rendant possible l'obtention de détails plus localisés, tels que la répartition de la température ou des champs de vitesse dans l'espace, par exemple. Toutefois, la modélisation numérique d'une géométrie aussi complexe qu'une extrudeuse bi-vis demande de porter une attention particulière au maillage. Étant donné que c'est une étape centrale, la maîtrise de la façon de mailler le domaine devient incontournable. C'est d'ailleurs un sujet qui sera abordé plus tard.

1.5 Objectif général

Ce travail, dont le cadre général s'appuie sur des méthodes de modélisation numérique des fluides pour des mélangeurs industriels et sur l'analyse de la qualité du mélange, a pour objectif de: **revisiter à la fois les outils utilisés pour la modélisation de l'écoulement dans des mélangeurs continus à géométrie complexe, mais aussi les méthodes d'analyse de ce type d'écoulement.**

L'hypothèse associée à cet objectif est que cette nouvelle méthodologie permettra d'améliorer la modélisation numérique dans ce type d'écoulement, tout en rendant leur obtention plus simple et systématique, conduisant à une meilleure analyse de ces systèmes physiques.

1.6 Plan du mémoire

Ce mémoire débute avec une revue de littérature (chapitre 2) sur l'état de l'art, en ce qui concerne la dynamique des fluides numérique et la distribution des temps de séjour. Celle-ci permet de

cibler les problématiques existantes. Suit, le chapitre 3 qui décrit en détail les démarches pour la modélisation numérique de l'écoulement dans une extrudeuse bi-vis ainsi que les équations qui entrent en jeu. Une nouvelle approche pour évaluer numériquement la distribution des temps de séjour est aussi introduite. Le chapitre 4 compile et analyse les résultats obtenus en appliquant la méthodologie numérique de la distribution des temps de séjour présentée au chapitre 3, en l'appliquant notamment dans le cas d'un mélangeur statique. Le chapitre 5 regroupe les résultats liés à la dynamique des fluides numérique dans une extrudeuse bi-vis. Et pour conclure ce mémoire, les principaux résultats de ce travail de maîtrise sont résumés et des recommandations pour des futurs travaux sont présentées.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 Outils numériques pour évaluer la distribution des temps de séjour dans des systèmes continus

La Distribution des temps de séjour est un principe ancien dont les premiers travaux peuvent être attribués à Danckwerts (1953). Ce principe a, depuis, fait l'objet de nombreux travaux rassemblés notamment dans un article de Nauman (2008a). Danckwerts a développé les équations de DTS pour des systèmes continus présents dans des domaines faisant intervenir des phénomènes de mélange, de transfert de masse, d'énergie ou des réactions chimiques. Les équations de ce modèle sont basées sur la dispersion axiale introduites par Langmuir (1908). Le concept de la DTS consiste à prévoir la répartition des temps de séjour grâce à l'étude de la concentration d'un traceur à la sortie d'un écoulement alors qu'il est injecté à l'entrée. Le but est de pouvoir évaluer la qualité d'un mélange (ou d'une intensité de ségrégation) ou l'efficacité d'un réacteur. Levenspiel (1999, p257) détaille le rôle de la DTS dans la compréhension du fonctionnement d'un réacteur. En particulier, il utilise la DTS pour caractériser la cinétique de réaction, les conditions d'opérations optimales et le degré de mélange.

Pour permettre l'analyse des systèmes de mélange, la DTS se base sur le tracé de courbes des temps de séjour du fluide, dans le domaine à l'étude, mais elle est limitée à la caractérisation globale du mélange. En effet, elle indique si le mélange est optimal ou non mais ne permet pas de déterminer à quel point le mélange n'est pas idéal. Plusieurs systèmes peuvent se retrouver avec des courbes de DTS identiques bien que la qualité du mélange dans chacun soit différente.

Dans les travaux présentés dans ce mémoire, la DTS est évaluée par la mécanique des fluides numérique (ou CFD). Cette approche fournit des résultats précis et permet d'observer en détail l'écoulement dans des géométries complexes. Deux types d'approches numériques existent pour calculer des temps de séjour qui permettent de tracer les courbes de DTS: l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne. Pour les deux méthodes, les temps de séjour sont obtenus en injectant des traceurs et en les suivant jusqu'à leur sortie, grâce au champ de vitesses obtenu numériquement. Dans le cas de l'approche lagrangienne, les traceurs sont des particules sans masse qui n'interagissent pas avec le fluide. Ils suivent l'écoulement du fluide et leur trajectoire

s'obtient en intégrant la vitesse dans le temps. Pour l'approche eulérienne, les traceurs sont symbolisés par des champs de concentration. L'approche lagrangienne est plus fréquemment rencontrée (Heniche & Tanguy, 2008) car elle permet d'appliquer d'autres concepts comme l'étude de la longueur des trajectoires des particules (Villermaux, 1996). Cette approche permet également de fournir des données locales en 3D de l'écoulement dans un système. Pour la méthode eulérienne, celle-ci implique souvent des temps de calcul plus importants car les équations différentielles partielles à résoudre sont hyperboliques afin de prendre en compte la diffusion, tandis que les méthodes lagrangiennes ne font que transporter les particules. Toutefois, des méthodes de calcul numériques prometteuses sont en développement mais restent pour l'instant limitées à des domaines en deux dimensions (Jongen, 2004; Lui & Tilton, 2010).

Joo & Kwon (1993) sont les premiers à investiguer une méthode numérique de type lagrangienne en effectuant un lâcher de particules dans un champ de vitesses en trois dimensions. La méthode est testée sur une extrudeuse mono-vis pour des fluides newtoniens et non-newtoniens, et les champs de vitesses sont obtenus par l'intermédiaire de la méthode des éléments finis. Le but est d'étudier l'effet de différents paramètres, tels que la vitesse de rotation des vis, sur les écoulements circulatoires en 3D non-observables à partir de champs de vitesses en 2D. Pour cela, les auteurs ont fait varier la position d'injection de 3 particules, examiné leurs trajectoires calculées à partir d'une méthode de Runge-Kutta de quatrième ordre et tracé des courbes de DTS.

Hobbs & Muzzio (1997) ont tracé les courbes de DTS dans un mélangeur Kenics après avoir obtenu le champ de vitesses grâce au logiciel commercial FLUENT et par l'intermédiaire d'un lâcher de particules utilisant une méthode de Runge Kutta. Les courbes obtenues ont été comparées à des résultats expérimentaux. La similitude des données a permis de valider les outils numériques et d'étendre les recherches à d'autres écoulements. Cependant, cette méthode basée sur un schéma de Runge Kutta est très coûteuse en temps de calcul: 10 jours de calculs pour 20 000 particules injectées. Et les auteurs ont aussi mis en évidence la perte d'une certaine quantité de particules à cause de l'hypothèse de paroi non glissante: les particules qui se retrouvent alors coincées dans cette zone ont une vitesse nulle et ne sortent donc plus du domaine.

Dans le cas d'écoulement périodique, il est possible d'utiliser la DTS avec une technique de 'mapping' (technique probabilistique qui permet de prédire le déplacement des particules au cours du temps). Kim & Kwon (1996) ont validé cette technique en comparant les courbes de

DTS correspondantes avec celles obtenues par l'intermédiaire d'un schéma de Runge Kutta. Galaktionov et *al.* (2003) se sont servis de cette technique de cartographie car, n'ayant pas besoin de connaître toute l'histoire des particules pour appliquer cette méthode, les temps de calculs sont réduits et différentes conditions opératoires peuvent être testées.

Heniche & Tanguy (2006) ont présenté une technique différente pour le suivi de particules dans un champ de vitesses qui ne dépend pas du pas de temps. Les motivations qui ont poussé les auteurs à développer cette méthode étaient de minimiser le problème de perte de particules, fréquemment rencontré dans ce genre de situation (Avalosse & Crochet, 1997a et Byrde & Swaley, 1999). La technique consiste à calculer les trajectoires à l'aide d'une approche élément par élément et d'un schéma de lancer prédicteur-correcteur. Le pas de temps est relié à un nombre de tirs. Elle a, par la suite, été appliquée par Heniche et *al.* (2005) dans des mélangeurs statiques SMX et KMX. Les temps de calculs se sont avérés légèrement plus faibles qu'avec un algorithme de Runge Kutta.

Pour minimiser la perte de particules lors d'un lâcher, Aubin et *al.* (2009) ont ajouté une condition sur les parois solides de renvoi des particules vers l'intérieur de la géométrie. Cette méthode pose, toutefois, le problème de la validité et de la précision des résultats obtenus.

Le raffinement de maillage est un bon moyen de diminuer la perte de particules. En effet, cela diminue l'accumulation d'erreurs lors du lâcher des particules et par conséquent permet de mieux décrire les trajectoires (Heniche & Tanguy, 2006). Néanmoins, le raffinement de maillage implique une augmentation considérable du nombre d'équations à résoudre, à la fois pour l'étape de résolution des équations pour la modélisation et pour celle de post-traitement. Les ressources informatiques peuvent alors facilement être le facteur limitant, bien que la puissance de calculs des ordinateurs est en constante amélioration.

Concernant son utilisation, la DTS (obtenue à partir de données expérimentales ou numériques) est documentée dans de nombreux chapitres (Nauman, 2004), livres (Levenspiel, 1999) et articles (comme mentionné auparavant: Nauman, 2008a). Comme expliqué dans le chapitre 1, expérimentalement, la DTS s'obtient par l'injection d'un traceur inerte dans le procédé et la mesure de l'évolution de sa concentration dans le temps. En général, elle est utilisée comme outil pour étudier l'écoulement dans des systèmes continus et pour qualifier leurs performances de mélange.

Par exemple, pour les mélangeurs statiques, la DTS a fait l'objet de nombreuses études (Kemblowski & Pustelnik, 1988) et a permis d'améliorer leur conception. Il a été démontré que la forme des courbes de DTS dépend des paramètres opératoires (rhéologie du fluide, débit...) et géométriques du système tels que la taille de la conduite, mais aussi du nombre d'éléments du mélangeur statique.

Beaucoup de travaux sur les mélangeurs statiques ont montré l'utilité de la DTS obtenue numériquement. Entre autres, elle a permis d'optimiser leur géométrie (Galaktionov et *al.*, 2003), d'analyser en détail le mélange, d'étudier différents types de configurations (nombre d'éléments, angle d'inclinaison entre chaque élément...), de comparer la performance de différents types de mélangeurs (Heniche et *al.*, 2005)...

Dans les procédés d'extrusion, la DTS est aussi un outil d'analyse fréquemment utilisé car elle permet non seulement d'évaluer la qualité du mélange mais aussi la probabilité de dégradation ou de réticulation du polymère (et par conséquent du procédé d'extrusion). Ceci est d'autant plus important lorsque l'extrudeuse joue aussi le rôle de réacteur continu car la réaction chimique dépend de la température et de la qualité du mélange. La DTS fournit des informations aidant à la conception du procédé et aux conditions d'opération. Cependant, lorsque l'écoulement est obtenu numériquement, la précision de la DTS dans ces procédés dépend directement de la précision du profil de vitesse. Or, vu que les champs de vitesses dans des extrudeuses bi-vis sont très complexes, la prédiction de la DTS dans de tels systèmes est très difficile (Rauwendaal, 2001, p 670).

Pour les extrudeuses bi-vis, l'utilisation des éléments finis et de particules sans masse pour prédire la DTS est documentée par de nombreux auteurs. En particulier, Ishikawa et *al.* (2002) s'en servent pour évaluer la qualité du mélange distributif. Pour cela, ils comparent trois types d'éléments de vis et étudient l'impact d'une augmentation de leur vitesse de rotation. Quant à Bravo et *al.* (2004), ils ont également combiné une résolution des champs de vitesse par éléments finis et une technique de suivi des particules pour déterminer la DTS dans des extrudeuses bi-vis, dans le but de caractériser le mélange distributif pour différentes configurations géométriques (variation du ratio de longueur de vis sur le diamètre de l'élément de malaxage). Leur analyse a mis en évidence l'importance de connaître l'histoire de la particule afin de caractériser la performance des différentes géométries. La complexité de la géométrie ainsi que l'aspect

transitoire de l'écoulement demandent des puissances de calculs importantes pour caractériser adéquatement la dynamique. De plus, la présence de géométries en mouvement amplifie le phénomène de pertes de particules. Pour traiter la rotation des vis, les auteurs ont produit plusieurs maillages pour représenter un quart de rotation de vis et ont créé un générateur de maillages qui, en tenant compte de la symétrie axiale des vis, a permis de générer les différentes positions pour une rotation complète (Bravo et *al.*, 2000). Les travaux ont montré que la complexité du domaine à l'étude tend à augmenter le phénomène de perte de particules qui n'est plus uniquement causé par l'hypothèse de condition de non-glissement sur les parois. La discrétisation du temps peut être problématique par rapport à la précision de la trajectoire des particules et conduire à des particules interceptant les vis en mouvement. La particule sort alors du domaine et est considérée perdue. Bravo et *al.*(2004) réinjectent les particules qui sont sorties du domaine et ont atterri dans la vis, en les réincorporant dans l'écoulement à la position où elles interceptent la frontière solide. Cependant, cette approximation est surtout utilisée pour étudier la distribution du temps de séjour plutôt que les trajectoires de chaque particule. Une solution, pour contourner le problème de particules perdues dans la partie mobile, est la réduction du pas de temps afin d'améliorer la précision des trajectoires, ce qui augmente toutefois les temps de calculs. Cependant, la réduction du pas de temps seule n'est pas suffisante pour résoudre le problème de perte de particules car l'erreur sur les trajectoires finit par plafonner, le raffinement du maillage se présente alors comme une solution complémentaire.

Une technique, plus récemment employée par Brito-Bazan (2011), pour limiter la perte de particules dans ce genre de géométries complexes (un Co-Kneader, un type d'extrudeuse mono-vis), est de diviser la vis en plusieurs zones. Les particules sont injectées à l'entrée de chaque section et récupérées à la sortie de chacune. Dans la zone critique, de 11 à 30% des particules injectées sont alors récupérées, ce qui reste un faible nombre. La courbe de DTS de la géométrie est obtenue par convolution à partir des courbes de DTS de chaque section. Ceci se base sur l'hypothèse que les régions sont statistiquement indépendantes, ce qui en réalité n'est pas le cas.

Afin de répondre aux différentes problématiques soulevées dans cette section, un objectif spécifique des travaux présentés dans ce mémoire est de **mettre en place une technique qui permet de diminuer la perte de particules lors de leur lâcher et d'améliorer la précision des résultats de la DTS obtenus numériquement.**

Cette technique sera approuvée si elle permet de récupérer significativement plus de particules comparativement à d'autres techniques de lâcher de particules et de donner une bonne approximation du temps de séjour moyen des particules. Cette méthodologie devra être validée sur des écoulements dont les solutions analytiques sont connues avant de pouvoir être appliquée sur des mélangeurs continus dont la géométrie est complexe.

2.2 Modélisation numérique de l'écoulement des fluides dans des systèmes contenant des parties mobiles

La modélisation numérique de l'écoulement du fluide passe par la génération de maillages qui sont des représentations discrétisées des géométries à l'étude. Ceci revient à diviser le domaine en de multiples formes géométriques simples (telles que des hexaèdres ou des tétraèdres). Le but est de résoudre les équations de quantité de mouvement et de conservation de matière sur ces éléments simples. Il est donc impératif que les éléments adoptent le plus possible la forme de la géométrie et de s'assurer de la continuité des éléments entre eux (pas de superposition).

Une des problématiques principales associée à la génération de maillage est la création d'éléments de formes géométriques les moins distordues possibles afin de réduire au maximum l'erreur numérique sur celui-ci. En effet, la précision de la résolution des équations et la stabilité du schéma numérique dépend de ces paramètres géométriques.

Une des méthodes de construction de maillages générant des maillages de bonne qualité et la plus fréquemment rencontrée est la triangulation de Delaunay (Delaunay, 1934). La propriété de cette méthode est de créer des triangles dont le cercle circonscrit ne contient pas d'autres sommets. Cette triangulation maximise la taille du plus petit des angles du triangle. Cela permet d'obtenir des triangles presque équilatéraux, de taille similaire et non aplatis. En remplaçant le cercle par une sphère, la définition s'étend en 3D.

Nombreux sont les travaux portant sur l'optimisation de la forme des éléments, parmi ceux-ci, il faut citer ceux conduits par Habashi et *al.* (2000). Ils présentent des techniques de correction de maillage afin d'obtenir des éléments les plus réguliers possibles. Les différentes méthodes présentées sont: le raffinement local ou le dégrossissement local (h-adaptation), l'inversion d'arêtes, le déplacement de nœuds (r-adaptation)... Dans son ensemble, l'optimisation du maillage

est un domaine en soi, pour lequel la recherche est très active et dont de nombreux livres existent (Frey & George, 1999).

Au cours de la résolution d'un problème, des zones avec des forts gradients peuvent nécessiter plus de raffinement que d'autres pour atteindre le même niveau de précision. Des techniques de raffinement adaptatif de maillage, d'abord introduites par Babuska et Rheinboldt (1978), ont été conçues. Elles consistent, après une première résolution des équations sur le maillage d'origine, à localiser ces zones par l'intermédiaire d'indicateurs d'erreurs et d'adapter le maillage avec les méthodes ci-dessus dans ces endroits. Par la suite, les équations sont de nouveau résolues sur ce maillage modifié et les indicateurs d'erreurs sont de nouveau évalués pour voir si le maillage a encore besoin d'être adapté. Dans le cas de simulation en régime transitoire, il faut répéter cette étape pour chaque pas de temps. Cette méthode est utilisée surtout dans le domaine de la mécanique et de l'hydrodynamique.

Comme mentionné au chapitre 1, les travaux à l'étude dans ce mémoire s'inscrivent dans le domaine de la mécanique des fluides et un des procédés étudié est une extrudeuse bi-vis. C'est un procédé de mise en forme de polymères fréquemment trouvé en industrie et pour lequel il est primordial d'étudier l'écoulement des fluides au sein du système, afin de le contrôler et de l'optimiser. Cependant, la prise de données expérimentales est souvent laborieuse et coûteuse. Dans ce cas, la modélisation numérique paraît avantageuse pour décrire les phénomènes.

Toutefois, numériquement, ces problèmes sont difficiles à résoudre car le domaine contient des parties mobiles. Ainsi, le volume occupé par le fluide varie dans le temps ; ce qui nécessite à priori la génération d'un maillage pour chaque itération en temps (Cheng & Manas-Zloczower, 1997; Ishikawa et al., 2002, Bravo et al., 2000). Ceci constitue alors une étape encombrante. Toutefois, lorsque le système possède une géométrie de révolution, il est possible de changer de référentiel en se plaçant sur celui de la partie en mouvement. Ainsi, le volume occupé par le fluide ne change pas dans le temps et des simulations en régime stationnaire sont possibles. Bertrand et al., (1997) ont utilisé cette technique pour simuler un ruban hélicoïdal en 3D. L'application de cette technique est par contre très limitée (un seul agitateur dans une cuve sans chicane en régime laminaire).

Pour des cas plus généralisés, des techniques ont été développées pour faciliter ou éviter les étapes de re-maillage. Deux grandes familles de méthodes existent: celle avec un maillage fixe et celle avec un maillage en mouvement.

Dans la famille des méthodes de maillage en mouvement, la technique ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) est la plus connue (Belytschko & Kennedy, 1978 et Belytschko *et al.*, 1980). Le volume est divisé en deux parties: celle contenant la partie mobile et celle comprenant la cuve. Le maillage est à la fois de type Lagrangien (les éléments sont rattachés à la partie mobile et suivent son mouvement) et de type Eulerien (les éléments sont fixes dans l'espace). La technique ALE consiste à décrire la partie fluide grâce à une méthode eulérienne (soit un maillage indépendant de la partie mobile) et la partie mobile avec une méthode lagrangienne. Au niveau de l'interface fluide/partie mobile, le maillage s'ajuste à chaque pas de temps pour s'enligner sur celui de la partie mobile. Cet ajustement peut conduire à la création d'éléments distordus et donc à un manque de précision des résultats. De plus, pour chaque pas de temps, une opération pour imposer une contrainte de conservation de la matière doit être faite à l'interface. Cette méthode permet de bien représenter la partie mobile mais la gestion de l'interface est problématique.

Dans la littérature, les méthodes de maillages fixes sont les plus courantes, en particulier, la méthode des conditions immergées (immersed boundary) qui a été introduite par Peskin & McQueen (1989). Celle-ci utilise un maillage fixe pour représenter la partie à l'étude qui contient des géométries en mouvement. La partie en mouvement est représentée par une série de points de contrôle. Ils permettent de prendre en compte la dynamique du fluide par l'imposition d'un champ de force de tension (induit par le mouvement) qui est appliqué aux nœuds se situant sur l'interface fluide/partie mobile. Les forces imposées n'étant pas connues, elles sont alors approximées par des modèles théoriques. Cette technique a notamment permis de modéliser l'écoulement du sang dans le cœur.

Depuis, de nombreuses variantes de la méthode des conditions immergées ont été proposées (Leveque & Li, 1994; Lai & Peskin, 2000). Il est important de préciser que ces méthodes impliquent la résolution des équations gouvernantes à l'intérieur de la frontière immergée. Leur principal inconvénient est lié au fait qu'elles utilisent des modèles pour approximer l'effet du

solide sur le fluide. La convergence des résultats et leur précision dépend alors beaucoup du modèle choisi.

Quant à Bertrand et *al.* (1997), ils ont présenté une méthode dérivant de la méthode du domaine fictif (FDM) (développée par Glowinski et *al.* (1994)), la méthode des éléments finis virtuels (VFEM). Ces méthodes consistent à générer un maillage volumique statique sans les parties mobiles. Leur contour est décrit par un ensemble de points de contrôle. Ces derniers sont utilisés pour introduire les conditions limites immergées au moyen de multiplicateurs de Lagrange. Ces conditions limites sont tirées de la cinématique du mobile qui est connue. Ces contraintes cinématiques sont intégrées dans les équations gouvernantes. Ceci permet de mettre le fluide en mouvement en imposant une vitesse dans les éléments qui contiennent des points de contrôle. En pratique, il s'agit de créer un maillage surfacique pour la partie mobile, à partir duquel les points de contrôle sont extraits. Ce maillage est moins contraignant à obtenir qu'un maillage volumique surtout pour des géométries complexes. La différence entre la FDM et la VFEM porte sur la façon d'insérer les contraintes cinématiques dans les équations gouvernantes. La technique utilisée par la VFEM (imposition de type 'formulation faible' sur les triangles représentant le domaine fictif) la rend moins coûteuse en temps de calcul et plus facile à implanter que la FDM qui utilise une imposition de type 'collocation' sur les points de contrôle, ce qui la rend plus précise. Bertrand et *al.*, (1997) ont utilisé la VFEM pour modéliser une cuve avec un ruban hélicoïdal.

Avalosse et Crochet (1997a) ont développé une autre technique dérivant de la famille du domaine fictif. C'est une technique de superposition de maillage (MST: Mesh Superposition Technique) qui a servi à modéliser l'écoulement 2D dans un fourreau contenant une bi-vis. La méthode consiste à superposer un maillage dynamique, représentant les parties en mouvement, sur un maillage statique du domaine d'écoulement du fluide. Le maillage dynamique des parties en mouvement est mis à jour à chaque pas de temps. Les éléments du maillage statique sont scannés pour repérer s'ils sont contenus dans la partie fluide ou dans la partie en mouvement. Si l'élément appartient à la partie en mouvement, tous les nœuds de cet élément sont alors contraints à la vitesse de rotation du mobile. Cette vitesse est par la suite prise en compte dans les équations de Navier-Stokes. Suite à ces travaux, Avalosse et *al.* (2002) ont étendu cette méthode en 3D pour modéliser le système bi-vis/fourreau. La contrainte associée à l'utilisation de cette méthode concerne la description de la géométrie de la partie en mouvement. Vu que la vitesse de rotation

est imposée sur les nœuds du maillage statique, celui-ci doit être très fin pour bien capter la forme de la géométrie. D'où la nécessité, pour les travaux effectués en 3D, de subdiviser en éléments plus petits, les éléments du maillage de base qui interceptent ceux du maillage dynamique.

Toutefois, en plus de la présence de parties mobiles, la difficulté supplémentaire associée à la modélisation des extrudeuses bi-vis est la présence d'entrefers. Ils sont situés entre les deux vis et entre la bi-vis et le fourreau. Ces entrefers peuvent être très petits relativement à la taille de la géométrie et leurs positions varient dans le temps. Or, c'est dans ces entrefers que le taux de cisaillement est important. Une des solutions afin de bien prédire les valeurs est de créer un maillage très fin pour tout l'écoulement. Cependant, les coûts en termes de temps de calculs seraient beaucoup trop lourds. Pour remédier à ce problème, il est possible de raffiner le maillage localement, en fonction de la position de l'entrefer au cours du temps, mais ceci implique un remaillage pour chaque pas de temps. De plus, lorsque le maillage de l'écoulement est trop grossier, il se peut qu'il n'y ait qu'un seul élément dans l'entrefer. Dans le cas de la VFEM, la situation suivante peut alors se produire: cet élément peut avoir un nœud situé sur la frontière du domaine (nœud pour lequel la vitesse imposée est nulle) mais contenir aussi un point de contrôle (qui implique qu'une condition cinématique est imposée sur l'élément). Le problème est dit sur-contraint, ce qui peut, à terme, jouer sur la stabilité du schéma numérique. C'est une autre raison pour laquelle il est préférable de mettre plusieurs éléments dans l'entrefer.

Afin d'éviter l'étape de remaillage pour chaque pas de temps qui peut être très coûteuse et qui perd l'avantage de l'utilisation des différentes méthodes énoncées ci-dessus, il serait intéressant d'utiliser la génération d'un raffinement adapté, à partir d'un seul maillage de base. L'idée est d'adapter à chaque pas de temps le maillage de base, selon la position de l'entrefer et des bi-vis. Le raffinement local et dynamique des mailles, couplé avec une méthode du domaine fictif, permettrait alors de modéliser plus facilement les différentes échelles spatiales du problème. Un maillage non-uniforme, adapté à la taille des entrefers, serait ainsi créé, évitant la génération d'un maillage fin du domaine au complet qui augmenterait considérablement les temps de calcul.

Cette combinaison a été utilisée en deux dimensions par Bertrand et *al.* (2003) pour une extrudeuse bi-vis. Les simulations ont été effectuées avec le logiciel Poly2D en régime transitoire sur un plan de coupe perpendiculaire aux vis. Le principe consiste à générer un

maillage statique de référence pour représenter le volume du fourreau. À chaque pas de temps, le maillage est adapté localement en divisant les éléments qui contiennent au moins un point de contrôle dans l'entrefer ou qui se situe à une certaine distance d'un élément contenant un point de contrôle dans l'entrefer. Deux techniques de décomposition des éléments de maillage triangulaires ont été proposées. La première, appelée technique de raffinement de maillage conforme (Figure 2.1 a), est simple et consiste à décomposer un élément par le barycentre et à le diviser en plusieurs éléments finis. Toutefois, la taille maximale des arêtes ne change pas. Quant aux résultats, ils ont mis en évidence un manque de précision. D'ailleurs, les subdivisions répétées conduisent à la création d'éléments distordus et à une dégénérescence des éléments qui, à terme, bloquent les calculs. Il faut donc avoir recours à une autre stratégie.

La seconde technique, la technique de raffinement non conforme (Figure 2.1 b), consiste à raffiner en décomposant par les arêtes ce qui permet de conserver la régularité des éléments. Pour cela, des nœuds sont ajoutés au centre de chaque arête, créant alors de nouveaux éléments finis.

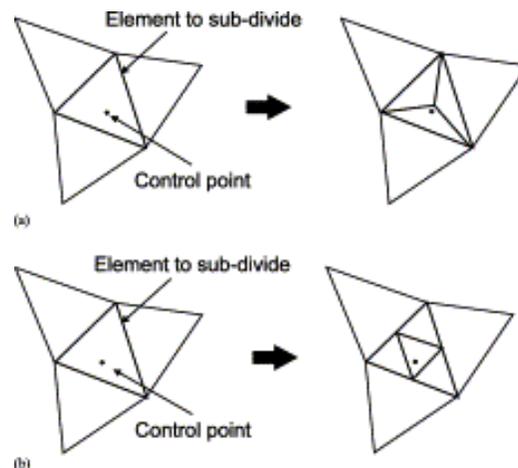


Figure 2.1: Techniques de décomposition (a) conforme et (b) non conforme des éléments.

(Bertrand et *al.*, 2003, p494).

Cette méthode a, par contre, le désavantage de créer des discontinuités sur la frontière entre les éléments raffinés et ceux non raffinés, dues aux nœuds situés sur une arête d'un élément non décomposé. Ces nœuds sont appelés nœuds étranglés. Pour contourner ce problème, les nœuds non conformes sont exprimés comme une fonction linéaire des nœuds conformes situés sur l'interface. Cela revient à modifier les fonctions de base associées à chaque nœud étranglé et à

apporter des modifications au code lors de l'assemblage de la matrice. Cette technique dite de condensation est présentée dans Fortin & Tanguy (1984). La problématique est alors axée sur le nombre de fois que cette décomposition doit être répétée afin de trouver un compromis entre le temps de calcul et la précision. La Figure 2.2 montre un maillage 2D obtenu par Bertrand et *al.* (2003) en répétant 4 fois la technique de raffinement local du maillage dans les entrefers, en divisant les éléments par le centre des arêtes (procédure non conforme).

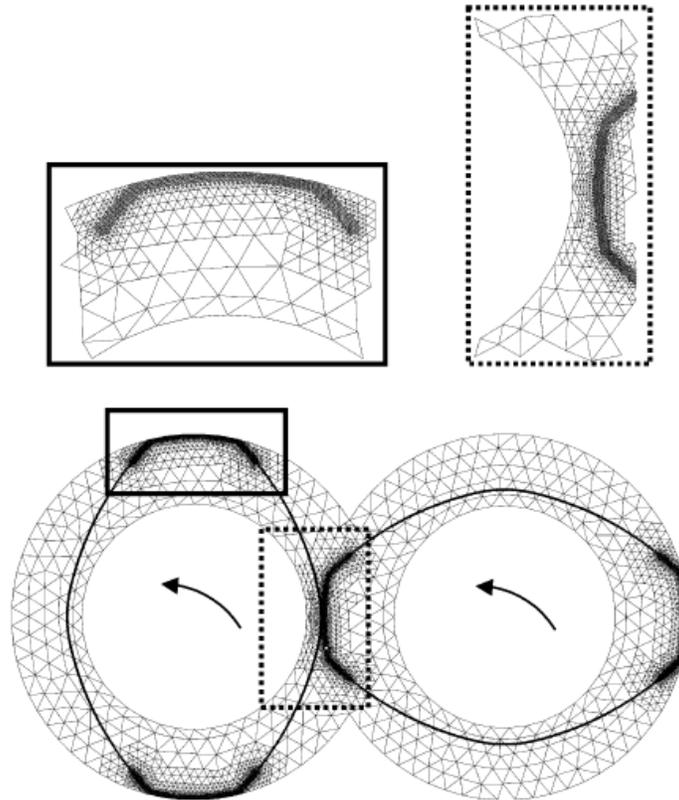


Figure 2.2: Exemple de procédure de raffinement de maillage non conforme à 4 niveaux dans les entrefers d'une extrudeuse bi-vis. (Bertrand et *al.*, 2003, p498).

Les simulations ont été faites par Bertrand et *al.* (2003) pour une extrudeuse bi-vis en deux dimensions, en supposant que l'écoulement transversal est le principal. Pour un entrefer relatif inférieur à 0,005 et quatre niveaux de raffinement pour chaque pas de temps (Figure 2.2), les résultats sur la pression ont moins de 7% d'erreur par rapport aux résultats expérimentaux issus des travaux de McCullough & Hilton (1993). Selon les auteurs, ce niveau de précision égale celui de simulations effectuées soit avec un maillage raffiné partout, soit avec un maillage localement raffiné mais qui serait généré à chaque pas de temps.

La technique de raffinement de maillage non conforme a aussi été utilisée par Fard et *al.* (2008). Elle a été couplée avec une méthode de superposition de maillage pour modéliser un écoulement polyphasique bidimensionnel dans une bi-vis, le but étant de raffiner les éléments situés au niveau des frontières avec le domaine fictif (qui représente les parties mobiles) afin de diminuer l'erreur numérique lors du calcul du champ de vitesses.

Giguère et *al.* (2006) ont utilisé les techniques de raffinement conforme et non-conforme couplées avec la méthode de domaine fictif en trois dimensions pour modéliser l'écoulement d'un fluide dans une cuve agitée avec un ruban hélicoïdal. L'application de la méthode de raffinement en 3D du tétraèdre par le barycentre n'a pas permis d'amélioration de la précision des résultats. En ce qui concerne l'application de la division par les faces, elle s'est avérée complexe en 3D due à la discontinuité des faces et des nœuds. En effet, l'utilisation de la méthode de condensation n'est possible que pour des éléments à base complète. Ce sont des éléments à pression continue qui ne conservent la masse que globalement (élément MINI ou Taylor-Hood). Par exemple, pour des éléments à base incomplète (par exemple: Crouzeix-Raviart), la méthode de condensation assure la continuité des nœuds mais pas des faces et des arêtes. Pour contourner ce problème, la méthode Red-Green Refinement Technique (Verfurth, 1994) a été adaptée pour subdiviser des éléments 3D (Figure 2.3). Pour cela, il faut compter le nombre de nœuds étranglés dans l'élément et le subdiviser en conséquence. Cette technique augmente de beaucoup le nombre d'éléments, ce qui peut s'avérer coûteux en terme de disponibilité d'espace disque et de mémoire vive pour les besoins du calcul.

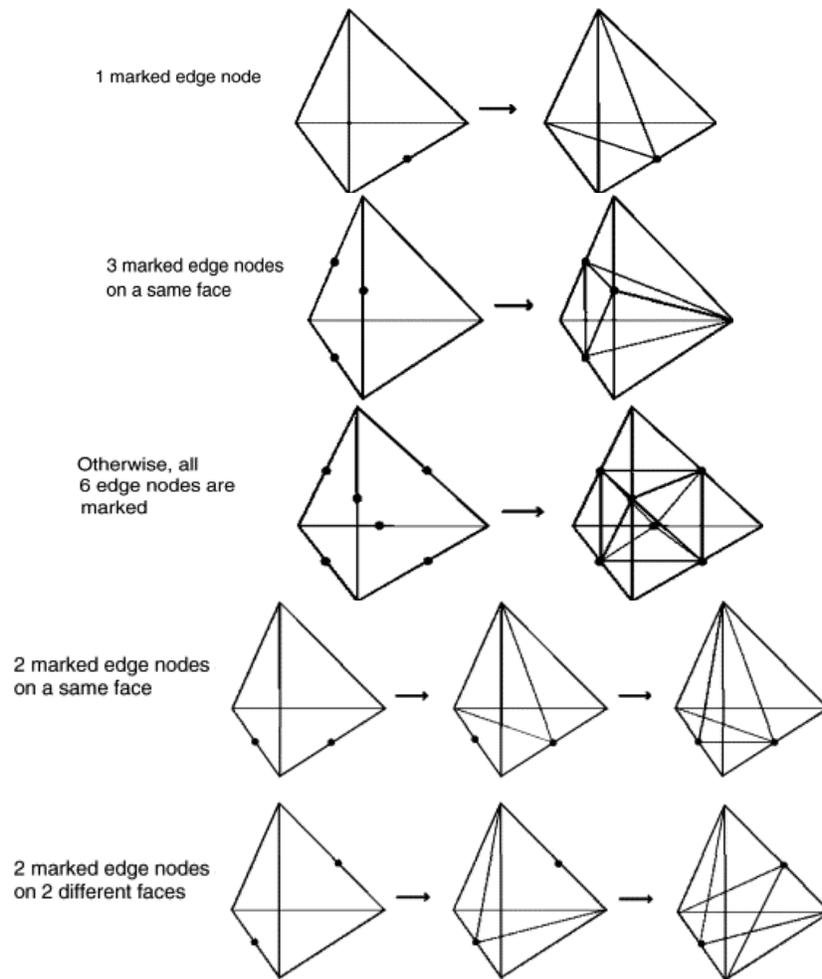


Figure 2.3: Modèle de subdivision d'un tétraèdre, basé sur la Red Green Refinement Technique, selon le nombre de nœuds étranglés contenus sur une face (Giguère et *al.*, 2006, p459-460).

Une autre approche, appartenant à la méthode des éléments mortiers (Mortar element technique) (Bernardi et *al.*, 1993), consiste à assurer la continuité des champs de variables entre éléments raffinés et éléments non raffinés via l'application de multiplicateurs de Lagrange sur les interfaces non conformes. Le but est de minimiser la différence de valeur des variables (telles que la vitesse) sur ces interfaces.

Le principal inconvénient des méthodes basées sur un maillage fixe est que le maillage des parties mobiles n'est, en général, pas aligné sur celui de l'écoulement du fluide. Il y a alors une discontinuité physique des variables (vitesse, pression) au niveau des éléments situés sur l'interface. Il n'est donc pas possible de prédire, de manière précise, les sauts des variables discrétisées de fluide à solide.

Pour capturer ces sauts de vitesse et pression sur les éléments à la frontière, Fard et *al.* (2012) ont appliqué la méthode des éléments finis étendus (XFEM: eXtended Finite Element Method) sur des écoulements impliquant des parties mobiles. Elle a initialement été développée pour améliorer la précision de la méthode des éléments finis, lors de la présence de petites singularités dans des géométries telles que des fentes (Belytschko & Black, 1999). Au niveau de la frontière, il faut évaluer la proportion volumique occupée par le fluide dans l'élément, d'où l'intérêt de raffiner. Le raffinement des éléments qui interceptent la partie mobile se fait en les divisant par une décomposition qui ajoute un nœud au centre des arêtes. Cette subdivision peut être répétée au besoin. Les éléments situés dans la partie solide sont retirés de la matrice finale de résolution. La subdivision permet de mieux interpoler le domaine occupé par le fluide. Ainsi, seuls les éléments subdivisés qui sont entièrement placés dans la partie fluide sont intégrés dans la matrice. Les auteurs ont comparé cette méthode avec celle du raffinement adaptatif non conforme basée sur l'élément mortier couplée avec la FDM pour des écoulements dans des extrudeuses bi-vis. Bien que le raffinement adaptatif améliore la précision du champ de vitesses par rapport à celui obtenu avec la FDM seule, la XFEM offre de meilleurs résultats particulièrement dans les entrefers.

En conclusion, la génération d'un maillage dynamique en 3D pour étudier l'écoulement transitoire d'un fluide, dans de faibles entrefers, sans complètement re-générer un maillage à chaque pas de temps, reste un problème ouvert. L'utilisation de la FDM pour modéliser ce type d'écoulement demande un raffinement local pour améliorer la précision du champ de vitesses. Comme ce sera expliqué en détail dans le chapitre 3, des problèmes ont été rencontrés avec des maillages commerciaux. Or, il a été précisé auparavant que la maîtrise du maillage est une étape cruciale dans la modélisation numérique. C'est pourquoi un objectif spécifique de cette étude est de **développer un outil de génération de maillage tridimensionnel pour modéliser le fourreau de l'extrudeuse et rendre possible un raffinement local efficace au niveau des entrefers.**

Cette technique permettra de mieux contrôler la façon de mailler afin que l'étape de génération de maillage soit plus systématique, moins contraignante et moins coûteuse en temps. De plus, la méthode devra permettre de raffiner le maillage localement dans le but de pouvoir obtenir une meilleure précision sur les résultats de l'écoulement dans l'extrudeuse bi-vis.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE

Ce chapitre présente les méthodes permettant de réaliser les objectifs spécifiques énoncés dans le chapitre précédent. Ainsi, la première partie décrit les différentes étapes qui permettent la modélisation de l'écoulement dans un système et l'obtention des courbes de distribution des temps de séjour. La seconde partie met l'accent sur la technique de maillage du fourreau de l'extrudeuse bi-vis.

3.1 Principes de la distribution des temps de séjour

Une partie de la méthodologie abordée dans cette section a été publiée dans *Macromolecular Materials and Engineering* (Olmiccia et *al.*, 2011), article attaché en annexe.

La DTS est un outil très utile pour analyser la qualité du mélange dans un système continu. Lorsqu'elle est évaluée de manière numérique, il faut tout d'abord résoudre les équations de Navier-Stokes pour obtenir le champ de vitesses. Par la suite, un lâcher de particules est fait à partir duquel les trajectoires sont calculées et analysées pour déterminer la distribution du temps de séjour.

3.1.1 Dynamique des fluides numériques

L'étude de la DTS se base sur les temps de séjour qui sont calculés à partir des profils de vitesse dans une géométrie. Dans le cadre de ce projet de maîtrise, ceux-ci sont obtenus par l'intermédiaire du logiciel Poly3DTM (Rheosoft), développé à l'URPEI, qui résout les équations de quantité de mouvement avec la méthode des éléments finis. Ce logiciel permet la résolution du système matriciel à l'aide d'un solveur itératif qui permet de coupler la résolution de la pression et de la vitesse par une méthode des points fixes.

