Modélisation tridimensionnelle du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides visqueux rhéologiquement complexes

François Bertrand

▶ **To cite this version:**

François Bertrand. Modélisation tridimensionnelle du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides visqueux rhéologiquement complexes. Alimentation et Nutrition. Institut National Polytechnique de Lorraine, 1995. Français. NNT : 1995INPL148N . tel-01776397

HAL Id: tel-01776397
https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01776397

Submitted on 24 Apr 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

136 89757

95 INPL 140

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

[M] 1995 BERTRAND, F.

Modélisation tridimensionnelle du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides visqueux rhéologiquement complexes

Service Commun de la Documentation
INPL
Nancy-Brabois

Thèse présentée

par

François BERTRAND

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Institut National Polytechnique de Lorraine

Soutenue publiquement le 6 décembre 1995,

Devant la Commission d'examen formée de :

MM.	A. STORCK	Professeur INPL	Président
	J. BERTRAND	Directeur de recherche CNRS/INPT	Rapporteur
	Y. DEMAY	Professeur Université de Nice	Rapporteur
	G. CHOUNET	Chef d'unité matériaux et technologies S.N.P.E.	
	P.A. TANGUY	Professeur École Polytechnique de Montréal	Codirecteur de thèse
	L. CHOPLIN	Professeur INPL	Directeur de thèse

©Copyright 1995

À mon épouse Johanne

et ma fille Anne-Sophie.

RÉSUMÉ

Le malaxage des fluides visqueux et des pâtes est une opération unitaire courante dans les industries chimique, alimentaire et pharmaceutique. Parmi les systèmes de mélange industriels les plus utilisés dans un tel cas, on retrouve entre autres les malaxeurs à mouvement planétaire. Ceux-ci comportent généralement deux ou trois pales engrenées de formes diverses qui sont montées sur un carrousel lui-même en rotation.

Ce travail consiste à mettre au point une méthode numérique efficace pour la modélisation tridimensionnelle du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides rhéologiquement complexes de grande viscosité.

Cette méthode, que nous appelons la méthode des éléments finis virtuels, est basée sur la théorie de l'optimisation avec contraintes et appartient à la classe des méthodes de domaine fictif. Seul le réservoir du malaxeur doit être maillé; le mobile d'agitation, comprenant le carrousel et les pales, est quant à lui représenté à l'aide de points de contrôle sur lesquels des contraintes cinématiques sont imposées puis intégrées aux équations d'échange au moyen de multiplicateurs de Lagrange.

Après avoir été validée, la méthode des éléments finis virtuels est utilisée pour simuler l'écoulement non isotherme dans un malaxeur à mouvement planétaire de la société Baker-Perkins. Il est notamment question de l'efficacité de ce système d'agitation ainsi que de l'influence de la rhéologie sur les mécanismes de mélange.

Nous complétons ce travail en montrant, à partir de calculs numériques, que le concept de Metzner et Otto peut être utilisé pour prédire la puissance consommée par ce même malaxeur lors du mélange de fluides viscoplastiques.

SUMMARY

The mixing of viscous fluids and pastes is a common unit operation in the chemical, food and pharmaceutical industries. Planetary mixers are among the most popular industrial mixing devices used for this purpose. They are made up of two or three intermeshing impellers of various shapes mounted on a rotating carousel.

This work consists of developing an efficient numerical strategy for the three-dimensional modeling of the mixing of highly viscous rheologically complex fluids with planetary mixers.

This method, dubbed the virtual finite element method, is based upon optimization techniques and belongs to the class of fictitious domain methods. Only a mesh for the vessel needs to be generated; the carousel and the blades are discretized using control points on which kinematic constraints are enforced and introduced into the mathematical formulation through the use of Lagrange multipliers.

The virtual finite element method is first validated. It is then used for the simulation of non-isothermal flow in a planetary mixer from Baker-Perkins. More specifically, we are concerned with mixing efficiency in such a system as well as with the influence of rheology on flow patterns.

Finally, we show though numerical computations that the Metzner and Otto concept can be used for the prediction of the power consumption by the Baker-Perkins planetary mixer in the case of viscoplastic fluids.

REMERCIEMENTS

Telle qu'elle apparaît, cette thèse doit beaucoup à certaines personnes que je veux ici remercier.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde gratitude au Professeur Lionel Choplin pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser ce travail. Son dynamisme et son implication dans le domaine du mélange ont été pour moi une source de motivation.

Je désire également remercier le Professeur Philippe A. Tanguy de l'Unité de Recherche en Procédés d'Écoulements Industriels (URPEI) de l'École Polytechnique de Montréal pour ses nombreuses suggestions, sa compréhension et son encouragement tout au long de ce travail.

Mes remerciements vont ensuite à la Société Rhéotek pour m'avoir permis d'utiliser le logiciel d'éléments finis tridimensionnels POLY3D™.

Toute ma reconnaissance s'adresse au Professeur A. Storck de l'INPL qui me fait l'honneur d'être le président de ce jury de thèse.

Qu'il me soit permis de remercier Monsieur J. Bertrand, Directeur de recherche CNRS à l'INPT, ainsi que le Professeur Y. Demay de l'Université de Nice, pour avoir accepté de juger ce travail et d'en faire le rapport.

Je suis très sensible à l'honneur que me fait Monsieur G. Chounet, Chef d'unité matériaux et technologies à la S.N.P.E., en participant à ce jury de thèse.

Je m'en voudrais de ne pas remercier tous les membres de l'URPEI et du GEMICO pour leur support et leur esprit de camaraderie. Je remercie tout

particulièrement le Docteur H. Z. Li du GEMICO et Messieurs F. Thibault et R. Labrie de l'URPEI.

Je ne puis finalement passer sous silence la compréhension dont a fait preuve mon épouse Johanne tout au long de ce travail.

Sans le concours de ces personnes dévouées à ma cause, cette thèse ne serait pas ce qu'elle est maintenant. Je les remercie encore une fois.