L'équation du mouvement sous forme tensorielle, aussi appelée équation de Cauchy, est la suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) = -[\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v}] - \nabla p - [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] + \rho \mathbf{g} \quad (3.1)$$

Taux de variation de la quantité de mouvement par unité de volume	Taux de quantité de mouvement créée par convection par unité de volume	Taux de quantité de mouvement créée par transport moléculaire par unité de volume	Force externe gravitationnelle appliquée sur le fluide par unité de volume
---	--	---	--

Le fluide est supposé incompressible, soit:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.2)$$

En négligeant les forces externes (la gravité), l'équation (3.1) simplifiée s'écrit:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p - [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad (3.3)$$

avec \mathbf{v} la vitesse du fluide (en m.s^{-1}), ρ la masse volumique du fluide (en kg.m^{-3}) qui est supposée constante et $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses qui s'exprime par $\boldsymbol{\tau} = -\eta \dot{\boldsymbol{\gamma}}$ où η est la viscosité du fluide (en Pa.s) et $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ le tenseur des vitesses de déformations:

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] \quad (3.4)$$

Pour un fluide newtonien, la viscosité η est constante mais elle varie pour un fluide non-newtonien. Dans le cas de ces travaux, des fluides non newtoniens sont considérés et suivent une loi de puissance:

$$\eta(\dot{\boldsymbol{\gamma}}) = K \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{n-1} \quad (3.5)$$

où K est l'indice de consistance en Pa.s^n et n l'indice de loi de puissance.

Dans ce travail, des fluides newtoniens ($n=1$) et des fluides rhéofluidifiants ($n<1$) seront étudiés. Les équations (3.2) et (3.3) sont résolues avec la méthode des éléments finis. L'élément tétraédrique MINI ($P1^+-P1$) (Figure 3.1), qui est un élément à pression continue permettant une conservation globale de la masse, a été utilisé pour résoudre les équations. Cet élément est relativement peu coûteux car il est linéaire en pression et super-linéaire en vitesse. Sur les quatre

sommets de l'élément, il possède trois degrés de liberté en vitesse et un en pression et, au barycentre de l'élément, il y a trois degrés de liberté en vitesse (Figure 3.1).

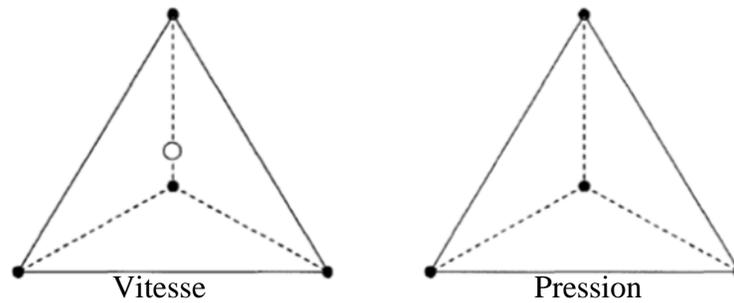
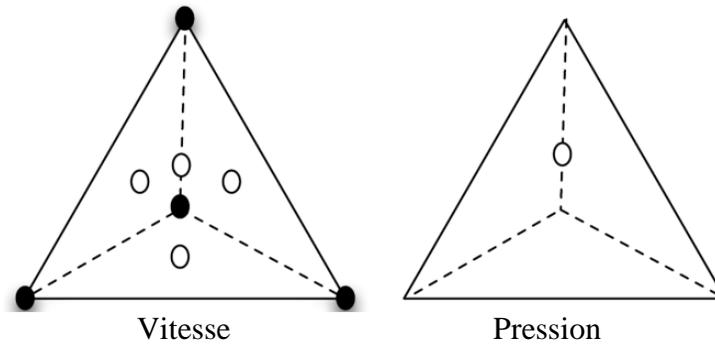


Figure 3.1: Éléments finis MINI ($P_1^+ - P_1$)

Dans le cas de l'étude de l'extrudeuse, la présence de parties mobiles oblige la résolution des équations en régime non stationnaire. Pour éviter de mailler le domaine à chaque pas de temps, la méthode des éléments finis virtuels (VFEM) développée par Bertrand et *al.* (1997) a été employée. Ainsi, un seul maillage est requis pour le fourreau et les vis sont, quant à elles, représentées par un ensemble de points de contrôle dont la position varie dans le temps en fonction de leur vitesse de rotation. Ces points de contrôle correspondent aux nœuds du maillage surfacique des vis. La cinématique des points de contrôle est une condition imposée par l'intermédiaire de multiplicateurs de Lagrange (Glowinski et *al.*, 1994; Bertrand et *al.*, 1997). Coesnon et *al.* (2008) ont montré que l'élément MINI, couplé à une méthode de domaine fictif dans des géométries complexes, donnait des résultats dont la précision était comparable à celle des éléments dont les coûts en temps de calculs sont plus importants ($P_1^+ - P_0$). C'est un élément linéaire à pression discontinue (c'est à dire que les degrés de liberté en pression sont à l'intérieur de l'élément) qui assure une conservation locale de la masse. En vitesse, il possède 4 degrés de liberté sur les sommets de l'éléments et 4 au centre des faces et en pression, il n'en a qu'un sur le barycentre (Figure 3.2).

Figure 3.2: Éléments finis P1⁺-P0

Pour pouvoir résoudre le problème, des conditions aux frontières du domaine d'écoulement doivent être imposées:

- Une condition de paroi solide sur les murs de la géométrie, soit $v=0$;
- Une condition de vitesse imposée sur la surface d'entrée, soit $v=v_{in}^*$. Ceci peut être soit un profil de vitesse établi ou une vitesse moyenne constante sur la section;
- Une condition de traction nulle sur la surface de sortie, pour laquelle les contraintes visqueuses appliquées au fluide sont uniquement longitudinales à l'écoulement, $(\sigma \cdot n) \cdot n = 0$, où n est le vecteur normal sortant.

À partir de la condition frontière imposée à l'entrée, le débit volumique, Q (en $m^3 \cdot s^{-1}$), est connu:

$$Q = \int_{S_{in}} (v_{in}^* \cdot n) \partial S_{in} \quad (3.6)$$

Ce débit volumique permet d'évaluer le temps de séjour moyen (T_{exact}) (en s) du fluide dans le volume Ω de la géométrie (en m^3):

$$T_{exact} = \frac{\Omega}{Q} \quad (3.7)$$

3.1.2 Lâcher de particules

Une fois que le champ de vitesses est connu, une technique lagrangienne simplifiée de lâcher de particules est utilisée pour déterminer la DTS. Les particules sont considérées comme appartenant à une phase distincte du fluide et n'ont pas de masse. Du fait, elles sont transportées librement par la phase fluide en suivant les lignes de courant. Aucune collision entre particules

n'est prise en compte. La première étape consiste à injecter des particules uniformément réparties sur la surface d'entrée du système. Le nombre de particules lancées est un paramètre à faire varier pour s'assurer de la convergence des résultats. La seconde étape est le calcul des trajectoires. Une approche de résolution élément par élément, couplée à une technique de tirs prédicteur-correcteur, telle que présentée par Heniche & Tanguy (2006), a été utilisée pour faire le suivi des particules. Cette technique n'est pas assujettie au pas temps et requiert moins de puissance de calculs mais la précision des résultats dépend du nombre de tirs par élément. Les trajectoires sont obtenues avec un paramètre de 100 tirs par élément pour des problèmes stationnaires et de 300 tirs par élément pour des problèmes transitoires. Dans chaque élément, la position de sortie de la particule de l'élément est extrapolée à partir du champ de vitesses. Par la suite, le nombre de tirs par élément permet d'évaluer un incrément de déplacement et pour chaque incrément de déplacement la position de sortie de la particule est réévaluée à partir du champ de vitesses. Le déplacement de la particule est mis à jour. Son déplacement est incrémenté jusqu'à ce que la particule croise une face de sortie de l'élément. Ceci est réitéré pour les éléments suivants jusqu'à sa sortie du domaine. C'est ainsi qu'est obtenue la trajectoire totale de la particule. Pour les particules qui sortent du système, il est alors possible de connaître leur position sur le plan de sortie et leur temps de séjour dans le domaine. La position de chaque particule peut être connue en tout temps grâce à l'équation suivante:

$$X(t) = \int_{t_0}^t v \cdot dt + X(t_0) \quad (3.8)$$

avec $X(t)$, la position de la particule au temps présent, $X(t_0)$ la position au temps initial et v le champ de vitesses obtenu numériquement.

3.1.3 Évaluation de la Distribution des Temps de Séjour

Le concept de la DTS repose sur le fait que les différentes particules de fluide mettent un temps différent pour traverser le système, en fonction de la géométrie et de l'hydrodynamique de ce système. Ce temps est appelé temps de séjour et est évalué par l'intermédiaire du lâcher de particules. La distribution de ces temps est répertoriée avec la fonction de densité $f(t)$ telle que:

$$\int_0^{\infty} f(t) \cdot dt = 1 \quad (3.9)$$

La fonction cumulative de distribution $F(t)$ est la seconde fonction caractéristique de la DTS:

$$F(t) = \int_0^t f(t).dt \quad (3.10)$$

$F(t)$ représente concrètement la fraction de fluide qui a passé un temps inférieur à t dans le système.

L'équation (3.9) de la fonction de la DTS, $f(t)$, peut être discrétisée de la façon suivante:

$$\int_0^{\infty} f(t).dt = \Delta t \sum_{i=1}^N f_i = 1 \quad (3.11)$$

où N est le nombre de classes de particules appartenant au même intervalle de temps de séjour et qui permet de créer un histogramme de la DTS. Le pas de temps, Δt , se calcule selon l'expression suivante:

$$\Delta t = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{N} \quad (3.12)$$

où t_{\max} est le plus grand temps mis par une particule pour traverser la géométrie et t_{\min} le plus court.

La fonction f_i de l'équation (3.11) peut s'exprimer de la manière suivante:

$$f_i = \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=1}^{n_i} w_i^j \quad (3.13)$$

avec n_i le nombre de particules dans la classe numéro i et w_i^j la pondération de la fonction de DTS. La pondération des temps de séjour doit respecter la règle suivante:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} w_i^j = 1 \quad (3.14)$$

Plusieurs pondérations peuvent être utilisées:

- La pondération par le débit volumique pour chaque particule (Nauman & Buffham (1983) et Hobbs & Muzzio (1997)):

$$w_i^j = \left(\frac{Q_i^j}{Q} \right) \quad (3.15)$$

avec Q_i^j le débit volumique à l'entrée associé à la particule j de la classe i , et Q le débit volumique total.

Le terme $f(t).dt$ correspond alors à la fraction volumique de fluide qui quitte le système entre le temps t et $t+dt$. Le but de pondérer par le débit est de ne pas mettre l'accent sur les parties de fluide qui sont plus lentes (Nauman, 1991).

- La pondération constante telle que:

$$w_i^j = \left(\frac{1}{n_p} \right) \quad (3.16)$$

avec n_p le nombre de particules lancées (Levenspiel, 1999 et Aubin et *al.*, 2009).

Dans ce cas, $f(t).dt$ représente la probabilité de trouver une particule dont le temps de séjour est situé dans l'intervalle $[t; t+dt]$. Les principaux avantages de cette pondération sont qu'elle est facile à implanter et qu'elle convient bien pour des fluides rhéo-épaississants car le profil de vitesse entrant est presque plat. L'hypothèse que le débit volumique est uniforme sur toute la section peut donc être posée.

- Une nouvelle pondération proposée dans ces travaux de maîtrise est basée sur la notion de vitesse moyenne:

$$w_i^j = \frac{(l/t)_i^j}{\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{n_k} (l/t)_k^l} \quad (3.17)$$

avec l la longueur parcourue par la particule j de la classe i et t le temps mis pour parcourir cette distance.

Le terme $f(t).dt$ indique alors la proportion de la somme des vitesses moyennes utilisées par les particules qui traversent le système entre t et $t+dt$. Cette pondération permet de donner plus d'importance aux particules ayant des vitesses moyennes importantes dans le système. Le but est de prendre en compte à la fois les vitesses longitudinales et transversales, donc l'histoire de la particule (soit la distance qu'elle a parcourue).

Lorsque les particules sont uniformément réparties et que l'écoulement est unidirectionnel, cette pondération est analogue à la pondération par le débit (équation (3.15)) vu que toutes les particules parcourent la même distance.

Le choix du nombre de classes, N , est un paramètre critique, lors de la construction de l'histogramme de la distribution des temps de séjour. En effet, il a une conséquence directe sur la forme de la fonction de distribution et donc sur l'analyse de la DTS. Un petit nombre de classes, qui correspondrait à un grand intervalle de temps, aurait tendance à trop lisser la courbe $f(t)$, ce qui peut cacher des détails sur l'écoulement. Au contraire, un trop grand nombre de classes aurait pour conséquence la création de beaucoup d'oscillations ce qui ne permettrait pas de discerner la distribution des données.

Pour déterminer le nombre de classes approprié à utiliser, des relations statistiques établies existent:

$$- N = 1 + \log_2(n_p) \quad (\text{Sturges, 1926}) \quad (3.18)$$

$$- N = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{3,5s} n_p^{1/3} \quad (\text{Scott, 1979}) \quad (3.19)$$

où s correspond à l'écart type des temps de séjour des particules,

$$- N = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{2(IQR)} n_p^{1/3} \quad (\text{Freedman \& Diaconis, 1981}) \quad (3.20)$$

où IQR correspond à l'écart sur les temps de séjour entre les 3ème et 1er quartiles.

Ces relations donnent dans la plupart des cas des valeurs de N différentes. Or, la valeur de N a une influence directe sur la valeur du temps de séjour moyen prédit (T_h). Il est donc important de s'attarder sur le calcul de N afin de diminuer l'erreur d'approximation. Dans cette étude, une nouvelle méthode pour déterminer le nombre de classes a été développée. Son but est de minimiser l'erreur sur le temps de séjour moyen prédit par rapport au temps théorique (T_{exact}) (équation (3.7)). Elle consiste à minimiser:

$$J = (T_{\text{exact}} - T_h)^2 \quad (3.21)$$

où le temps de séjour moyen prédit, T_h , dépend du nombre de classes. Il est évalué de la façon suivante:

$$T_h = \int_0^{\infty} t \times f(t) dt \approx \Delta t \sum_{i=1}^N (t \times f(t))_i \quad (3.22)$$

Pour un écoulement unidirectionnel, J peut donc se réécrire de la façon suivante:

$$J = \left(\frac{\Omega}{Q} - \Delta t \sum_{i=1}^N (t \times f(t))_i \right)^2, N \in [1, n_p] \quad (3.23)$$

Pour trouver la valeur de N qui minimise J , toutes les valeurs de J sont calculées pour toutes les grandeurs de N possibles, soit de 1 au nombre total de particules lancées (n_p). Le nombre de classes retenu est celui qui donne le plus petit J . Cependant, il est possible que J soit une fonction monotone et que le minimum n'existe pas. Dans ce cas là, il faudra se référer aux relations établies (3.18 à 3.20) pour trouver le nombre de classes.

La prédiction numérique des temps de séjour est souvent problématique du fait de l'imposition d'une condition de non glissement au niveau des parois. Mais, en réalité, la diffusion moléculaire fait en sorte que les particules ne restent pas dans cette zone (Nauman, 2008a). Numériquement, cette hypothèse de non-glissement conduit à une vitesse proche de zéro dans les zones avoisinantes. Par conséquent, une particule se trouvant dans cette région peut se retrouver coincée. La particule est alors soit considérée perdue, soit ayant un temps de séjour tendant vers l'infini. Dans le cas où une pondération constante est utilisée, ceci peut conduire à des temps de séjour des particules trop importants, empêchant alors la convergence des données de DTS et du temps moyen de séjour. Effectivement, lorsque le nombre de particules lancées augmente, cela implique aussi plus de particules dans les régions proches des parois, contribuant à augmenter le temps de séjour moyen.

L'idée est donc de calculer une épaisseur, notée δ , qui correspond à une distance de la paroi solide dans laquelle aucune particule ne sera injectée à l'entrée du domaine. Afin d'évaluer cette épaisseur, cette stratégie a d'abord été testée sur un écoulement entre deux plaques parallèles infinies (Figure 3.3). Les deux plaques sont espacées d'une hauteur H . Une plaque est fixe et l'autre se déplace à une vitesse notée v_{\max} . En considérant que les deux plaques sont infinies,

l'écoulement est bidimensionnel. Le cas étant simple et la solution numérique exacte pour cet écoulement, il a paru judicieux de tester cette stratégie sur ce cas.

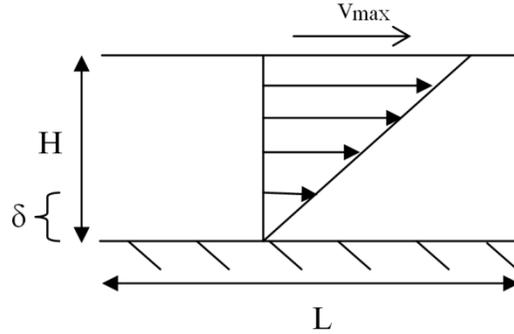


Figure 3.3: Profil de vitesse entre deux plaques parallèles

Le profil de vitesse est défini par:

$$v_x(y) = 2\dot{\gamma}y \quad (3.24)$$

où $v_x(0) = 0$ et $v_x(H) = v_{\max}$ et $\dot{\gamma} = \frac{1}{2} \frac{dv_x(y)}{dy}$

La vitesse axiale de l'équation (3.24) s'écrit alors:

$$v_x(y) = \frac{v_{\max}}{H} y \quad (3.25)$$

Le temps moyen se calcule à l'extérieur de la couche δ , à partir de l'expression suivante:

$$T = \frac{1}{H - \delta} \int_{\delta}^H t \, dy \quad (3.26)$$

Or, le temps est égal à:

$$t = \frac{L}{v_x(y)} = \frac{L}{2\dot{\gamma}y} \quad (3.27)$$

En remplaçant dans 3.26 par 3.27, et en intégrant l'expression obtenue, on a:

$$T = \frac{L}{2\dot{\gamma}(H - \delta)} (\ln(H) - \ln(\delta)) \quad (3.28)$$

L'équation (3.28) montre l'influence de la région proche des parois sur la valeur du temps de séjour moyen prédit par la DTS. En effet, lorsque δ tend vers 0, l'expression du temps moyen tend vers l'infini. Ce qui confirme l'impact de cette épaisseur sur la convergence des résultats.

Pour trouver la valeur de δ , il suffit de remplacer dans 3.28 le temps moyen T par la valeur théorique du temps (T_{exact}) (3.7) et de résoudre l'équation:

$$\frac{\Omega}{Q} - \frac{L}{2\dot{\gamma}(H - \delta)} (\ln(H) - \ln(\delta)) = 0 \quad (3.29)$$

Il est important de remarquer que cette stratégie pour la détermination du δ n'est pas la même pour toutes les géométries car cette épaisseur dépend du profil d'écoulement du fluide et, par conséquent, du système à l'étude. Dans le cas où le profil de vitesse n'est pas connu, il faudra alors l'estimer.

Pour confirmer l'importance de l'impact de la région proche des parois, deux simulations ont été faites pour un écoulement entre deux plaques parallèles. Une dans laquelle des particules sont lancées sur toute la surface d'entrée ($\delta=0$) et l'autre dans laquelle les particules sont injectées sur toute la surface d'entrée, à l'exception de la zone proche de la paroi, dont le δ a été calculé à l'aide de la formule 3.29. Les deux courbes cumulatives $F(t)$ de la DTS, obtenues avec une pondération constante, sont représentées à la Figure 3.4 de même que la courbe théorique $F(t)$ (cf annexe 1 de l'article Olmiccia et *al.*, 2011, joint en annexe) dont l'expression est:

$$F(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq t_{\min} \\ 1 - \frac{t_{\min}^2}{t^2} & \text{si } t > t_{\min} \end{cases} \quad (3.30)$$

Lorsque $\delta \neq 0$, la tendance de la courbe $F(t)$ est améliorée car elle est beaucoup plus proche de la courbe théorique que celle obtenue quand $\delta=0$. La principale différence entre les deux courbes de $F(t)$ avec $\delta=0$ et $\delta \neq 0$ est due au fait que le temps de séjour moyen des particules est plus important quand $\delta=0$, 3,59 s contre 1s quand $\delta \neq 0$, ce qui correspond aussi à la valeur théorique. Ceci s'explique par le fait qu'il y a plus de particules situées dans la couche proche de la paroi solide lorsque $\delta=0$ et que ces particules ont des vitesses très petites voire quasi-nulles. Ce point-là se visualise aussi sur la courbe, qui est en dessous des deux autres, signifiant ainsi que les particules restent plus longtemps dans le système. Par contre, le fait de ne pas avoir de particules

dans la couche proche de la paroi fait en sorte que le temps maximal de séjour est moins important, ce qui se voit sur la courbe de $F(t)$ qui est plus courte que les deux autres.

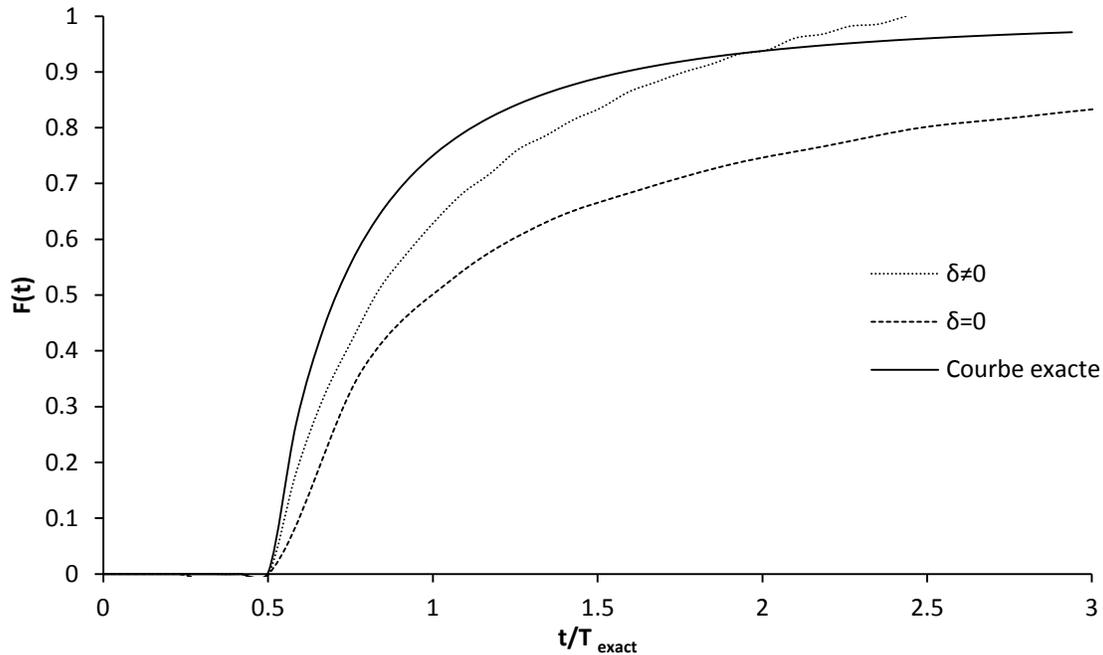


Figure 3.4: Influence de l'épaisseur de la paroi proche du mur sur la courbe cumulative $F(t)$ de la DTS.

Cette partie a permis de revisiter la méthodologie permettant de calculer la DTS à partir de simulations numériques, en mettant l'accent sur les problèmes liés aux conditions frontières. Une méthode a été développée et validée sur un écoulement entre deux plaques parallèles. Elle sera étendue dans le chapitre 4 à des géométries plus complexes.

3.2 Méthodologie sur le maillage du fourreau

3.2.1 Motivations

Plusieurs raisons ont motivé l'idée de créer un code permettant de générer un maillage volumique sans passer par un logiciel de maillage industriel tel que I-DEAS (Siemens) ou Gambit (Ansys).

Le maillage de géométries complexes est une étape critique, lors de la simulation d'écoulement de fluides. Dans le cas étudié ici, un système d'extrudeuse bi-vis, à plusieurs échelles géométriques, est en jeu. En effet, l'espace entre les deux vis ou entre la vis et le fourreau est très petit, comparé au rayon interne du fourreau. Or, c'est dans cette zone que le profil de vitesse et le

cisaillement sont critiques, ce qui nécessite une attention particulière pour le choix de la taille de maille. Le raffinement du maillage est nécessaire pour améliorer la précision des résultats et limiter la perte de particules lors de l'étude de la DTS, mais il engendre des temps de calculs importants, ce qui peut aussi être un facteur limitant. L'astuce souvent utilisée est une méthode de raffinement local du maillage. Cela consiste à diviser le volume en plusieurs zones qui auront des tailles de maille différentes. Par conséquent, les zones, comme les entrefers, où la précision est critique, peuvent avoir une taille de maille plus petite que les zones situées au centre des vis.

Lors de précédents travaux réalisés sur les extrudeuses bi-vis (Brito-Bazan, 2011), le raffinement du maillage du fourreau avec les logiciels commerciaux (I-DEAS, Gambit) représentait une étape fastidieuse. Pour de très petites tailles de maille, la mémoire vive disponible demandée par les logiciels pour générer le maillage est importante. Ceci conduit à des temps de génération de maillages considérables.

De plus, avec ces logiciels, vu que les courbures de la géométrie sont approximées par des splines, certaines anomalies peuvent apparaître lors de la création des différentes partitions de la géométrie et que celles-ci sont de très petites tailles. En effet, la jonction entre ces partitions est mal raccordée car cette frontière est représentée par deux splines différentes vu que chaque partition a un rayon différent. Ainsi, il peut arriver qu'elles se chevauchent (Figure 3.5). Ce problème est dû à la mauvaise approximation du cercle par la spline. Le maillage de la géométrie est faussé car, les mailles se chevauchant, certains éléments se recoupent lors de la création du maillage.

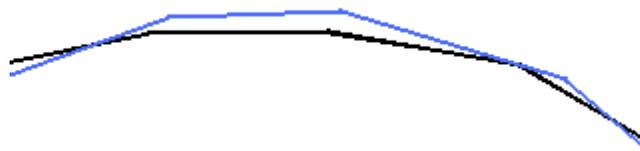


Figure 3.5 : Superposition de splines

Pour contourner ce problème, il faut augmenter l'écart entre les tailles des partitions. Ceci n'est pas forcément avantageux car cela revient à mailler plus fin une plus grosse partie du domaine, perdant en partie l'avantage du raffinement local.

En générant un code qui permet de mailler le fourreau, le but est de simplifier cette étape et de la rendre automatique en entrant uniquement des paramètres tels que les dimensions de la

géométrie et les tailles de maille. Un avantage est la flexibilité, c'est à dire la possibilité de pouvoir contrôler la disposition des nœuds générés pour pouvoir raffiner localement certaines zones. Il est à noter que ce code ne s'applique que pour le fourreau. Le logiciel I-DEAS reste utilisé pour mailler la surface de la partie mobile (les vis) afin de créer les points de contrôle nécessaires avec la méthode des éléments finis virtuels.

Et enfin, une autre raison est la possibilité de pouvoir contrôler la numérotation des nœuds du maillage. Il est bien connu (Dhatt & Touzot, 1981, p256) que la numérotation des nœuds ou des éléments joue un rôle important sur les temps de calculs et l'espace mémoire. En effet, une numérotation optimale des nœuds permet de minimiser le stockage en rassemblant les termes non-nuls autour de la diagonale de la matrice à résoudre. Le but est aussi de pouvoir diminuer le temps de calcul qui, en éléments finis, est un paramètre à prendre en considération. Ce constat est particulièrement vrai pour les méthodes directes. Dans le cas des méthodes itératives que nous utilisons dans la présente étude, il est bien connu que la numérotation n'a pas d'influence sur l'espace mémoire. En revanche, elle affecte les caractéristiques de convergence du solveur car son conditionnement est aussi amélioré. Le besoin d'optimiser la numérotation est donc tout aussi important.

Une numérotation optimale des nœuds correspond à une maille qui possède des numéros de nœuds proches. Une numérotation optimale des éléments fait en sorte que deux éléments côte à côte ont des numéros qui se suivent. Évidemment, en trois dimensions, la numérotation optimale dans des géométries est complexe. Cet aspect ne sera pas abordé en détail mais néanmoins le fait de mailler manuellement en permet un meilleur contrôle.

La méthode adoptée pour mailler une géométrie tridimensionnelle consiste d'abord à générer un maillage pour une surface. Ce maillage surfacique est composé d'éléments triangulaires à trois nœuds. Par la suite, il s'agit de créer le volume en extrudant ces éléments. Plusieurs surfaces parallèles et identiques à l'initiale sont alors reproduites et des éléments prismatiques à 6 nœuds sont alors obtenus, tels que schématisés sur la Figure 3.6. Il reste alors à diviser chaque prisme pour créer des tétraèdres à 4 nœuds.

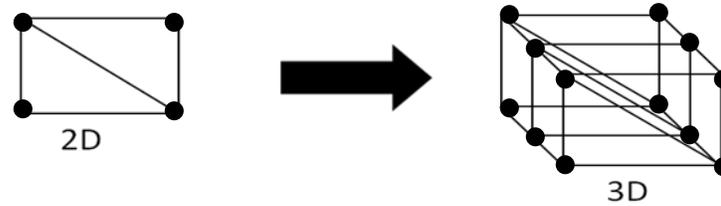


Figure 3.6: Extrusion du maillage surfacique pour obtenir un maillage tridimensionnel avec des prismes

3.2.2 Génération du maillage surfacique

Afin de tester la méthode, un mailleur pour générer des surfaces plus simples, telles que des rectangles et des cercles, a été créé avant de développer le mailleur pour la surface du fourreau.

Pour le maillage de la surface du fourreau (en forme de lunettes), les nœuds et éléments sont générés pour un quart de la géométrie, le reste étant fait par symétrie. Les dimensions caractéristiques d'un fourreau sont: l'entraxe (la distance entre les deux centres de rotation) et le rayon (R) qui correspond à la moitié du diamètre de hauteur des lunettes (cf. Figure 3.7)

Le maillage se fait par couches, c'est à dire que, pour un rayon donné, des nœuds sont placés à une distance Δl_θ les uns des autres. Pour la taille de maille, il est donc possible de jouer sur la distance entre chaque rayon, Δr , et sur la composante orthoradiale Δl_θ . Afin d'assurer un équilibre du maillage de la géométrie, le nombre de points orthoradiaux doit correspondre à six fois le nombre de points radiaux. En effet, sachant que l'on veut conserver le même nombre de nœuds par unité de longueur, si N nœuds sont placés le long du rayon, il faudra $2\pi N$ nœuds dans la direction orthoradiale. Vu qu'il faut donner une valeur entière, 2π est arrondi à la valeur la plus proche, soit 6.

La façon de placer les nœuds sur la surface, telle que présentée ci-dessus, rend alors possible le raffinement local du maillage, notamment proche des parois où se trouvent les entrefers, en créant une région où le Δr et le Δl_θ sont plus petits.

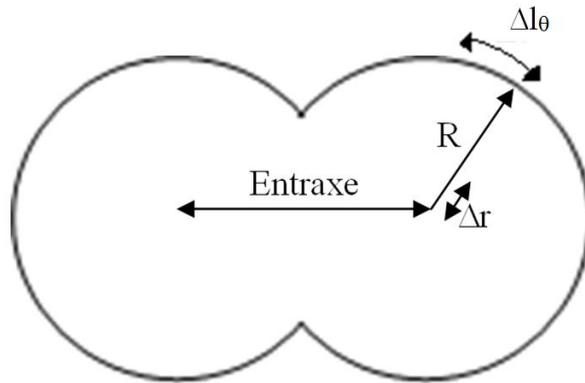


Figure 3.7: Paramètres importants dans la lunette d'un fourreau

Lors du positionnement des nœuds, deux zones sont à distinguer. La première, dans laquelle les nœuds forment des courbes parallèles à la paroi du fourreau et la seconde, au centre de chaque lunette, dans laquelle ils forment des cercles (Figure 3.8). Dans la zone au centre de chaque lunette, le nombre de points dans la direction orthoradiale a été diminué afin de conserver un espacement entre les noeuds de Δl_{θ} , créant des éléments moins aplatis et réduisant le nombre d'éléments. De plus, ceci est justifié car cette zone ne correspond pas à une région dans laquelle les taux de cisaillement sont critiques.

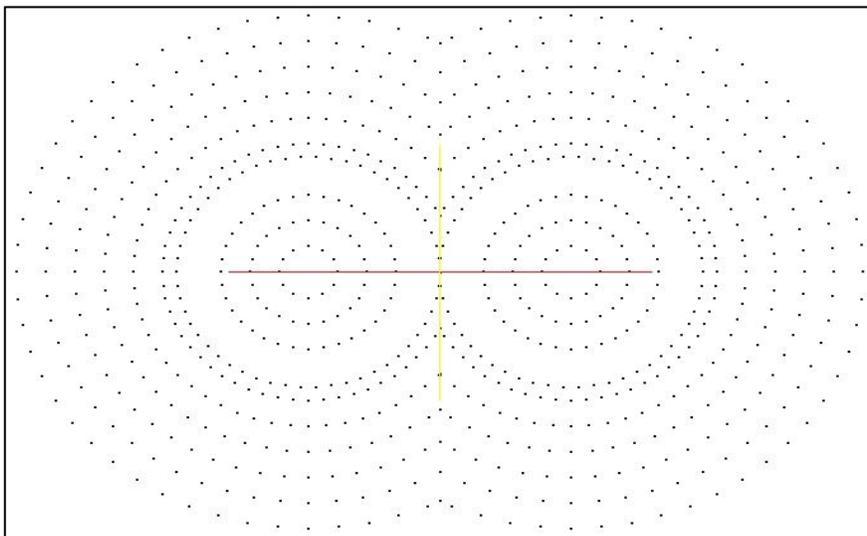


Figure 3.8: Position des nœuds dans les lunettes du fourreau

Une fois les nœuds placés sur la surface, il s'agit de les relier pour former des éléments triangulaires. Cette formation se fait aussi par couches, ainsi les éléments sont créés à partir des nœuds situés sur 2 courbes parallèles. La méthodologie de formation, telle que présentée sur la

Figure 3.9, est la suivante: une première arête est formée avec deux nœuds, un situé sur chaque courbe parallèle. À partir de cette arête, il s'agit alors de choisir le nœud qui optimise la forme de l'élément. Pour ce nœud, il y a le choix entre les deux nœuds les plus proches de ceux qui forment la première arête du triangle: soit le nœud qui est placé sur la courbe de rayon r , soit celui sur celle de rayon $r+\Delta r$.

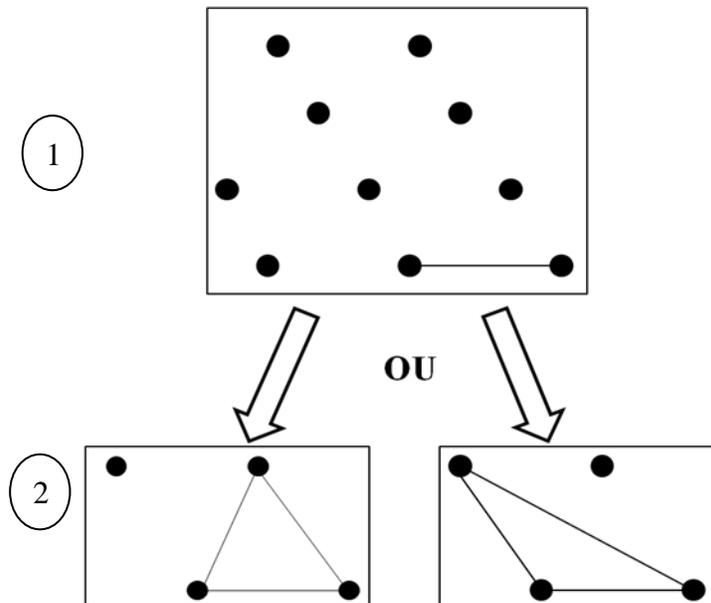


Figure 3.9: Schématisation de la formation des éléments surfaciques

Pour déterminer lequel de ces nœuds optimise la forme des éléments, plusieurs critères ont été testés.

Le premier critère est basé sur le point situé le plus proche de l'arête. L'objectif de ce critère est de minimiser la possibilité de trouver un nœud à l'intérieur d'un autre élément créant une situation dans laquelle 2 éléments recourent. Cette situation est indésirable car elle conduirait à la création d'un maillage non fonctionnel avec des éléments dont les arêtes s'entrecroisent.

Le deuxième critère permet de choisir le nœud qui crée l'élément le moins distordu (ce qui aurait un impact négatif sur l'erreur). Il s'agit alors de calculer le rapport de forme d'un triangle Q_K (Frey & George, 1999, p.606-607):

$$Q_K = \beta \frac{h_{\max} P_K}{S_K} \quad (3.31)$$

où P_K est le demi-périmètre de l'élément, S_K son aire, h_{max} est la longueur de la plus grande arête et β un coefficient de normalisation tel que Q_K vaut 1 lorsque le triangle est équilatéral. De ce fait, ce coefficient β se calcule à partir des propriétés d'un triangle équilatéral de côté de longueur a :

$$\beta = \frac{S_K}{h_{max} P_K} \quad (3.32)$$

Pour un triangle équilatéral, $S_K = \frac{\sqrt{3}}{4}a$, $P_K = \frac{3}{2}a$ et $h_{max}=a$, ce qui donne: $\beta = \frac{1}{2a\sqrt{3}}$.

Ainsi, le rapport d'aspect de forme varie de 1 pour un triangle équilatéral à l'infini pour un triangle aplati. Pour éviter des problèmes numériques dus à la possibilité de voir apparaître l'infini dans les calculs, il est préférable d'implanter le calcul de l'inverse de Q_K , de telle sorte que les valeurs de Q_K varient de 0 à 1 et le nœud choisi est celui qui donne le Q_K le plus proche de 1.

Le troisième critère prend le point qui donne un triangle avec le plus petit angle maximal. Ceci permet de choisir l'élément qui sera le moins aplati possible. Plus la valeur du plus grand angle s'approche de 180° , plus les trois nœuds ont tendance à former une ligne droite plutôt qu'un triangle. Par ailleurs, si les trois angles sont égaux, le triangle est équilatéral. C'est pourquoi la minimalisation de la taille maximale a été choisie comme critère.

Le quatrième critère correspond au point qui donne le plus petit écart-type sur la longueur des arêtes du triangle. Le but est de créer des éléments les plus équilatéraux possibles pour former des éléments les plus réguliers possibles. Pour un triangle équilatéral, l'écart-type σ_L est nul, c'est pourquoi la plus la plus petite valeur possible de σ_L est recherchée.

$$\sigma_L = \sqrt{\frac{\left(\sum_{i=1}^3 (a_i - \bar{a})^2\right)}{3}} \quad (3.33)$$

où a_i est la longueur d'une des arêtes et \bar{a} est la moyenne des longueurs des trois arêtes.

Le choix d'un de ces critères ne permet cependant pas de prévenir une situation pour laquelle un nœud serait situé à l'intérieur d'un autre élément et qui créerait un maillage non fonctionnel car des éléments se recouvreraient. Une condition de sécurité a donc été ajoutée afin de s'assurer que le nœud non choisi (mais qui sera choisi pour la construction d'un autre élément) n'est pas

contenu dans l'élément qui vient d'être créé. Le principe de cette méthode consiste à déterminer les coordonnées du nœud P sur l'élément de référence et, avec ses coordonnées, de vérifier s'il appartient à cet élément. C'est une transformation géométrique de l'élément qui est faite à partir de la position des nœuds.

Les coordonnées du nœud P (x_P, y_P) correspondent à une relation entre les coordonnées des trois nœuds de l'élément ($x_1, y_1; x_2, y_2; x_3, y_3$) et les coordonnées du nœud P dans l'élément de référence (ξ_P, η_P), tels que:

$$\begin{aligned} x_P &= \sum_{i=1}^3 \varphi_i x_i = (1 - \xi_P - \eta_P) \cdot x_1 + \xi_P \cdot x_2 + \eta_P \cdot x_3 \\ y_P &= \sum_{i=1}^3 \varphi_i y_i = (1 - \xi_P - \eta_P) \cdot y_1 + \xi_P \cdot y_2 + \eta_P \cdot y_3 \end{aligned} \quad (3.34)$$

φ_i représente la fonction de forme.

On obtient alors le système d'équations de type : $A \cdot \vec{\xi} = \vec{B}$ à résoudre:

$$\begin{bmatrix} (x_2 - x_1) & (x_3 - x_1) \\ (y_2 - y_1) & (y_3 - y_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_P \\ \eta_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_P - x_1 \\ y_P - y_1 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

La résolution de ξ_P et η_P , permet de déterminer si le nœud P appartient à l'élément. C'est le cas si:

$$0 \leq \xi_P \leq 1 \text{ et } 0 \leq \eta_P \leq 1 \text{ et } 0 \leq 1 - \xi_P - \eta_P \leq 1$$

La dernière étape du maillage surfacique est de vérifier que la surface est bien formée en calculant l'aire engendrée par les éléments du maillage (A_{maillage}) et en la comparant à l'aire théorique (A_{fourreau}).

L'aire générée par le maillage se calcule de la façon suivante:

$$A_{\text{maillage}} = \sum_{IELT=1}^{NELT} S_{IELT} \quad (3.36)$$

où S_{IELT} est la surface d'un élément triangulaire qui s'obtient par:

$$S_{IELT} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{vmatrix} \quad (3.37)$$

L'expression théorique de l'aire d'un fourreau peut être approximée avec la formule suivante:

$$A_{\text{fourreau}} = 2 \cdot \left[(\Pi - \theta)R^2 + \frac{\text{Entraxe} \times \sqrt{R^2 - \frac{\text{Entraxe}^2}{4}}}{2} \right] \quad (3.38)$$

$$\text{où } \theta = \cos^{-1} \left(\frac{\text{Entraxe}/2}{R} \right)$$

L'obtention de cette formule est présentée à la Figure 3.10.