TABLE DES MATIÈRES

LISTE DES FIGURES 5

LISTE DES TABLEAUX 9

NOMENCLATURE 10

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 16

1.1 Mélange de fluides visqueux 16
1.1.1 Généralités 16
1.1.2 Types de fluides 17
1.1.3 Types d'agitateurs 20
1.1.4 Conception des systèmes de mélange 25

1.2 Modélisation numérique des procédés de mélange 29
1.2.1 Historique 29
1.2.2 Génération de maillages 31
1.2.3 Résolution des systèmes linéaires 32

1.3 Objectif du présent travail 33

CHAPITRE 2 MODÉLISATION DU PROCÉDÉ DE MALAXAGE À MOUVEMENT PLANÉTAIRE 34

2.1 Introduction 34

2.2 Équations d'échange 35
2.2.1 Conservation de la quantité de mouvement et de la matière 35
2.2.2 Conservation de l'énergie 37
2.2.3 Conditions aux limites 39

2.3 Méthode des éléments finis 40

2.3.1 Généralités 40
2.3.2 Rappel d'analyse fonctionnelle 40
2.3.3 Discrétisation des équations de Navier-Stokes 41
2.3.4 Discrétisation de l'équation de conservation de l'énergie 45

2.4 Méthode du lagrangien augmenté 48
2.4.1 Problème d'optimisation avec contraintes 48
2.4.2 Algorithme d'Uzawa 49
2.4.3 Traitement de la rhéologie 50

CHAPITRE 3 MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS 53

3.1 Résolution de problèmes d'écoulement dans des domaines contenant des parties mobiles ou déformables 53

3.2 Méthode du domaine fictif 57
3.2.1 Description de la méthode 57
3.2.2 Méthode des éléments finis virtuels 61

3.3 Résolution des systèmes linéaires 63
3.3.1 Généralités 63
3.3.2 Résolution des systèmes linéaires en température 66
3.3.3 Résolution des systèmes de Stokes 66
3.3.4 Traitement des problèmes non linéaires 72

CHAPITRE 4 VALIDATION DE LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS 74

4.1 Validation 2D : problème de Couette-Hatschek 74
4.1.1 Présentation du problème 74
4.1.2 Résultats 77

4.2 Validation 3D : agitation à l'aide d'un ruban hélicoïdal 79

4.2.1 Présentation du problème 79
4.2.2 Résultats 81

CHAPITRE 5 RÉSULTATS NUMÉRIQUES 87

5.1 Présentation du problème 87
5.1.1 Type de malaxeur 87
5.1.2 Paramètres physiques 88
5.1.3 Conditions opératoires 89
5.1.4 Stratégie de résolution 89

5.2 Résultats 93
5.2.1 Étude de la température 93
5.2.1.1 Homogénéisation thermique 93
5.2.1.2 Régime établi 94
5.2.2 Étude de l'écoulement 95
5.2.3 Influence de la rhéologie 97
5.2.3.1 Loi de puissance 97
5.2.3.2 Viscoplasticité 98

CHAPITRE 6 CONCEPT DE METZNER ET OTTO POUR LES FLUIDES VISCOPLASTIQUES 127

6.1 Analyse dimensionnelle 127

6.2 Validation du concept de Metzner et Otto pour les fluides viscoplastiques 130
6.2.1 Ancre 131
6.2.1.1 Description du problème 131
6.2.1.2 Résultats 132
6.2.2 Malaxeur à mouvement planétaire 136
6.2.2.1 Description du problème 137
6.2.2.2 Résultats 137

CHAPITRE 7 CONCLUSION 144

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES 147

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Turbines (haut:type axial ; bas:type radial).	20
Figure 1.2	Agitateurs raclants (de gauche à droite, une ancre et un ruban hélicoïdal).	21
Figure 1.3	Malaxeur à bras en z.	23
Figure 1.4	Malaxeur à mouvement planétaire.	24
Figure 1.5	Maillage d'un réservoir cylindrique équipé d'un ruban hélicoïdal.	32
Figure 2.1.	Représentation schématique d'un malaxeur à mouvement planétaire.	35
Figure 2.2	Élément fini $P_1^+ - P_0$.	44
Figure 2.3	Élément fini P_1.	47
Figure 3.1	Domaine bidimensionnel contenant un objet.	58
Figure 4.1	Problème de Couette-Hatschek.	75
Figure 4.2	Élément fini $P_2^+ - P_1$.	75
Figure 4.3	Maillage et points de contrôle (h=0,025) pour le problème de Couette-Hatschek.	77
Figure 4.4	Champ de vitesse pour le problème de Couette-Hatschek (h=0,025).	78
Figure 4.5	Lignes de courant pour le problème de Couette-Hatschek (h=0,025).	78
Figure 4.6	Convergence de la méthode des éléments finis virtuels.	79
Figure 4.7	Caractéristiques géométriques du réservoir cylindrique muni d'un ruban hélicoïdal.	80
Figure 4.8	Maillage du réservoir cylindrique.	82

Figure 4.9 Tubes de pompage axial. 85

Figure 4.10 Norme du champ de vitesse sur un plan de coupe médian. 86

Figure 5.1 Malaxeur à mouvement planétaire Baker-Perkins à deux pales torsadées. 99

Figure 5.2 Évolution du champ de température lors du malaxage (vue plongeante). 100

Figure 5.3 Évolution du champ de température lors du malaxage (vue en perspective). 101

Figure 5.4 Champ de température en régime périodique établi. 102

Figure 5.5 Puissance dissipée par friction en régime périodique établi. 103

Figure 5.6 Énergie de dissipation visqueuse après 1 tour de carrousel. 104

Figure 5.7 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 0°). 105

Figure 5.8 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 0°). 106

Figure 5.9 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 72°). 107

Figure 5.10 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 72°). 108

Figure 5.11 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 144°). 109

Figure 5.12 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 144°). 110

Figure 5.13 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 216°). 111

Figure 5.14 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 216°). 112

Figure 5.15 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 288°). 113

Figure 5.16 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 288°). 114

Figure 5.17 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur. 115

Figure 5.18 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur. 116

Figure 5.19 Champ de vitesse de cisaillement en régime périodique établi. 117

Figure 5.20 Champ de pression en régime périodique établi. 118

Figure 5.21 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=0,50). 119

Figure 5.22 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=0,50). 120

Figure 5.23 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,00). 121

Figure 5.24 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,00). 122

Figure 5.25 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,40). 123

Figure 5.26 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,40). 124

Figure 5.27 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (τ_0= 5000). 125

Figure 5.28 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (τ_0= 5000). 126

Figure 6.1 Caractéristiques géométriques du réservoir et de l'ancre. 132

Figure 6.2 Graphe de N_p en fonction de Re_g. 133

Figure 6.3 Graphe de $K_p(Bi)$ en fonction de Bi. 134

Figure 6.4 Histogramme de K_s en fonction de Bi. 135

Figure 6.5 Courbe généralisée pour la puissance consommée. 135

Figure 6.6 Graphe de N_p en fonction de Bi. 136

Figure 6.7 Graphe de la puissance consommée en fonction du temps. 138

Figure 6.8 Graphe de N_p en fonction de Re_g. 139

Figure 6.9 Graphe de $K_p(Bi)$ en fonction de Bi. 140

Figure 6.10 Histogramme de K_s en fonction de Bi. 140

Figure 6.11 Courbe généralisée pour la puissance consommée. 141

Figure 6.12 Graphe de N_p en fonction de Bi. 142

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 Ressources informatiques nécessaires pour la résolution par la méthode d'élimination de Gauss du système matriciel (2.44). 64

Tableau 3.2 Ressources informatiques nécessaires pour la résolution par la méthode d'Uzawa incomplet du système matriciel (2.44)-(2.45). 69

Tableau 4.1 Caractéristiques des maillages utilisés pour la simulation du problème de Couette-Hatschek. 76

Tableau 4.2 Caractéristiques des maillages utilisés pour la simulation de l'écoulement dans un réservoir cylindrique muni d'un ruban hélicoïdal. 81

Tableau 4.3 Valeurs du temps de circulation et du couple. 83

Tableau 5.1 Caractéristiques numériques du maillage utilisé pour la simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire Baker-Perkins. 90

Tableau 5.2 Temps de calcul nécessaire pour la simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire Baker-Perkins. 92

NOMENCLATURE

Lettres de l'alphabet

a longueur de descente dans l'algorithme d'Uzawa incomplet.

b variable de travail dans l'algorithme d'Uzawa incomplet.

$\mathbf{B}$ matrice divergence.

c longueur de descente dans l'algorithme d'Uzawa.

D diamètre du réservoir de mélange (m).

$\mathbf{D}$ matrice dans la méthode du domaine fictif.

$\mathbf{D}$ direction de descente dans l'algorithme d'Uzawa incomplet.

$\mathbf{E}$ matrice dans la méthode du domaine fictif.

$\mathbf{f}$ force externe dans les équations de Navier-Stokes (N/m^3).

$\mathbf{G}$ vecteur dans la méthode du domaine fictif.

$\mathbf{H}$ matrice dans la méthode du domaine fictif.

k conductibilité thermique (W/m·K).

m indice de consistance pour le modèle de la loi de puissance ($Pa \cdot s^{n-1}$).

L lagrangien pour le problème de Stokes.

n indice de puissance pour le modèle de la loi de puissance.

$\mathbf{n}$ vecteur normal.

N vitesse de rotation (tours/s).

P puissance consommée (W).

p indice de puissance pour le modèle de Cross.

p pression (Pa).

$\mathbf{P}$ vecteur contenant la pression.

r paramètre de pénalisation dans le lagrangien augmenté.

$\mathbf{r}$ rayon (m).

R rayon du cylindre extérieur pour le problème de Couette-Hatschek (m).

$\mathbf{R}$ résidu primal dans l'algorithme d'Uzawa incomplet.

s paramètre de pénalisation dans le lagrangien augmenté.

$\mathbf{S}$ matrice de préconditionnement.

t temps (s).

T température (K).

T 1 tour de carrousel = 4 s.

$\mathbf{T}$ vecteur contenant la température.

$\mathbf{v}$ vitesse (m/s).

$\mathbf{V}$ vecteur contenant le champ de vitesse.

$\mathbf{Z}$ direction de descente dans l'algorithme d'Uzawa incomplet.

Lettres grecques

α diffusivité thermique (m^2/s).

α paramètre dans l'algorithme d'Uzawa.

β paramètre dans l'algorithme d'Uzawa.

δ fonction de Dirac.

ϕ fonction-test pour la pression.

φ fonction-test pour la température.

Γ frontière du domaine Ω.

η viscosité apparente (Pa·s).

κ rapport des rayons pour le problème de Couette-Hatschek.

λ multiplicateur de Lagrange dans la formulation variationnelle de la méthode du domaine fictif.

Λ vecteur contenant le multiplicateur de Lagrange dans la méthode du domaine fictif.

μ viscosité newtonienne (Pa·s).

Θ fonctionnelle pour le traitement de la rhéologie.

ϑ fonctionnelle pour le traitement de la rhéologie.

ρ masse volumique (kg/m^3).

σ multiplicateur de Lagrange pour le traitement de la rhéologie.

τ contrainte de cisaillement (Pa).

τ tenseur des contraintes (Pa).

ω vitesse angulaire (rad/s).

Ω domaine d'écoulement.

ξ fonction-test pour la méthode du domaine fictif.

ψ fonction-test pour la vitesse.

Nombres adimensionnels

Bi nombre de Bingham.

Br nombre de Brinkman.

He nombre de Hedström.

K_p constante de puissance.

N_p nombre de puissance ou de Newton.

Pe nombre de Péclet.

Re nombre de Reynolds.

Re_a nombre de Reynolds du procédé.

Re_g nombre de Reynolds généralisé.

Re_μ nombre de Reynolds newtonien.

Autres symboles

$\mathbf{A}_T$ matrice de diffusion en température.

$\mathbf{A}_v$ matrice de diffusion en vitesse.

$\mathbf{B}^T$ matrice gradient.

C_p capacité calorifique (J/kg·K).

$\mathbf{C}_T(\mathbf{V})$ matrice de convection en température.

$\mathbf{C}_v(\mathbf{V})$ matrice de convection en vitesse.

$\frac{D\cdot}{Dt}$ dérivée de Jaumann dans le modèle de Maxwell ou dérivée matérielle classique ($\cdot\ s^{-1}$).

$\mathbf{F}_T$ vecteur contenant le terme de dissipation visqueuse.

$\mathbf{F}_v$ vecteur contenant la force externe en vitesse.

L_r lagrangien augmenté pour le problème de Stokes.

L_{rs} lagrangien augmenté pour le traitement de la rhéologie.

L^*_{rs} lagrangien augmenté dans la méthode du domaine fictif.

$\mathbf{M}_T$ matrice masse en température.

$\mathbf{M}_v$ matrice masse en vitesse.

NEQ nombre d'équations d'un système matriciel.

p_h pression dans la formulation discrète (Pa).

Q_h espace d'approximation en pression.

S_h espace d'approximation en température.

t_1 temps caractéristique pour les modèles de Carreau et de Cross (s).

T_h température dans la formulation discrète (K).

T_p température à la paroi (K).

T_{ref} température de référence (K).

V_c vitesse du carrousel (tours/min).

V_e vitesse de la pale évidée (tours/min).

V_p vitesse de la pale pleine (tours/min).

$\mathbf{v}_h$ vitesse dans la formulation discrète (m/s).

V_h espace d'approximation en vitesse.

v_θ composante angulaire de la vitesse (m/s).

$\mathbf{x}_i$ point de contrôle dans la méthode du domaine fictif.

ϕ_h fonction-test discrète pour la pression.

φ_h fonction-test discrète en température.

Φ_h espace d'approximation pour les fonctions-tests en température.

$\dot{\gamma}$ cisaillement (s^{-1}).

$\dot{\gamma}$ tenseur des vitesses de déformation (s^{-1}).

Γ^* frontière du domaine fictif.

λ_h multiplicateur de Lagrange dans la formulation discrète de la méthode du domaine fictif.

Λ_h espace d'approximation du multiplicateur de Lagrange dans la méthode du domaine fictif.

μ_0 viscosité de plateau pour les modèles rhéologiques (Pa·s).

μ_∞ viscosité du solvant pour les modèles rhéologiques (Pa·s).

Ω_0 vitesse angulaire pour le problème de Couette-Hatschek (tours/minute).