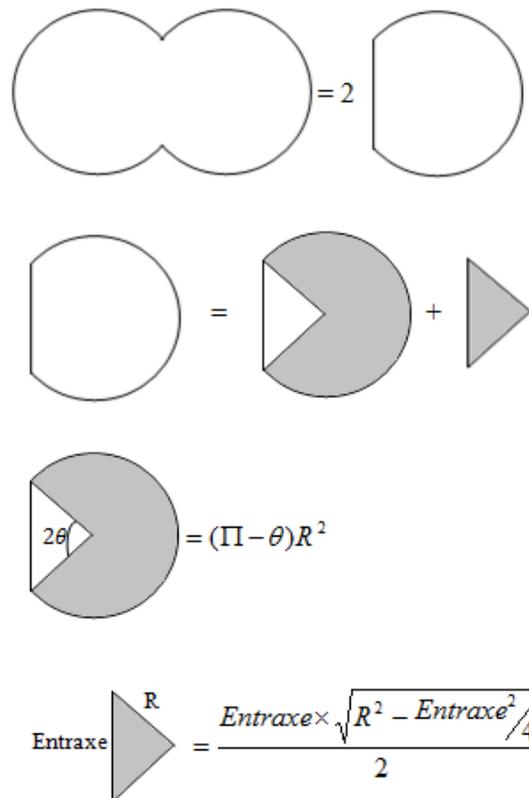


Figure 3.10: Démonstration du calcul de l'aire du fourreau (équation (3.38))

3.2.3 Génération du maillage volumique

Il reste maintenant à créer le maillage volumique. Pour cela, il suffit de dupliquer les nœuds et éléments du maillage surfacique sur plusieurs plans de l'axe des z, jusqu'à la longueur L de la

géométrie. Les éléments triangulaires en 2D deviennent donc des prismes en 3D (Figure 3.11). Il faut cependant spécifier le nombre de plans en z désiré, ce qui correspond à fixer une taille de maille selon l'axe z . Ce choix peut être fait de manière arbitraire ou de manière à conserver la taille moyenne des arêtes du maillage surfacique. C'est cette dernière qui sera utilisée dans ces travaux. Il est aussi possible de créer plusieurs régions qui auront des longueurs de prismes différentes. Ceci peut être pertinent, entre autres, dans le cas où la vis ne s'étend pas sur toute la longueur du fourreau.

L'étape suivante consiste à diviser ces prismes en tétraèdres afin de pouvoir lancer les simulations avec le logiciel Poly3D. Plusieurs découpages ont été étudiés. Le premier donne 3 tétraèdres grâce à l'addition d'une arête en diagonale sur chaque face (Figure 3.11).

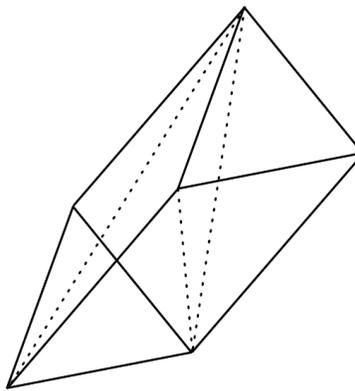


Figure 3.11: Division du prisme en 3 tétraèdres

Cette configuration, bien qu'intéressante puisqu'elle ne crée que peu d'éléments, a été rapidement écartée car elle conduit à la création de faces non contiguës. En effet, lorsqu'une face est commune à deux prismes, il est possible que l'arête ajoutée ne soit pas sur la même diagonale des 2 prismes. Il n'y a alors pas de continuité sur cette face à 4 nœuds, comme le montre la Figure 3.12 (les 2 arêtes en gras).

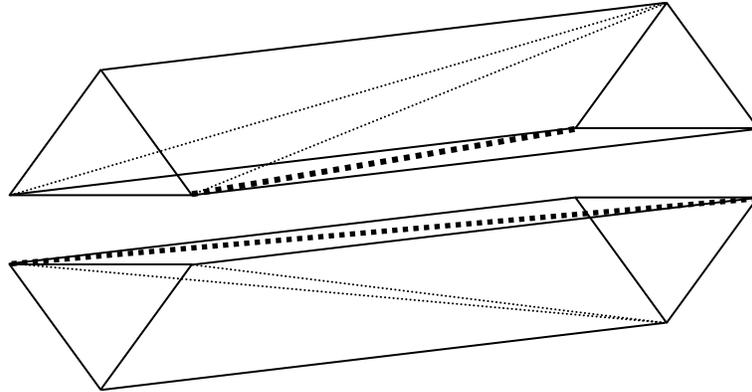


Figure 3.12: Discontinuité des faces entre la face du dessous du prisme du haut et celle du dessus du prisme du bas

La deuxième décomposition étudiée est basée sur l'ajout de 4 nœuds, 3 au centre de chacune des faces à 4 nœuds et un au centre du volume du prisme. 14 tétraèdres sont alors formés et tous ont pour sommet le centre du volume du prisme. Bien que ce découpage conduise à l'addition de nœuds et à la création d'un important nombre d'éléments, celle-ci est retenue car elle assure la continuité des faces en tous temps.

D'autres possibilités existent, notamment un découpage pour lequel un nœud au centre de chaque face à 4 nœuds est ajouté mais la façon retenue est plus simple par rapport à la division en tétraèdres et à leur numérotation car chaque tétraèdre possède le même sommet, celui qui est au barycentre de la géométrie.

Afin de s'assurer que le découpage du prisme en tétraèdres se fait correctement, le volume du maillage prismatique (V_{MP}) est comparé à celui avec des tétraèdres (V_{MT}), lui même comparé au volume théorique ($V_{fourreau}$).

Pour calculer le volume du maillage avec les prismes, on utilise:

$$V_{MP} = \sum_{IELT=1}^{NELT} (V_{prisme})_{IELT} \quad (3.39)$$

avec $V_{prisme} = \frac{1}{2} (z_4 - z_1) \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{vmatrix}$. Le prisme possède les sommets 1, 2, 3 sur le premier plan xy et les sommets 4, 5, 6 sur l'autre plan.

Pour calculer le volume du maillage avec les tétraèdres, on utilise:

$$V_{MT} = \sum_{IELT=1}^{NELT} (V_{\text{tétraèdre}})_{IELT} \quad (3.40)$$

$$\text{avec } V_{\text{tétraèdre}} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_4 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 & y_4 - y_1 \\ z_2 - z_1 & z_3 - z_1 & z_4 - z_1 \end{vmatrix}$$

Le volume théorique est:

$$V_{\text{fourreau}} = A_{\text{fourreau}} \times L \quad (3.41)$$

La dernière étape pour finaliser le maillage est la formation des régions pour pouvoir entrer les différentes conditions frontières. Il faut donc rassembler les nœuds situés sur la paroi entrante d'un côté et sortante de l'autre.

3.2.4 Autres fonctionnalités connexes

Dans l'optique de réduire le nombre d'éléments et, par conséquent, les temps de simulation, une fonction permet d'enlever les nœuds et les éléments qui sont situés à l'intérieur de l'arbre de la vis. Ces éléments ne jouent pas de rôle dans l'obtention du profil de vitesse et alourdissent donc inutilement les calculs. Cette fonction est lancée une fois le maillage réalisée. Dans le cas du fourreau, cela implique la présence de deux trous dans le maillage.

3.2.5 Avantages et inconvénients de la technique de maillage proposée

Le logiciel Poly3D calcule la régularité du maillage permettant ainsi d'évaluer sa qualité. Dans le logiciel, la régularité est un ratio du volume du tétraèdre régulier sur le volume du tétraèdre réel. Le tétraèdre régulier est un tétraèdre qui possède des arêtes de même longueur dont la valeur est celle de la longueur maximale du tétraèdre réel. Une régularité moyenne correspondant à la moyenne de ces ratios sur tous les éléments, une régularité minimale et maximale sont évalués. Techniquement, un bon maillage doit donc avoir une valeur de régularité moyenne la plus proche de 1.

La régularité est un paramètre important à regarder car un maillage de bonne qualité permet une convergence plus rapide des solveurs itératifs vers une solution plus précise. Cela a donc pour impact de diminuer le temps de calcul car moins de ressources sont demandées. Si elle est trop

élevée, des problèmes de convergence peuvent apparaître, lors de la résolution de l'écoulement. Les temps de calculs peuvent alors être plus importants ou la solution moins précise. En général, la régularité d'un maillage avec un mailleur industriel est plus petite que celle obtenue par la méthode exposée ci-dessus comme ce sera vu dans le chapitre 5.

Un inconvénient de la technique proposée est qu'elle ne peut être utilisée que pour des géométries dont la surface transversale à l'écoulement est constante le long de la direction d'écoulement. Par contre, elle est plus flexible car il est possible de raffiner certaines régions, et l'étape de maillage est plus rapide et moins fastidieuse. Par ailleurs, elle est plus systématique car il suffit de rentrer les paramètres géométriques, sans devoir travailler avec une interface graphique.

CHAPITRE 4 APPLICATIONS ET VALIDATION DE LA DTS

Les résultats présentés dans ce chapitre ont été obtenus en collaboration avec le professeur Heniche et le professeur Bertrand et ont par la suite fait l'objet d'un article publié dans *Macromolecular Materials and Engineering* (Olmiccia et *al.*, 2011) qui est en annexe. Ma contribution à cet article est de moins de 45%.

L'objectif de ce chapitre est de valider la méthodologie de la DTS présentée dans le chapitre précédent sur un écoulement simple (écoulement de Poiseuille) puis de l'étendre à une géométrie plus complexe: un mélangeur statique. Les maillages pour les différentes géométries dans ce chapitre ne sont pas issus de notre générateur de maillage mais du logiciel I-DEAS.

4.1 Application sur un écoulement Poiseuille

L'intérêt de travailler sur un écoulement de Poiseuille est que les solutions analytiques des profils de vitesse et des fonctions de DTS sont connues. Il est ainsi possible de tester la méthode de DTS développée dans la section 3.1 avant de l'appliquer à des géométries plus complexes.

4.1.1 Géométrie et propriétés du fluide

L'écoulement se fait dans une conduite de rayon $R=0,1\text{m}$ et de longueur $L=0,5\text{m}$. Un profil de vitesse établi est inséré comme condition à l'entrée de la conduite. La vitesse moyenne est de $\bar{v} = 0,05\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Le fluide étudié suit une loi de puissance avec comme indice de consistance $K=1000\text{ Pa}\cdot\text{s}^n$ et un indice de loi de puissance n qui prend des valeurs de 1 à 0,5. Sa masse volumique est de $\rho=1000\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

4.1.2 Calcul de l'épaisseur de la région proche des parois

La première étape dans l'obtention des courbes de la DTS consiste à évaluer l'épaisseur proche de la paroi, δ , en procédant de la même manière que pour un écoulement entre 2 plaques (équation (3.29)). Pour un écoulement de type Poiseuille, elle se calcule à partir de l'expression du profil de vitesse et s'obtient en résolvant l'équation suivante:

$$T_{exact} - \frac{2L}{v_{\max} (R-\delta)^2} \int_0^{R-\delta} \frac{r}{1-\left(\frac{r}{R}\right)^{1+1/n}} dr = 0 \quad (4.1)$$

Pour la démonstration de l'expression, le lecteur se référera à l'annexe A2 de l'article: Olmiccia et al. , 2011, situé en annexe.

Il est important de noter que l'épaisseur δ varie en fonction de l'indice de loi de puissance n , tel que montré à la Figure 4.1. En effet, la valeur de δ décroît avec la valeur de n ce qui s'explique par l'aplatissement du profil de vitesse qui diminue ainsi la surface de zone dans laquelle les vitesses sont faibles. Pour minimiser la perte de particules, Nauman (Nauman, 2008b, p553) propose une épaisseur adimensionnelle constante, telle que: $\frac{|R-\delta|}{R} = 0,94$, dans laquelle le fluide est considéré comme stagnant en l'absence de diffusion. Cette valeur est posée quelle que soit la viscosité du fluide.

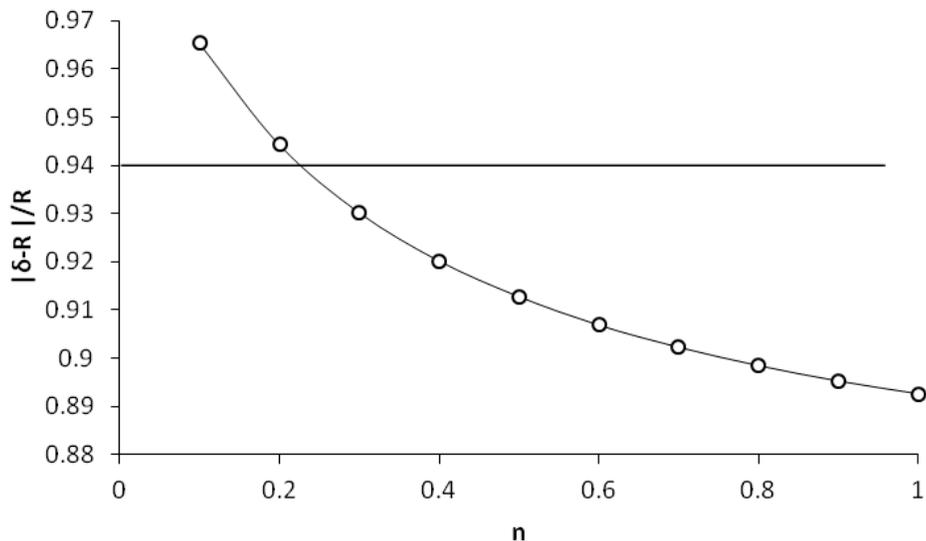


Figure 4.1: Variation du δ en fonction de l'indice de loi de puissance, n , pour un écoulement de Poiseuille, en comparaison avec la constante proposée par Nauman (Nauman, 2008b, p553) et représentée par une ligne droite.

Au regard de la Figure 4.1, comparativement aux valeurs de δ obtenues, grâce à l'équation (4.1), la constante proposée par Nauman est plus grande lorsque $n > 0,2$, ce qui montre que l'épaisseur proche des parois est sous-estimée et que beaucoup de particules risquent alors d'être encore

perdus. Pour les cas où $n \leq 0,2$, le δ est surestimé et donc certains détails sur l'écoulement du fluide peuvent être perdus vu que les particules pourraient être injectées sur une surface un peu plus grande.

4.1.3 Résultats de la DTS

4.1.3.1 Influence de la taille de maille sur le temps de séjour moyen

Il est bien connu que la taille de maille joue un rôle important sur la précision du champ de vitesses. Il paraît toutefois intéressant de regarder son influence sur la prédiction du temps de séjour moyen. La Figure 4.2 montre les résultats du temps de séjour moyen T_h en fonction de la taille de maille h , pour cinq maillages au total. Les valeurs convergent vu que, lorsque la taille de maille diminue, T_h tend vers T_{exact} . Pour avoir une erreur sur l'approximation de T_h inférieure à 1%, h/L doit être inférieur à 0,018. Au-dessus de cette valeur de h/L , l'erreur sur la prédiction de T_h augmente fortement et peut rapidement devenir non négligeable.

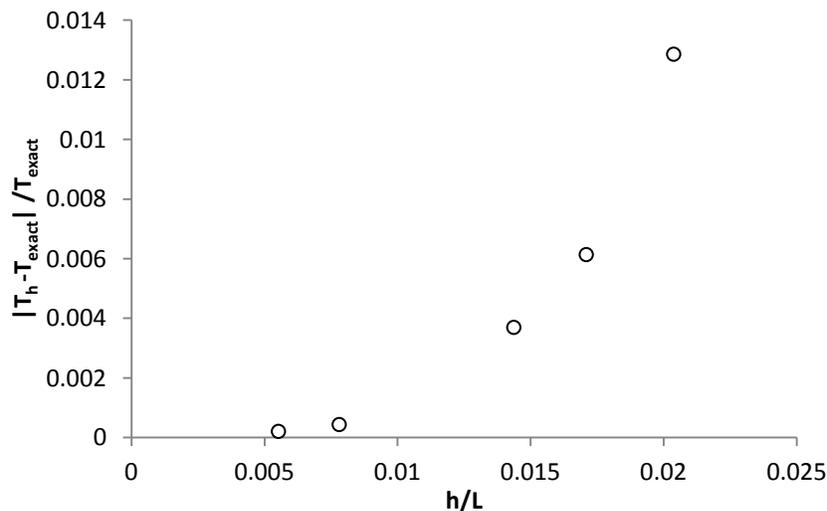


Figure 4.2: Convergence de T_h en fonction de la taille de maille pour un écoulement de Poiseuille

Cette étape a aussi permis de sélectionner la taille de maille utilisée pour les prochaines simulations. C'est le troisième maillage le plus grossier qui a été pris ($h/L = 0,014$), parmi les cinq maillages. Il ne contient pas beaucoup d'éléments (50755 éléments) ni beaucoup d'équations à résoudre (30020 équations en vitesse). Les résultats peuvent être obtenus très rapidement, ce qui est un point important lors de l'étude des fluides non-newtoniens. De plus, il permet d'obtenir

des résultats suffisamment précis (erreur sur la prédiction du temps de séjour moyen inférieure à 0,4%).

4.1.3.2 Influence du nombre de classes

La prochaine étape est l'étude de l'impact du nombre de classes, N , sur la DTS. Selon la méthode statistique utilisée (Sturges, 1926; Scott, 1979; Freedman & Diaconis, 1981 (cf. équations (3.18) à (3.20))), le nombre de classes diffère. Le Tableau 4.1 montre l'impact du nombre de classes sur la prédiction du temps de séjour moyen, T_h . Ainsi, pour ces 3 méthodes, l'erreur varie entre 10% et 16%. Mais l'utilisation de la méthode permettant d'obtenir une valeur de N optimale (équation (3.23)) améliore grandement la précision.

Tableau 4.1: Évaluation du temps de séjour moyen d'un écoulement de Poiseuille pour plusieurs valeurs de N déterminées selon diverses méthodes

Méthodes	N	T_h (s)	T_{exact} (s)	Erreur (%)
Sturges	15	9,0		10
Freedman-Diaconis	55	8,4	10	16
Scott	29	8,6		14
Optimal	8	9,9		0,8

Une fois l'impact du nombre de classes sur le temps de séjour moyen étudié, il faut maintenant examiner les courbes de la fonction $f(t)$ de la DTS (Figure 4.3). La courbe théorique a pu être obtenue et comparée aux situations où le nombre de classes est évalué selon une des quatre méthodes vues ci-dessus. Pour le développement de l'expression théorique de $f(t)$ et $F(t)$, pour un écoulement de Poiseuille, il faut se référer à l'annexe A3 de l'article Olmiccia et *al.*, 2011, en annexe.

Les quatre courbes obtenues (Figure 4.3) présentent des différences en comparaison à la solution exacte. Celle obtenue avec un nombre de classes optimal est plus lisse, le pic est moins important et est retardé, ce qui s'explique par le faible nombre de classes obtenu avec cette méthode. Contrairement aux méthodes statistiques de calcul de N , elle ne présente aucune oscillation. La courbe issue de Sturges est celle qui est la plus proche de la courbe du N optimal. La méthode de

Freedman-Diaconis permet de mieux capturer l'intensité du pic et de mieux le positionner mais présente de grandes oscillations.

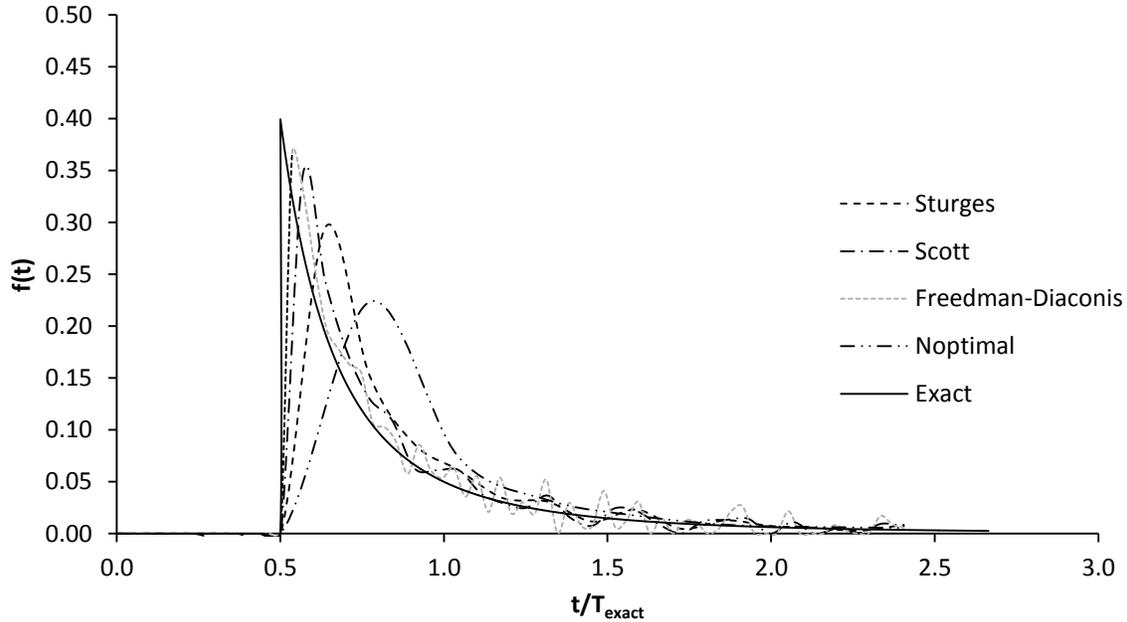


Figure 4.3: Influence de la méthode utilisée pour évaluer le nombre de classes N sur les courbes $f(t)$ de la DTS pour un écoulement de type Poiseuille d'un fluide newtonien.

Le nombre de classes N issu de la méthode du N optimal a toutefois été utilisé pour des fluides non newtoniens suivant une loi de puissance d'indice n , vu que c'est celle qui donne les meilleurs résultats sur la prédiction du temps de séjour moyen. Pour les six valeurs de n étudiées, des erreurs pour T_h inférieures à 1% sont obtenues (Tableau 4.2).

Tableau 4.2: Évaluation du temps de séjour moyen d'un écoulement de Poiseuille avec une valeur de N optimale pour des fluides suivant une loi de puissance

n	N	T_h (s)	T_{exact} (s)	Erreur (%)
1,0	8	9,9	10	0,8
0,9	8	10,0		0,1
0,8	8	10,1		0,6
0,7	8	10,1		1,0
0,6	9	9,9		0,6
0,5	9	10,1		0,7

Le tracé des courbes de la fonction $f(t)$ de la DTS, selon l'indice de loi de puissance n (Figure 4.4), montre peu de différences entre chacune. Avec la méthode du N optimal, aucune oscillation n'est observée pour les six courbes. En ce qui concerne leurs formes, elles sont très semblables. Cependant, deux différences peuvent être observées. La première concerne le temps minimal de séjour. Il est plus petit pour un fluide newtonien, ce qui est attendu car, à débit volumique identique, la vitesse maximale dans un écoulement Poiseuille est plus grande dans le cas newtonien ($n=1$). Ensuite, l'intensité des pics est légèrement différente selon les valeurs de n , ce qui est un résultat corroboré par l'expression théorique de $f(t)$ en fonction de n , telle que présentée à l'annexe A3 de l'article (Olmiccia et *al.*, 2011).

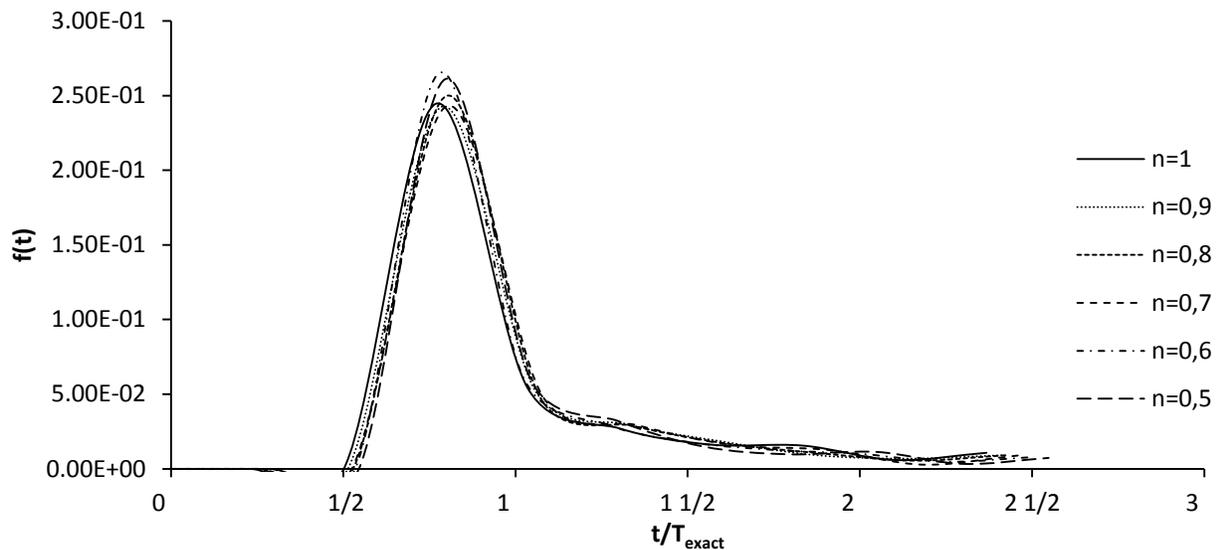


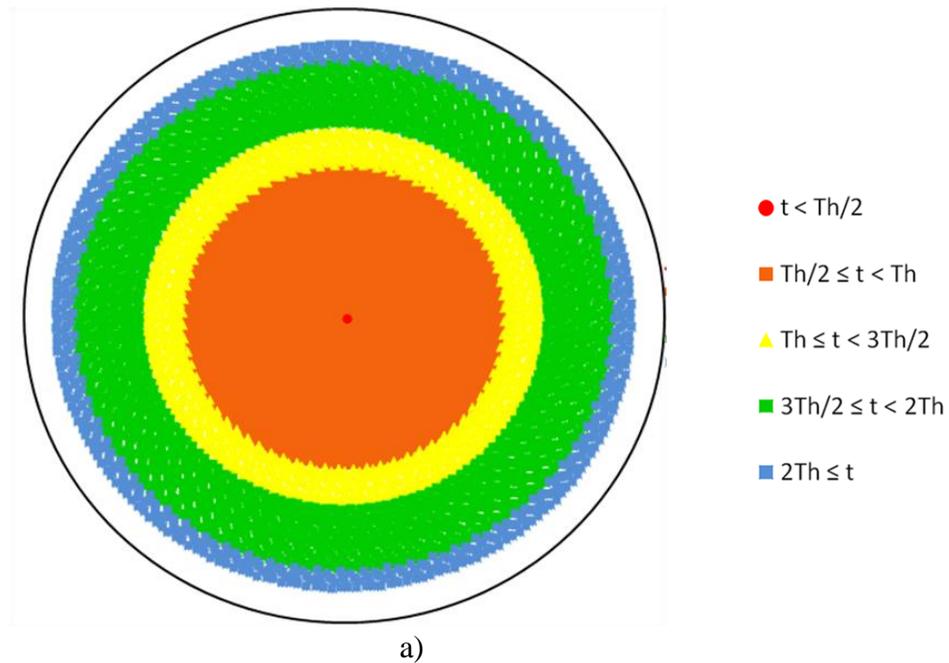
Figure 4.4: Influence de l'indice de loi de puissance, n , sur la fonction $f(t)$ de la DTS pour un écoulement de type Poiseuille.

4.1.3.3 Représentation spatiale des temps de séjour

La représentation spatiale des temps de séjour des particules sur le plan de sortie à l'aide de cartes de Poincaré est très utile pour repérer l'emplacement des particules les plus rapides, mais aussi pour pouvoir étudier la qualité du mélange des particules entre l'entrée et la sortie. Un système bien mélangé présente une distribution homogène de l'âge des particules sur toute la section de sortie. Cette carte permet d'évaluer l'efficacité du mélange en démontrant que les particules ont aussi pu circuler dans la direction radiale. Dans le cas d'un écoulement de

Poiseuille, étant donné qu'il n'y a pas de vitesse dans la direction transversale, le mélange des particules ne peut avoir lieu.

Les sections de Poincaré ont été obtenues pour l'écoulement de Poiseuille d'un fluide newtonien et d'un fluide suivant une loi de puissance d'indice $n=0,5$, (Figure 4.5 a et b). Cinq groupes d'âge de particules ont été choisis.



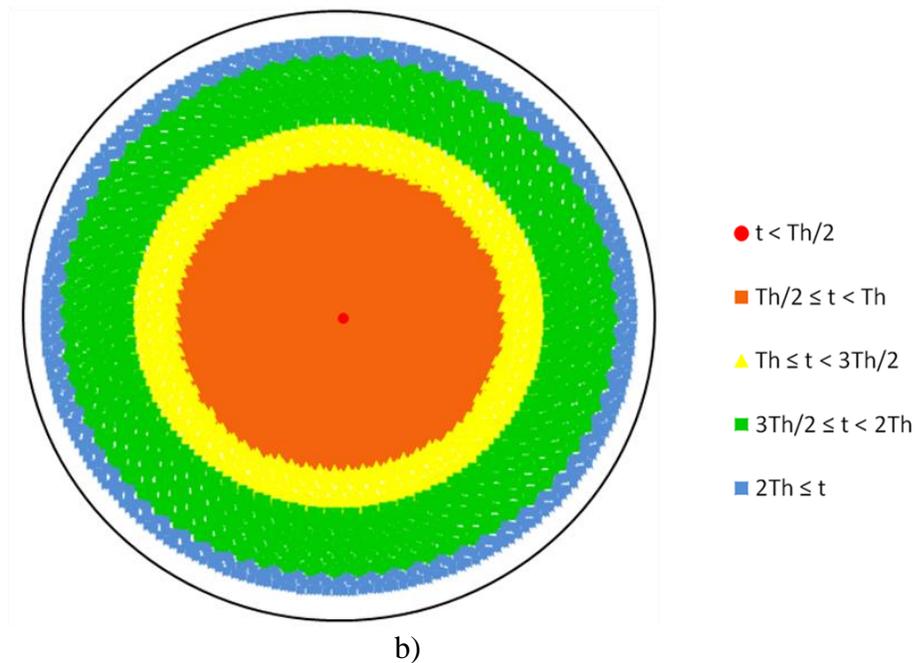


Figure 4.5: Représentation spatiale de la DTS sur une carte Poincaré d'un écoulement de Poiseuille pour un fluide a) newtonien et b) d'indice de loi de puissance $n=0,5$

Sur les deux figures, une distribution concentrique de l'âge des particules est soulignée, ce qui démontre que les lignes de courant restent parallèles. Aucun mélange n'est effectué, ce qui n'est pas surprenant car un écoulement de Poiseuille ne le permet pas. La particule la plus rapide est située au centre de la géométrie tandis que les particules les plus vieilles sont proches des parois. Il est à noter que la zone sans particule, causée par l'utilisation de l'épaisseur proche des parois δ , est toujours présente à la sortie de la géométrie. Ainsi, aucune particule n'a traversé cette zone lors de l'écoulement.

Les résultats présentés dans cette section confirment la théorie et valident la technique développée.

4.2 Application sur un mélangeur statique: le Kenics

La méthode de calcul de la DTS a par la suite été utilisée sur une géométrie plus complexe pour laquelle la solution analytique n'est pas connue. Le choix s'est porté sur un mélangeur statique car, ne possédant pas de partie mobile, l'application numérique sur cette géométrie est une bonne étape de transition. Le défi consiste alors à approximer la DTS.

4.2.1 Géométrie et propriétés du fluide

Le mélangeur statique considéré est le RR-Kenics, présenté à la Figure 4.6. Il est composé de 6 éléments qui permettent de mélanger le fluide dans la direction radiale. Cela permet, en effet, de casser les lignes de courant parallèles. Cette géométrie a été étudiée par Avalosse et Crochet (1997b); le diamètre de la conduite est de 60 mm et chaque élément mesure 115 mm. La longueur de la conduite est de 920 mm, ce qui correspond à 8 fois 115 mm. La terminologie RR signifie que les éléments du mélangeur sont toujours inclinés dans la même direction les uns par rapport aux autres, contrairement au type RL pour lequel l'inclinaison se fait de façon alternative, une fois à droite puis à gauche.

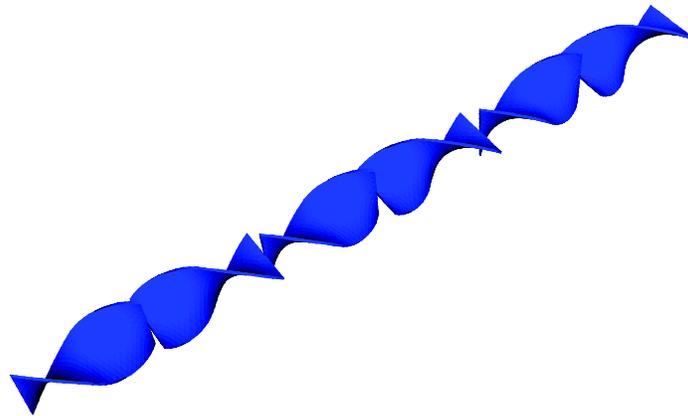
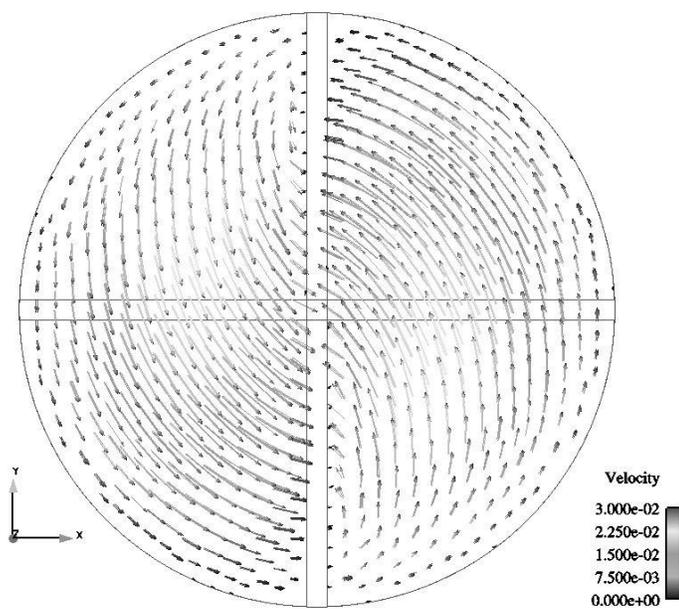


Figure 4.6: Géométrie du mélangeur statique RR-Kenics

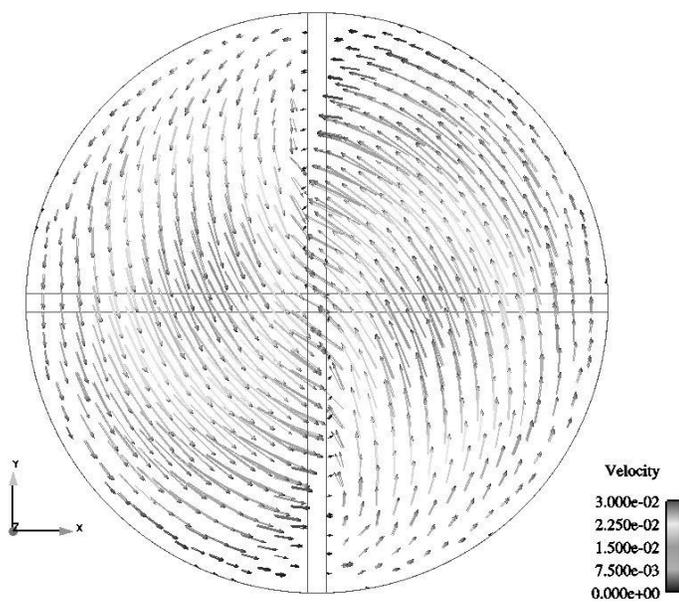
Le fluide à l'étude possède une masse volumique $\rho=1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et suit une loi de puissance avec comme indice de consistance $K = 78 \text{ Pa.s}^n$. L'indice de loi de puissance a été testé pour $n=1$; $n=0,9$; $n=0,8$; $n=0,7$; $n=0,6$; $n=0,5$. Bien que la configuration de type RR fournisse un moins bon mélange que celle de type RL (Galaktionov et *al.*, 2003), c'est cette géométrie qui a été retenue car de précédents travaux numériques, au sein de l'URPEI, avaient été faits pour étudier l'écoulement de ce fluide dans cette géométrie. Le maillage était donc déjà prêt et la convergence de la variation de pression, avec le logiciel Poly3D, selon la taille de maille avait été tracée.

Les champs de vitesse ont été générés pour les 6 cas avec le logiciel Poly3D. Les champs obtenus pour les 2 indices de loi des puissance extrêmes sont présentés aux Figures 4.7 a et b. Lors des simulations, à l'entrée de la conduite, un profil de vitesse déjà établi a été imposé. Pour cela, la conduite étant circulaire, c'est l'expression de la vitesse d'un écoulement Poiseuille qui a

été utilisée. Le maillage est composé de 1,25 millions d'éléments tétraédriques de type MINI et de 1,5 millions de nœuds. Le nombre d'équations à résoudre en vitesse-pression est de 750 000.



a)



b)

Figure 4.7: Écoulement transversal à la sortie d'un mélangeur statique Kenics de type RR pour a) un fluide newtonien, b) un fluide suivant une loi de puissance tel que $n=0,5$.

La différence entre les deux profils transversaux de la vitesse est peu visible à l'œil nu. Elle réside, principalement, dans l'intensité des vitesses observées au centre de la géométrie; elles sont plus importantes dans le cas où le fluide suit une loi de puissance $n=0,5$. La perte de charge, en fonction de l'indice de loi de puissance, a aussi été calculée et tracée à la Figure 4.8. Lorsque cet indice diminue, la perte de charge aussi. Cette tendance a été démontrée pour des fluides rhéofluidifiants dans une conduite (Tadmor & Gogos, 1979, p86). Des recherches ont été faites pour essayer de vérifier ces valeurs de perte de charge mais des travaux ou corrélations pour un nombre de Reynolds aussi faible (0,046) et des conditions similaires (ratio de longueur d'élément/ diamètre de 2) ne sont pas accessibles. De plus, la perte de charge évaluée prend en compte la zone d'entrée et de sortie de la conduite dans laquelle il n'y a pas d'élément de mélange. Ceci rend donc la comparaison plus difficile. Parmi ces travaux, on peut, tout de même, citer Hobbs et *al.* (1998) qui comparent des résultats numériques avec ceux provenant de corrélations mais pour un Reynolds de 0,15 et un ratio de longueur d'élément/diamètre de 1,5.

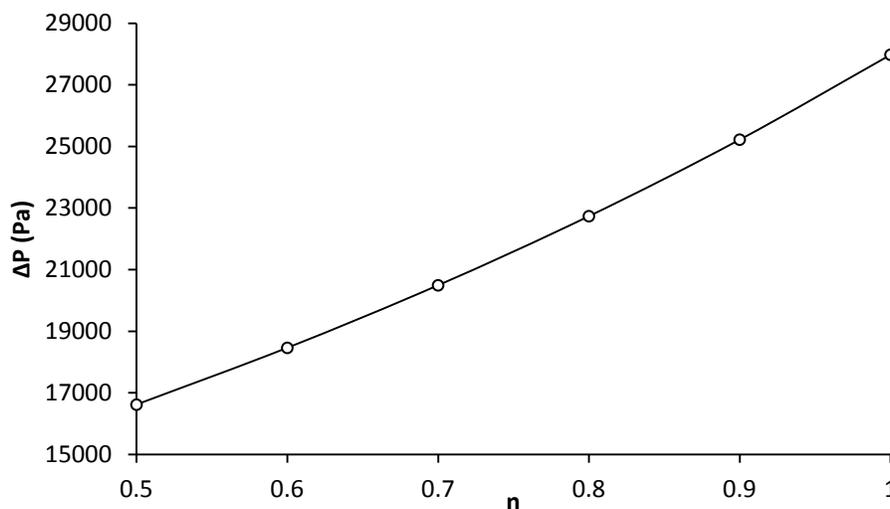


Figure 4.8: Influence de l'indice de loi de puissance, n , sur la perte de charge dans un mélangeur statique Kenics de type RR

4.2.2 Évaluation de l'épaisseur de la région proche des parois

Étant donné que le profil de vitesse n'est pas connu pour la géométrie étudiée, le calcul de l'épaisseur proche des parois, δ , a été approximée de la même façon que pour un écoulement de type Poiseuille dans une conduite cylindrique (équation (4.1)).

Tout d'abord, afin de mettre en valeur l'utilité de cette méthode, les fonctions DTS pour le fluide newtonien ont été calculées avec des particules lancées sur toute la section d'entrée (soit $\delta=0$), puis avec l'insertion d'une zone sans particule à l'entrée (soit $\delta\neq 0$). Le premier avantage mis en évidence est que l'insertion d'une zone sans particule permet de réduire le pourcentage de particules qui ne sortent pas et donc ne sont pas prises en compte. Sur 5000 particules lancées, lorsque $\delta=0$, 4% sont perdues versus 2% lorsque $\delta\neq 0$.

Le second point est l'amélioration de la prédiction du temps de séjour moyen, T_h , lorsque $\delta\neq 0$. Comme le montre le Tableau 4.3, l'erreur de prédiction est de 13,7%, lorsque l'épaisseur proche de la paroi n'est pas prise en compte, tandis que l'erreur est inférieure à 0,01%, si elle l'est. Le temps de séjour moyen a été approximé par le rapport du volume du domaine $\Omega = 11,36$ L (ce qui correspond au volume du maillage par éléments finis) sur le débit volumique à l'entrée, $Q=0,17$ L.s⁻¹. Le temps de séjour moyen est donc: $T_{\text{exact}} \approx 66,9$ s.

Tableau 4.3: Étude de la précision de la prédiction des temps de séjour moyens selon le δ utilisé.

	$T_{\text{exact}}(\text{s})$	$T_h(\text{s})$	% Erreur
$\delta\neq 0$	66,9	66,9	<0,01
$\delta=0$		76,1	13,7

La courbe $f(t)$ de la DTS peut aussi être tracée (Figure 4.9) pour les deux situations. Comme on peut le constater, la courbe avec $\delta\neq 0$ est plus lisse et ne présente pas d'oscillations, contrairement à celle où $\delta=0$ qui présente deux pics. Généralement, les mêmes observations avaient été tirées par rapport à l'impact du δ , dans le cas d'un écoulement de Poiseuille.