Ω^* domaine fictif.

ξ_h fonction-test discrète pour la méthode du domaine fictif.

ψ_h fonction-test discrète pour la vitesse.

ζ_h fonction de base en température.

$\mathfrak{I}_h$ Maillage volumique.

$\mathfrak{I}_h^*$ Maillage surfacique de la frontière du domaine fictif.

CHAPITRE 1
INTRODUCTION

1.1 Mélange de fluides visqueux

1.1.1 Généralités

Le mélange de fluides visqueux est une opération unitaire très importante dans nombre de procédés industriels. On la retrouve notamment en génie alimentaire, dans l'industrie des peintures, dans celle des pâtes et papier et également dans la fabrication des carburants solides pour les applications spatiales (propergols).

Les fluides visqueux sont très souvent des substances non newtoniennes. Par exemple, le propergol est préparé en mélangeant une matrice polymère chargée de perchlorates responsables de sa viscosité complexe. Durant la phase de malaxage, la viscosité du milieu évolue fortement, passant de 10 Pa·s en début de malaxée à 500 Pa·s après ajout des charges. À cette augmentation de la viscosité s'ajoute une modification du comportement rhéologique qui devient non newtonien au cours du procédé. On comprendra alors que la mise au point d'un système de mélange efficace dans une telle situation doive tenir compte de la nature évolutive du milieu.

L'exemple précédent n'est pas unique; il permet de souligner l'importance de la rhéologie lors de la conception d'un procédé de mélange. La nature complexe des fluides visqueux rend difficile le choix d'un système d'agitation

et la conception de systèmes industriels de grande capacité (Smith 1990). Comme cette complexité se manifeste de plusieurs façons, il convient donc, tout d'abord, d'en présenter les grandes caractéristiques.

1.1.2 Types de fluides

Les fluides visqueux sont très souvent non newtoniens. On doit donc utiliser des équations d'état rhéologiques de formes diverses qui permettent de modéliser leur comportement (déformation) sous contrainte.

Il existe des fluides purement visqueux dont le comportement ne dépend pas du temps:

$$\tau = \eta(\dot{\gamma})\,\dot{\gamma}. \tag{1.1}$$

Ces fluides peuvent notamment être rhéofluidifiants ou rhéoépaississants selon que la viscosité apparente dans l'équation d'état rhéologique diminue ou augmente avec le cisaillement. Les modèles les plus courants sont:

$$\tau = m|\dot{\gamma}|^{n-1}\,\dot{\gamma}, \qquad \text{(loi de puissance)} \tag{1.2}$$

$$\tau = \left(\mu_\infty + \frac{(\mu_0 - \mu_\infty)}{(1+(t_1\dot{\gamma})^2)^s}\right)\dot{\gamma}, \qquad \text{(Carreau)} \tag{1.3}$$

$$\tau = \left(\mu_\infty + \frac{(\mu_0 - \mu_\infty)}{1+(t_1\dot{\gamma})^p}\right)\dot{\gamma}. \qquad \text{(Cross)} \tag{1.4}$$

Comme exemple de fluides rhéofluidifiants, on peut citer les solutions polymériques, les milieux de fermentation et les polymères fondus. Les fluides rhéoépaississants sont beaucoup moins courants; par exemple, les solutions contenant de l'amidon ou encore les sauces de couchage à haut

taux de solide utilisées pour la fabrication du papier à valeur ajoutée (Roper et Attal 1993).

Certains fluides visqueux peuvent être viscoplastiques ou binghamiens, c'est-à-dire posséder un seuil de contrainte en-dessous duquel ils ne s'écoulent pas. Ils réagissent à toutes fins utiles comme un solide. Pour expliquer ce comportement, certains auteurs (par exemple, Lobe et White 1979) supposent que ces fluides sont constitués au repos d'un réseau structuré et rigide qui ne peut se désorganiser que lorsqu'il est soumis à une contrainte suffisamment importante. À cause de sa simplicité, le modèle de Bingham est le plus utilisé pour représenter les fluides à seuil:

$$\tau = \tau_0 + \mu\,\dot{\gamma}, \qquad \tau \geq \tau_0, \tag{1.5a}$$

$$\tau = 0, \qquad \text{sinon.} \tag{1.5b}$$

Mentionnons également le modèle de Herschel-Bulkley qui permet de décrire un comportement rhéofluidifiant ou rhéoépaississant au-delà du seuil de contrainte:

$$\tau = \tau_0 + m|\dot{\gamma}|^{n-1}\dot{\gamma}, \qquad \tau \geq \tau_0, \tag{1.6a}$$

$$\tau = 0, \qquad \text{sinon.} \tag{1.6b}$$

Parmi les exemples de fluides viscoplastiques, on peut citer en particulier le sang, les peintures, les margarines, les graisses et les suspensions de Kaolin ou les solutions de carbonate de calcium telles qu'on les retrouve dans l'industrie des pâtes et papier (Beazley 1980). Le lecteur trouvera dans Bird, Dai et Yarusso (1983) un résumé des différents problèmes reliés à la caractérisation des fluides à seuil.

Il arrive parfois que le comportement rhéologique d'un fluide visqueux dépende du temps. Le réarrangement de structure interne est l'explication la

plus courante pour expliquer ce phénomène. Il en résulte alors que la viscosité apparente du fluide varie en fonction du temps. Plus précisément, on parlera de fluide thixotrope ou rhéopexe lorsque, suite à un cisaillement, il y a désorganisation ou organisation de structure (Midoux 1993). Expérimentalement, ce type de comportement est très difficile à caractériser et est très souvent ignoré. On le retrouve fréquemment dans le domaine du génie alimentaire lors de la préparation des émulsions et dans l'industrie des pâtes et papier lors de la fabrication des sauces de couchage.

Finalement, il existe des fluides viscoélastiques. Ceux-ci, en plus d'être visqueux, réagissent de façon élastique à une contrainte en se déformant puis en revenant graduellement à leur état initial lorsque celle-ci a cessé. Pour cette raison, ces fluides sont également appelés "fluides à mémoire". Un des modèles les plus simples pour décrire le comportement des fluides viscoélastiques est le modèle de Maxwell:

$$\tau + \lambda \frac{D\tau}{Dt} = \mu\dot{\gamma}, \tag{1.7}$$

où $\frac{D}{Dt}$ représente la dérivée de Jaumann et où λ, le temps de relaxation du fluide, exprime la vitesse à laquelle une contrainte appliquée à ce fluide peut se dissiper. Malheureusement, ce modèle ainsi que les nombreux autres disponibles dans la littérature ne permettent pas de représenter adéquatement le comportement d'un fluide viscoélastique dans la plupart des situations physiques. Qu'ils soient différentiels, intégraux ou mixtes, aucun de ces modèles ne semble être assez robuste pour pouvoir être utilisé dans toutes les situations. Enfin, parmi les fluides susceptibles de présenter un comportement viscoélastique, on notera les polymères fondus en général, les solutions polymériques suffisamment concentrées et les suspensions de

particules élastiques. Le lecteur intéressé par la rhéologie et l'écoulement des fluides viscoélastiques pourra consulter l'ouvrage de Bird et coll. (1976).