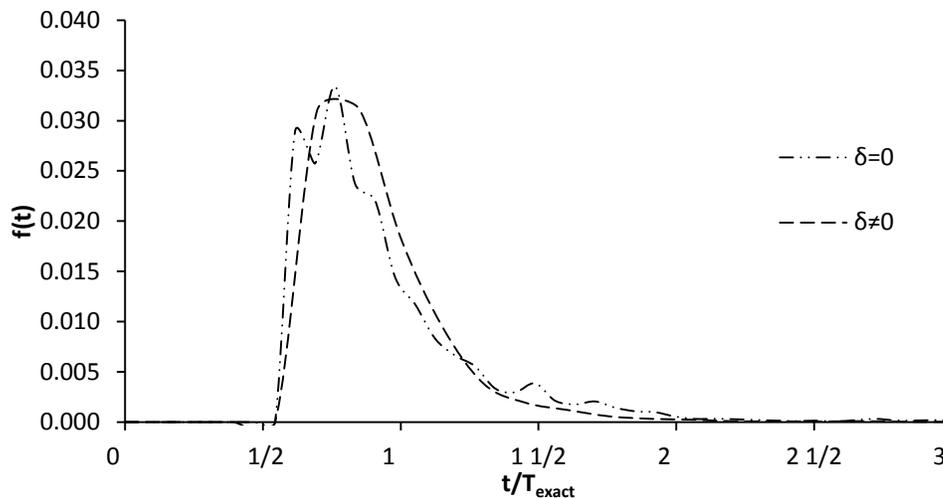


Figure 4.9: Influence du paramètre δ sur la courbe de la DTS pour un fluide newtonien dans un mélangeur statique Kenics de type RR (Olmiccia et *al.*, 2011)

4.2.3 Résultats

4.2.3.1 Impact de la pondération sur les courbes de DTS

Les courbes de la DTS peuvent être utilisées pour étudier l'impact de la pondération sur leur forme. Trois pondérations ont été testées: la pondération constante (équation (3.16)), la pondération par le débit volumique (équation (3.15)) et la pondération proposée dans ce travail (équation (3.17)). La Figure 4.10 montre que la forme de la courbe avec la pondération constante est plus proche de celle avec une pondération par le débit que de celle qui est pondérée avec l'équation (3.17). Ce résultat est assez inattendu car la pondération par un débit volumique et celle introduite ont des principes très similaires.

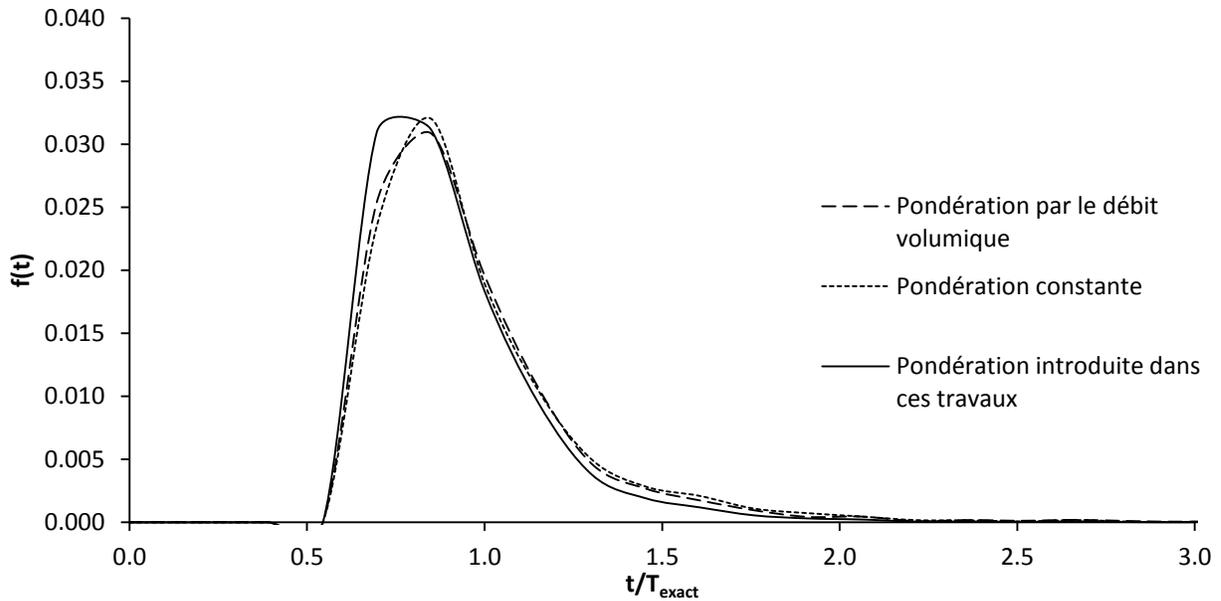


Figure 4.10: Influence du type de pondération utilisée sur les courbes $f(t)$ de la DTS pour l'écoulement d'un fluide newtonien dans un mélangeur Kenics de type RR

Les mêmes tests ont été effectués pour l'écoulement entre 2 plaques parallèles et pour un Poiseuille, et les deux courbes se superposent parfaitement (Figure 4.11). Ce résultat paraît logique vu qu'il n'y a pas de vitesse transversale dans ces cas, les trajectoires de chaque particule étant parallèles et suivant la direction de l'écoulement. Il y a donc une uniformité des débits et trajectoires.

Dans un mélangeur statique, cette différence peut s'expliquer par le fait que la vitesse n'est pas unidirectionnelle. Or, lors d'une pondération par le débit, c'est uniquement la vitesse transversale qui est prise en compte. En ce qui concerne la similarité entre les courbes avec la pondération constante et la pondération par le débit, ceci peut s'expliquer par l'enlèvement de la zone proche des parois qui diminue l'influence des vitesses proches de 0 dans le calcul des trajectoires des particules.

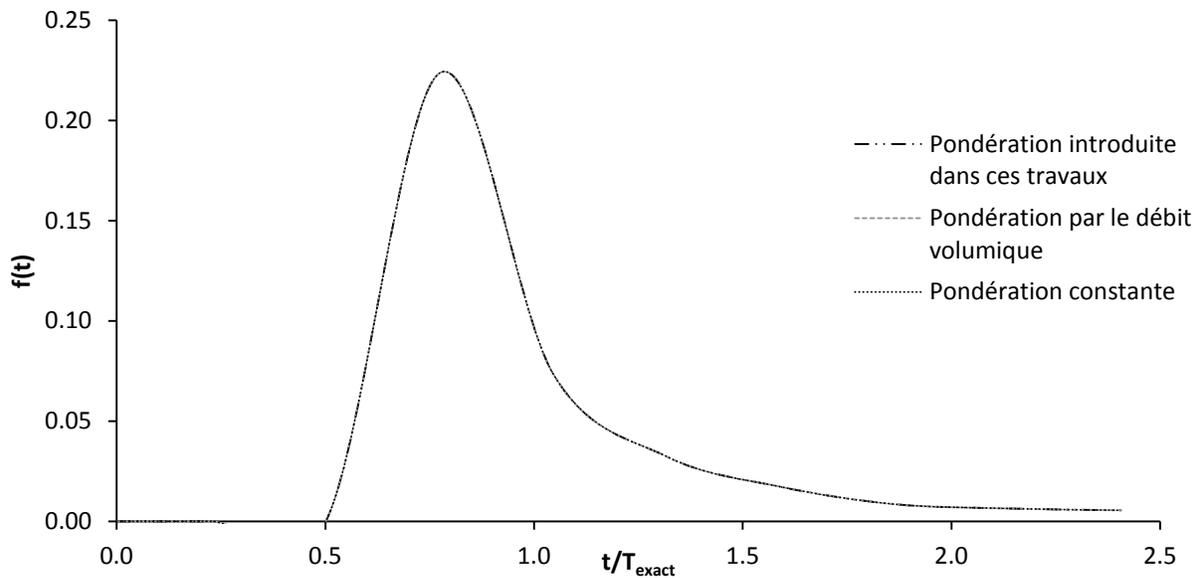


Figure 4.11: Influence du type de pondération choisie sur les courbes $f(t)$ de la DTS pour un écoulement de Poiseuille.

4.2.3.2 Influence de l'indice de loi de puissance sur la DTS

Pour étudier l'influence d'un fluide rhéofluidifiant sur la DTS, la valeur de l'indice de la loi de puissance, n , a été variée. La méthode du nombre de classes optimal et une pondération constante ont été utilisées pour obtenir les résultats dans cette partie. Les courbes cumulatives sont présentées (Figure 4.12) pour les six cas. À l'exception de la valeur du temps de séjour minimal qui est légèrement différente, aucune différence notable n'est à noter, les courbes étant presque superposées.

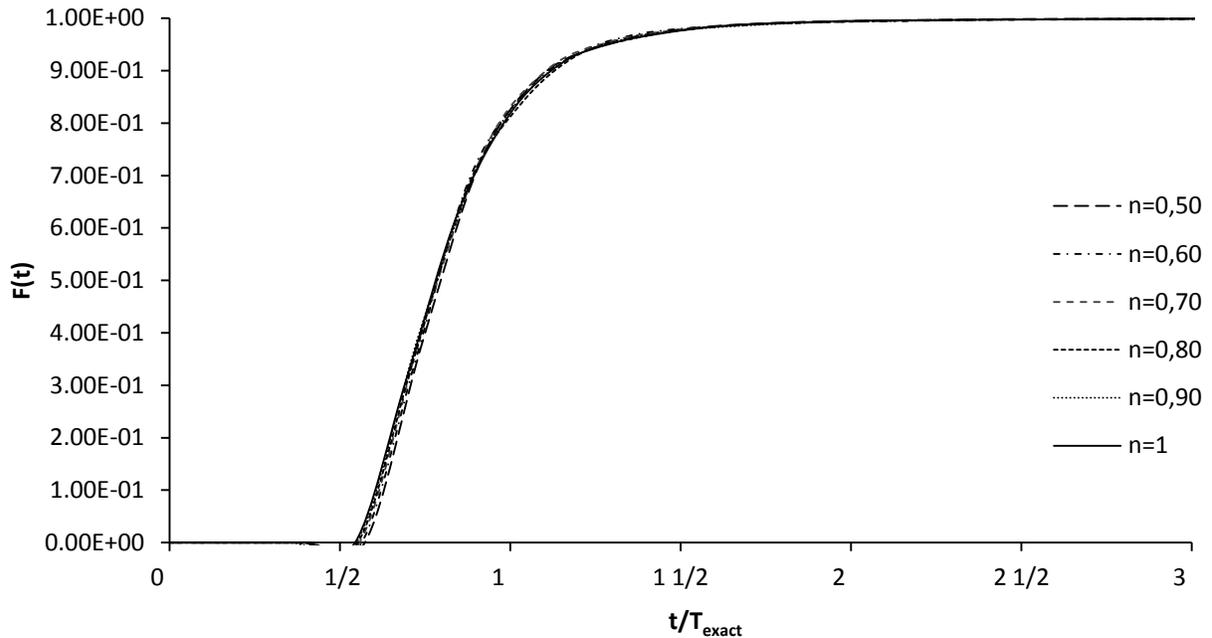


Figure 4.12: Influence de l'indice de loi de puissance sur la fonction cumulative de la DTS pour un écoulement dans un Kenics de type RR

Le temps de séjour moyen en fonction de n est présenté dans le Tableau 4.4. Peu importe l'indice de loi de puissance, l'erreur de prédiction est très faible dans les six cas (inférieure à 0,1%). Par contre, le nombre de classes varie de 40 à 189 en fonction de l'indice de loi de puissance de manière non monotone: aucune tendance ne ressort entre la rhéologie du fluide et le nombre de classes N calculé avec la méthode du N optimal.

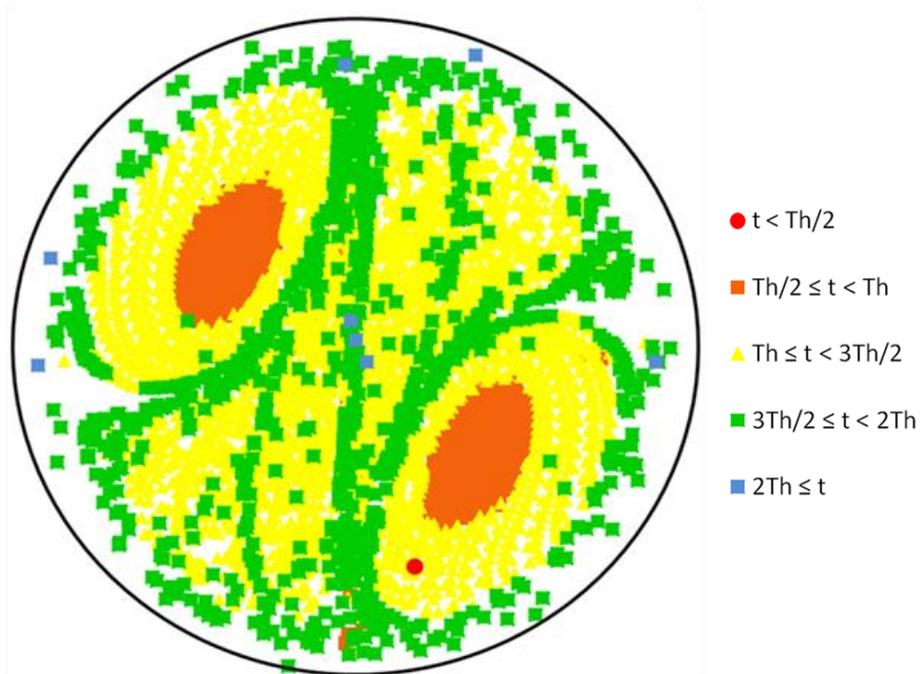
Tableau 4.4: Prédiction du temps de séjour moyen avec une valeur de N optimale pour un mélangeur Kenics de type RR

n	N	T_h (s)	T_{exact} (s)	% Erreur
1,0	189	66,9		
0,9	40	66,9		
0,8	85	66,9	66,9	$\leq 0,1$
0,7	69	67,0		
0,6	73	67,0		
0,5	60	67,0		

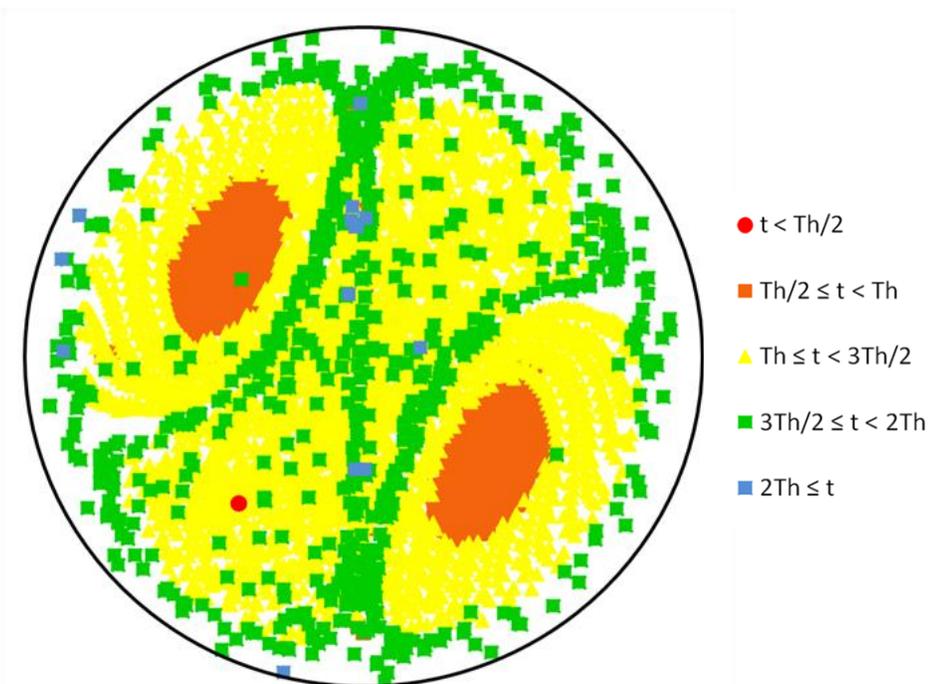
4.2.3.3 Représentation spatiale des temps de séjour

Les représentations spatiales de la DTS sur des sections Poincaré, à la sortie du mélangeur Kenics, pour un fluide newtonien et un fluide de loi de puissance d'indice $n=0,5$, sont présentées aux Figures 4.13a et b. La méthodologie utilisée est identique à celle présentée pour l'étude du Poiseuille; 5 tranches d'âge de particules ont été créées. Les deux figures (fluide newtonien et fluide non-newtonien) présentent une forte ressemblance. Dans chacun des cas, deux yeux de particules, formés par les particules âgées entre $T_h/2 \leq t < T_h$ (en orange sur la carte), sont observés. Ils sont entourés de particules dans l'intervalle $T_h \leq t < 3T_h/2$ (en jaune). La zone centrale du Kenics est composée majoritairement de particules situées dans l'intervalle $T_h \leq t < 2T_h$ (jaune et vert).

La principale différence entre le newtonien et non-newtonien est la forme et l'épaisseur des striations situées proches des parois. Dans le cas du fluide rhéofluidifiant, il semble que ces striations proches des parois soient plus longues et plus épaisses (les particules d'âge $T_h \leq t < 3T_h/2$ en jaune). Ceci laisse penser que le mélange est moins bon qu'avec un fluide newtonien. Ce qui rejoint les travaux de Galaktionov et *al.*(2003) qui avaient remarqué des résultats similaires sur un mélangeur Kenics de type RL. La seconde différence notable entre le newtonien et le non-newtonien est l'emplacement de la particule la plus rapide (le point rouge dans la région du bas). En regardant l'emplacement des 30 particules les plus rapides, elles sont majoritairement situées sur une ligne verticale au centre du cylindre. Par contre lorsque le fluide est newtonien, un plus grand nombre de ces particules les plus rapides se trouve dans le reste du domaine. Ceci rejoint les conclusions ci-dessus sur le fait que le mélange semble meilleur dans le cas d'un fluide newtonien.



a)



b)

Figure 4.13: Représentation spatiale de la DTS sur une section Poincaré pour un écoulement dans un Kenics de type RR avec un fluide: a) newtonien et b) suivant une loi de puissance d'indice $n=0,5$

Il est aussi important de remarquer que, dans les deux cas, des particules entrent dans la zone proche des parois (située entre R et $R-\delta$) contrairement à un écoulement de Poiseuille. En effet, la zone sans particules est une condition qui n'est imposée qu'à l'entrée de la géométrie et qui ne peut-être garantie sur toute la longueur, particulièrement lorsqu'un mélange a lieu.

En conclusion de ce chapitre, la méthode de la DTS introduite, qui utilise l'épaisseur proche des parois et le N optimal, a été appliquée avec succès sur une géométrie complexe. Elle a permis d'améliorer la précision des résultats en temps de séjour moyen ainsi que de diminuer le phénomène de perte de particules. Toutefois, la DTS étant basée sur un champ de vitesses associé à un maillage, ce dernier a un impact sur la précision des résultats obtenus. C'est d'autant plus le cas pour des géométries complexes car le maillage doit permettre de capter la complexité de l'écoulement et va donc influencer grandement le champ de vitesses.

CHAPITRE 5 RESULTATS SUR LA BI-VIS

Ce chapitre présente des résultats associés à la modélisation numérique de l'écoulement dans le fourreau d'une extrudeuse bi-vis. Une attention particulière est portée sur la validation de la méthodologie de génération de maillage proposée dans ce travail. Puis, des résultats de l'écoulement dans le système fourreau/bi-vis en rotation sont présentés.

5.1 Géométries et maillages

5.1.1 Détails de la géométrie et du fluide

La géométrie du système bi-vis/fourreau étudiée dans ces travaux est de dimension industrielle. Le fourreau mesure 540 mm de longueur, a un diamètre en hauteur de 85,3 mm et une entraxe de 72,35 mm. En ce qui concerne la bi-vis, la figure 5.1 montre une représentation latérale. Chaque vis comprend une zone de transport qui est composée d'éléments bi-filet, soit une double hélice enroulée autour de l'arbre. Se trouvent ensuite deux zones de compression. Elles sont toutes deux constituées d'éléments malaxeurs de type bi-lobes qui permettent d'assurer un mélange dispersif et distributif. La différence entre les deux zones est l'épaisseur des éléments. Plus un élément est épais, plus la zone de contact avec le fluide est importante ce qui permet de créer plus de cisaillement, tandis que des éléments fins favorisent plutôt une déformation du fluide et une complexification du champ de vitesses. Enfin, une autre zone de transport est présente.

L'extrudeuse bi-vis est de type interpénétrée co-rotative. C'est une des plus fréquemment rencontrées car le fluide peut aisément passer d'une vis à l'autre ce qui diminue le risque d'apparition de zones stagnantes et permet un bon mélange. La zone d'interpénétration entraîne l'élongation du fluide et les éléments de malaxage permettent de mettre la matière en expansion/compression à répétition. Pour plus de détails, le lecteur peut se référer à Vergnes & Chapet (2001).

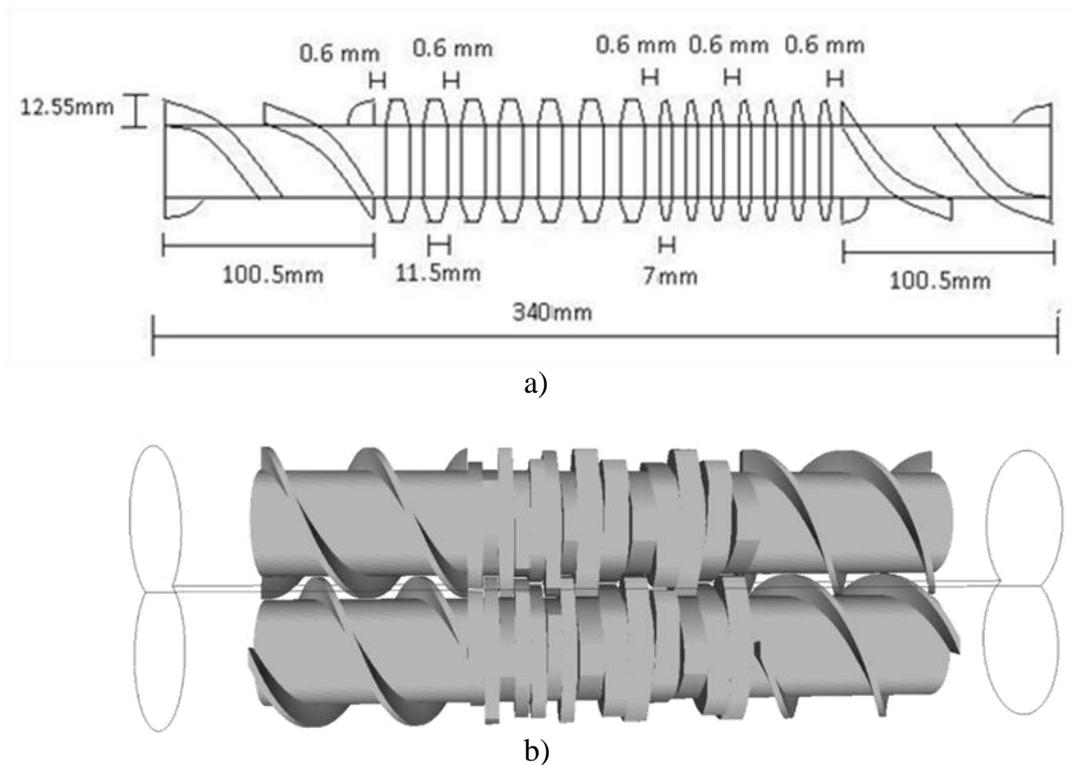


Figure 5.1: a) Représentation latérale d'une vis (tiré d'un document de la SNPE- Société Nationale des Poudres et Explosifs) b) Visualisation de la configuration de la bi-vis

Avec cette géométrie, les entrefers sont de 0,35mm entre la vis et le fourreau, et 0,3mm entre les deux vis. Les deux vis ne sont pas tout à fait centrées au niveau de la longueur du fourreau: un espace avant et après les vis a été ajouté. D'un point de vue numérique, ceci laisse de la place pour établir le profil de vitesse à l'entrée du fourreau et qu'il soit développé lorsque le fluide entre dans la vis. La zone tampon en aval de la vis permet de redévelopper le profil de vitesse pour éviter les effets de sortie (reflux de l'écoulement) et l'obtention de vitesses transversales amplifiées qui influenceraient l'écoulement.

La vis est modélisée avec le logiciel IDEAS. Elle est alors maillée afin de récupérer les points de contrôle qui décrivent la géométrie et sur lesquels la méthode des éléments finis virtuels impose les contraintes cinématiques pour les mettre en mouvement (Figure 5.1b).

5.1.2 Présentation des maillages obtenus

Le but de cette section est de vérifier que la méthodologie pour mailler donne des maillages adéquats pour la géométrie du domaine à l'étude. De plus, l'objectif est d'examiner la qualité des

maillages en analysant les régularités minimales, moyennes et maximales des éléments. Enfin, l'impact de différents critères sur la qualité des maillages générés est évalué.

5.1.2.1 Validation et amélioration des maillages

Plusieurs maillages volumiques du fourreau ont été obtenus (dont un exemple est présenté à la figure 5.2). Ils paraissent, au premier abord, fonctionnels car ils ne comportent pas de trous (tout le volume est maillé) et les éléments ne se chevauchent pas. Qui plus est, l'évaluation du volume des maillages avec les tétraèdres permet de confirmer que la géométrie est bien représentée. La valeur théorique du volume calculée avec l'équation (3.41) donne $V_{\text{fourreau}}=0,005958 \text{ m}^3$. Sur les maillages les plus grossiers, l'écart entre cette valeur et le volume du maillage tétraédrique est 0,6%. Cette légère différence provient du fait qu'une géométrie circulaire est approximée à partir d'éléments triangulaires, à arêtes droites. Il est toujours possible de réduire cet écart en diminuant Δl_θ , la composante orthoradiale, paramètre à spécifier pour créer le maillage surfacique de départ.

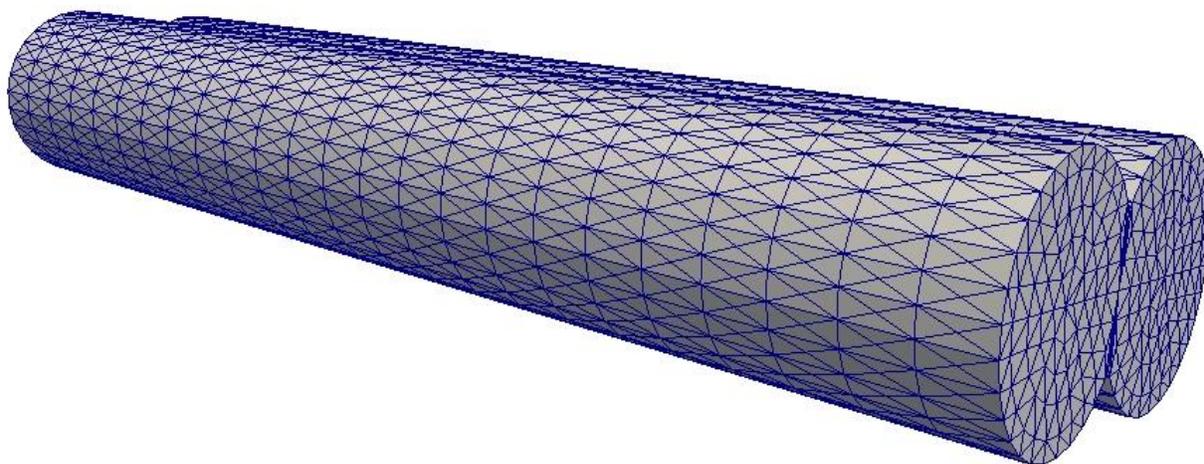


Figure 5.2: Image d'un maillage complet du fourreau

La régularité étant un paramètre permettant de qualifier un maillage, il est important de s'y attarder. En effet, il est intéressant de connaître, parmi les différents paramètres à entrer pour mailler le domaine, lesquels ont le plus d'impact sur ce critère. Pour cela, différents tests ont été effectués dont voici les principales observations.

Il est à noter que la valeur de Δl_0 n'a que très peu d'impact sur la régularité moyenne du maillage final obtenu (moins de 10% de variation pour des mêmes valeurs de Δr). La valeur de la régularité maximale est un peu plus affectée, il est donc possible de la diminuer en réglant ce paramètre mais cela reste toutefois très limité.

La régularité du maillage peut aussi être améliorée en ajoutant des points selon l'axe z, soit sur la longueur du fourreau. Par défaut, le nombre de points en z est choisi de manière à ce que chaque point soit distancé d'une longueur qui correspond à la longueur moyenne des arêtes en surface. Cet ajout de points permet de rendre le tétraèdre moins étiré en profondeur (selon l'axe z). Ce paramètre a un impact plus prononcé sur la régularité moyenne, permettant de la diminuer de plus de 50%. Par contre, le nombre de nœuds augmente rapidement allant jusqu'à être doublé, voire plus. Il ne faut cependant pas ajouter trop de points sur l'axe des z car la régularité augmente de nouveau au-delà d'un certain seuil. Les éléments qui sont alors créés sont distordus (plus aplatis) au point de bloquer la convergence du solveur itératif implanté dans le code d'éléments finis Poly3D, pour la résolution des équations de Navier-Stokes.

5.1.2.2 Comparaison des maillages obtenus en fonction des critères choisis

Dans cette partie, le but est d'étudier l'impact du choix d'un des 4 critères sur la qualité du maillage volumique final obtenu. Ces critères sont implantés dans le mailleur et présentés dans la section 3.2.2 du chapitre 3. Ils sont utilisés pour créer le maillage surfacique de manière à ce que les éléments triangulaires soient les plus réguliers possibles. Le critère n°1 est basé sur le choix du nœud qui crée l'élément le moins distordu. Le critère n°2 choisit le nœud situé le plus proche de l'arête déjà formée. Le critère n°3 permet de créer un triangle avec le plus petit angle maximal et le critère n°4 crée un triangle aux côtés les plus équilatéraux possibles. Le but est de déterminer si un des critères est meilleur que les autres afin de l'utiliser subséquentement, pour étudier l'écoulement dans le fourreau.

Pour comparer les maillages associés à chacun des 4 critères, les paramètres Δr et Δl_0 sont posés identiques dans le but de générer des maillages similaires. Avec la première version du mailleur de la surface des lunettes du fourreau, des problèmes de régularité des éléments à la jonction des lunettes ont été remarqués, et ce, peu importe le critère choisi. Le mailleur a donc été modifié pour améliorer la forme des éléments dans cette zone. En effet, les éléments surfaciques pouvant être très distordus, le maillage volumique résultant n'a pas permis la convergence du solveur

itératif de Poly3D, lors de la résolution des champs de vitesses pour certaines simulations. Pour contourner cette difficulté, des nœuds ont été ajoutés à la jonction des 2 lunettes du fourreau, ce qui n'est pas vraiment problématique car c'est une zone dans laquelle de petits entrefers sont présents (Figure 5.3).

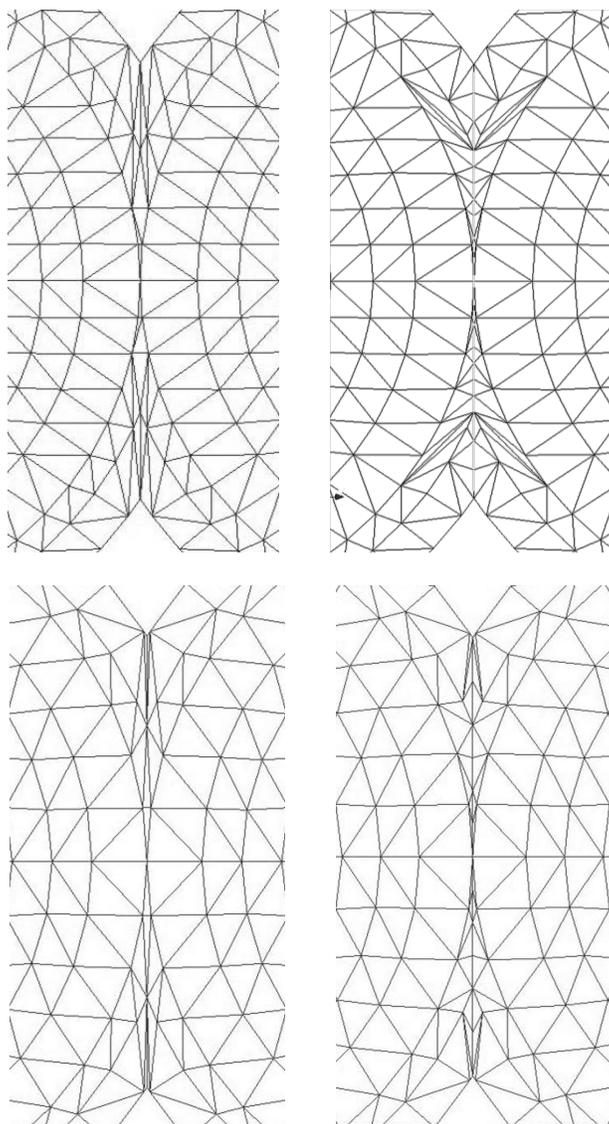


Figure 5.3: Exemples de maillage de la zone centrale avec la première (à gauche) et la seconde version (à droite) du mailleur

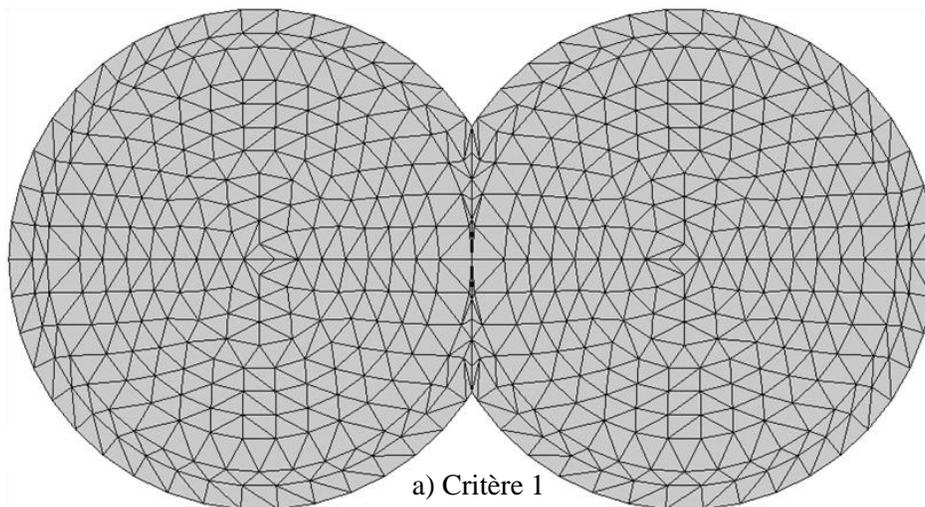
Afin de comparer les maillages, selon le critère utilisé, la régularité du maillage (dont le principe est présenté à la section 3.2.5) est étudiée. Pour chaque critère, 3 maillages ont été générés de manière à ce que le nombre de nœuds et d'éléments soient identiques d'un critère à l'autre. Le

maillage #1, le plus fin, contient 576296 éléments, le #2, 249984 éléments, le #3, le plus grossier, 110208 éléments.

Tableau 5.1: Comparaison des régularités obtenues en fonction du critère utilisé pour plusieurs maillages

		Critère 1	Critère 2	Critère 3	Critère 4
Maillage #1	Régularité minimale	1,5	1,5	1,4	1,5
	Régularité maximale	490	490	460	490
	Régularité moyenne	21	21	20	21
Maillage #2	Régularité minimale	1,7	1,7	1,7	1,7
	Régularité maximale	210	210	210	210
	Régularité moyenne	19	19	19	19
Maillage #3	Régularité minimale	1,6	1,6	1,6	1,6
	Régularité maximale	92	110	110	110
	Régularité moyenne	18	18	18	18

Le tableau 5.1 montre que le choix du critère n'a que peu d'impact sur les régularités des maillages volumiques qui sont quasi-identiques. En fait, en s'attardant sur les images des maillages surfaciques (Figure 5.4), quelques différences sont à noter. Celles-ci portent sur la forme des éléments situés principalement à la jonction entre les deux lunettes et au centre de chaque lunette. Cependant, celles-ci sont très légères et n'affectent peu ou pas la structure globale et la régularité. Les maillages obtenus sont très similaires, comme le montre la comparaison des Figures 5.4a, b, c et d, dans lesquelles sont encerclées les différences notables par rapport au maillage du critère 1.



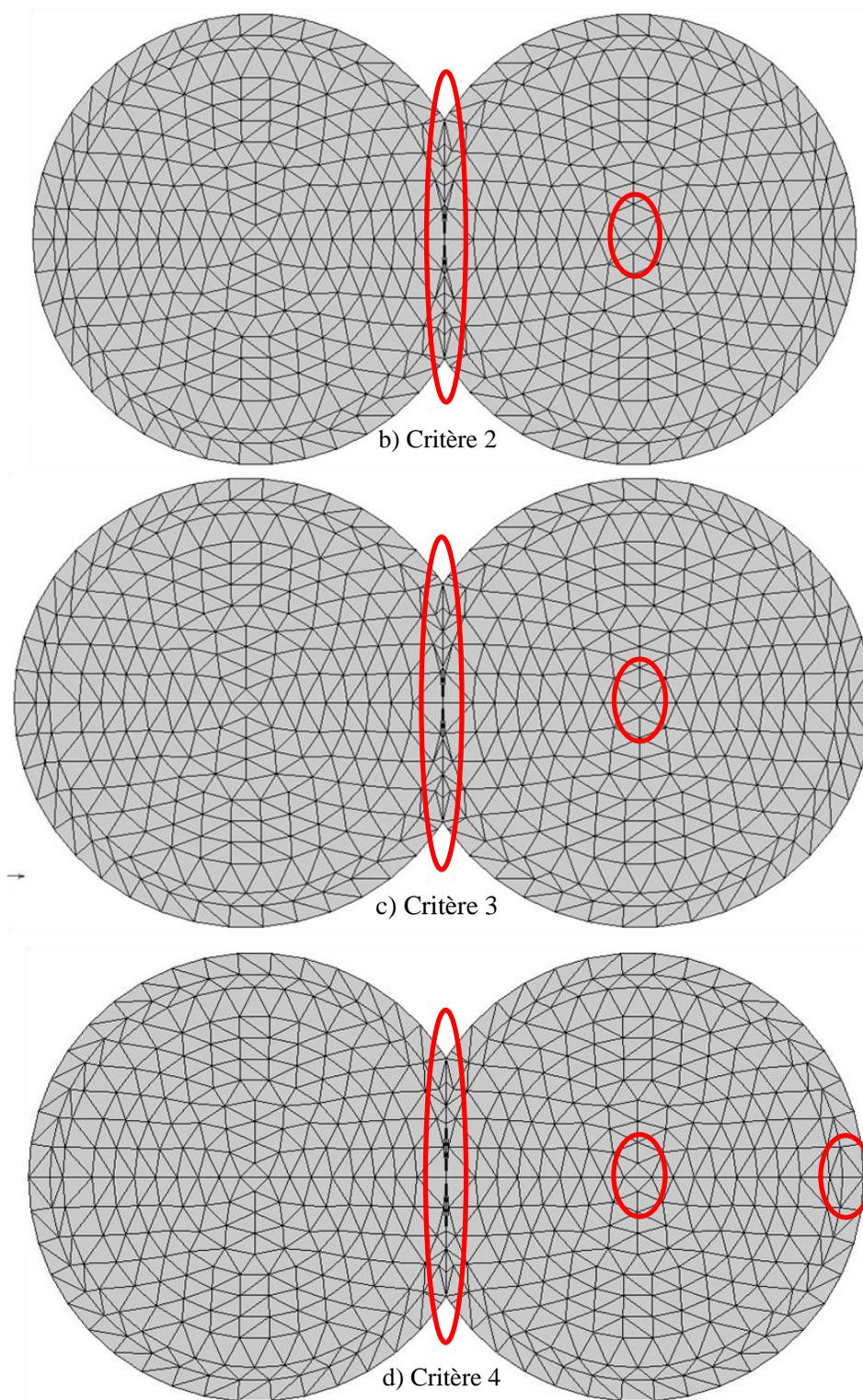


Figure 5.4: Comparaison visuelle entre les maillages surfaciques générés par les 4 critères par rapport au maillage #1

Le fait d'obtenir des maillages surfaciques très proches n'est pas étonnant en soi. En effet, dans la méthodologie pour mailler, quand le critère intervient, il s'agit de sélectionner un nœud pour compléter le triangle et ce choix s'effectue entre 2 nœuds, seulement. Pour chaque critère, les éléments sont traités un par un et non de manière globale, donc la méthode ne permet pas d'obtenir un maillage optimal ayant la plus basse régularité. De plus, l'ajout du critère de sécurité (cf. section 3.2.2), qui évite d'avoir des nœuds dans un élément, ajoute une restriction supplémentaire dans la création de l'élément. Enfin, les principes des critères 1, 3 et 4 se recoupent, vu qu'il s'agit indirectement d'obtenir des éléments équilatéraux. Pour le critère 2, soit le choix du nœud le plus proche, il rejoint le principe de la condition de sécurité ajoutée qui évite que 2 éléments se recoupent. Ce dernier a donc été mis de côté pour les simulations suivantes. C'est le critère 1, celui qui crée l'élément le moins distordu, qui a été retenu car il offre une meilleure fiabilité pour créer un meilleur maillage, en comparaison des critères 3 et 4 qui, respectivement, ne travaillent directement que sur les angles et les longueurs des arêtes. Visuellement, la Figure 5.5 montrent les éléments surfaciques des maillages #2 et #3.