1.1.3 Types d'agitateurs

L'homogénéisation des fluides visqueux rhéologiquement complexes est une opération difficile dont l'efficacité dépend du système de mélange utilisé. Les systèmes de mélange peuvent être classés en trois catégories distinctes.

Dans la première, on retrouve les turbines à décharge radiale ou axiale tels les disques, les hélices marines et les turbines Rushton (Figure 1.1).

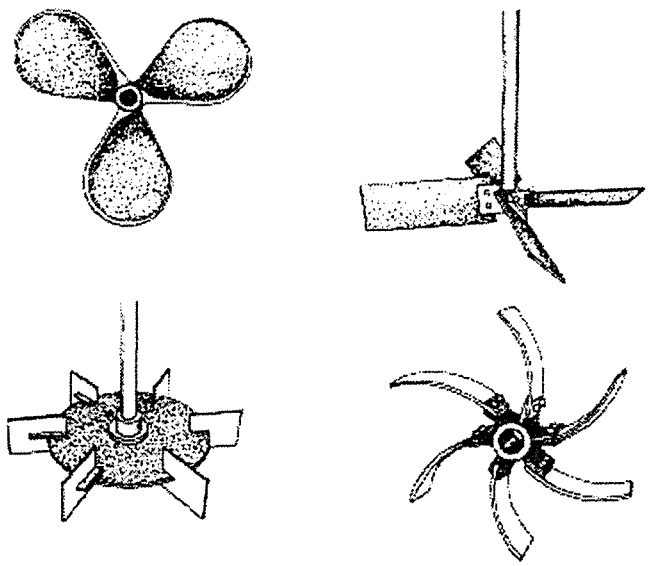

Figure 1.1 Turbines (haut:type axial ; bas:type radial).

Les turbines sont bien adaptées au mélange de fluides de faible viscosité et sont généralement utilisées à haut régime (100-1000 tours/minute). Celles-ci sont par contre beaucoup moins efficaces pour le mélange de fluides visqueux, leur utilisation pouvant conduire à un produit non homogène et même grumeleux (Nagata et coll. 1972). Dans le cas des fluides

rhéofluidifiants ou viscoplastiques, la viscosité apparente peut devenir très grande dans les régions faiblement cisaillées, loin de la turbine; le mouvement peut aller jusqu'à cesser complètement. On observe alors la formation d'une caverne qui englobe l'agitateur et à l'extérieur de laquelle le mélange est inexistant (Eklund et Teirfolk 1981, Solomon et coll. 1981). Elson et Nienow (1988) ont montré que l'ajout de chicanes dans le réservoir n'a qu'un effet limité qui n'empêche pas la formation des cavernes. D'autres ont par ailleurs démontré qu'on peut accroître l'efficacité d'une turbine en ajoutant à son mouvement de rotation standard un mouvement vertical de va-et-vient. Ce système de mécanique plus complexe, semblable à une colonne d'extraction Karr, permet l'homogénéisation des fluides visqueux dans des temps raisonnables (Murakami et coll. 1980).

Dans la seconde catégorie sont regroupés les agitateurs raclants de grand diamètre. On y retrouve notamment les ancres et les rubans hélicoïdaux avec ou sans vis (Figure 1.2). Convenant mieux au mélange de fluides visqueux (Oldshue 1983), ces systèmes d'agitation sont normalement exploités à bas régime (< 100 tours/minute).

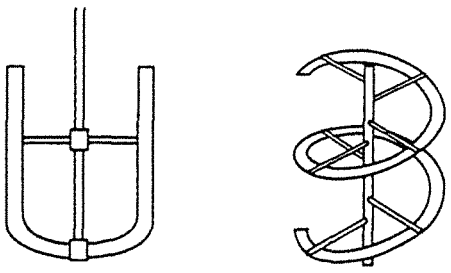

Figure 1.2 Agitateurs raclants (de gauche à droite, une ancre et un ruban hélicoïdal).

De nombreuses expériences, menées en laboratoire et dans l'industrie avec plusieurs types d'agitateurs raclants, ont permis à Jensen et Talton (1965) d'établir des critères d'efficacité concernant le mélange des fluides visqueux:

- l'enveloppe balayée par l'agitateur devrait correspondre à une grande fraction du volume du réservoir de mélange;
- la forme de l'agitateur devrait pouvoir garantir un pompage vertical en plus d'un mouvement de rotation dans le réservoir de mélange;
- deux pales engrenés sont généralement plus efficaces qu'une seule.

Les ancres répondent au premier critère. Le niveau de pompage induit par ce type d'agitateur est par contre très insuffisant et ce, même à grande vitesse (Hoogendorn et Den Hartog 1967). Malgré tout, les ancres sont encore aujourd'hui utilisés pour le mélange des fluides visqueux (Kaminoyama et coll. 1990).

Les rubans hélicoïdaux balaient un plus grand volume et induisent un pompage vertical plus important que les turbines et les ancres (Gray 1963). Dans le cas d'un fluide viscoplastique, ce niveau de pompage assure une quantité d'énergie mécanique suffisante pour empêcher la formation de zones "solides" (Hoogendorn et Den Hartog 1967).

Le principe de fabrication des rubans hélicoïdaux est élémentaire; une bande spiralée est découpée sur une feuille d'acier inoxydable puis étirée dans la troisième dimension. Ce principe est simple à appliquer pour la conception de petits agitateurs. Il est toutefois techniquement difficile de fabriquer des rubans hélicoïdaux pour des réacteurs de très grande taille.

Lorsque la viscosité du milieu est très grande, le nombre de Reynolds de mélange, défini comme

$$\mathrm{Re}_g = \frac{\rho N D^2}{\eta(|\dot{\gamma}|)}, \tag{1.8}$$

est très petit. Il s'ensuit que le mélange est purement mécanique. On parle alors de malaxage; le fluide est poussé de part et d'autre du réservoir, replié sur lui-même, divisé à plusieurs reprises en portions, puis recombiné (Shearer 1973).

L'efficacité des rubans hélicoïdaux pour le mélange des fluides très visqueux et des pâtes est un sujet ouvert qui n'a été abordé qu'à quelques reprises et pour lequel des conclusions contradictoires ont été obtenues (Hall et Godfrey 1968). D'une part, Johnson (1965) a observé que le temps de mélange diminue lorsque la viscosité augmente. D'autre part, Nagata et coll. (1957) ont constaté que la viscosité n'a aucun effet sur le temps de mélange.

Une troisième catégorie de systèmes d'agitation répond aux trois critères de Jensen et Talton (1965). Elle est constituée des malaxeurs à pales engrenées.

Traditionnellement, les premiers malaxeurs étaient horizontaux à bras sigma ou en z (Figure 1.3).

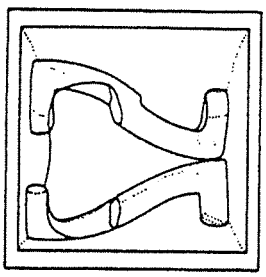

Figure 1.3 Malaxeur à bras en z.

Dans le cas des malaxeurs à bras sigma, des expériences avec de la pâte à pain (Earle 1959), du sirop de maïs et des solutions de CMC (Hall et Godfrey 1968), et un mélange eau-amidon-dextrose (Michaels et Puzinauskas 1954) ont permis de montrer l'intérêt de ce type de système pour le malaxage des

fluides de très grande viscosité. De son côté, Käppel (1979) a pu établir que ce type de malaxeur est plus efficace lorsque les bras tournent à la même vitesse.

Les malaxeurs horizontaux présentent un inconvénient majeur, soit celui de ne pas être étanche. Les risques de contamination du milieu ont amené certains fabricants à mettre au point des malaxeurs montés sur un arbre vertical. Parmi ceux-ci, on peut citer les malaxeurs à mouvement planétaire qui sont constitués de deux ou trois agitateurs à pales engrenées montés sur un carrousel lui-même en rotation (Figure 1.4). Le volume du réservoir de mélange est ainsi complètement balayé par le système d'agitation et ce, à intervalles réguliers.

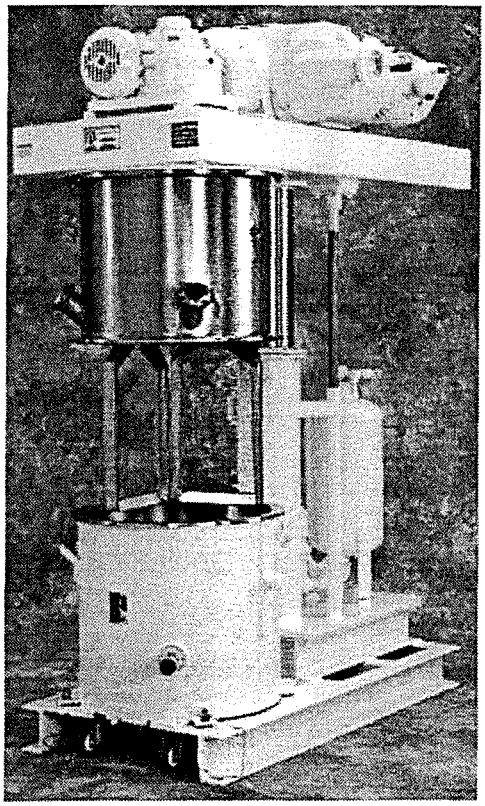

Figure 1.4 Malaxeur à mouvement planétaire.

Finalement, l'homogénéisation des fluides visqueux peut également s'effectuer au moyen d'autres systèmes de mélange tels les mélangeurs statiques ou les vis et double-vis d'extrusion. On notera dans ce dernier cas la similitude avec les systèmes à pales engrenées.

1.1.4 Conception des systèmes de mélange

La conception de systèmes de mélange, basée sur l'analyse de quantités macroscopiques aussi variées que le temps de circulation, le temps de mélange et la consommation de puissance, est souvent difficile et onéreuse. La situation est encore plus critique pour les malaxeurs à mouvement planétaire en raison de la cinématique relativement complexe de leurs pales. Les mesures expérimentales nécessaires à cette conception sont souvent effectuées en laboratoire sur des prototypes de petite taille. Des lois d'extrapolation sont ensuite utilisées pour la conception des systèmes de mélange industriels.

Les conditions d'extrapolation nécessaires à la mise à l'échelle des systèmes de mélange font appel à la notion de similitude (Coulson et Richardson 1993). On parle de similitude géométrique entre un système de laboratoire et un système industriel si le rapport des dimensions caractéristiques est constant. On dit qu'il existe une similitude cinématique entre deux systèmes lorsque le rapport des vitesses est le même en tout point. Ces deux types de similitudes sont essentiels. Souvent, une similitude dynamique est également souhaitable; le rapport des forces, exprimé à l'aide de nombres adimensionnels (Reynolds, Froude et Weber), doit alors être invariable. Enfin, une plus grande similitude peut faire intervenir des quantités macroscopiques

telles la puissance, les temps de circulation et de mélange ou encore la température, le cisaillement et la rhéologie.

En pratique, les conditions d'extrapolation sont généralement mal connues, à fortiori dans le cas de systèmes très complexes comme les malaxeurs. Il s'ensuit que la conception des mélangeurs industriels est essentiellement empirique et approximative.

La puissance, le temps de mélange et le temps de circulation dépendent directement des patrons d'écoulement dans le réservoir, ceux-ci étant à leur tour fonction de la géométrie du système de mélange, de la vitesse de l'agitateur et de la rhéologie du milieu. L'étude des patrons d'écoulement est donc très utile lors de la conception des systèmes de mélange. Elle permet de détecter la présence de zones mortes ou peu mélangées. Malheureusement, en pratique, la visualisation directe de l'écoulement en cuve agitée est souvent impossible (opacité du milieu, parois en métal, ...) et nécessite un appareillage coûteux. Précisons toutefois que l'utilisation de la simulation numérique par éléments finis est une option intéressante pour pallier cette difficulté (Tanguy et coll. 1992).

En général, les quantités macroscopiques intervenant dans la conception des systèmes de mélange sont exprimées sous forme de corrélations mettant en jeu des nombres adimensionnels qui prennent en compte la géométrie du système d'agitation, la rhéologie du milieu et la dynamique de l'écoulement (par exemple, Holland et Chapman 1966).

La puissance consommée par un agitateur dans un réservoir de mélange contenant un fluide newtonien, peut être évaluée à l'aide de la corrélation

$$K_p = N_p \,\mathrm{Re} = \frac{P}{\mu N^2 D^3}, \tag{1.9}$$

où N_p est appelé le nombre de puissance ou nombre de Newton, et où K_p est une constante qui ne dépend que de la géométrie.

En étendant la définition du nombre de Reynolds au cas des fluides de la loi de puissance, soit

$$\mathrm{Re}_g = \frac{\rho N^{2-n} D^2}{m}. \tag{1.10}$$

Rieger et Novak (1973) ont obtenu une expression plus générale pour la consommation de puissance:

$$K_p(n) = N_p \mathrm{Re}_g = \frac{P}{mN^{n+1}D^3}, \tag{1.11}$$

où cette fois-ci la constante $K_p(n)$ dépend de la géométrie et de la rhéofluidifiance.