En examinant les Figures 5.5 a) et b), des éléments distordus apparaissent à la jonction des deux lunettes. Il est important de noter que cette région est maillée de manière similaire avec les autres critères. Avec la méthodologie utilisée pour mailler cette géométrie, la jonction est une partie difficile à mailler car deux cercles se rejoignent. Il aurait toutefois été difficile de mailler différemment car le maillage surfacique au complet est obtenu par symétrie à partir du maillage d'un quart de la géométrie. L'ajout de plus de nœuds sur le maillage surfacique semble une idée intéressante. Toutefois, en ajoutant des nœuds, des éléments triangulaires plus petits sont formés. Or, lorsque ceux-ci sont extrudés pour former des tétraèdres, ils ont une forme beaucoup plus étirée, la position du quatrième nœud en z étant standard pour tous les éléments surfaciques.

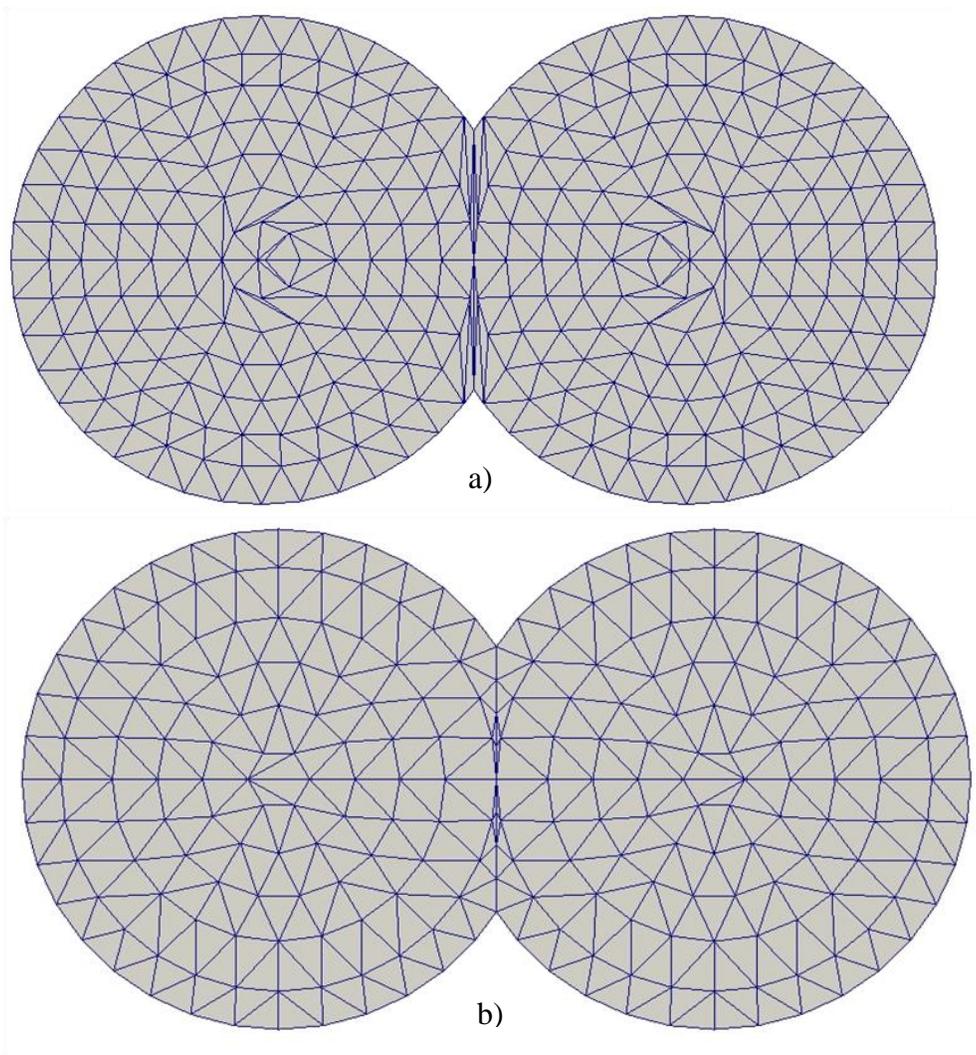


Figure 5.5: Visualisation des maillages surfaciques obtenus avec le critère 1 pour les maillages a) #2 et b) #3.

Le premier test effectué pour vérifier les maillages obtenus est de les appliquer sur une géométrie pour laquelle la solution analytique est connue. Le cas classique est l'étude par modélisation numérique de l'écoulement dans une conduite circulaire. Le but est de vérifier que, lorsque la taille de maille diminue, les résultats convergent vers la solution théorique en vitesse et en perte de charge. Les résultats, non montrés ici, étant satisfaisants, le bon fonctionnement de la méthodologie de génération du maillage volumique a pu être démontré. Par contre, la géométrie surfacique du fourreau n'étant pas la même, le positionnement des nœuds sur la surface diffère légèrement et, par conséquent, les résultats obtenus avec notre mailleur sur un fourreau restent à vérifier.

5.2 Validation du maillage du fourreau: écoulement sans vis

Vu qu'il a été démontré que les maillages générés étaient fonctionnels, il s'agit de les utiliser pour l'étude de la dynamique des fluides appliquée au maillage du fourreau. Avant de faire des simulations pour le système fourreau et vis en mouvement, l'écoulement dans le fourreau seul est étudié. Le but est de vérifier qu'il est possible d'obtenir des résultats satisfaisants avec des maillages obtenus grâce à notre mailleur.

5.2.1 Résultats en vitesse et pression

Des simulations ont été réalisées, avec l'élément MINI, pour cinq tailles de mailles différentes et les résultats sont ensuite comparés avec ceux des simulations obtenues pour des maillages Gambit. La taille des cinq maillages Gambit a été choisie de manière à avoir des tailles de maille moyennes similaires à celles issues du mailleur développé, dans le cadre de ce travail. Les détails des différents maillages sont présentés dans le Tableau 5.2. Toutes les simulations ont été effectuées avec le logiciel Poly3D, même lorsque le mailleur Gambit a été utilisé.

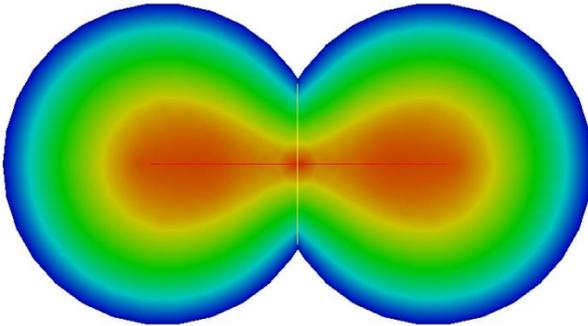
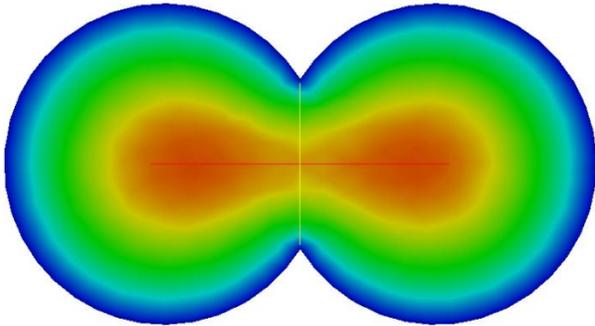
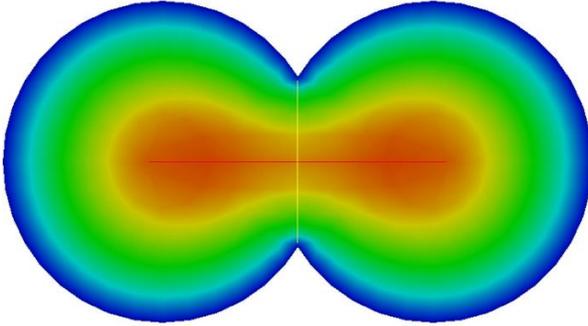
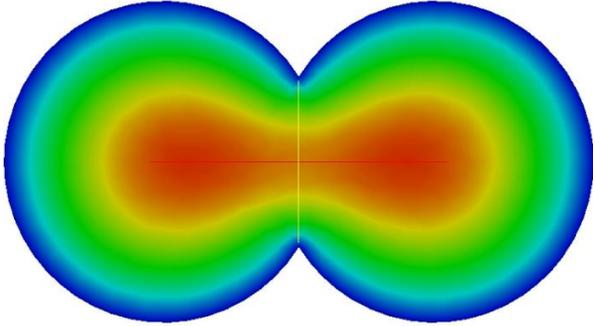
Tableau 5.2: Comparaison des différents paramètres des maillages selon le mailleur utilisé

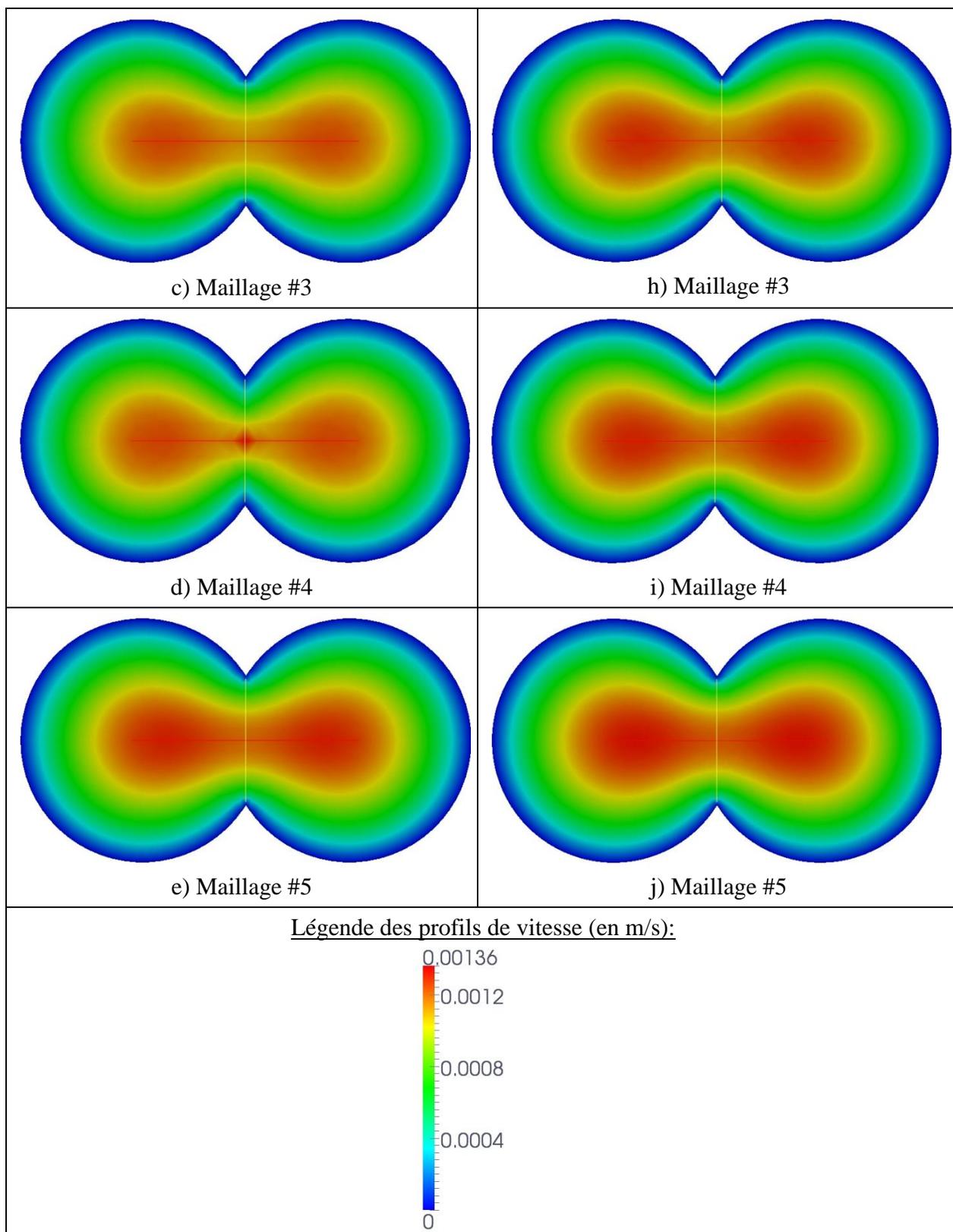
Maillage	Paramètres	Maillages issus de notre mailleur			Maillages issus de Gambit		
#1	Nombre d'éléments	95312			87232		
	h (en mm) minimale/ moyenne/ maximale	2,08	3,96	5,97	2,21	4,08	5,91
	Régularités minimale/ moyenne/ maximale	1,7	20	170	1	2,3	7,3
#2	Nombre d'éléments	170912			180834		
	h (en mm) minimale/ moyenne/ maximale	1,28	3,26	4,86	1,70	3,20	4,50
	Régularités minimale/ moyenne/ maximale	1,7	21	400	1	2,4	7,0
#3	Nombre d'éléments	250880			244823		
	h (en mm) minimale/ moyenne/ maximale	1,18	2,87	4,01	1,52	2,90	3,98
	Régularités minimale/ moyenne/ maximale	1,6	19	350	1	2,4	7,1
#4	Nombre d'éléments	327488			355957		
	h (en mm) minimale/ moyenne/ maximale	1,43	2,63	3,90	1,38	2,56	3,66
	Régularités minimale/ moyenne/ maximale	1,7	20,0	490,0	1	2,4	7,2
#5	Nombre d'éléments	1038800			993517		
	h (en mm) minimale/ moyenne/ maximale	0,51	1,79	2,68	0,82	1,82	2,58
	Régularités minimale/ moyenne/ maximale	1,7	23	350	1	2,4	7,3

Les simulations effectuées à partir des cinq maillages issus de notre mailleur ont convergé. Les profils de la norme de la vitesse obtenus sur un plan (au centre de la géométrie) (Tableau 5.3 a) à

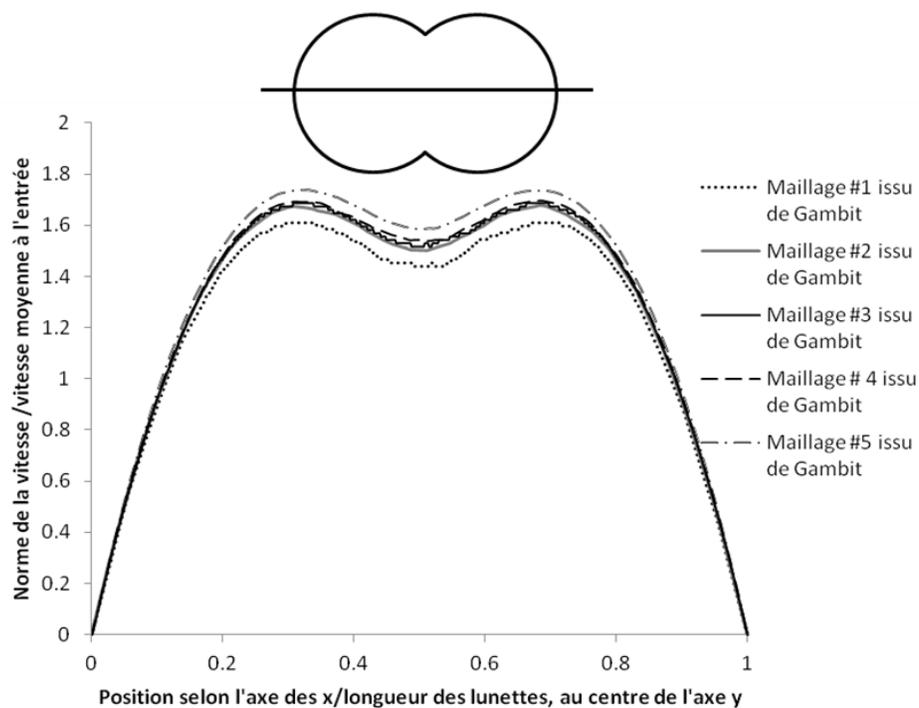
e)) sont logiques puisque les vitesses maximales sont situées au centre des lunettes du fourreau, et les différentes couches de vitesse épousent la géométrie des parois de celui-ci. Entre le maillage le plus grossier et celui le plus fin, l'épaisseur de la zone où les vitesses sont les plus grandes augmente. Les résultats sur les profils de vitesses recourent ceux obtenus avec des maillages Gambit (Tableau 5.3 f) à j)). Globalement, les couches de vitesse sont similaires et leurs épaisseurs semblent identiques. Les légères différences entre les profils obtenus via Gambit et notre mailleur portent sur les intensités des vitesses. La zone dans laquelle les vitesses sont les plus élevées est beaucoup moins marquée avec les maillages issus de notre mailleur. La vitesse maximale sur ces 5 coupes est légèrement en-dessous de celle obtenue avec un maillage Gambit équivalent.

Tableau 5.3: Comparaison des profils de vitesses au centre de la géométrie pour différents maillages (en ordre croissant) obtenus avec Gambit et avec notre mailleur (selon la numérotation des maillages du Tableau 5.2)

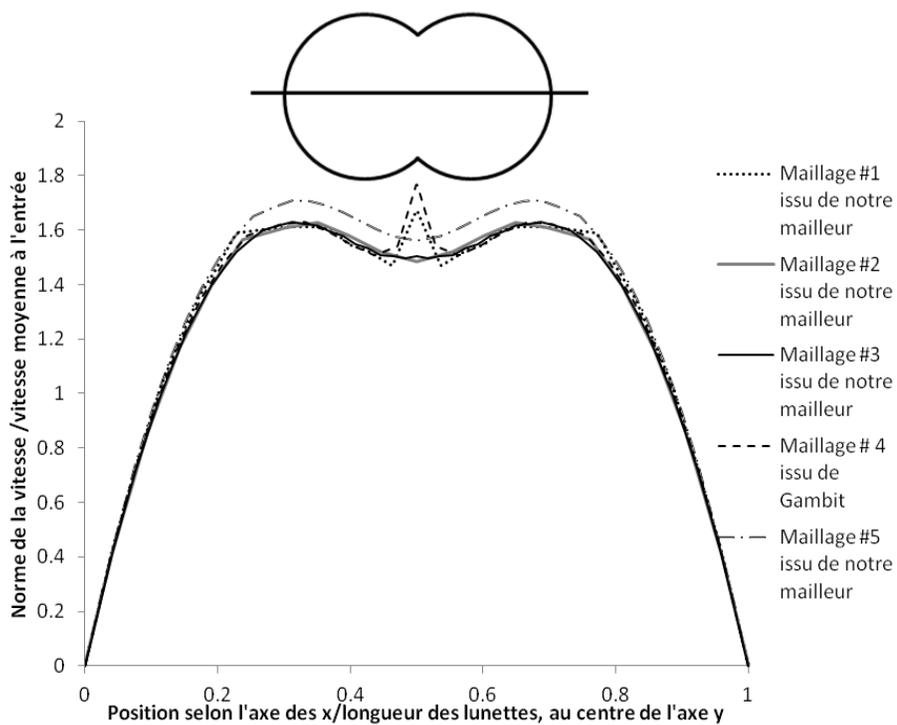
Profils de vitesse obtenus avec des maillages issus de notre mailleur	Profils de vitesse obtenus avec des maillages Gambit
 <p data-bbox="402 1465 591 1499">a) Maillage #1</p>	 <p data-bbox="1029 1465 1218 1499">f) Maillage #1</p>
 <p data-bbox="402 1862 591 1896">b) Maillage #2</p>	 <p data-bbox="1029 1862 1218 1896">g) Maillage #2</p>



Il est à noter que les profils a et d du Tableau 5.3 (avec les maillages issus de notre mailleur) présentent une zone de vitesse à forte intensité à la jonction des deux lunettes et, à cet endroit, la forme des lignes des couches de vitesse est un peu plus creuse en comparaison des autres coupes. Cette intensité à la jonction n'est pas observée sur d'autres coupes. Afin de pouvoir quantifier ces différences, la norme de la vitesse a été tracée sur l'axe horizontal au centre des lunettes du fourreau (au milieu de la longueur d'écoulement), pour tous les maillages (Figure 5.6). Sur cette figure, la zone de vitesses à forte intensité, remarquée à la jonction pour les maillages #1 et #4 issus de notre mailleur, apparaît clairement. L'écart à cet endroit avec les maillages Gambit équivalents est de 17% pour le maillage #1 et de 15% pour le maillage #4. Pour les autres maillages, les formes des courbes de vitesses sont identiques. Pour les maillages Gambit, la convergence de la vitesse est beaucoup plus monotone, tandis que pour les maillages issus de notre mailleur, seul le plus fin (le #5) se détache légèrement des autres courbes. En ce qui concerne la sous-évaluation des vitesses maximales avec les maillages générés par notre mailleur, l'écart par rapport au maillage Gambit équivalent est de 3% pour les maillages #2 et #3 et de 1,5% pour le #5.



a)



b)

Figure 5.6: Norme de la vitesse sur l'axe horizontal au centre des lunettes du fourreau (tel que représenté au dessus des graphiques) pour les maillages a) issus de Gambit et b) issus de notre mailleur

La raison de cet écart sur la vitesse maximale peut s'expliquer par le fait que les maillages issus de notre mailleur ne possèdent pas de nœud au centre de chaque lunette (cf. Figure 5.4). Ceci empêche de capter la vitesse maximale qui se trouve à cet endroit. La présence de ce nœud au centre de chaque lunette du fourreau implique une différente façon de mailler cette région, conduisant à la création d'éléments distordus.

Le pic de vitesse, qui apparait à la jonction des lunettes des maillages #1 et #4 de notre mailleur, peut s'expliquer par la présence d'éléments étirés (cf. Figure 5.7), dans cette région. Dans les 2 cas, ces irrégularités ont entraîné une légère augmentation du nombre d'itérations primales, requis par Poly3D pour faire converger les résultats, par rapport aux simulations effectuées à partir de maillages Gambit équivalents qui sont plus réguliers (cf. Figure 5.8). Ceci n'a, toutefois, pas eu un impact significatif sur les temps de calcul car, le cas étant stationnaire, les temps de simulations étaient très courts.

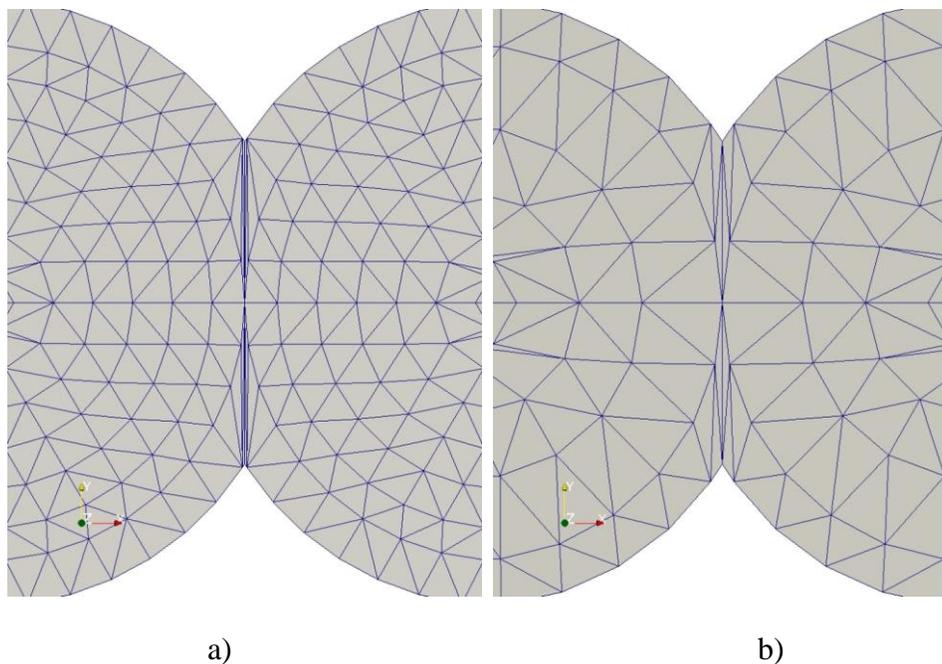


Figure 5.7: Zoom sur les éléments centraux des maillages a) #4 ($h=2,63$ mm) et b) #1 ($h=3,96$ mm)

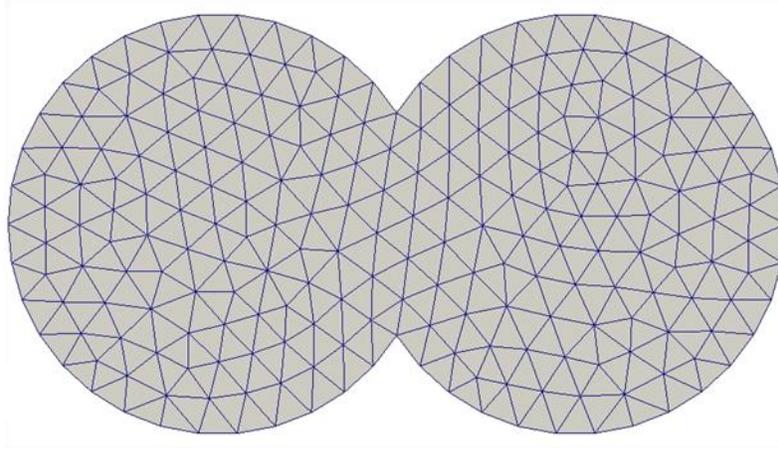


Figure 5.8: Visualisation d'un maillage surfacique Gambit utilisé (Maillage #1)

La vitesse moyenne sur le plan d'entrée obtenue numériquement est aussi un moyen d'étudier la qualité des résultats. Dans ce cas-ci, la valeur théorique est connue, vu que c'est une condition limite imposée. Elle est de $7,65 \cdot 10^{-3}$ m/s. Les résultats, pour les cinq maillages issus de notre mailleur, montrent une faible erreur, inférieure à 14%. De plus, ils convergent, de façon non monotone vers la valeur théorique lorsque le maillage est raffiné (Figure 5.9). Ceci sera expliqué plus tard. La comparaison des résultats obtenus à partir de maillages issus de notre mailleur et de ceux issus de Gambit montre le même niveau d'erreur pour le maillage le plus fin et le plus grossier. Par contre, globalement, les vitesses moyennes sur le plan d'entrée, lorsque le maillage est créé avec notre mailleur, sont légèrement sous-estimées comparativement à celles obtenues en utilisant un maillage Gambit. Ceci coïncide avec le fait que la valeur de la vitesse maximale sur le plan est aussi inférieure, lorsqu'un maillage généré avec notre mailleur est utilisé.

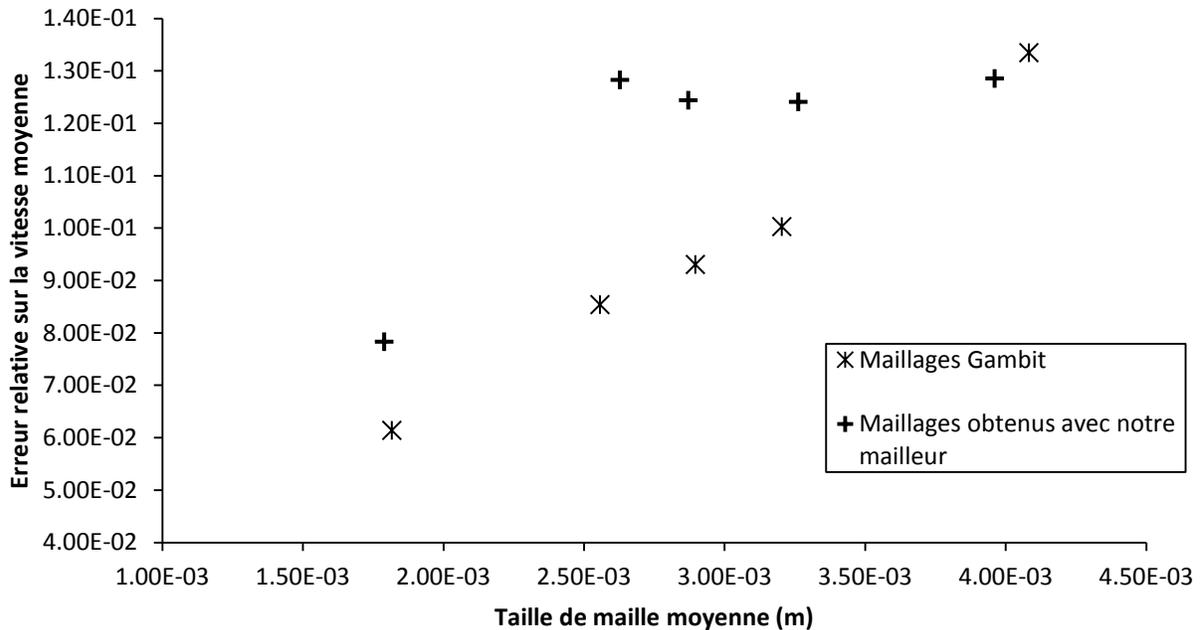


Figure 5.9: Graphique représentant l'erreur sur la vitesse moyenne sur le plan d'entrée en fonction de la taille de maille et du mailleur utilisé

Le champ de pression est également une variable-clé dans l'étude de la qualité des résultats d'écoulement. Il est possible de regarder la perte de charge dans le fourreau (ΔP). La valeur théorique n'étant pas connue, il n'est pas possible de quantifier l'erreur. Par contre, afin de vérifier les résultats obtenus, ils ont été comparés à des simulations faites sur le logiciel Poly3D en utilisant l'élément linéaire $P1^+-P0$, avec les maillages issus des 2 mailleurs. C'est un élément à pression discontinue qui, contrairement à l'élément MINI, conserve la masse localement. Par la suite, l'ensemble des pertes de charge sont comparées à la valeur obtenue avec l'élément fini $P2^+-P1$, pour un des maillages Gambit les plus fins. Cet élément est plus précis en vitesse et en pression (car il est quadratique) et c'est pour cela que la perte de charge obtenue avec cet élément est considérée comme la valeur de référence ($\Delta P = 700\text{Pa}$). Un écart relatif, $\epsilon_{\Delta P}$, peut alors être calculé entre cette valeur de référence et la perte de charge des différentes simulations.

Tableau 5.4: Comparaison des écarts relatifs $\epsilon_{\Delta P}$ sur la perte de charge en fonction du maillage utilisé, de la taille de maille et de l'élément fini utilisé (MINI ou P1⁺-P0)

Écart Relatifs sur la perte de charge $\epsilon_{\Delta P}$				
Maillage	Maillage Gambit / élément MINI	Maillage Gambit / élément P1 ⁺ -P0	Maillage obtenu avec notre maillage / élément MINI	Maillage obtenu avec notre maillage / élément P1 ⁺ -P0
#1	0,13	0,03	0,14	0,24
#2	0,09	0,01	0,02	0,25
#3	0,08	0,02	0,17	0,24
#4	0,08	0,01	0,13	0,22
#5	0,05	0,01	0,10	0,15

Le Tableau 5.4 présente les résultats de convergence de la perte de charge. Pour les 4 cas de simulations, lorsque la taille de maille moyenne diminue, l'écart relatif sur la perte de charge se réduit et les valeurs ont tendance à se rapprocher les unes des autres. La valeur de référence ayant été obtenue à partir de simulations faites avec un maillage Gambit, il apparaît normal que les simulations avec ces maillages aient des écarts relatifs plus faibles et cela, d'autant plus, avec l'utilisation d'un élément plus précis (P1⁺-P0) que MINI. En outre, sachant qu'il a été observé que les vitesses sont sous-évaluées avec le maillage maison, il n'est pas étonnant d'avoir des valeurs de perte de charge plus éloignées de la valeur de référence, étant donné que la résolution du champ de pression est dépendante du champ de vitesses et que l'erreur sur la pression est plus importante que l'erreur sur la vitesse.

La convergence de ΔP , lorsque nos maillages sont utilisés, n'est pas monotone. En effet, le ΔP , pour le maillage le plus grossier, est plus proche de la valeur de référence que les 2 maillages moins grossiers suivants. Cela peut s'expliquer par le fait que le premier présente des éléments distordus (Figure 5.7), ce qui peut créer une erreur plus importante sur le profil de vitesse et donc surestimer la pression.

La non-monotonie de la convergence des résultats, à la fois en vitesse et en pression, quand des maillages issus de notre mailleur sont utilisés, peut trouver sa raison dans le fait que les maillages sont plus irréguliers que pour ceux obtenus avec Gambit (Tableau 5.2). En effet, l'écart entre la taille de maille maximale et minimale est plus important, pour les 5 maillages, en comparaison avec les maillages équivalents Gambit. De plus, lorsque le maillage est raffiné avec le mailleur maison, différentes familles régulières d'éléments finis sont obtenues, les maillages sont topologiquement différents, ce qui n'est pas le cas avec Gambit.

5.2.2 Observations sur les maillages issus de notre mailleur

Les différences entre les résultats pour une même taille de maille moyenne mais issus de 2 mailleurs différents peuvent s'expliquer par le fait que la régularité moyenne du maillage est moins bonne avec notre mailleur (Tableau 5.2), ce qui peut créer localement des erreurs d'approximation comme, par exemple, à la jonction des deux lunettes.

Pour les profils de vitesse, la disposition des éléments surfaciques de manière parallèle à la paroi du fourreau fait en sorte que la zone d'influence de la paroi solide est très dépendante de la taille des éléments. En effet, lorsque les éléments sont plus petits, la zone où la vitesse est nulle (proche des parois) est plus petite et donc mieux approximée, ce qui tend à faire converger les résultats vers la vitesse moyenne imposée à l'entrée. Une solution à ce problème, en plus du raffinement, est le raffinement local du maillage dans la région proche des parois.

Avec notre mailleur, trois maillages raffinés localement ont été générés (les 5 précédents ne l'étaient pas). Comme le montre la Figure 5.10, la figure b) contient plus d'éléments surfaciques dans la région proche des parois que la figure a). Les résultats obtenus avec l'élément MINI, pour la vitesse moyenne à l'entrée (Figure 5.11) et pour la perte de charge (Figure 5.12), ont été comparés avec les résultats obtenus avec les maillages non raffinés localement présentés auparavant. Les résultats obtenus en utilisant les maillages raffinés localement sont améliorés. La zone d'écoulement est mieux approximée, ce qui permet d'améliorer la vitesse moyenne sur une coupe et le ΔP . Pour une taille de maille moyenne équivalente aux maillages les plus fins non raffinés localement, l'erreur sur la vitesse moyenne à l'entrée est de 5%, ce qui est mieux que celle générée avec le maillage le plus fin de Gambit (le maillage #5) (Figure 5.11). Les résultats en pression sont, aussi en général, plus proches de ceux obtenus avec les maillages les plus fins de Gambit, comme le montre la Figure 5.12. La même valeur de perte de charge est d'ailleurs

prédite avec l'utilisation du maillage raffinés localement le plus fin et du plus fin généré par Gambit, qui ont tous 2 la même taille de maille moyenne.

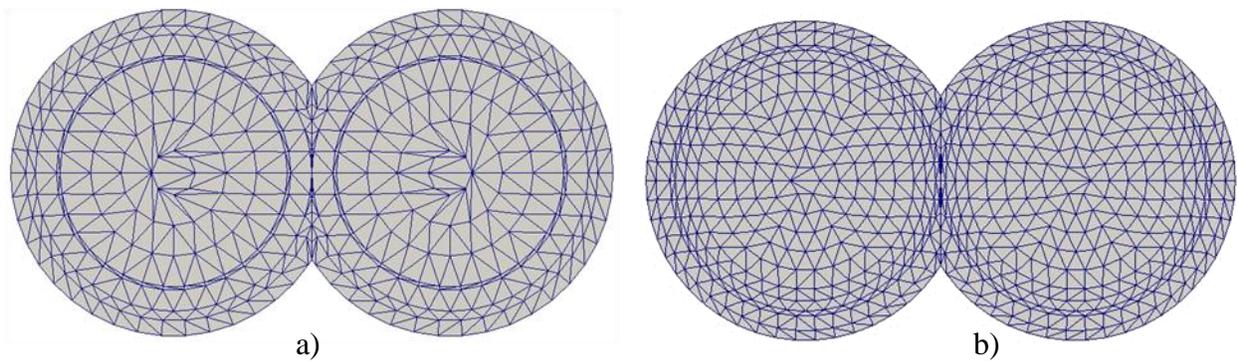


Figure 5.10: Maillages surfaciques raffinés localement: a) le plus grossier b) le plus fin

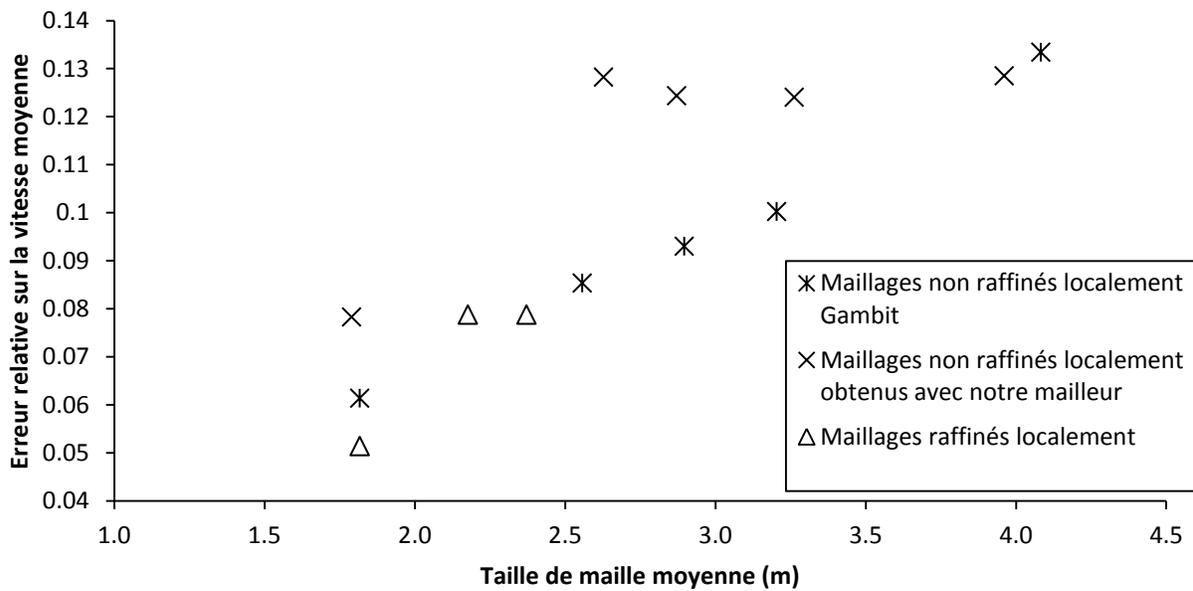


Figure 5.11: Comparaison des erreurs relatives sur la vitesse moyenne à l'entrée entre des maillages raffinés localement et des maillages réguliers issus de Gambit et de notre mailleur pour l'élément MINI.

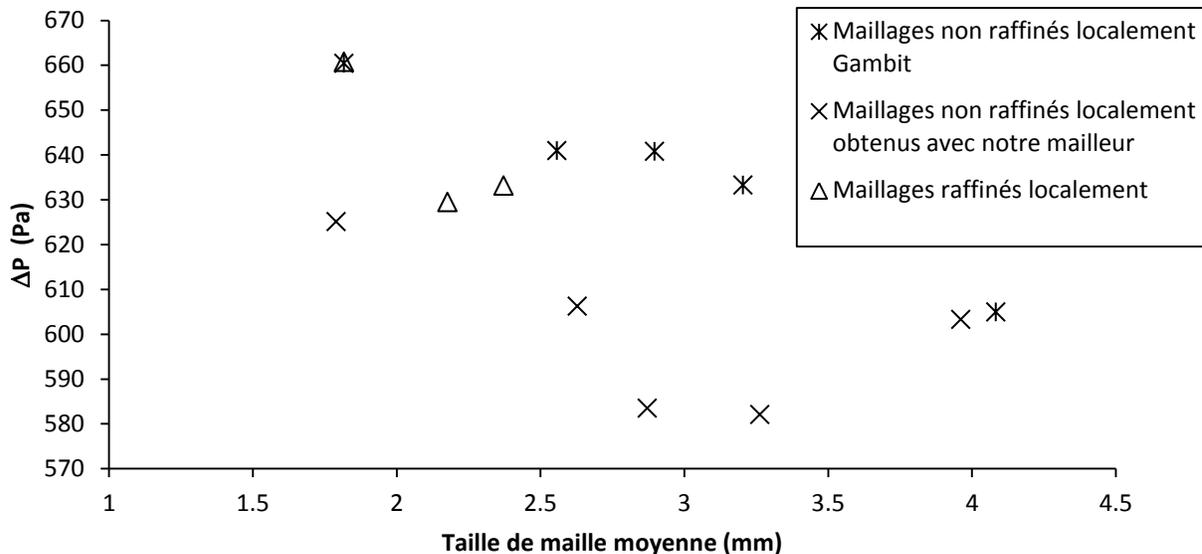


Figure 5.12: Comparaison des ΔP entre des maillages raffinés localement et des maillages réguliers générés par Gambit et par notre mailleur pour des simulations avec l'élément MINI.

Pour conclure, notre mailleur donne des résultats sensiblement proches de ceux de Gambit. Il est tout de même important de mentionner qu'avec cette technique de génération de maillage, il faut raffiner davantage pour avoir les résultats ayant une précision comparable à celle obtenue avec des maillages Gambit. Il est aussi possible de raffiner localement le maillage pour améliorer les approximations. Les résultats obtenus avec l'élément MINI restent assez proches de ceux obtenus avec l'élément $P1^+-P0$ (environ 5% de différence pour les pertes de charges, cf. Tableau 5.4). Pour cette raison, les simulations subséquentes ont été effectuées avec l'élément MINI afin de réduire les temps de calculs.

5.3 Écoulement dans un système fourreau et vis fixes

Après l'étude de l'écoulement dans un fourreau, la prochaine étape consiste à étudier l'écoulement dans celui-ci avec des vis qui ne sont pas en mouvement. Ceci permet de complexifier légèrement le cas à l'étude, sans alourdir de beaucoup les temps de calculs, car le problème se résout en régime stationnaire. De plus, l'ajout des vis permet d'introduire la méthode des domaines fictifs et donc d'investiguer l'impact du nombre de points de contrôle qui représentent les vis sur la qualité de la solution.

Des premières simulations ont été faites et ont mis en évidence le développement d'un écoulement axial dans la partie solide des vis. Ceci est dû au volume relativement important des

vis par rapport à celui du fourreau. En effet, les éléments du maillage du fourreau, qui se situent au niveau de l'emplacement de vis, ne possèdent pas de points de contrôle. Les conditions de cinématique de la vis ne sont pas appliquées, les équations sont résolues. Pour contourner ce problème, des points de contrôle ont été rajoutés dans tout le volume de la géométrie. Des tentatives pour éviter le fourreau à l'emplacement des arbres de la vis ont été essayées, mais la convergence des solveurs n'a pu être atteinte. Une étude plus approfondie pour en expliquer les raisons serait nécessaire.

Pour les simulations, le nombre de points de contrôle imposé oscillait entre 70% et 80% du nombre total, selon la taille du maillage du fourreau. Ceci montre que le nombre de points de contrôle est relativement bien adapté par rapport aux tailles des maillages de celui-ci.

Les maillages du fourreau utilisés dans cette étude correspondent aux 3 maillages les plus fins issus de Gambit et de notre mailleur (le #3, #4, #5 présentés dans le Tableau 5.2). À ceux-ci, 4 maillages raffiné localement issus de notre mailleur ont été ajoutés. Les simulations ont été faites avec l'élément MINI. Les détails des maillages sont présentés au Tableau 5.5. Les maillages raffinés localement sont tous identiques dans la zone située dans l'arbre de la vis et le maillage raffiné localement le plus grossier a été construit de manière à mettre le même nombre d'éléments sur la surface entre l'arbre des vis et la paroi du fourreau que le maillage le plus fin de notre mailleur.

Tableau 5.5: Détails des maillages étudiés

	Nom des maillages	Nombre d'éléments	Taille de maille moyenne (mm)	Nombre d'éléments dans la zone entre l'arbre et la paroi	Nombre d'équations en fluide
Maillages raffinés localement	MRL #1	4,45E+05	2,37	3,5	3,76E+05
	MRL #2	5,76E+05	2,18	4,5	4,88E+05
	MRL #3	9,92E+05	1,82	5	1,13E+06
	MRL #4 (avec 3 zones de raffinement)	2,57E+06	1,32	13 dont 2 dans les entrefers minimaux	2,19E+06
Maillages non raffinés localement issus de notre mailleur	MNRL#1	2,51E+05	2,87	1,5	2,11E+05
	MNRL#2	3,27E+05	2,63	2,5	2,75E+05
	MNRL#3	1,04E+06	1,79	3,5	8,80E+05
Maillages non raffinés localement issus de Gambit	MG#1	2,45E+05	2,90	NA	1,54E+05
	MG#2	3,56E+05	2,56	NA	2,26E+05
	MG#3	9,94E+05	1,82	NA	6,40E+05

Pour le maillage raffiné localement le plus fin, une coupe transversale du champ de vitesses typiquement rencontré dans ce genre de géométrie est présentée à la Figure 5.13. On peut observer que l'ajout des vis crée des zones d'accélération dans les entrefers du fait de la conservation de la masse dans le système. Cette coupe met aussi en relief la non-uniformité de l'écoulement et l'éparpillement des zones d'accélération dans l'entrefer. Ceci est dû à la complexité de la géométrie des vis qui jouent le rôle, dans ce cas, d'un mélangeur statique; elles permettent de diviser et rediriger l'écoulement. Il est aussi possible de voir que la zone d'influence de la condition de non glissement, appliquée sur la paroi solide du fourreau, est assez petite.

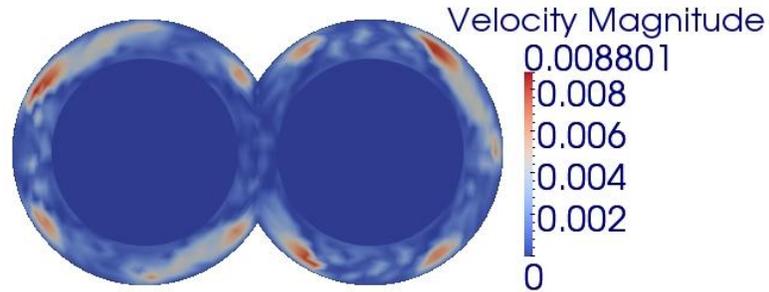


Figure 5.13: Coupe du champ de vitesse (en $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) au centre de la longueur du fourreau pour le maillage raffiné localement le plus fin

Les résultats de la perte de charge pour ces maillages sont présentés à la Figure 5.14. Tout d'abord, il est remarqué que les valeurs de perte de charge obtenues sont plus importantes que celles dans le cas d'un écoulement sans vis (Figure 5.12). Ceci est normal vu que les vis créent un obstacle à l'écoulement du fluide, ce qui augmente la perte de charge. Les valeurs convergent, peu importe le type de maillage, vers une valeur autour de 160kPa. La convergence n'est pas monotone et lorsque le maillage devient plus fin, la valeur de ΔP diminue. Ce qui s'explique par le fait que les maillages les plus grossiers opposent une plus grande résistance à l'écoulement que les plus fins. En effet, le volume occupé par les vis est moins bien approximé, il est plus important pour des maillages grossiers et donc, celui de l'écoulement est plus faible. C'est pourquoi les valeurs de ΔP sont plus grandes dans ce cas.

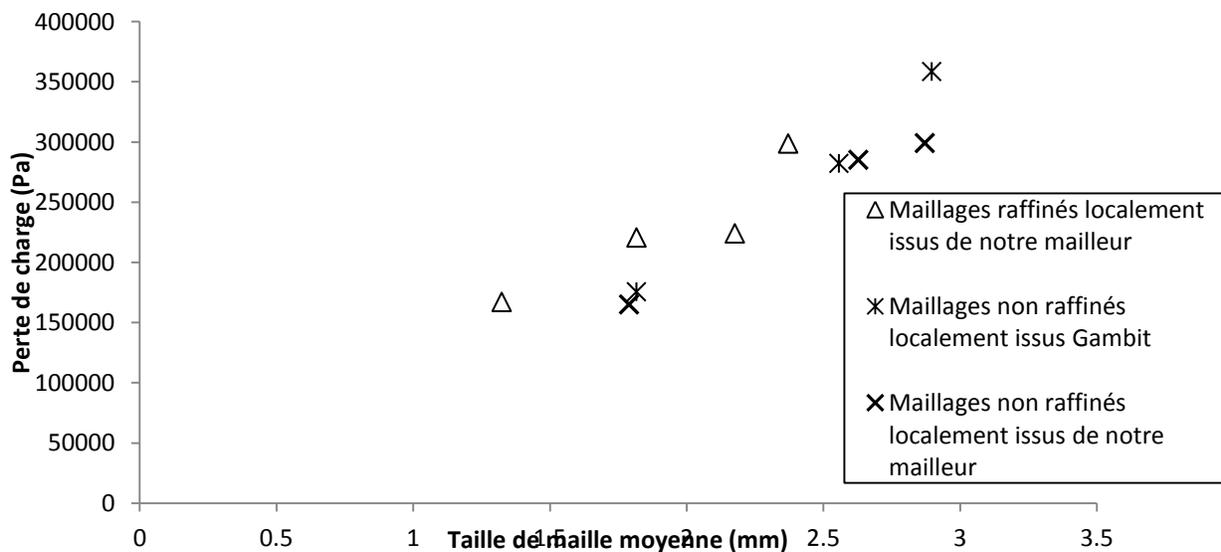


Figure 5.14: Comparaison des ΔP entre des maillages raffinés localement et des maillages réguliers générés par Gambit et par notre mailleur pour l'écoulement avec des vis fixes

La comparaison des valeurs de ΔP obtenues avec les maillages non raffinés localement issus de Gambit et de notre mailleur sont, à tailles de mailles moyennes proches, similaires. Pour une même taille, l'écart entre les valeurs obtenues à partir des maillages non raffinés localement, générés avec Gambit ou notre mailleur, ne dépasse pas 10%. La même conclusion peut être tirée des maillages raffinés localement versus les non raffinés localement. En fait, la convergence avec ce type de maillage n'est pas plus rapide et les résultats peu améliorés. Tout d'abord, la notion de taille de maille moyenne, dans ce cas, est moins significative car la différence entre la taille de maille maximale et minimale est beaucoup plus grande et la variable étudiée, le ΔP , est une variable globale. Cette variable ne permet pas de conclure sur la précision locale. En effet, l'ajout des vis peut entraîner de plus forts gradients (en vitesse ou pression) qu'il faut pouvoir capter avec le maillage, d'où l'intérêt de s'attarder sur l'écoulement local.

Pour cela, la norme de la vitesse a été tracée à une position en x et z donnée. Dans un premier temps, cela a été fait pour 3 maillages uniquement. Les maillages sélectionnés sont: un maillage non raffiné localement issu de notre mailleur (MNRL#3), un maillage raffiné localement (MRL#1) qui possède autant d'éléments surfaciques dans la zone entre l'arbre de la vis et la paroi du fourreau que le MNRL#3, et un maillage Gambit (MG#3) dont la taille de maille moyenne équivaut à celle du MNRL#3. Pour comparer les résultats des différents maillages, les graphiques tracés sont normalisés: la norme des vitesses est divisée par la vitesse moyenne à l'entrée et la position en y par la hauteur de la lunette du fourreau. Seule une position en y est présentée dans ces travaux (Figure 5.15) vu que les conclusions pour les autres graphiques étaient globalement identiques.

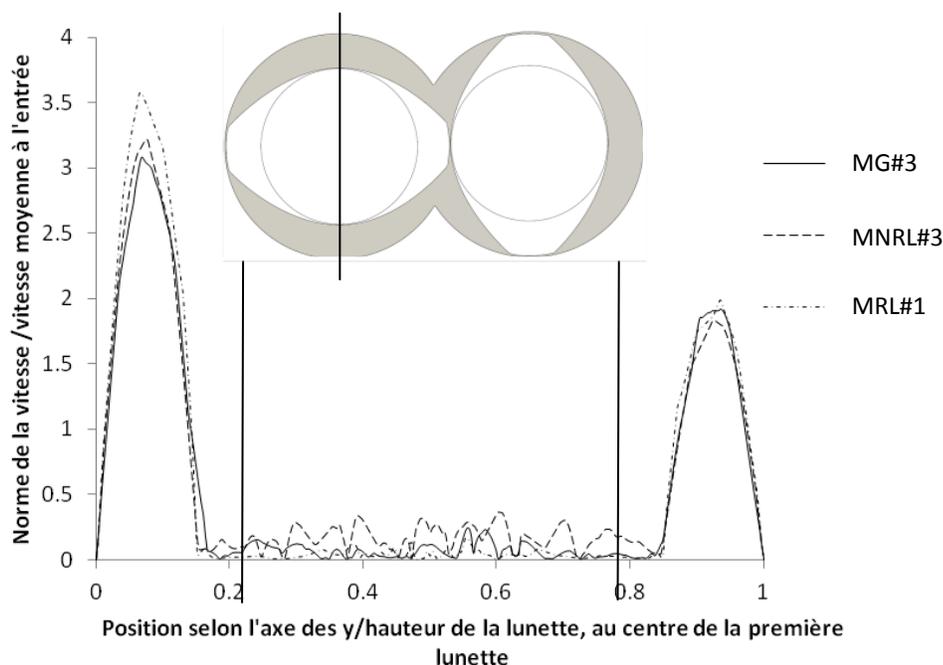


Figure 5.15: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse à une hauteur donnée de la lunette du fourreau, au centre de la longueur d'écoulement des vis, selon le type de maillage utilisé

Sur la Figure 5.15, la zone entre les 2 traits sur le graphique représente l'arbre de la vis et le trait sur le schéma des lunettes du fourreau est l'endroit où la norme de la vitesse est tracée. Les 3 courbes obtenues sont similaires et de même ordre de grandeur. Ceci était un résultat attendu puisqu'il y a le même nombre d'éléments dans l'entrefer, pour le maillage raffiné localement (MRL#1) et le non raffiné localement issu de notre maillage (MNRL#3). La seule différence entre les 2 maillages est que le MNRL#3 présente des oscillations plus grandes dans l'arbre des vis en raison d'une plus grande porosité. Ceci est dû au fait qu'à cet endroit, ce maillage est plus fin que le maillage raffiné localement pour un nombre de points de contrôle identique. Il n'y a pas assez de points de contrôle dans la vis par rapport au nombre d'éléments du maillage du fourreau, ce qui fait que la vitesse nulle n'est pas imposée sur tous les éléments à l'intérieur de la vis.

Il a donc été montré que des résultats étaient proches pour les 3 types de maillages, avec un nombre d'éléments similaires dans la zone d'écoulement. Il s'agit, maintenant, d'étudier l'effet du raffinement local sur la prédiction des valeurs locales de vitesses. La Figure 5.16 qui présente les

résultats des 4 maillages raffinés localement montre que les courbes sont similaires peu importe le maillage. Ceci peut s'expliquer par le fait que l'écoulement est moins complexe dans le cas d'une vis fixe car la composante transversale est moins importante. Ainsi, même le maillage le plus grossier arrive déjà bien à capter l'écoulement car les écoulements secondaires sont moins intenses que pour des vis en mouvement. La Figure 5.17, sur laquelle sont tracés les profils de vitesses au même endroit que ceux de la Figure 5.16, pour les maillages non raffinés localement de notre mailleur, montre que les intensités des pics de vitesses diffèrent. Le pic de vitesse du maillage le plus fin est d'amplitude plus faible que les 2 autres. Cela indique que les maillages plus grossiers ont tendance à surévaluer la vitesse par rapport aux maillages les plus fins, tout comme ils surévaluent la perte de charge (Figure 5.14).

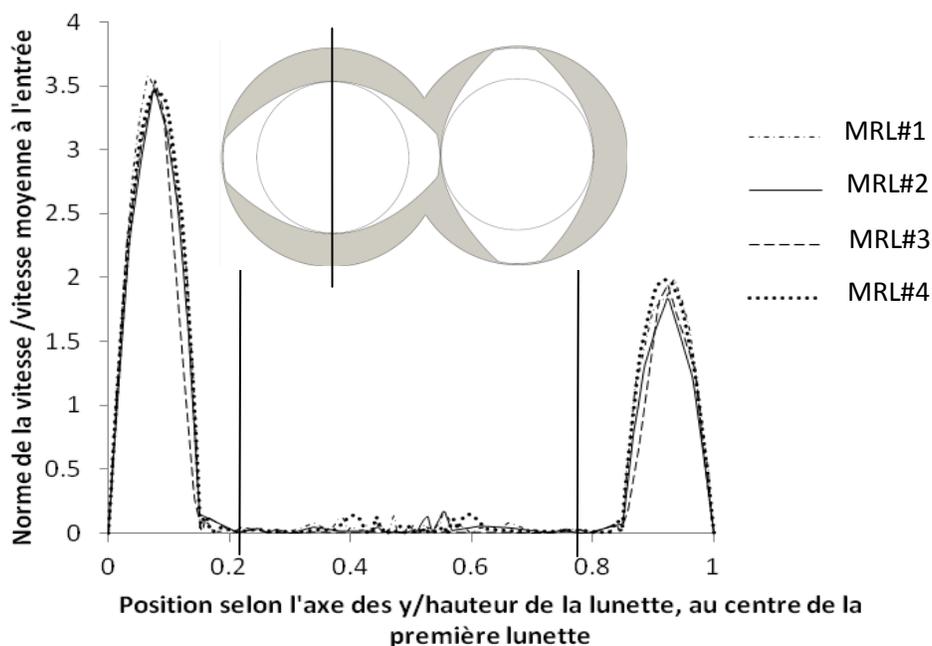


Figure 5.16: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse à une hauteur donnée de la lunette du fourreau, au centre de la longueur d'écoulement des vis pour différents maillages raffinés localement

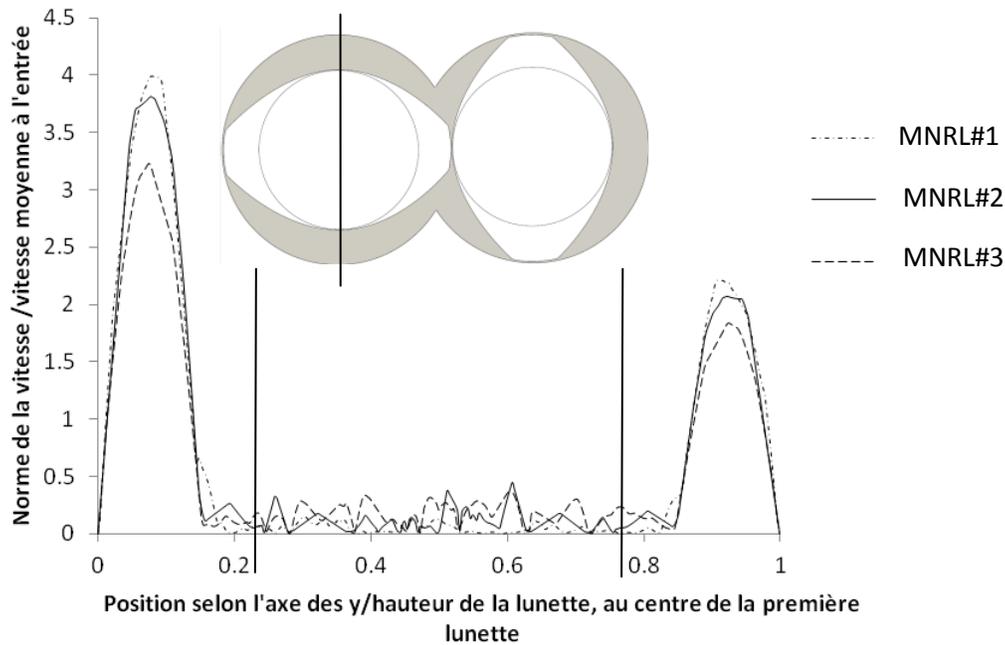


Figure 5.17: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse à une hauteur donnée de la lunette du fourreau au centre de la longueur d'écoulement des vis pour différents maillages non raffinés localement issus de notre mailleur

En conclusion, les résultats des différents maillages pour l'écoulement dans un fourreau avec des vis fixes montrent une convergence vers une même solution. Il a été vu que pour des maillages non raffinés localement, un raffinement a été nécessaire pour s'assurer de la convergence des résultats en vitesse et en pression. Les maillages raffinés localement, bien que nécessitant un raffinement pour la convergence en pression, donnent des résultats similaires en vitesse. Le maillage raffiné localement le plus grossier (MRL#1) donne des résultats en vitesse proches du maillage non raffiné localement le plus fin (MNRL#3) avec un nombre d'éléments moins important. Ceci conduit à continuer l'étude des vis en mouvement avec uniquement des maillages raffinés localement.

5.4 Résultats de l'écoulement avec les vis en mouvement

Étant donné la complexité de la géométrie, les résultats de l'écoulement vont être étudiés sous différents angles. Ainsi, des données en pression et vitesse seront analysées pour les 4 maillages raffinés localement afin de visualiser la concordance ou disparité des résultats, selon les

différents maillages. Les simulations ont été faites en régime transitoire pour un temps de 2s, ce qui correspond au temps nécessaire pour que les vis fassent un tour complet.

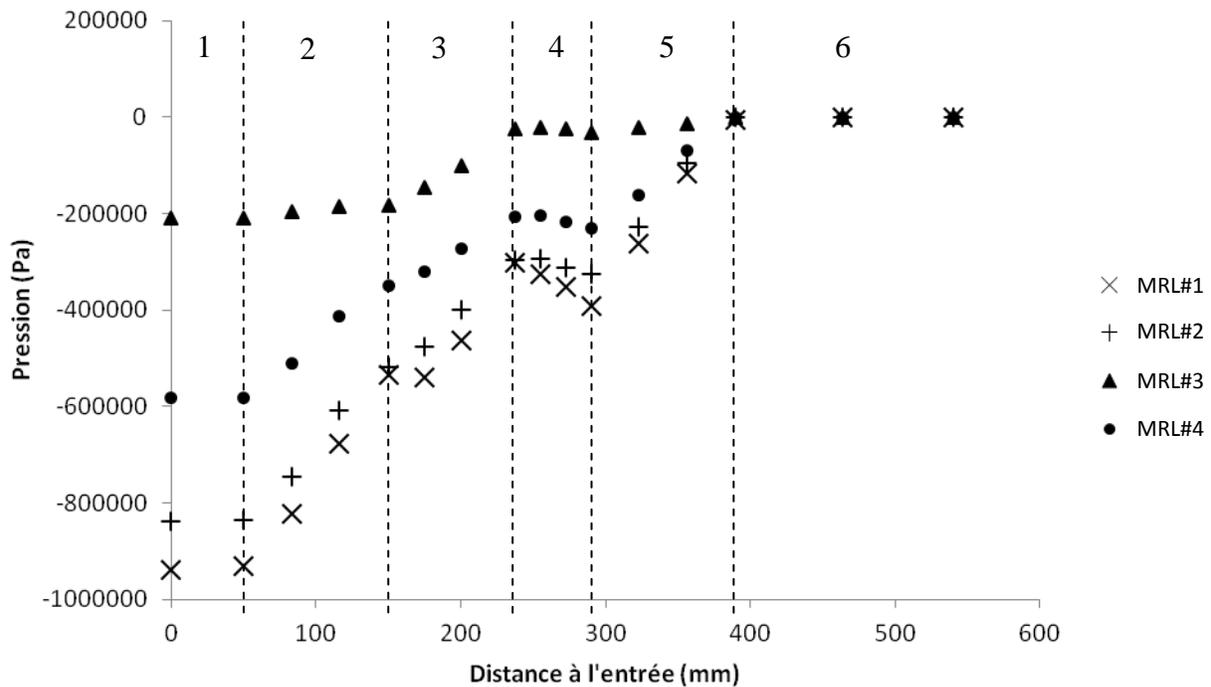
5.4.1 Étude des résultats en pression

La Figure 5.18 permet d'étudier la variation de la pression moyenne selon la position du plan par rapport à sa distance de l'entrée. La première remarque est que la pression augmente dans le procédé. Ceci est normal vu que le rôle de l'extrudeuse bi-vis est de mettre le fluide en pression afin de pouvoir le mettre en forme. En regardant plus en détail l'évolution de la pression en fonction de la zone où se situe le plan, il est noté que les zones d'entrée et de sortie (zones 1 et 6 de la Figure 5.18), dans laquelle il n'y a pas de vis, présentent un plateau. La pression varie peu dans cette section comparativement au reste, vu que c'est dans cette partie que se développe l'écoulement du fluide. Dans les 2 zones de transport (zones 2 et 5), il est observé que la pression augmente. Ceci était aussi attendu car, pour faire avancer le fluide, ce dernier passe par des sections plus petites. Il est donc comprimé, ce qui a pour conséquence de le mettre en pression. Ensuite, pour la première zone de malaxage (zone 3), l'épaisseur des éléments bi-lobes et leur faible angle d'inclinaison a tendance à créer du cisaillement; le fluide doit passer dans des entrefers relativement petits, donc la pression augmente. Pour la seconde zone de malaxage (zone 4), les éléments de vis sont beaucoup moins épais et beaucoup plus décalés entre eux, ce qui ne force pas le fluide à passer dans les petits entrefers aux sommets des éléments de malaxage mais plutôt à les contourner. Ainsi, c'est surtout du mélange distributif qui a lieu, ce qui crée plutôt une perte de charge. Les tendances de la variation de la pression, selon la longueur du fourreau pour les 4 maillages (Figure 5.18), paraissent donc logiques.

Les maillages MRL#1 et MRL#2 donnent des résultats très proches, ce qui n'est pas étonnant vu que leurs tailles de mailles moyennes le sont aussi. Les courbes des résultats du maillage MRL#4 et ceux de MRL#1 et MRL#2 se rapprochent à partir de la zone 3. L'écart sur la pression plus important, à l'entrée par rapport à la sortie, s'explique par l'imposition d'une condition frontière de traction nulle à la sortie du domaine laquelle revient à imposer une pression nulle. Ainsi, l'erreur sur la pression se propage vers l'entrée du système. En ce qui concerne le maillage MRL#3, il montre moins bien les évolutions dans chaque zone et possède globalement une variation de pression plus faible. Ces résultats s'éloignent des autres ce qui pourrait être causé par le maillage. Comme cela a été mentionné auparavant, les maillages raffinés sont

topologiquement différents et l'utilisation de la taille de maille moyenne, pour caractériser le maillage, est moins significative en raison de l'écart plus important sur les tailles de maille des éléments. Ainsi, cette différence pourrait s'expliquer par la présence d'éléments très grossiers à un endroit du domaine, diminuant la précision locale, laquelle aurait un impact sur les résultats finaux. Pour mieux expliquer ceci, une étude plus approfondie du MRL#3 serait nécessaire.

Figure 5.18: Variation de la pression moyenne après 2s sur un plan en fonction de la distance de l'entrée du fourreau qui est divisée selon les 6 zones de la géométrie de la vis. 1: zone d'entrée, 2:



première zone de transport, 3: première zone de malaxage, 4: seconde zone de malaxage, 5: seconde zone de transport, 6: zone de sortie

En ce qui concerne la perte de charge, la puissance et le cisaillement moyen, leurs évolutions ont été étudiées dans le temps et n'ont montré qu'une faible variation d'amplitude. Les valeurs sont rassemblées après une révolution complète de vis dans le Tableau 5.6 et présentent un grand écart en fonction du maillage étudié. Il est remarqué que plus le maillage est fin, plus la puissance et le cisaillement sont importants. Les valeurs en perte de charge montrent ce qui avait été dit auparavant sur la Figure 5.18: le MRL#3 a une perte de charge plus faible et les maillages MRL#1 et MRL#2 ont des résultats proches.

Tableau 5.6: Données de perte de charge, puissance et cisaillement moyen selon le maillage

Maillages	Perte de charge (kPa)	Puissance (W)	Cisaillement moyen (/s)
MRL#1	-938	1300	4,46
MRL#2	-839	1310	4,18
MRL#3	-209	1610	5,24
MRL#4	-582	2850	6,26

La variation de la pression dans le temps, au niveau de l'apex (coin supérieur à la jonction entre les 2 lunettes du fourreau), a été tracée à la Figure 5.19, dans la seconde zone de malaxage. En fait, dans cette zone, les 2 éléments bi-lobes des vis font chacun 2 rotations complètes. Les différentes configurations par rapport à l'angle d'inclinaison des 2 éléments, sont répétées 2 fois. Peu importe le maillage, les pressions obtenues montrent des oscillations. Ceci est cohérent car le fluide est soumis alternativement à des zones de compression et d'expansion avant et après le passage des éléments de malaxage, à cet endroit. En effet, à $t=0,2$ s, la position des vis (telle que montrée à la Figure 5.19) fait subir au fluide une forte compression causant une pression élevée. L'éloignement des vis de l'apex crée, par la suite, une zone de détente qui fait chuter la pression. La position des vis à $t=2$ s montre que les vis se déplacent vers l'apex, ce qui explique que le dernier point (sauf celui du maillage MRL#1) soit situé sur une pente ascendante. Ce même type d'oscillations avait aussi été remarqué par Bertrand et *al.* (2003), lors de la modélisation en 2D d'une extrudeuse bi-vis (opérée différemment), qui avaient eux mêmes trouvé des résultats cohérents avec ceux obtenus expérimentalement par McCullough & Hilton (1993).

Maintenant, en comparant les résultats de la Figure 5.19 en fonction des maillages, il est à noter que le maillage MRL#3 est celui qui restitue la courbe la plus lisse avec des pics très peu prononcés. Cette faible variation n'est pas vraiment un résultat attendu car, de part son emplacement, cette zone est balayée par les 2 vis et est donc soumise à de forts gradients de pression. Le maillage MRL#4 est celui qui exhibe les pics de pression les plus marqués. De plus, le maillage MRL#1 ne semble pas bien capter les valeurs de pression, vu que les courbes sont à contre-courant des autres. En effet, lorsque les courbes des 3 autres maillages présentent une pente moyenne négative, la courbe du maillage MRL#1 présente une pente moyenne positive.

Ceci est certainement dû à un maillage trop grossier qui ne permet pas de bien modéliser l'écoulement dans les petits entrefers présents entre les 2 vis.

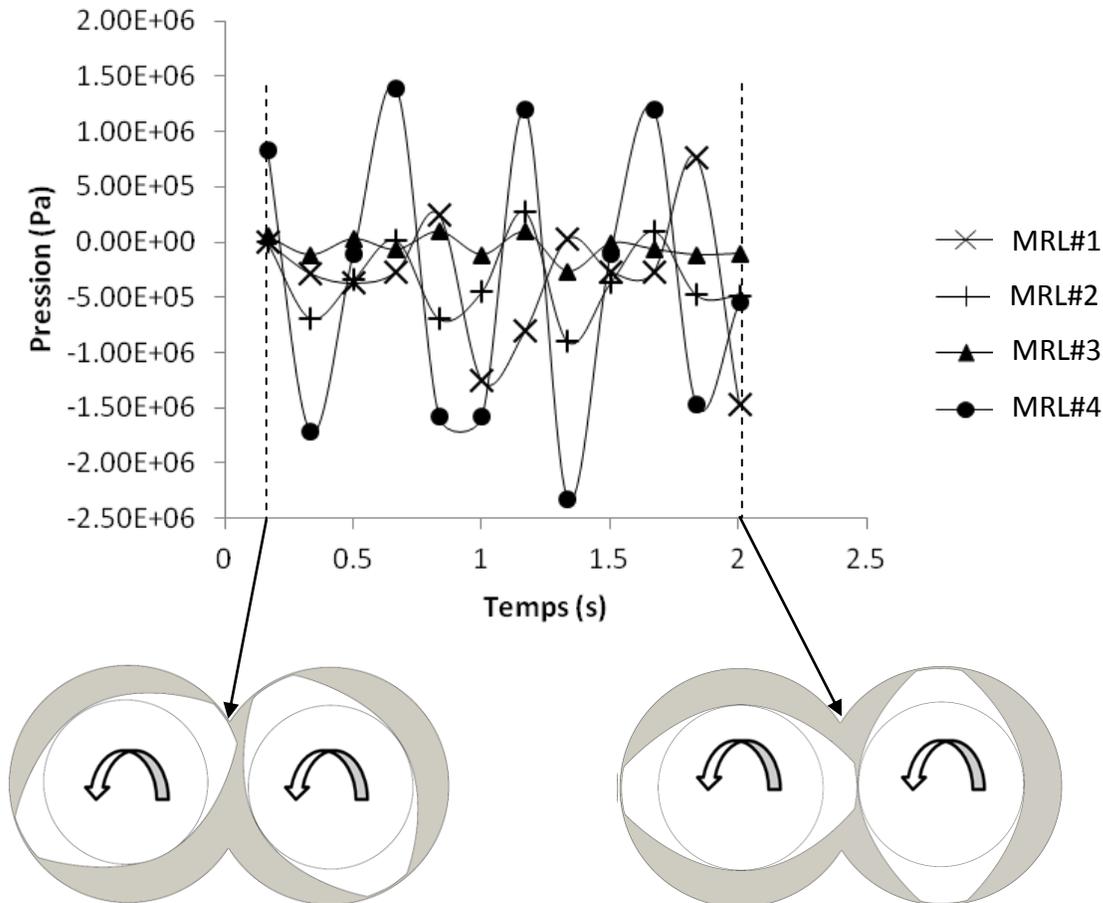


Figure 5.19: Évolution de la pression dans le temps au niveau de l'apex dans la seconde zone de malaxage

5.4.2 Étude de la vitesse

Des graphiques de vitesse ont été obtenus sur plusieurs axes, dans le procédé. Les 2 graphiques présentés dans les Figures 5.20 et 5.21 correspondent au milieu de la longueur de vis, dans la seconde zone de malaxage. Plus précisément, les résultats de la Figure 5.20 et 5.21 montrent une certaine symétrie entre les deux zones dans lesquelles se trouve l'écoulement. Vu que l'élément de vis, à cet endroit, se trouve complètement à l'horizontale, soit, à la perpendiculaire de l'axe étudié, la même surface d'écoulement est formée de part et d'autre de l'arbre de la vis, c'est à dire qu'il y a symétrie en terme de norme de vitesse. Le maillage MRL#4 est celui qui permet de mieux lisser la solution tandis que le maillage MRL#3 possède 2 pics très prononcés proches de

la paroi du solide. Or, en se fiant aux travaux faits par Wang et *al.* (2013) dans une extrudeuse bi-vis avec des éléments tri-lobes, les résultats obtenus par CFD sont lisses et symétriques, dans un cas similaire. Ceci laisse à penser que le maillage MRL#4 donne les meilleurs résultats. Les mêmes conclusions sont tirées de la Figure 5.21. Le maillage MRL#4 donne aussi des courbes généralement lisses et c'est celui qui offre les courbes les plus symétriques, parmi les 4 maillages. Par contre, le maillage MRL#1 est celui qui donne les plus importants pics, ce qui peut expliquer pourquoi la pression est mal évaluée dans l'apex (Figure 5.19). Le maillage MRL#3 lisse un peu plus la vitesse, à cet endroit, comparativement à la Figure 5.20.

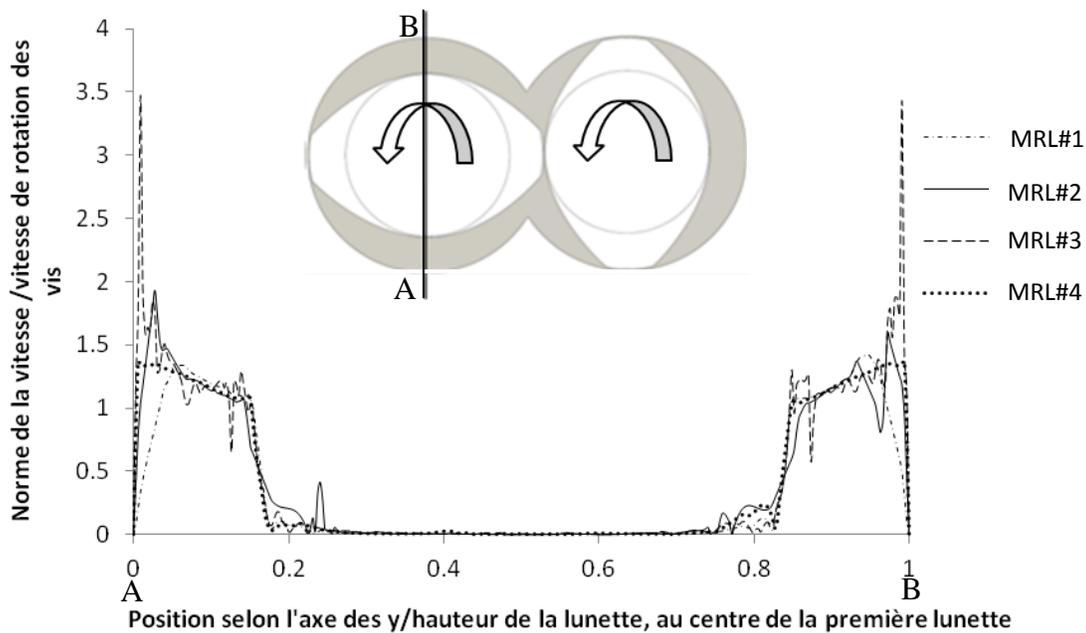


Figure 5.20: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse pour différents maillages raffinés localement à la mi-longueur pour 2 axes dans le fourreau au centre de la première lunette

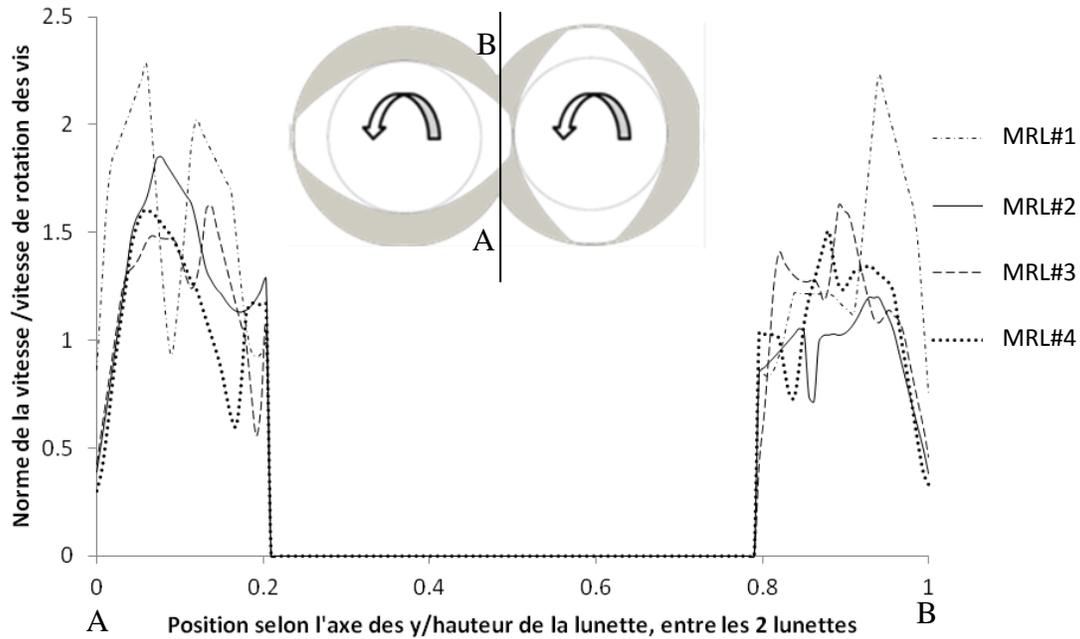


Figure 5.21: Comparaison de la valeur de la norme de la vitesse pour différents maillages raffinés localement à la mi-longueur pour 2 axes dans le fourreau à la jonction des 2 lunettes

L'examen de ce genre de résultats est très rare et, sans résultats expérimentaux, il est difficile de se prononcer avec exactitude sur leur validité. Toutefois, cette étude sur différents maillages met en lumière la complexité de ce type d'écoulement. Il apparaît que le maillage raffinés localement le plus fin produit les meilleurs résultats car il semble mieux capter les pics de pression au niveau de l'apex et permet de lisser les résultats en vitesse. Le maillage raffinés localement MRL#1 se révèle trop grossier pour bien capter la tendance de la pression dans l'apex.

Pour conclure ce chapitre, la méthodologie développée pour mailler le fourreau de l'extrudeuse bi-vis a pu être appliquée. Elle s'est avérée utile pour modéliser l'écoulement en régime transitoire avec des vis en mouvement. En effet, elle a conduit à obtenir des maillages fonctionnels, générés de façon systématique et quasi-instantanée. De plus, il est maintenant possible de pouvoir raffiner localement le maillage pour mettre plus d'éléments dans les entrefers ce que nous n'avions pu faire avec les logiciels commerciaux. Ceci a permis d'analyser la dynamique d'un fluide newtonien visqueux dans le fourreau avec les vis en mouvement en mode co-rotatif.

CHAPITRE 6 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Le travail présenté dans ce mémoire avait comme principal objectif de revisiter certains outils pour la modélisation de l'écoulement dans des mélangeurs continus et pour les méthodes d'analyse du mélange dans ces systèmes. Ceci se fait dans l'optique de pouvoir comprendre et mieux maîtriser les procédés de mélange à des fins d'amélioration de la qualité du produit final. Pour cela, les travaux ont été axés sur deux aspects. Le premier s'est concentré sur le développement d'une méthodologie numérique pour pouvoir évaluer la Distribution des Temps de Séjour dans des mélangeurs continus à géométrie complexe. La DTS est une technique de post-traitement appliquée, après que l'écoulement ait été modélisé, afin d'étudier la qualité du mélange dans le procédé. Le second point a impliqué le développement d'une technique de maillage pour le fourreau d'une extrudeuse bi-vis, soit, la zone dans laquelle s'écoule le fluide. Le but était de modéliser plus précisément l'écoulement dans ce système pour soutirer des informations locales qui, à terme, permettront une meilleure analyse du procédé.

Pour en revenir aux travaux concernant la DTS dans un système continu, un paramètre a été développé afin de réduire l'influence de la condition d'adhérence à la paroi, en partie responsable du phénomène de perte de particules. Ce phénomène numérique apparaît lorsqu'une particule injectée ne sort pas du domaine et a pour conséquence d'altérer les résultats, notamment la prédiction des temps de séjour. Ce paramètre représente une épaisseur dans laquelle aucune particule n'est injectée sur le plan à l'entrée. Un autre paramètre a, par la suite, été introduit afin d'évaluer, d'une nouvelle façon, le nombre de classes qui joue un rôle sur la précision du temps de séjour moyen calculé et sur l'allure des courbes de DTS obtenues. La méthode a été développée sur un écoulement entre 2 plaques infinies parallèles puis vérifiée sur un écoulement de type Poiseuille, c'est à dire dans une conduite cylindrique pour lesquelles les solutions analytiques sont connues. La méthodologie a ensuite été étendue au cas d'un mélangeur statique. Il a été remarqué qu'avec l'application de cette méthodologie, le nombre de particules perdues a diminué et la précision de la prédiction du temps de séjour moyen a augmenté. La problématique, à laquelle cette partie répondait, portait sur le développement de nouvelles techniques pour mieux évaluer la DTS numériquement.