En supposant qu'un mobile d'agitation dans un réservoir de mélange se comporte de façon similaire à un système de Couette, il est facile, en résolvant les équations d'échange qui gouvernent l'écoulement du fluide, d'établir que le cisaillement $\dot{\gamma}$ est relié linéairement à la vitesse de rotation de l'agitateur (Brodkey 1967). Cette propriété est à la base du concept de Metzner et Otto (1957) qui stipule que le cisaillement "de procédé" $\dot{\gamma}_a$ dans un réservoir de mélange est directement proportionnel à N:

$$\dot{\gamma}_a = K_s N. \tag{1.12}$$

On en tire alors ce qu'on appelle couramment la "viscosité de procédé":

$$\mu_a = \eta(|\dot{\gamma}_a|). \tag{1.13}$$

Dans (1.12), K_s est une constante qui dépend de la géométrie du système de mélange. Elle peut être déterminée expérimentalement ou numériquement à

l'aide de deux études de consommation de puissance, une pour un fluide newtonien et l'autre pour un fluide non newtonien. Sous l'hypothèse que K_s est effectivement une constante qui ne dépend que de considérations géométriques, il est alors possible d'estimer la consommation de puissance pour un fluide quelconque en utilisant le concept de viscosité de procédé et la courbe de puissance newtonienne (1.9).

La question de la constance de K_s fait l'objet d'un débat (Skelland 1983, Ulbrecht et Carreau 1985), en raison notamment de la très grande variabilité des valeurs obtenues expérimentalement pour des fluides rhéofluidifiants. À titre d'exemple, Brito-De La Fuente (1992) rapporte des valeurs de K_s variant entre 1 et 80 pour des rubans hélicoïdaux. Ces différences suggèrent entre autres que K_s est une fonction qui dépend plus ou moins fortement de l'indice de rhéofluidifiance. Il est intéressant de souligner que des calculs de K_s, basés sur la simulation numérique dans un réservoir muni d'un ruban hélicoïdal, ont indiqué que cette constante ne dépendait que modérément de n (Tanguy et coll., à paraître).

Par ailleurs, il peut être intéressant de comparer le résultat (1.11) obtenu par Rieger et Novak au concept de Metzner et Otto (1.12). On démontre alors que (Brito-De La Fuente 1992)

$$K_p(n) = K_p K_s^{n-1}. \qquad (1.14)$$

Finalement, le lecteur trouvera dans Skelland (1983) un résumé d'études portant sur la détermination de K_s pour différents types de mélangeurs. La plupart des articles de la littérature concernant la puissance consommée dans des systèmes d'agitation traitent des fluides rhéofluidifiants. On ne retrouve malheureusement que quelques résultats ayant trait à des fluides présentant d'autres types de complexités rhéologiques (Tatterson 1991). Citons, à titre

d'exemple, les travaux de Edwards et coll. (1976) qui ont porté sur les fluides thixotropes ainsi que ceux de Nagata (1975) sur les fluides à seuil de contrainte. Ce dernier a étudié, à l'aide du concept de Metzner et Otto et de la relation de puissance newtonienne (1.9) l'influence de la viscoplasticité sur la puissance consommée par plusieurs types d'agitateurs dont les ancres, les turbines à pales multiples et les rubans hélicoïdaux. On y retrouve cependant certaines inconsistances quant à l'utilisation de la constante de puissance K_p et plus spécifiquement concernant sa dépendance par rapport au nombre de Hedström

$$He = \frac{\rho D^2 \tau_0}{\mu^2}. \tag{1.15}$$

Selon toute vraisemblance, les travaux de Rieger et Novak (1973) portant sur la généralisation des corrélations de puissance pour des fluides non newtoniens pourraient aider à clarifier certaines ambiguïtés.

1.2 Modélisation numérique des procédés de mélange

1.2.1 Historique

L'étude du mélange à l'aide de la simulation numérique remonte à la fin des années 70 avec notamment les travaux de Hiraoka et coll. (1978, 1979) sur la modélisation bidimensionnelle par différences finies de l'écoulement de fluides newtoniens et rhéofluidifiants dans un réservoir muni d'ancres ou de pales multiples. Ces travaux ont permis entre autres de confirmer la pertinence du concept de Metzner et Otto dans de tels systèmes.

Kuriyama et coll. (1982) ainsi que Ohta et coll. (1985) ont utilisé une approche similaire à celle de Hiraoka (1978, 1979) pour établir que l'écoulement d'un

fluide visqueux dans un réservoir agité par une ancre était principalement tangentiel, corroborant ainsi les résultats expérimentaux de Peters et Smith (1967).

Citons également les travaux de Bertrand (1983) et de Lafon et Bertrand (1988) qui ont porté sur l'agitation de fluides visqueux à l'aide d'agitateurs à pales multiples, d'ancres et de barrières, au moyen de méthodes de volumes finis.

Jusqu'à la fin des années 80, la plupart des simulations présentées dans la littérature étaient basées sur des méthodes de différences finies ou de volumes finis bidimensionnelles et portaient sur des systèmes d'agitation de forme simple. On ne pouvait trouver aucune étude numérique traitant par exemple du mélange avec des rubans hélicoïdaux ou des hélices marines. Comme les phénomènes de mélange sont en général tridimensionnels, toutes ces simulations bidimensionnelles ne pouvaient être qu'approximatives et incomplètes.

L'avènement d'ordinateurs plus puissants et le développement de techniques numériques nouvelles basées sur la méthode des éléments finis ont permis l'émergence récente de simulations tridimensionnelles des profils de vitesse dans des réservoirs agités.

En utilisant le repère de l'agitateur, Tanguy et coll. (1991) ont étudié numériquement l'agitation de fluides rhéologiquement complexes avec une ancre, des agitateurs à barrières et une hélice marine. Dans un tel repère en mouvement (lagrangien), un seul maillage était nécessaire dans chaque cas. La solution numérique, périodique en régime laminaire dans le repère du laboratoire, devenait stationnaire dans le repère de l'agitateur.

Pour des solutions de CMC et de Xanthane agitées à l'aide d'un ruban hélicoïdal de type HRS, Tanguy et coll. (1991 et 1992) ont calculé des temps de circulation et des valeurs de couple qui se comparent bien à ceux obtenus expérimentalement. Comme précédemment, le repère lagrangien de l'agitateur a été utilisée.

Deux facteurs peuvent expliquer le faible nombre de travaux ayant trait à la simulation tridimensionnelle du mélange avec des agitateurs de forme complexe: la génération des maillages et la résolution des systèmes linéaires sous-jacents.

1.2.2 Génération de maillages

La génération de maillages d'éléments finis demeure encore aujourd'hui une tâche ardue qui nécessite beaucoup de temps. Il n'est pas rare que la construction d'un maillage pour une seule géométrie tridimensionnelle prenne plusieurs jours. À titre d'exemple, nous présentons à la Figure 1.5 le maillage d'un réservoir cylindrique équipé d'un ruban hélicoïdal et pour lequel cinq jours de travail ont été nécessaires avec le générateur de maillages commercial I-DEAS de la société SDRC. Heureusement, pour ce type de système, l'utilisation du repère de l'agitateur rend possible la simulation en régime stationnaire; un seul maillage est alors requis.