En ce qui concerne la modélisation numérique de l'écoulement dans une extrudeuse bi-vis, une technique de maillage a été développée pour le fourreau. Celle-ci permet de mailler cette

géométrie de façon systématique et de fixer de façon appropriée les tailles de mailles. Il est ainsi possible de facilement créer des maillages pour raffiner localement les petits entrefers, très présents dans ce type de géométrie. Une fois la méthodologie développée, la méthode a été vérifiée sur des écoulements plus simples (fourreau sans vis), en comparant les résultats de simulation à ceux obtenus avec des maillages Gambit de taille équivalente aux nôtres. Il a été remarqué que les données en perte de charge et en vitesse étaient similaires et convergeaient, de façon non monotone, vers une même valeur. Par la suite, l'avantage d'un maillage raffiné localement a été mis en avant avec la simulation d'un écoulement avec les vis fixes. En effet, cela a donné une qualité d'informations comparable à celle obtenue avec un maillage non raffiné localement formé de plus d'éléments. Ce qui, pour des simulations en régime non stationnaire, peut vraiment être un avantage pour diminuer les temps de calculs. Ceci nous a poussés à étudier l'écoulement dans une extrudeuse bi-vis en utilisant uniquement des maillages raffinés localement. Avec les vis en mouvement, il a été possible d'analyser les vitesses et pertes de charge dans le temps et l'espace afin de mieux visualiser l'écoulement. En conclusion de cette partie, c'est une méthode peu contraignante pour mailler le fourreau qui a été développée et qui a permis de modéliser en détail l'écoulement dans les petits entrefers du système.

Le développement des outils numériques décrits ci-dessus ont permis de modéliser l'écoulement dans des procédés de mélange continu mais aussi de l'analyser avec la méthode de Distribution des Temps de Séjour. Ces travaux ont contribué à l'amélioration de la modélisation numérique en terme de simplicité de préparation des résultats et de capacité à résoudre des problèmes numériques liés aux géométries complexes.

Pour de futurs travaux, plusieurs pistes peuvent être encore explorées. La première serait de valider les résultats numériques obtenus pour l'écoulement, dans la géométrie bi-vis. Pour cela, des données expérimentales devront être récupérées et concorder avec celles présentées dans le chapitre 5. Ceci est une étape primordiale car le travail expérimental et le travail numérique sont très souvent complémentaires. La deuxième étape serait d'appliquer la méthodologie de la DTS, développée et utilisée dans le chapitre 4 sur le mélangeur statique Kenics, à l'écoulement dans une bi-vis. Une des difficultés sera de s'assurer que les particules ne traversent pas la zone solide des vis mais passent bien dans les entrefers. Des tests de lâcher de particules pourront être effectués auparavant pour des vis fixes afin d'éviter l'effet de la modélisation en transitoire et visualiser les trajectoires. Une dernière piste serait d'étudier de façon plus approfondie l'impact

d'un maillage du fourreau évidé, à l'emplacement des arbres des vis, sur la convergence des résultats. Cela permettrait de diminuer le nombre d'éléments, tout en évitant le problème de particules qui traversent la paroi solide des vis. Une piste de solution à ce problème de perte de particules serait l'obtention, par simulation numérique, d'un champ de vitesses qui permet de conserver les particules injectées dans le domaine jusqu'à leur sortie par une frontière ouverte. Cela permettrait d'analyser la DTS par la technique développée et présentée au chapitre 4. Les travaux de Heniche & Tanguy (2006) ont montré que la génération d'un maillage hydrodynamique adéquat est essentielle pour y parvenir. Dans cette perspective, il nous apparaît que la contribution de ce travail, en matière de génération de maillage, est probablement un atout.

RÉFÉRENCES

- Aubin, J., Prat, L., Xuereb, C., & Gourdon, C. (2009). Effect of Microchannel Aspect Ratio on Residence Time Distributions and the Axial Dispersion Coefficient. *Chemical Engineering and Processing*, 48(1), 554-559.
- Avalosse, T., & Crochet, M.J. (1997). Finite Element Simulations of Mixing: 1. Two Dimensional Flow in Periodic Geometry. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, 43(3), 577-587.
- Avalosse, T. & Crochet, M. J. (1997). Finite-Element Simulation of Mixing: 2. Three-Dimensional Flow Through a Kenics Mixer. *AIChE Journal*, 43(3), 588–597.
- Avalosse, T., Rubin, Y., & Fondin, L. (2002). Non Isothermal Modeling of Co-Rotating and Contra-Rotating Twin Screw Extruders. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 21(5), 419-429.
- Babuska, I., & Rheinboldt, W. C. (1978). Error Estimates for Adaptive Finite Element Computations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 15(4), 736-754.
- Belytschko, T. B., & Kennedy, J. M. (1978). Computer Models for Subassembly Simulation. *Nuclear Engineering and Design*; 49(1–2), 17–38.
- Belytschko, T., Schoeberle, D. F., & Kennedy, J. M. (1980). Quasi-Eulerian Finite Element Formulation for Fluid-Structure Interaction. *Transactions of ASME, Journal of Pressure Vessel Technology*, 102(1), 62–69.
- Belytschko T, & Black T. (1999). Elastic Crack Growth in Finite Elements with Minimal Remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5), 601– 620.
- Bernardi, C., Maday, Y., & Patera, A. T. (1993). Domain Decomposition by the Mortar Element Method. In *Asymptotic and Numerical Methods for Partial Differential Equations with Critical Parameters* (pp. 269-286). Netherlands: Springer.
- Bertrand, F., Tanguy, P.A., & Thibault, F. (1997). A Three-Dimensional Fictitious Domain Method for Incompressible Fluid Flow Problems. *International journal for numerical methods in fluids*, 25(6), 719-736.

- Bertrand, F., Thibault, F., Delamare, L., & Tanguy, P.A. (2003). Adaptive Finite Element Simulations of Fluid Flow in Twin-Screw Extruders. *Computers and Chemical Engineering*, 27(4), 491-500.
- Bravo, V. L., Hrymak, A. N. & Wright, J. D. (2000). Numerical Simulation of Pressure and Velocity Profiles in Kneading Elements of a Co-rotating Twin Screw Extruder. *Polymer Engineering & Science*, 40(2), 525–541.
- Bravo, V. L., Hrymak, A. N., & Wright, J. D. (2004). Study of Particle Trajectories, Residence Times and Flow Behavior in Kneading Discs of Intermeshing Co-Rotating Twin-Screw Extruders. *Polymer Engineering and Science*, 44(4), 779-793.
- Brito-Bazan, M. M. (2011). *Mixing Studies in a Co-Kneader* (Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal). Tiré de: ProQuest Dissertations and Theses.
- Byrde, O., & Swaley, M. L. (1999). Parallel Computation and Analysis of the Flow in a Static Mixer. *Computers & Fluids*, 28(1), 1-18.
- Cheng, H., & Manas-Zloczower, I. (1997). Study of Mixing Efficiency in Kneading Discs of Co-Rotating Twin Screw Extruders. *Polymer Engineering and Science*. 37(6), 1082-1090.
- Coesnon, B., Heniche, M., Devals, C., Bertrand, F., & Tanguy, P. A. (2008). A Fast and Robust Fictitious Domain Method for Modelling Viscous Flows in Complex Mixers: The Example of Propellant Make-Down. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 58(4), 427-449.
- Danckwerts, P. V. (1953). Continuous-Flow Systems: Distribution of Residence Times. *Chemical Engineering Science*, 2(1), 1-13.
- Dhatt, G. & Touzot, G. (1981). *Une présentation de la méthode des éléments finis*. Paris: Maloine.
- Delaunay, B. (1934). Sur la sphère vide. *Izvestia Akademii Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskikh i Estestvennykh Nauk*, 7(1-2), 793-800.
- Fard, A. S., Famili, N. M., & Anderson, P. D. (2008). A New Adaptation of Mapping Method to Study Mixing of Multiphase Flows in Mixers with Complex Geometries. *Computers & Chemical Engineering*, 32(7), 1471-1481.

- Fard, A. S., Hulsen, M. A., Meijer, H. E. H., Famili, N. M. H., & Anderson, P. D. (2012). Adaptive Non-Conformal Mesh Refinement and Extended Finite Element Method for Viscous Flow Inside Complex Moving Geometry. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 68(8), 1031-1052.
- Freedman, D., & Diaconis, P. (1981). On this Histogram as a Density Estimator: L2 Theory. *Probability theory and related field.*, 57(4), 453–476
- Frey, P. J., & George, P.-L. (1999). Optimisation des maillages. In *Maillages: applications aux éléments finis* (chapitre 18, pp. 601-633). Paris: Hermes Science publications.
- Fortin, M., & Tanguy, P.A. (1984). A Non-Standard Mesh Refinement Procedure through Node Labelling, short communication. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20(7), 1361-1365.
- Galaktionov, O. S., Anderson, P. D., Peters, G. W. M., & Meijer, H. E. H. (2003). Analysis and Optimization of Kenics Static Mixers. *International Polymer Processing*, 18(2), 138-150.
- Giguère, R., Bertrand, F., & Tanguy, P.A. (2006). A Three-Dimensional Mesh Refinement Strategy for the Simulation of Fluid Flow with a Fictitious Domain Method. *Computers and Chemical Engineering*, 30(3), 453-466.
- Glowinski, R., Pan, T., & Periaux, J. (1994). A Fictitious Domain Method for Dirichlet Problem and Applications. *Computer Methods Application in Mechanical Engineering*, 111(3-4), 283-303.
- Habashi, W.G., Dompierre, J., Bourgault, Y., Ait-Ali-Yahia, D., Fortin, F., & Vallet, M.C. (2000) Anisotropic Mesh Adaptation: Towards User-Independent, Mesh-Independent and Solver-Independent CFD. Part I: General Principles. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 32(6),725–744.
- Heniche, M., Reeder, M. F., Tanguy, P. A., & Fasano, J. B. (2005). Numerical Investigation of Blade Shape in Static Mixing. *AIChE Journal*, 51(1), 44–58.
- Heniche, M., & Tanguy, P. A. (2006). A New Element-by-Element Method for Trajectory Calculations with Tetrahedral Finite Element Meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 67(9), 1290-1317.

- Heniche, M., & Tanguy, P. A. (2008). Finite Element Modeling of Viscous Mixing: a Review. *Chemical Product and Process Modeling*, 3(1), art no 55.
- Hobbs, D. M., & Muzzio, F. J. (1997). The Kenics Static Mixer: a Three Dimensional Chaotic Flow. *Chemical Engineering Journal*, 67(3), 156-166.
- Hobbs, D. M., Swanson, P. D., & Muzzio, F. J. (1998). Numerical Characterization of Low Reynolds Number Flow in the Kenics Static Mixer. *Chemical Engineering Science*, 53(8), 1565-1584.
- Ishikawa, T., Amano, T., Kihara, S.-I., & Funatsu, K. (2002). Flow Patterns and Mixing Mechanisms in the Screw Mixing Element of a Co-Rotating Twin-Screw Extruder. *Polymer Engineering and Science*, 42(5), 925-939.
- Jongen, T. (2004). Extension of the Age-of Fluid Method to Unsteady and Closed-Flow Systems. *AIChE Journal*, 50(9), 2020-2037.
- Joo, J. W., & Kwon, T. H. (1993). Analysis of Residence Time Distribution in the Extrusion Process Including the Effect of 3-d Circulatory Flow. *Polymer Engineering & Science*, 33(15), 959-970.
- Kemblowski, Z., & Pustelnik, P. (1988). Residence Time Distribution of a Power-Law Fluid in Kenics Static Mixers. *Chemical Engineering Science*, 43(3), 473-478.
- Kim, S.J., & Kwon, T.H. (1996). Accurate Determination of a Deformation Measure in the Screw Extrusion Process. *Polymer Engineering and Science*, 36(11), 1454-1465.
- Lai, M. C., & Peskin, C. S. (2000). An Immersed Boundary Method with Formal Second Order Accuracy and Reduced Numerical Viscosity. *Journal of Computational Physics*, 160(2), 705-719.
- Langmuir, I. (1908). The Velocity of Reactions in Gases Moving Through Heated Vessels and the Effect of Convection and Diffusion. *Journal of the American Chemical Society*, 30(11), 1742-1754.
- Levenspiel, O. (1999). *Chemical Reaction Engineering*, New-York : John Wiley & Sons.

Leveque, R. J., & Li, Z. (1994). The Immersed Interface Method for Elliptic Equations with Discontinuous Coefficients and Singular Sources. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(4), 1019-1044.

Lui, M., & Tilton, J. M. (2010). Spatial Distributions of Mean Age and Higher Moments in Steady Continuous Flows. *AIChE Journal*, 56(10), 2561-2572.

McCullough, T.-W., & Hilton, B.-T. (1993). The Extrusion Performance of Co-Rotating Intermeshing Twin-Screw Extruder Screw Elements - An Experimental Investigation. In *Technical Papers of the Annual Technical Conference Society of Plastics Engineers Incorporated*, pp. 3372-3379. Society of Plastics Engineers INC.

Nauman, E. B., & Buffham, B. A. (1983). *Mixing in continuous flow systems*. New York: Wiley.

Nauman, E. B. (1991). On Residence Time and Trajectory Calculations in Motionless Mixers. *Chemical engineering journal*, 47(3), 141-148.

Nauman, E. B. (2004). Residence Time Distributions. In Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., Kresta, S. M (dir.), *Handbook of Industrial Mixing - Science and Practice* (pp. 1-17). Hoboken : John Wiley & Sons.

Nauman, E. B., (2008). Residence Time Theory. *Industrial & Engineering Chemistry*, 47(10), 3752-3766.

Nauman, E. B. (2008). *Chemical Reactor Design, Optimization, and Scaleup* (2nd Edition). Hoboken, New-Jersey : John Wiley & Sons.

Olmiccia, J., Heniche, M., & Bertrand, F. (2011). A Particulate Method for Determining Residence Time in Viscous Flow Processes. *Macromolecular Materials and Engineering*, 296(3-4), 362-372.

Patterson, G. K., Paul, E. L., Kresta, S. M. & Etchells III, A. W. (2004). Mixing and Chemical reactions. In Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., Kresta, S. M (dir.), *Handbook of Industrial Mixing - Science and Practice* (pp. 755-867). Hoboken : John Wiley & Sons.

Peskin, C. S., & McQueen, D. M. (1989). A Three-Dimensional Computational Method for Blood Flow on the Heart: I. Immersed Elastic Fibers in a Viscous Incompressible Fluid. *Journal of Computational Physics*, 81(2), 372-405.

- Rauwendaal, C. (2001). *Polymer Extrusion*. Munich : Hanser.
- Scott, D. W. (1979). On Optimal and Data Based Histograms. *Biometrika*, 66(3): 605–610.
- Sturges, H. (1926). The Choice of a Class Interval. *Journal of the American Statistical Association*, 21(153), 65–66.
- Sulzer Chemtech Ltd . (2013). Catalogue. Suisse: Mixing and Reaction Technology. Consulté le 9 juillet 2013, tiré de: http://www.sulzer.com/en/-/media/Documents/ProductsAndServices/Agitators_Mixers_Dispensers/Static_Mixers/Brochures/Mixing_and_Reaction_Technology_e_23270640.pdf
- Tadmor, Z., & Gogos, C. G. (1979). *Principles of Polymer Processing*. Hoboken, New-Jersey: John Wiley & Sons.
- Todd, D. B.(2004). Mixing of Highly Viscous Fluids, Polymers and Pastes. In, Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., Kresta, S. M (dir.), *Handbook of Industrial Mixing - Science and Practice* (pp. 987-1024). Hoboken : John Wiley & Sons.
- Verfurth, R. (1994). A Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh Refinement Techniques. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 50 (1-3), 67–83.
- Vergnes, B., & Chapet, M. (2001). *Procédés d'extrusion baxis*. In *Techniques de l'ingénieur : Plastiques et composites* (Vol. AM3653, pp. 1-23). Tiré de <http://www.techniques-ingenieur.fr/>
- Villermaux, J. (1996). Trajectory Length Distribution (TLD), a Novel Concept to Characterize Mixing in Flow Systems. *Chemical Engineering Science*, 51(10), 1939-1946.
- Wang, G., Zhu, X.Z., He, Y.D. & Chen, L. (2013). Effects of Screw Clearance and Blend Ratio on the Flow and Mixing Characteristics of Tri-Screw Extruders in Cross Section with CFD. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 7(1), 74-89.

ANNEXE 1 – Titre de l'article: A Particulate Method for Determining Residence Time in Viscous Flow Processes

Julie Olmiccia, Mourad Heniche¹, François Bertrand

Research Unit on Industrial Flow Processes (URPEI) &

Center for Applied Research on Polymers and Composites (CREPEC), École Polytechnique, Montréal, Canada

Abstract

It is well known that residence time distribution (RTD) is a significant parameter in material processing, therefore its accurate prediction is essential. From a numerical standpoint, one of the most widespread simulation methodologies is based on the combination of computational fluid dynamics (CFD) and particle tracking techniques. Within this framework, the novelty of this contribution is that the RTD is built upon a minimization of a least square criterion ensuring an accurate prediction of the mean residence time, as well as a smooth RTD function. In addition, a computational procedure is developed to estimate the thickness of the near wall region, which must be free of particles otherwise the RTD predictions will diverge. The relevance of the proposed method is assessed on analytical flow test cases and the Kenics static mixer for both Newtonian and non-Newtonian fluids. Good agreement is found between numerical and corresponding theoretical mean residence times.

Keywords: mixing, RTD, particle tracking, Kenics static mixer, near wall region, Poincaré maps

¹ Corresponding author: M. Heniche Tel.: (514) 340-4040; Fax: (514) 340-4105.

E-mail addresses:

julie.olmiccia@polymtl.ca (Julie Olmiccia)

mourad.heniche@polymtl.ca (Mourad Heniche)

francois.bertrand@polymtl.ca (François Bertrand)

INTRODUCTION

Fundamentally, the concept of residence time distribution (RTD) is assumed as an old concept when considering the pioneer work of Langmuir^[1]. However, it was not until Danckwerts^[2] that the RTD theory was extensively generalized to many disciplines, such as chemical reaction, polymer processing and potable water treatment. Indeed, the RTD is adequately versatile that it can be applied to various length scale systems - from micro-devices to earth sciences, where the corresponding time scale varies respectively from fraction of seconds to billions of years.

Bear in mind that RTD is a probability distribution function of the time it takes for a material to enter and exit within a flow system. In practice, the knowledge of RTD is valuable. Its interpretation allows us to determine the rate of a chemical reaction, the degree of homogeneity of mixing, the scale-up and the optimal operating conditions of reactors. For further detail, one may refer to these noteworthy authors: Nauman and Buffham^[3] and Levenspiel^[4].

Our main purpose in this work is to determine the RTD in viscous flow processes by computational fluid dynamics (CFD). It is well admitted that CFD avoids simplifying assumptions, and provides quite high resolution numerical results. In the literature there exists essentially two classes of numerical methods for RTD prediction based on CFD: the Lagrangian method and the Eulerian method. In both approaches, the modeling methodology comprises two steps: i) the first step consists of computing the velocity field; ii) the second step consists of injecting a tracer at the inlet boundary and tracking it via the velocity (computed in the first step) until it exits the domain. It is assumed that the tracer does not react with the fluid. The tracer is represented by a set of massless particles when using the Lagrangian approach, and a concentration field when using the Eulerian one.

Our intent is to give a clear understanding on the numerical accuracy of the RTD prediction when using the Lagrangian technique. As reported in Heniche and Tanguy^[5], the Lagrangian technique is by far the most used because it is not strictly limited to the RTD analysis but to many other parameters that can be extracted from it, such as length of trajectories and those based on chaos theory.^[6-7] In comparison to the Lagrangian method, the Eulerian method is more marginal because the governing partial differential equation (PDE) is hyperbolic, making it difficult and time consuming to solve. It must be stated that highly promising Eulerian computational techniques have been proposed, yet they are limited to 2D flow systems, namely

the age-of-fluid technique and the mean-age-of-fluid technique.^[8-9] It is essential that further research be done to extend them to 3D. Although particle tracking is widely used, few 3D CFD studies are concerned with the RTD in order to characterize the mixing in extruders and static mixers. Hereafter, we shall discuss their main numerical issues.

The early work of Joo and Kwon^[10] paved the way for numerical prediction of RTD in material processing. The authors developed a methodology within the finite element method (FEM) framework to analyze an extruder comprising a set of three particles injected from different locations. The paths of the tracers were predicted by a Runge-Kutta (RK) scheme, which is one of the most widely used today.

When considering a Newtonian viscous fluid, Hobbs and Muzzio^[11] used Fluent software and the RK scheme to characterize the RTD of a Kenics static mixer with as many as 20,000 particles, leading up to ten days in CPU time calculations. The predicted RTD exhibits the classical S-shaped curve in good agreement with experimental data, with exception to the tail region.

Heniche et al.^[12] compared the KMX and SMX static mixers using refined meshes, comprising 1.6 million tetrahedral finite elements and 16,000 particles. In order to tightly fasten the computations, they used an element-by-element technique as opposed to a RK scheme.^[13]

In the analysis of RTD in periodic flows, such as in an extruder, Kim and Kwon^[14] and Galaktionov et al.^[15] suggested applying the so-called mapping technique. This method is effective in rapidly analyzing various injection conditions in contrast to the RK scheme, which takes more time. However, it does pose a severe accuracy constraint on the mesh density requirement, thus delaying the realization of its full potential.^[16]

Aubin et al.^[17] used the FEM-RK approach to design micromixers based on RTD. As many others have done, they employed a reflexive wall boundary condition technique to store as many particles as possible within the computational domain. Consequently, this method raises the question of validity of the predictions. Our observations concluded that it does not in fact resolve the problem of trajectory calculation accuracy, rather the problem is simply displaced.

Due to the accumulation of errors in running the particle trajectory calculation algorithm, it appears that mesh refinement is an appropriate way to reduce the *loss-of-particle* phenomenon and keep the particles within the flow system.^[13] The major criticism of this technique is that it

is computationally intensive, which is a major shortcoming. This drawback is less critical if we consider the availability of modern affordable powerful computers that offer new opportunities.^[18-20] To illustrate the fast and considerable progress regarding the increase in relatively cheap computing power, Fard^[21] tracked on a cluster of CPUs 6×10^9 particles in one week to analyze a co-rotating twin screw extruder.

In a legacy review paper, Nauman^[22] suggests to ‘*modify CFD codes to allow easy, accurate, and semi automatic determination of RTD in laminar flows.*’ Keeping this in mind, our motivation is to revisit the methodology of RTD calculation using the particle tracking technique. We emphasize the purpose of the treatment of the near wall region where the no slip assumption poses accuracy issues in determining the RTD. We developed a computational procedure to cope with this problem to avoid the divergence of RTD predictions. The effectiveness of the procedure is assessed on analytical Newtonian and non-Newtonian viscous flows, namely the Couette flow between parallel planes and the Poiseuille flow in a cylindrical pipe. The relevance of the proposed method is also assessed on a Kenics static mixer. The predicted RTD is spatially represented on Poincaré maps, which is key from a mixing standpoint.

MATERIAL AND METHOD

CFD methodology

Let us consider a steady state flow system of volume Ω , bounded by $\partial\Omega(= \partial\Omega_{wall} \cup \partial\Omega_{out} \cup \partial\Omega_{in})$, where the flow obeys the Navier-Stokes equations that govern the momentum of the fluid:

$$\rho(\mathbf{v} \cdot \text{grad} \mathbf{v}) - \text{div} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} = \mathbf{0} \quad (1)$$

under the incompressibility constraint

$$\text{div} \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

In Equation 1 and Equation 2, \mathbf{v} is the fluid velocity vector, ρ is the fluid density, which is assumed constant, and $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}$ is the stress tensor expressed as follows:

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} = -p \underline{\underline{\mathbf{I}}} + \eta \underline{\underline{\dot{\boldsymbol{\gamma}}}} \quad (3)$$

In this expression, p is the pressure, $\underline{\underline{\mathbf{I}}}$ is the identity tensor, η is the fluid viscosity and $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}$ the rate-of-strain tensor defined as:

$$\underline{\underline{\dot{\gamma}}} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] \quad (4)$$

For a Newtonian fluid, the viscosity η reduces to a constant but for non-Newtonian fluids it varies. For instance, when considering a power law fluid, the viscosity is expressed as follows:

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1}; \dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} (\underline{\underline{\dot{\gamma}}} : \underline{\underline{\dot{\gamma}}})} \quad (5)$$

where $\dot{\gamma}$ is the shear rate, K the consistency index and n the power law index. In this work, we consider a Newtonian fluid ($n=1$) and a shear thinning fluid ($n < 1$).^[23]

We restrict our purpose to pipe flows with a single inlet and a single outlet. The associated boundary conditions are the following:

- wall boundary $\partial\Omega_{wall}$, no slip condition : $\mathbf{v} = \mathbf{0}$;
- outlet boundary $\partial\Omega_{out}$, no traction condition : $(\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}\mathbf{n})\cdot\mathbf{n} = \mathbf{0}$;
- inlet boundary $\partial\Omega_{in}$, velocity condition : $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in}^* = \mathbf{v}_{in}^*(\mathbf{x})$.

At the outlet boundary, \mathbf{n} stands for the outward normal. The velocity $\mathbf{v}_{in}^*(\mathbf{x})$ imposed at the inlet boundary is assumed herein to follow a developed flow profile.

Let us mention that in some situations the velocity profile is not known. One possibility to address this issue is the addition of an upstream buffer. When applied correctly, this technique can be used to assume a fully developed velocity profile at the physical inlet boundary. It was not used in this work and a fully developed velocity profile was imposed for all the geometries considered next.

From the above expression of the inlet boundary condition, the total flow rate, denoted Q , entering in the system is expressed as follows:

$$Q = \int_{\partial\Omega_{in}} \mathbf{v}_{in}^* \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega \quad (6)$$

The flow rate Q and the volume of the domain Ω are used to evaluate the theoretical (e.g. exact) mean residence time by

$$T_{exact} = \frac{\Omega}{Q} \quad (7)$$

In this work, the discretization of the Navier-Stokes equations, the fluid rheology and the associated boundary conditions are resolved within the finite element framework. The inertia component $\rho(\mathbf{v} \cdot \text{grad} \mathbf{v})$ in Equation (1) was considered in all simulations. The extra memory and CPU cost were not an issue. In deep laminar regime, the inertia vanishes by itself when the Reynolds number decreases.

Particle tracking methodology

At this stage it is assumed that the complete CFD velocity field \mathbf{v}_h , where the subscript h stands for the mesh size, is known such that the calculations of particle trajectories can be performed. Let us recall that the position of a particle at time t is described by the following equation:

$$\mathbf{x}(t) = \int_{t_0}^t \mathbf{v}_h dt + \mathbf{x}(t_0) \quad (8)$$

where $\mathbf{x}(t)$ is the position at current time t starting from an initial position $\mathbf{x}(t_0)$. In order to determine the RTD, we assume herein that a set of uniformly distributed particles is injected at the inlet boundary $\partial\Omega_{in}$ of the flow system. We denote by n_p the total number of particles injected. The calculations of the trajectories are achieved with an element-by-element method in combination with a predictor-corrector shooting scheme for the determination of the exit point at the outlet boundary $\partial\Omega_{out}$.^[13] This method requires no time stepping operations, which is a strong advantage in comparison to explicit integration schemes. It has been implemented in a finite element framework using unstructured tetrahedral finite element meshes so that the CFD mesh can be reused for trajectory calculations.

Once the computation of a trajectory of a particle until the exit has been achieved, its final position on outlet boundary $\partial\Omega_{out}$ and its age are recorded. This operation is repeated for all the particles. Once the particle tracking calculations are completed, the RTD prediction as well as its spatial representation can be performed.

RTD methodology

This section discusses the methodology to determine the RTD by a massless particle tracking technique. We begin by recalling the basic RTD concepts and then go deeper on computational aspects.

In this work, the RTD function is denoted $f(t)$ and its cumulative RTD function is denoted by $F(t)$, such that

$$F(t) = \int_0^t f(t)dt \quad (9)$$

Since $f(t)$ is a probability function it obeys

$$\int_0^{\infty} f(t)dt = 1 \quad (10)$$

We suppose that the RTD is known point wise. Equation (11) can then be rewritten in discrete form. Using a mid-point quadrature rule, one obtains

$$\int_0^{\infty} f(t)dt = \Delta t \sum_{i=1}^N f_i = 1 \quad (11)$$

where N is the number of classes of particles belonging to the same interval age.

In the above expression, the time step Δt is extracted from the particle tracking results, in a post-processing step, as follows:

$$\Delta t = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{N} \quad (12)$$

where t_{\max} is the age of the oldest particle, t_{\min} the age of the youngest particle. The discrete RTD function can thus be expressed as

$$f_i = \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=1}^{n_i} w_i^{(j)} \quad (13)$$

where n_i is the number of particles in the i^{th} class and $w_i^{(j)}$ are the weights of the RTD function and obeys the following condition:

$$\sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^{n_i} w_i^{(j)} \right) = 1 \quad (14)$$

Different possibilities exist to express the weights; surface area or flow rate weights are the most used. ^[3,4,11,17,22] In this work, we considered the following:

- constant weighting

$$w_i^{(j)} = \left(\frac{1}{n_p} \right)_i \quad (15)$$

- flow rate weighting

$$w_i^{(j)} = \left(\frac{Q^{(j)}}{Q} \right)_i \quad (16)$$

where $Q^{(j)}$ is the partial flow rate at inlet boundary associated to particle j that belongs to class i ;

- present work weighting

$$w_i^{(j)} = \frac{\left(\frac{L}{t} \right)^{(j)}}{\sum_{i=1}^{n_p} \left(\frac{L}{t} \right)_i} \quad (17)$$

where L and t are respectively the trajectory length and the age of particle j that belongs to class i .

Constant weighting (Equation (15)) was considered for two reasons. The first one is its simplicity because it requires less effort in data processing in comparison to flow rate weighting (Equation(16)). The second reason is that constant weighting is a good candidate for highly shear thinning fluids where the velocity profile at inlet boundary is almost constant so that one can assume that all the particles have equal associated flow rates $Q^{(j)}$ (see Appendixes A1 and A3 for theoretical development). In assuming uniformly distributed particles, proposed weighting

(Equation (17)) is analogous to a flow rate weighting type except it considers the history of the particle.

OPTIMAL NUMBER OF CLASSES

The determination of the number of classes N is an important issue and one can rely on well established statistical methods. For example, the following formulas can be used:

- Sturges^[24]

$$N = 1 + \log_2 n_p \quad (18)$$

- Scott^[25]

$$N = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{3.5s} n_p^{1/3} \quad (19)$$

where s is the standard deviation, and

- Freedman-Diaconis^[26]

$$N = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{2(IQ)} n_p^{1/3} \quad (20)$$

where (IQ) is the interquartile range.

Rather than using the above well-established statistical formulas, we suggest to select N in such a way that it guarantees that the error on the prediction of the mean residence time is minimum with respect to Equation (7). To do so, let us determine the optimal number of classes in the sense of the following least square criterion:

$$J = (T_{exact} - T_h)^2 \quad (21)$$

where T_h is the mean residence time predicted by CFD such that

$$T_h = \int_0^{\infty} tf(t)dt \approx \Delta t \sum_{i=1}^N (tf(t))_i \quad (22)$$

Using Equation (7) and Equation (18), Equation (17) is rewritten as follows:

$$J = \left(\frac{\Omega}{Q} - \Delta t \sum_{i=1}^N (tf(t))_i \right)^2, \quad N \in [1, n_p] \quad (23)$$

From a mathematical standpoint, the problem consists of finding N such that J in Equation (23) is minimum which means that

$$\frac{\partial J}{\partial N} = 0 \quad (24)$$

According to Equation (19), N is a finite integer because it belongs to the interval $[1, n_p]$. A simple method to choose the optimal N value consists in evaluating J for all possible values of N , and choosing the one that minimizes it. It happens that J is monotone and that no minimum exists. In this particular case, the determination of N can be made through well established statistical methods (Equations (18-20)).

Let us recall that the theoretical mean residence time defined by the flow rate and the mixer volume is used to determine the optimal number of classes N . It guarantees that the computed RTD will provide the most accurate mean residence time with respect to the theoretical one. To ensure the success of this approach, it is however essential to consider the flow in the near-wall region.

THICKNESS OF THE NEAR WALL REGION

It is well known that the near wall region poses difficulties in RTD prediction. Indeed, in laminar flow modeling, we generally assume a no slip condition on the wall so that the velocity approaches zero in this region. From the RTD calculation standpoint, particles in the near wall region then have excessive residence times that contribute to diverge the RTD predictions. One possibility to alleviate this problem is to skip (at the particle tracking step only) the near wall region that must be free of particles.

To better explain, let us consider the classical 2D Couette flow problem between two parallel planes of height H . The axial velocity v_x is a linear function of the transverse direction y :

$$v_x = 2\dot{\gamma}y \quad (25)$$

where $v_x = 0$ for $y = 0$ and $v_x = v_{max}$ for $y = H$.

We would like to determine the mean residence time from a particle tracking calculation. If the thickness δ of the near wall region is introduced, it follows that

$$T = \frac{1}{(H - \delta)} \int_{\delta}^H t dy \quad (26)$$

Considering that the time t can be expressed with respect to the velocity v_x and the axial domain length L , we have

$$t = \frac{L}{v_x} \quad (27)$$

Using Equation (21), Equation (23) becomes:

$$t = \frac{L}{2\dot{\gamma}y} \quad (28)$$

Inserting Equation (24) into Equation (22), one obtains

$$T = \frac{L}{(H - \delta)} \int_{\delta}^H \frac{1}{2\dot{\gamma}y} dy \quad (29)$$

Integrating the above expression we obtain the mean residence time in Couette flow problem in the following form:

$$T = \frac{L}{2\dot{\gamma}(H - \delta)} (\log(H) - \log(\delta)) \quad (30)$$

Equation (26) shows that the mean residence time diverges when δ approaches zero:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} T \rightarrow \infty \quad (31)$$

Rewriting Equation (26) in homogeneous form and considering that the mean residence time is known from Equation (7), the determination of δ can be established by solving the following nonlinear equation

$$\frac{\Omega}{Q} - \frac{L}{2\dot{\gamma}(H - \delta)} (\log(H) - \log(\delta)) = 0 \quad (32)$$

Influence of the near wall region in the prediction of the RTD can be important as shown in **Figure 6.1** that presents the cumulative RTD curves for δ equal to zero and for δ determined by

solving Equation (32). The analytical expression of the RTD for the Couette flow problem is provided in Appendix A1.

Notice that the determination of δ is not straightforward because it depends on the particular flow problem at hand. In some situations, its exact determination is not possible so that one must to rely on approximations.

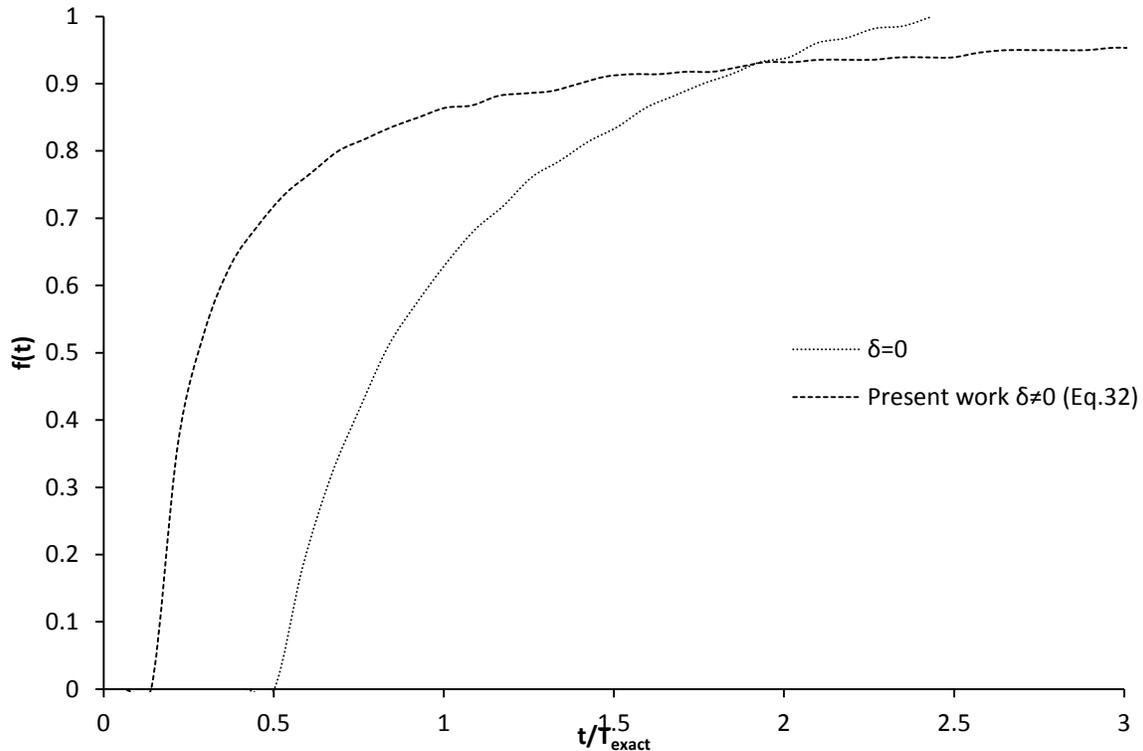


Figure 6.1: Couette flow: influence of near wall region on cumulative RTD curves.

RESULTS

In this section, we present the results of numerical experiments for two steady state Newtonian and non-Newtonian laminar flow cases. The first one is the flow in a circular pipe where analytical solutions are available. The second one is the flow through a Kenics static mixer, which is challenging due to its geometrical complexity. For each case, the 3D flow field was computed using POLY3D (Rheosoft) CFD code. The computational meshes are made of tetrahedral finite elements. The mixed velocity-pressure variables are approximated using MINI low order finite element that has proven accurate and fast.^[27]

6.1 Poiseuille flow

The interest of this example is that the analytical solution of the RTD is available so that we can assess the behaviour of the computational methodology discussed above. Although this example is conceptually simple, it appears that the accuracy of the velocity field \mathbf{v}_h is sensitive to mesh size. We would like to characterize the impact it has on the prediction of the RTD.

We consider the flow of a power law fluid in a cylindrical pipe where the axial direction is the z-axis. The pipe has a radius $R=0.1\text{m}$ and a length $L=0.5\text{m}$. The mean flow velocity is $\bar{v}=0.05\text{m/s}$ ($v_{\max}=0.1\text{m/s}$) corresponding to a theoretical mean residence time $T=10.0\text{s}$. The fluid has a density $\rho=1000\text{kg/m}^3$ and a consistency index $K=1000\text{Pa}\cdot\text{s}^n$. The power law index n varies from 1.0 to 0.1.

Prior to the injection of the tracers in the pipe, we have first determined the thickness δ as a function of the power law index presented in **Figure 6.2**. It appears that the dimensionless thickness $(R - \delta)/R$ varies substantially in comparison to the constant value proposed by Nauman^[28], 0.94, which lies within the range of dimensionless thickness found in this work. The general trend is that δ decreases with n . The theoretical development to determine the thickness δ is presented in Appendix A2.

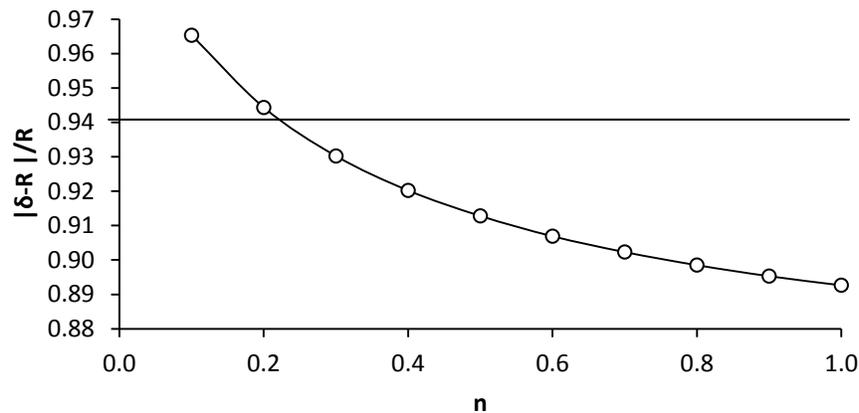


Figure 6.2 : Poiseuille flow: variation of δ versus power law index. The straight line is the constant value proposed by Nauman.^[24]

The influence of the mesh size on the prediction of T_h is presented in **Figure 6.3**. It is interesting to note that T_h converges with mesh refinement, which is of course an important property.

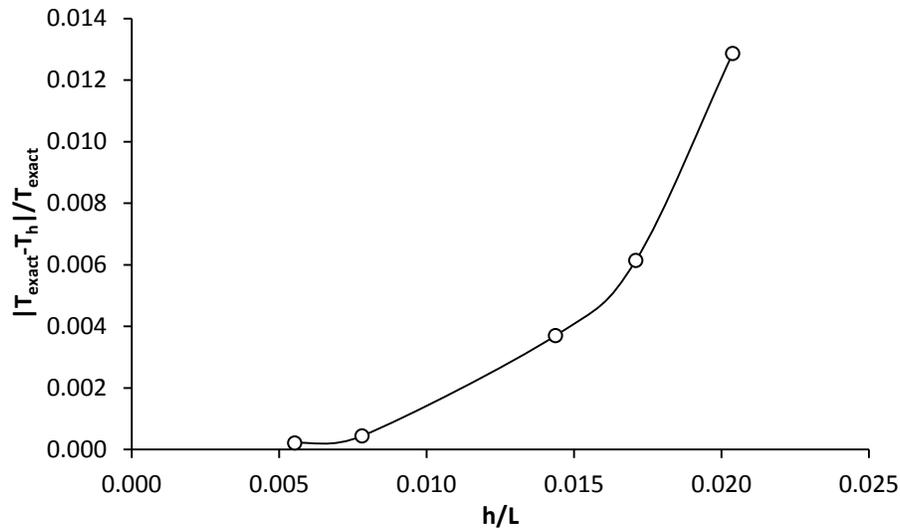


Figure 6.3 : Poiseuille flow: convergence of T_h with respect to mesh size.

The influence of the number of classes is next investigated to assess the behaviour of the different statistical approaches. For instance, Table 1 presents the number of classes obtained from the statistical formulas of Sturges (Equation (18)), Scott (Equation (19)) and Freedman-Diaconis (Equation (20)). When considering the theoretical mean time $T_{\text{exact}}=10.0\text{s}$, the accuracy of T_h is observed to vary between 13.5% and 15.5%. The accuracy strongly improves for the optimal value of N , as shown in Table 2, where the maximum discrepancy become less than 1.0% irrespective of the power law index n .

Table 1: Poiseuille flow: accuracy of mean time prediction for values of N determined by various methods.

Methods	N	T_h (s)	T_{exact} (s)	Error (%)
Sturges	15	9.0	10	10
Freedman-Diaconis	55	8.4		16
Scott	29	8.6		14
Nopt	8	9.9		0.8

Table 2: Poiseuille flow: accuracy of mean time prediction for the optimal value of N .

n	N	T_h (s)	T_{exact} (s)	Error (%)
1.0	8	9.9	10.0	0.8
0.9	8	10.0		0.1
0.8	8	10.1		0.6
0.7	8	10.1		1.0
0.6	9	9.9		0.6
0.5	9	10.1		0.7

The influence of N on the RTD curve is presented in [Erreur! Source du renvoi introuvable](#). **Figure 6.4** for the Newtonian fluid. The exact solution is represented by the solid line. In spite of differences, the predicted RTD curves exhibit the same trend in comparison to the exact solution. In fact, it can be noticed that the RTD is smoother with the optimal value of N . In particular, the oscillations observed in the case of values of N based on statistical methods vanish when the optimal value is used. Moreover, due to the small value of optimal N , it appears that the RTD peak is delayed and its value is smaller than those obtained with the statistical methods. Among all selected methods, the method of Sturges yields an RTD curve that is the closest to that obtained with the method based on an optimal value of N . The Freedman-Diaconis method best captures the peak with minimum phase error but exhibits the largest non physical wiggles. Moreover, it is worth mentioning that for this case, the influence of the RTD weighting appears to be marginal. The theoretical development of the RTD in the case of the Poiseuille flow is provided in Appendix A3.

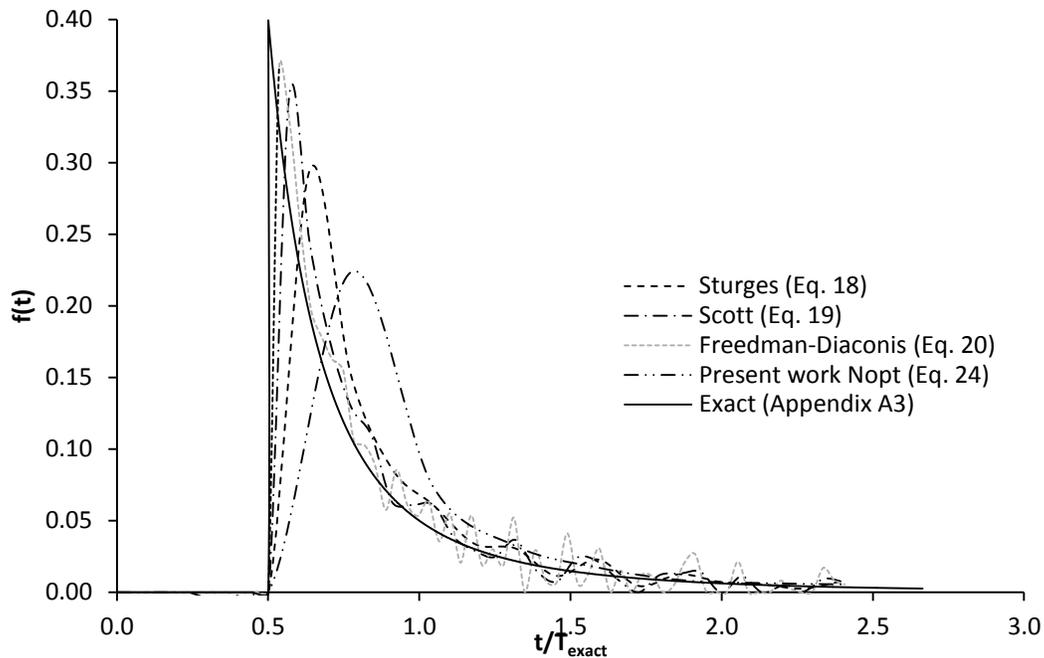
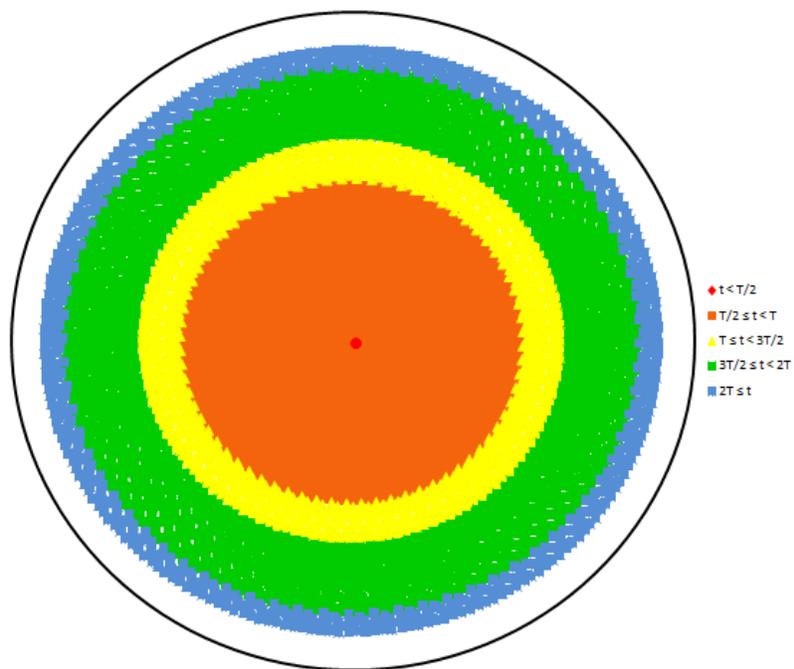


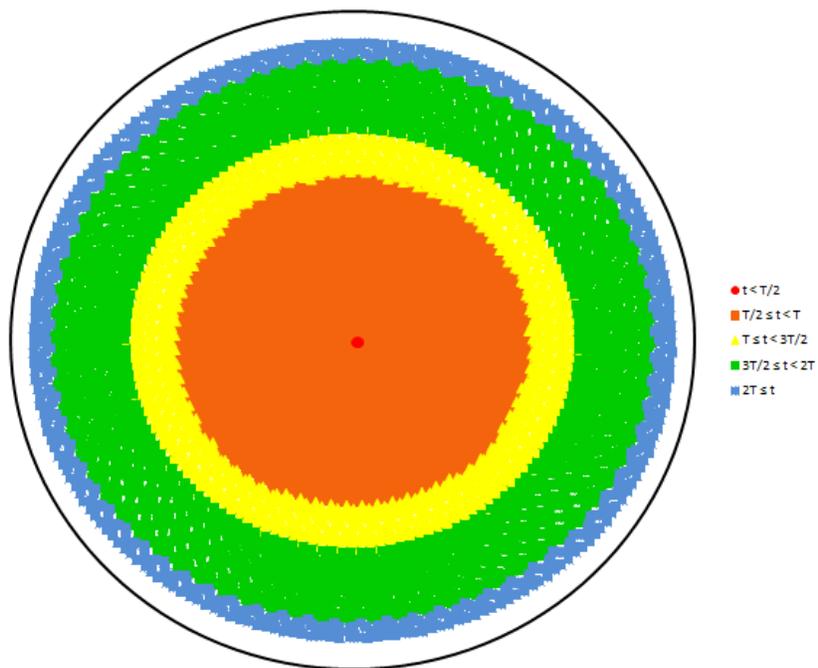
Figure 6.4: Influence of the rules used to evaluate the classes N on RTD curves for the Poiseuille flow of the Newtonian fluid.

The spatial representation of the RTD on Poincaré maps helps identify whether the fluid streams mix or not, which is important for the mixing efficiency. A well mixed system will exhibit a homogeneous distribution of particle ages.

The Poincaré maps were built at the exit of the mixer for $n=1.0$ (Newtonian fluid) and $n=0.5$, as presented in **Figure 6.5a** and **Figure 6.5b**, respectively. Five particle age categories were selected to realize the spatial representation. One can clearly distinguish the thickness of the wall layer, which is empty of particles. One may observe that the exit age increases as we move away from the center of the pipe and radially towards the wall, as expected for this type of flow. The concentric distribution of particle ages suggests that the fluid streams remain parallel and do not mix providing the Poiseuille flow a poor mixer a well know result. At this stage not much can be said except that it helps to convince about the validity of the calculations.



a)



b)

Figure 6.5 : Spatial representation of the RTD on Poincaré map for the Poiseuille flow: a) Newtonian fluid; b) power law fluid ($n=0.5$).

6.2 Kenics static mixer

The methodology proposed in this work was next used to predict the RTD in the Kenics static mixer at $Re=0.01$. The static mixer device studied here is made of six elements, as shown in **Figure 6.6** proposed by Avalosse and Crochet.^[29] The pipe diameter of 60 mm and is 8×115 mm long. The length of each element is 115 mm long. The role of a static mixer is to generate a transversal flow to mix the fluid streams and then promote mixing. We have considered here the RR configuration since it proved less efficient for mixing than the RL configuration.^[15] In fact, the interest is rather to assess the behaviour of the proposed RTD methodology on a complex geometry.

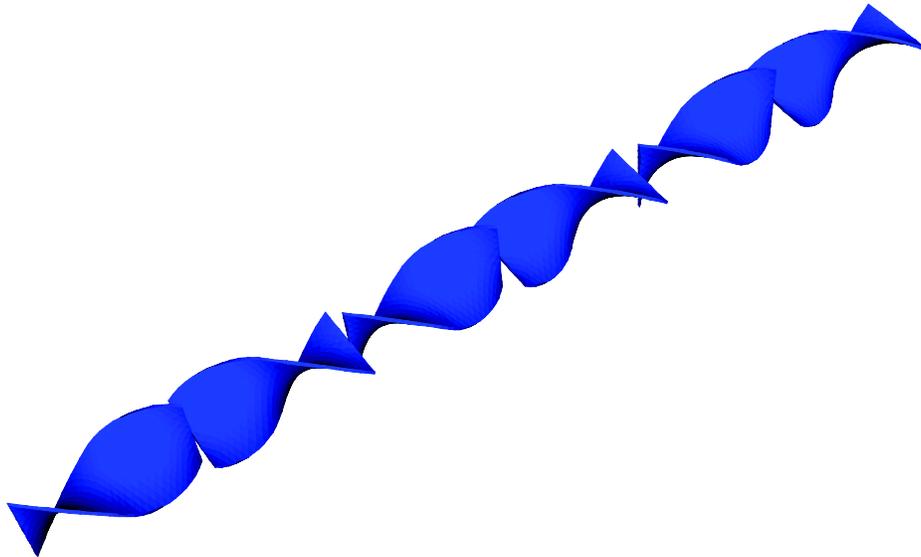
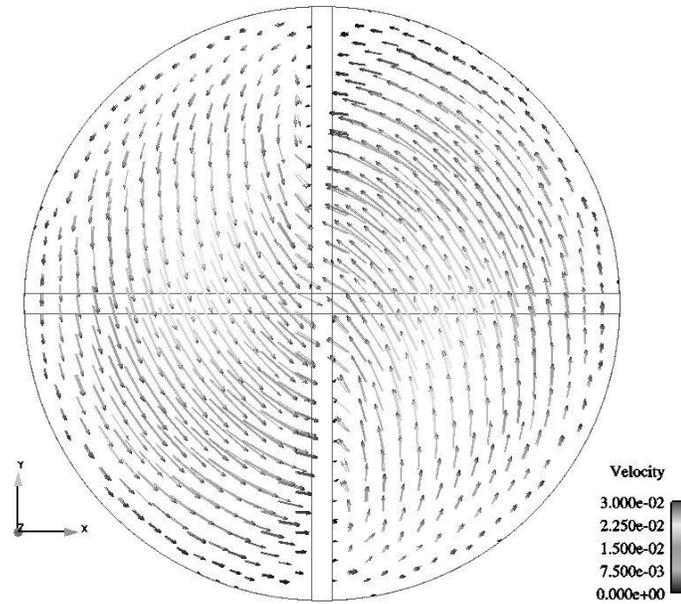
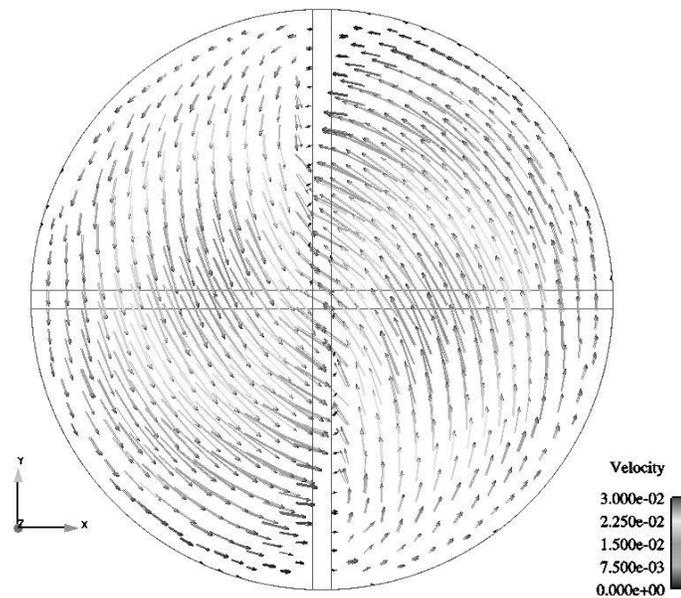


Figure 6.6: Kenics static mixer: geometry of the six-element device.

Figure 6.7a and **Figure 6.7b** present the computed transversal flows at the exit of the sixth mixing element for the Newtonian fluid and the power law fluid ($n=0.5$), respectively. At the naked eye, the transversal flow patterns are more or less similar. It appears that a slight difference on the magnitude exists between the two transversal flows in the central part of the pipe.



a)



b)

Figure 6.7 : Transversal flow in the Kenics static mixer at the exit of the sixth mixer element: a) Newtonian fluid; b) power law fluid ($n=0.5$).

The power law fluid considered in this part of the work has a consistency index $K=78 \text{ Pa}\cdot\text{s}^n$. A series of 6 power law index values were selected: $n=1.0, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6$ and 0.5 . The corresponding pressure drop is presented in **Figure 6.8**, which decreases according to the power

law index, as expected from shear thinning fluid pipe theory.^[23] It was computed on a tetrahedral mesh composed of 1.25M elements, 1.5M nodes and 0.75M pressure-velocity equations. The RTD was obtained by launching 5,000 particles at the entrance of the mixing device. Since no analytical expression of the velocity field is available, the thickness of the near wall region was approximated by assuming a Poiseuille-like flow in a cylindrical pipe, as discussed in the previous section. This approximation is adequate because, for all the particle paths computed, the rate of loss of particles is less than 4% for $\delta=0$ and less than 2% for $\delta \neq 0$. Another benefit of the near-wall function is evidenced in **Figure 6.9**, which presents the RTD curves for a Newtonian fluid. The shape is smooth for $\delta \neq 0$ in comparison to the oscillatory shape for $\delta =0$. The impact of δ on the predicted mean residence time is reported in Table 3. As can be seen, δ has indeed a strong influence since $\delta =0$ provides poor mean residence time predictions with a 13.7% error in comparison to an error less than 0.01% for $\delta \neq 0$.

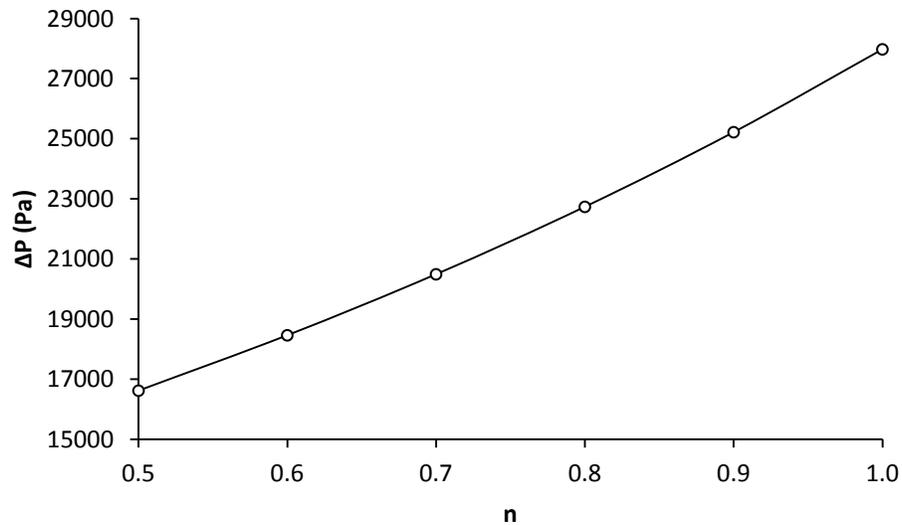


Figure 6.8: Kenics static mixer: influence of power law index on pressure drop.

Table 3: Kenics static mixer: accuracy of mean time prediction with respect to the value of δ .

	T_h (s)	T_{exact} (s)	Error (%)
$\delta \neq 0$	66.9	66.9	<0.01
$\delta = 0$	76.1		13.7

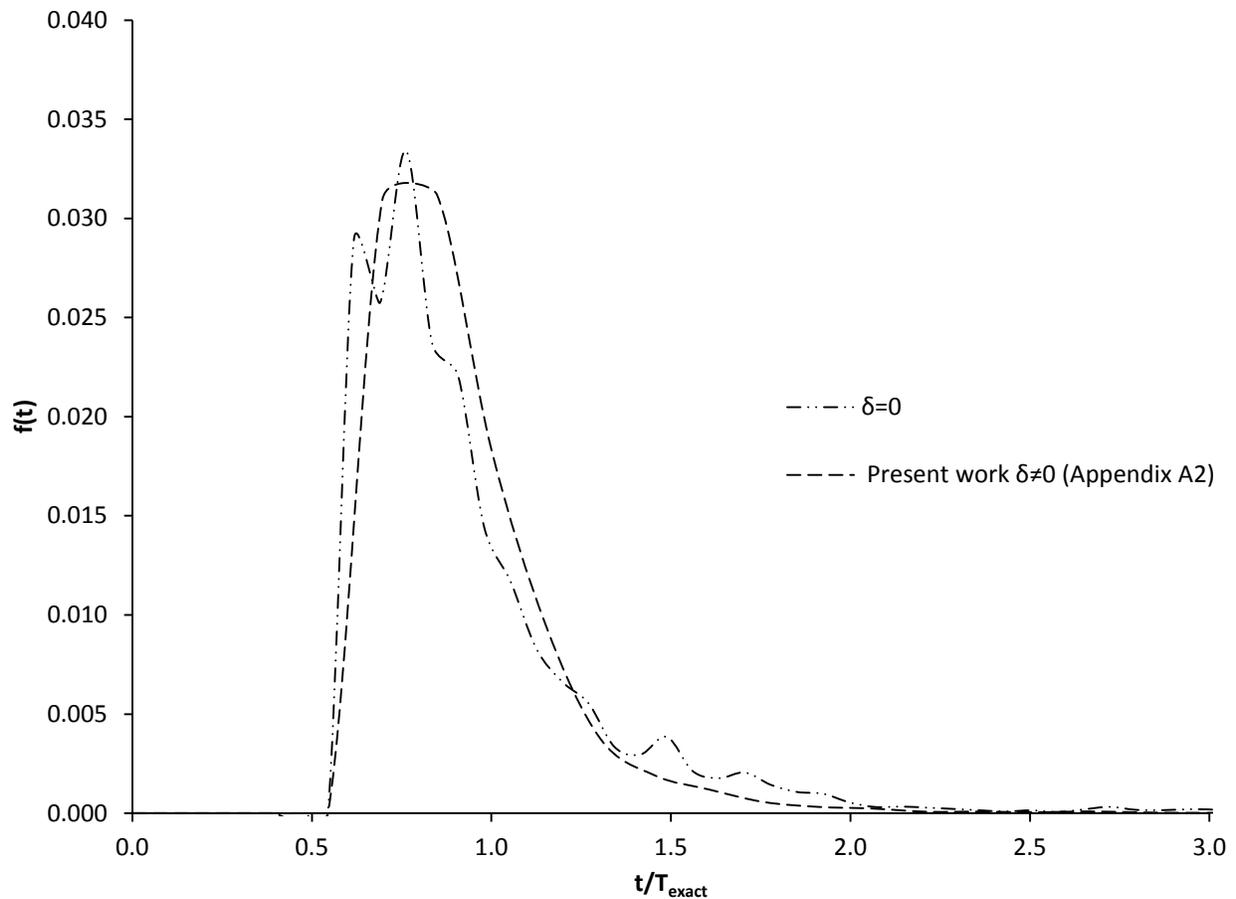


Figure 6.9: Kenics static mixer: Influence of the δ parameter on RTD for a Newtonian fluid.

Figure 6.10 presents RTD curves, for a Newtonian fluid, established by considering different weighting functions. Constant weighting (Equation (15)) and flow rate weighting (Equation (16)) exhibit similar RTD curves shape than one different from that obtained with Equation (17). This result was not expected due the similarity of the weighting methods defined by Equation (16) and Equation (17). Although not shown, they however provide identical RTD curves for Couette flow between parallel planes and Poiseuille flow. More work is needed to provide further explanations.

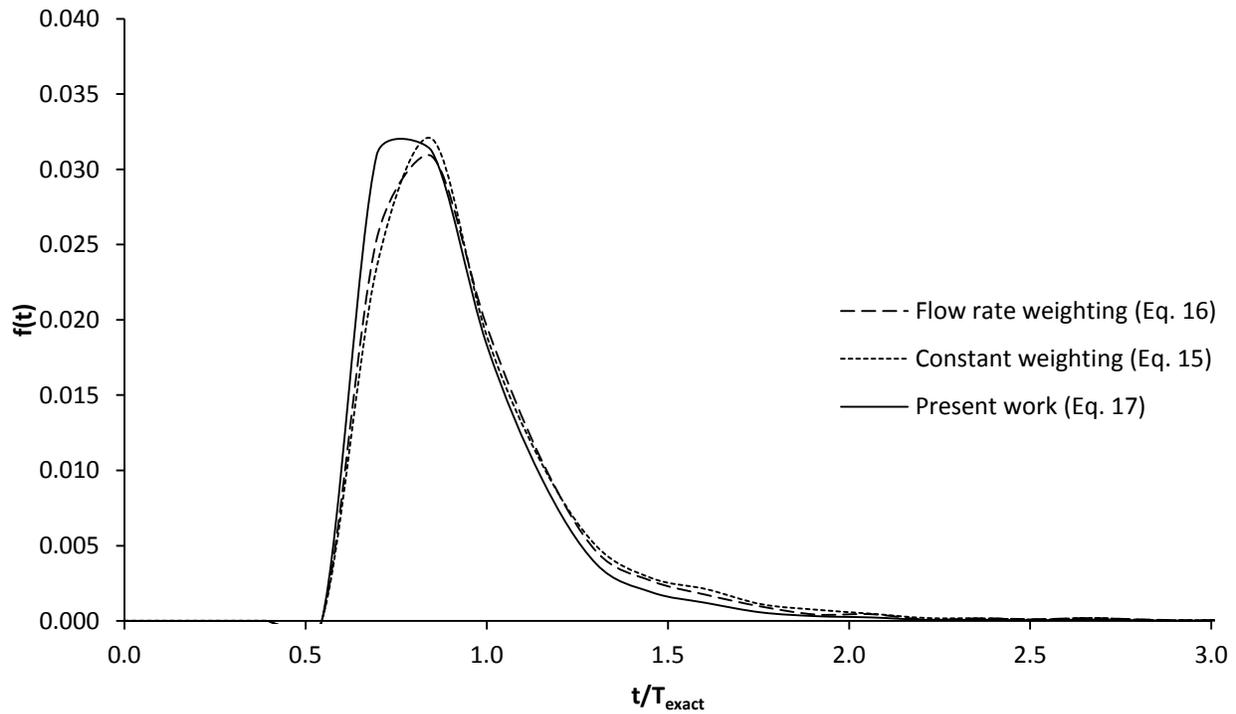


Figure 6.10: Kenics static mixer: influence of power law index on RTD.

Figure 6.11 presents the cumulative RTD curves corresponding to all simulated power law indices. It appears that the curves are very smooth in comparison to the one established for a Newtonian fluid by Nauman.^[30] In addition, no perceptible influence of the power law index can be discerned. Table 4 shows the number of optimal classes obtained by the minimization of the least square criterion (Equation (21)), which varies in the range 40-189 in a non-monotonic fashion with respect to the power law index. Also, the predicted mean time is in very good agreement in comparison to the exact mean residence time $T_{\text{exact}}=66.9\text{s}$ for a flow rate $Q=0.17\text{l/s}$ and a mixer volume $\Omega=11.36\text{l}$ determined from the finite element mesh used for the flow calculation.

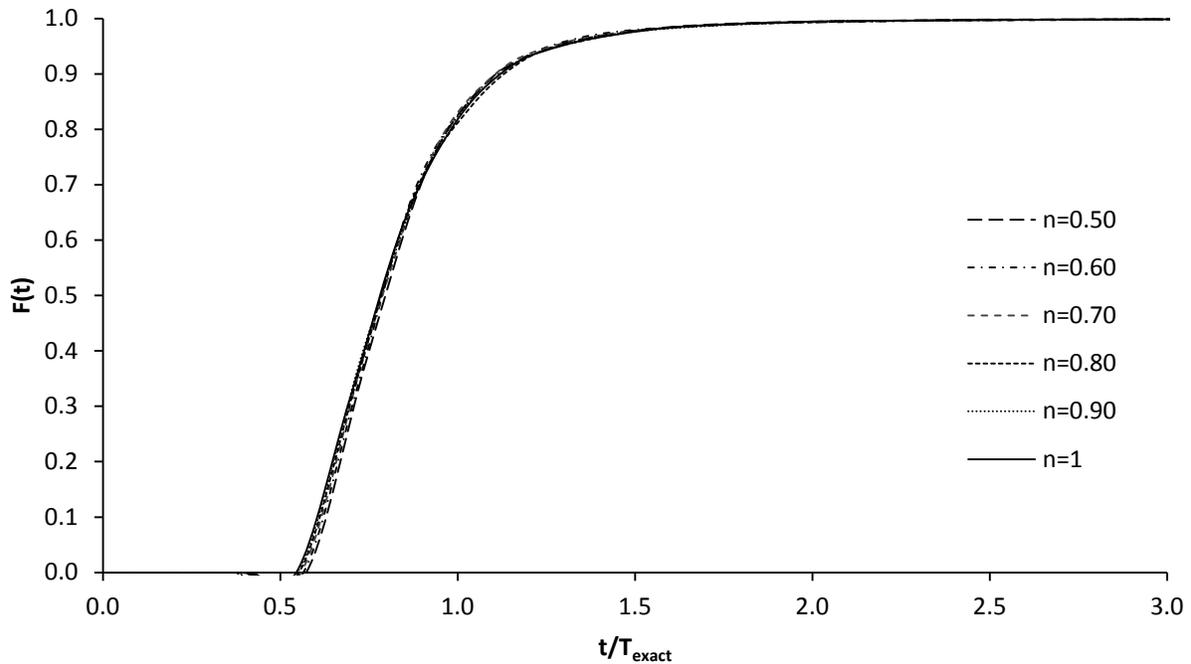


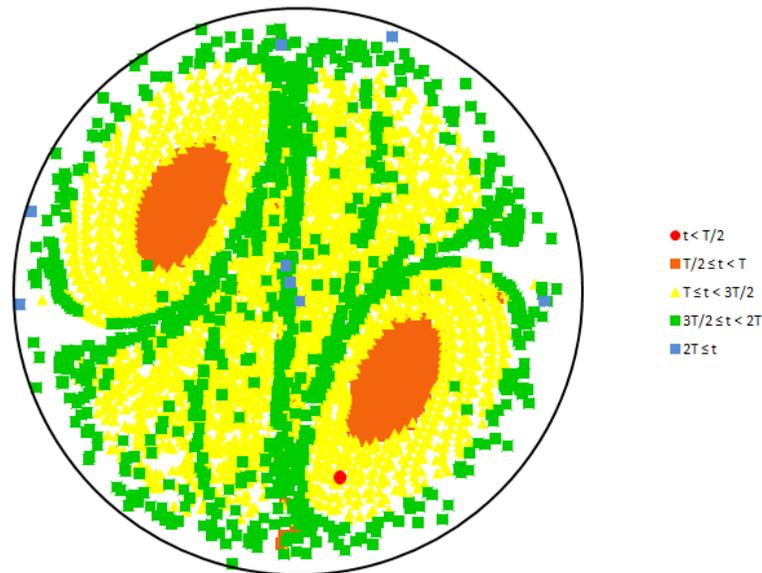
Figure 6.11: Kenics static mixer: influence of power law index on cumulative RTD curves.

Table 4: Kenics static mixer: accuracy of mean time prediction for the optimal value of N .

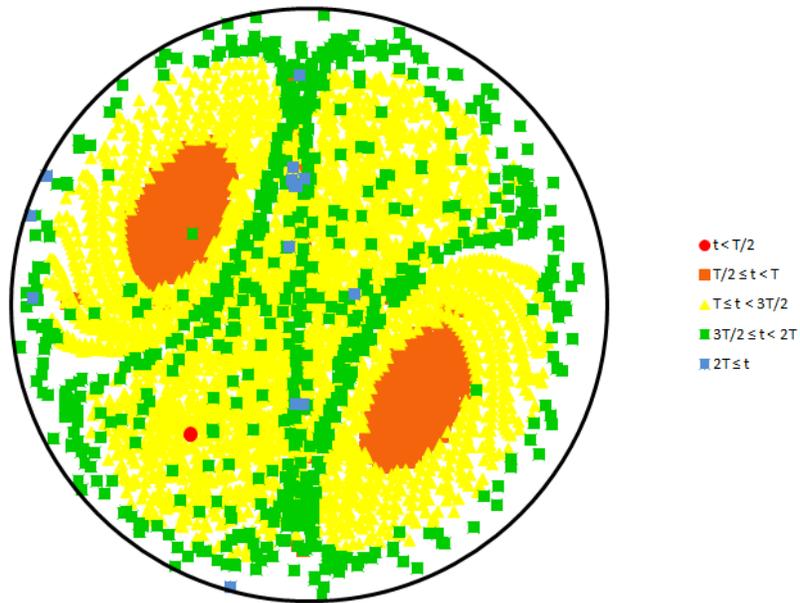
n	N	T_h (s)	T_{exact} (s)	Error (%)
1.0	189	66.9	66.9	≤ 0.1
0.9	40	66.9		
0.8	85	66.9		
0.7	69	67.0		
0.6	73	67.0		
0.5	60	67.0		

Although many studies have been concerned with the characterization of the Kenics static mixer, very few have focused on the geometrical representation of the RTD. The spatial representation of the RTD on Poincaré maps built at the exit of the mixer for $n=1.0$ (Newtonian fluid) and $n=0.5$ is presented in **Figure 6.12a** and **Figure 6.12b**, respectively. The representation of the

maps is made in a fashion similar to the previous example. Their examination reveals a close similarity between Newtonian and non-Newtonian fluids. More specifically, one observes the existence of a central bulk made of particles aging in the range $T/2 \leq t < 3T/2$. Also, the particles aging in the range $T/2 \leq t < T$ form two islands (in red colour) surrounded by striation-like streams made of older particles ($T \leq t < 3T/2$). The oldest particles ($3T/2 \leq t < 2T$) represented by a cross symbol seem to invade the entire flow section. The main differences between the Newtonian and the non-Newtonian maps lie in the location of the fastest particle (red circle) as well as in the shape of the striations, which exhibit an excess of bending of their leading edge near the wall for the non-Newtonian case. Note that Galaktionov et al.^[15] reported similar findings when studying a Carreau-Yasuda fluid.



a)



b)

Figure 6.12 : Spatial representation of the RTD on Poincaré map for the Kenics static mixer: a) Newtonian fluid; b) power law fluid ($n=0.5$).

A closer look at the Poincaré maps reveals that a few particles invade the near-wall imaginary layer even though it is assumed free of particles. This behaviour cannot be guaranteed for complex geometries. The proposed strategy is however advantageous because it yields a lower rate of lost particles, an accurate prediction of mixing time and smoother RTD curves.

CONCLUSION

In this work, RTD calculation in laminar flow regime based on massless tracer technique was revisited to shed more light on the underlying computational aspects. Emphasis was made on the near wall region, which is the main cause of the over-prediction of numerical RTD. A procedure to alleviate the problem was proposed for both Newtonian and non-Newtonian fluids. As discussed, the near-wall region must be empty of particles for better accuracy. The thickness of this layer, which can be determined exactly for analytical flows, was showed to be crucial for the accurate prediction of the RTD. The relevance of our approach was illustrated for analytical flows as well as in the case of a Kenics static mixer. Extension to more complicated geometries is still underway.

ACKNOWLEDGMENTS

The financial support of the Natural Sciences and Engineering Research Council (NSERC) of Canada is gratefully acknowledged. The authors also thank the referees for their careful and critical comments.

REFERENCES

- [1] I. Langmuir, *J. Am. Chem. Soc.* **1908**, 30, 1742.
- [2] P.V. Danckwerts, *Chem. Eng. Sci.* **1953**, 2, 1.
- [3] E.B. Nauman, B.A. Buffham, “*Mixing in continuous flow systems*”, Wiley-Interscience Publication, New York **1983**.
- [4] O. Levenspiel, “*Chemical Reaction Engineering*”, 3rd ed., John Wiley & Sons, New York **1999**.
- [5] M. Heniche, P.A. Tanguy, *Chemical Product and Process Modeling*, **2008**, 3(1), Article 55.
- [6] J. Villiermaux, *Chem. Engng. Sci.*, **1996**, 51, 1939.
- [7] J.M. Ottino, “*The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos and Transport*”, Cambridge University Press, New York **1989**.
- [8] T. Jongen, *AIChE Journal*. **2004**, 50(9), 2020.
- [9] M. Liu, J.M. Tilton, *AIChE Journal*. **2010**, 56(10), 2561.
- [10] S.J. Joo, T.H. Kwon, *Polym. Eng. Sci.* **1993**, 33(15), 959.
- [11] D.M. Hobbs, F.J. Muzzio, *Chem. Eng. J.* **1997**, 67, 153.
- [12] M. Heniche, M. Reeder, P.A. Tanguy, J. Fasano, *AIChE Journal*. **2005**, 43(3), 588.
- [13] M. Heniche, P.A. Tanguy, *Int. J. Num. Meth. Engng.* **2006**, 67(a), 1290.
- [14] S.J. Kim, T.H. Kwon, *Polym. Eng. Sci.* **1996**, 36(11), 1454.
- [15] O.S. Galaktionov, P.D. Anderson, G.W.M. Peters, H.E.H. Meijer, *Intern. Polymer Processing*, **2003**, 2, 138.
- [16] V. Stobiac, M. Heniche, C. Devals, F. Bertrand, P.A. Tanguy, **2008**, 86, 1410.
- [17] J. Aubin, L. Prat, C. Xuereb, C. Gourdon, *Chem. Eng. Processing*, **2009**, 48, 554.

- [18] A. Limper, D. Schramm, *Macromol. Mater. Eng.* **2002**, 287(11), 824.
- [19] H. Potente, W.H. Többen, *Macromol. Mater. Eng.* **2002**, 287, 808.
- [20] X.Y. Wang, R.H. Gong, Z. Dong, I. Porat, *Macromol. Mater. Eng.*, **2006**, 291, 210.
- [21] A.S. Fard, “*Analysis and optimization of mixing inside twin-screw extruders*”, Thesis, Eindhoven University of Technology, **2010**.
- [22] E.B. Nauman, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2008**, 47, 3752.
- [23] Z. Tadmor, C. G. Gogos, “*Principles of Polymer Processing*”, John Wiley & Sons, New York, Brisbane, Chichester, Toronto **1979**.
- [24] H. Sturges, *J. Am. Statist. Assoc.*, **1926**, 21, 65.
- [25] D.W. Scott, *Biometrika*, **1972**, 66, 605.
- [26] D. Freedman, P. Diaconis, *Zeit. Wahr. Ver. Geb.*, **1981**, 57, 453.
- [27] B. Coesnon, M. Heniche, C. Devals, F. Bertrand, P.A. Tanguy, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **2008**, 58, 427.
- [28] E.B. Nauman, “*Chemical Reactor Design, Optimization and Scaleup*”, 2nd ed., John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey **2008**.
- [29] Th. Avalosse, M.J. Crochet, *AIChE Journal*. **1997**, 43(3), 588.
- [30] E.B. Nauman, *Ind. Eng. Chem. Res.* **1991**, 47, 3752.

APPENDIX

A1. ANALYTICAL EXPRESSIONS OF $f(t)$ AND $F(t)$ FOR COUETTE FLOW OF A NEWTONIAN FLUID BETWEEN TWO PARALLEL PLANES

Let us first consider the expression of the axial velocity:

$$v(y) = \frac{v_{max}}{H} y + \frac{v_{max}}{2}$$

and the mean velocity

$$\bar{v} = \frac{v_{max}}{2}$$

$$f(t)dt = \frac{dQ}{Q} = \frac{Wv(y)dy}{WH\bar{v}}$$

$$t = \frac{L}{v(y)} = \frac{L}{\frac{v_{max}}{H}y + \frac{v_{max}}{2}}$$

From the above expression, we have

$$dy = -\frac{LH}{t^2 v_{max}} dt$$

The following expressions for $f(t)$ and $F(t)$ are then obtained:

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq t_{min} \\ \frac{2t_{min}^2}{t^3} & \text{si } t > t_{min} \end{cases}$$

$$F(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq t_{min} \\ 1 - \frac{t_{min}^2}{t^2} & \text{si } t > t_{min} \end{cases}$$

A2. THICKNESS OF THE NEAR-WALL REGION FOR LAMINAR POWER LAW FLUID FLOW IN CYLINDRICAL PIPE

The axial velocity and the maximum velocity are given by

$$v_z = \frac{R}{\left(\frac{1}{n} + 1\right)} \left(R * \frac{P_0 - P_L}{2KL}\right)^{\frac{1}{n}} \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^{\frac{1}{n}+1}\right)$$

$$V_{zmax} = \frac{R}{\left(\frac{1}{n} + 1\right)} \left(R * \frac{P_0 - P_L}{2KL}\right)^{\frac{1}{n}}$$

The mean residence time is expressed as follows:

$$T = \frac{L}{\langle v_z \rangle} = \frac{L}{v_{zmax}} * \frac{\frac{1}{n} + 3}{\frac{1}{n} + 1}$$

Replacing the maximum velocity and integrating over the whole cross section lead to:

$$T = \frac{1}{\pi(R - \delta)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{R-\delta} t * r dr d\theta = \frac{2}{(R - \delta)^2} \int_0^{R-\delta} \frac{L}{v_z} r dr$$

Finally, the following equation for δ :

$$T - \frac{2L}{v_{zmax} * (R - \delta)^2} \int_0^{R-\delta} \frac{r}{\left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^{\frac{1}{n}+1}\right)} dr = 0$$

A3. ANALYTICAL EXPRESSIONS OF F(T) AND F(T) FOR POISEUILLE FLOW OF A POWER LAW FLUID IN CYLINDRICAL PIPE

From the RTD theory, we have

$$f(t)dt = \frac{dQ}{Q} = 2\pi r * \frac{v(r)}{\pi R^2 \bar{v}} dr$$

The time t can be expressed as a function of the fluid velocity and pipe length:

$$t = \frac{L}{v_z(r)} = \frac{L}{v_{zmax} \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^{\frac{1}{n+1}}\right)}$$

From the above equation, it comes:

$$dr = R \frac{n}{n+1} \frac{L}{v_{zmax}} \frac{1}{t^2} \left(1 - \frac{L}{v_{zmax}t}\right)^{-\frac{1}{n+1}} dt$$

An expression for $f(t)dt$ then follows:

$$f(t)dt = \frac{2n(3n+1)(t_{min})^2}{(n+1)^2} \left(1 - \frac{t_{min}}{t}\right)^{\frac{n}{n+1}} \frac{1}{t^3} \left(1 - \frac{t_{min}}{t}\right)^{-\frac{1}{n+1}} dt$$

$$\text{So that } f(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t \leq t_{min} \\ \frac{2n(3n+1)(t_{min})^2}{(n+1)^2} \frac{1}{t^3} \left(1 - \frac{t_{min}}{t}\right)^{\frac{n-1}{n+1}} & \text{if } t > t_{min} \end{cases}$$

and

$$F(t) = \int_{t_{min}}^t f(t)dt$$

$$F(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t \leq t_{min} \\ \left(\frac{2n(t_{min})}{t(n+1)} + 1\right) \left(1 - \frac{t_{min}}{t}\right)^{\frac{2n}{n+1}} & \text{if } t > t_{min} \end{cases}$$

For a Newtonian fluid ($n=1$), these expressions simplify to

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq t_{min} \\ \frac{2(t_{min})^2}{t^3} & \text{si } t > t_{min} \end{cases}$$

$$F(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t \leq t_{min} \\ 1 - \left(\frac{t_{min}}{t}\right)^2 & \text{if } t > t_{min} \end{cases}$$