L'utilisation d'un repère lagrangien n'est pas toujours avantageux. Par exemple, dans une cuve munie de chicanes, le fait de se placer dans le repère de l'agitateur ne simplifie pas la simulation; la solution demeure transitoire et un maillage est nécessaire à chaque pas de temps. La situation

est aussi problématique dans le cas d'un malaxeur à mouvement planétaire en raison de la cinématique complexe de ses pales.

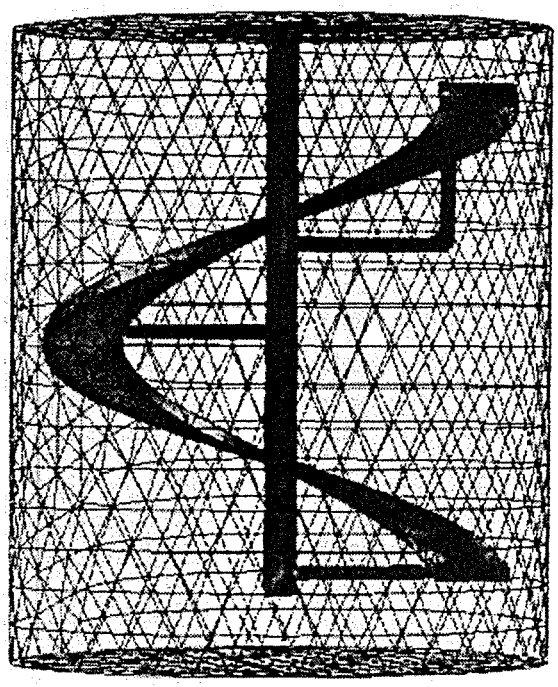

Figure 1.5 Maillage d'un réservoir cylindrique équipé d'un ruban hélicoïdal.

1.2.3 Résolution des systèmes linéaires

La résolution numérique de problèmes tridimensionnels de la mécanique des fluides à l'aide de la méthode des éléments finis demandent des ressources informatiques importantes. L'efficacité d'un code de calcul est déterminée par la mémoire et le temps de calcul requis pour la résolution des systèmes linéaires de grande taille résultant de cette méthode.

Deux classes d'algorithmes sont disponibles pour résoudre ces systèmes linéaires : les algorithmes directs et les algorithmes itératifs (Axelsson et Barker 1984). Pour la résolution de systèmes linéaires de grande taille, ces

derniers sont beaucoup plus performants et leur emploi devrait être privilégié. S'ils sont utilisés convenablement, ils peuvent notamment permettre la modélisation de procédés industriels sur des stations de travail. Malheureusement, dans le contexte de la mécanique des fluides incompressibles, de tels algorithmes sont encore mal compris et peu utilisés.

1.3 Objectif du présent travail

L'objectif de ce travail consiste à mettre au point une méthode numérique efficace pour la modélisation tridimensionnelle du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides rhéologiquement complexes de grande viscosité.

Cette méthode, que nous appellerons la *méthode des éléments finis virtuels*, est basée sur la théorie de l'optimisation avec contraintes. Seul le réservoir du malaxeur est maillé; le mobile d'agitation, comprenant le carrousel et les pales, est quant à lui représenté à l'aide de points de contrôle sur lesquels des contraintes cinématiques sont imposées puis intégrées aux équations d'échange au moyen de multiplicateurs de Lagrange.

CHAPITRE 2

MODÉLISATION DU PROCÉDÉ DE MALAXAGE À MOUVEMENT PLANÉTAIRE

Dans ce chapitre, nous nous proposons de modéliser le procédé de malaxage à mouvement planétaire. À cette fin, nous rappelons les équations d'échange gouvernant l'écoulement d'un fluide incompressible. Celles-ci sont par la suite discrétisées à l'aide de la méthode des éléments finis. Finalement, nous montrons comment ce problème de modélisation peut être reformulé comme un problème d'optimisation avec contrainte.

2.1 Introduction

Les malaxeurs à mouvement planétaire utilisés dans l'industrie comportent généralement 2 ou 3 agitateurs à pales engrenées qui sont montés sur un carrousel lui-même en rotation (Figure 2.1). Les pales sont évidées ou pleines et peuvent être de forme rectangulaire ou torsadée.

L'étude des mécanismes de malaxage à l'aide de la simulation numérique passe par la résolution des équations d'échange qui gouvernent l'écoulement d'un fluide incompressible.

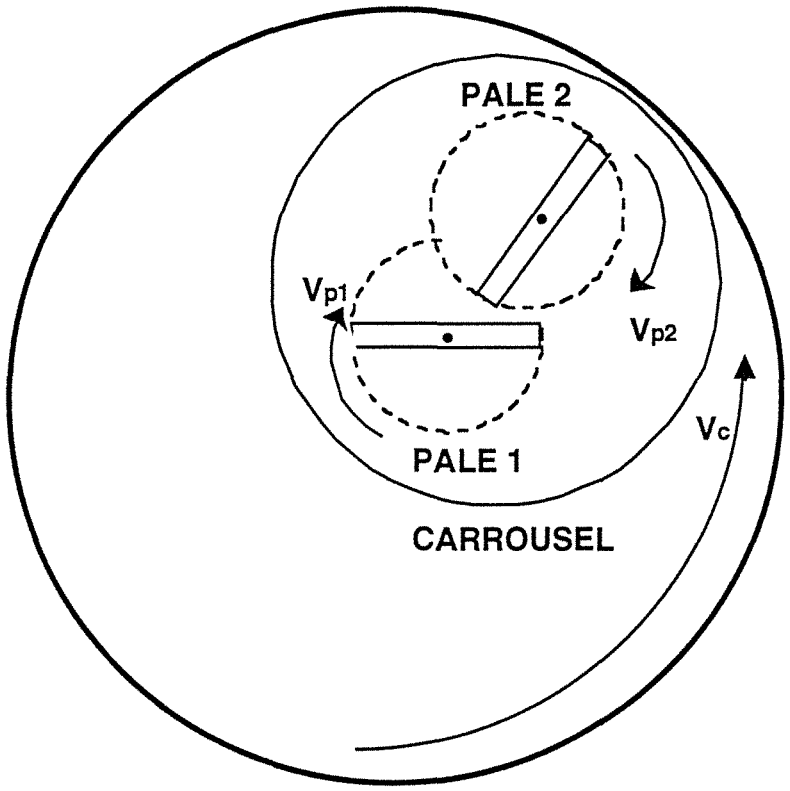

Figure 2.1 Représentation schématique d'un malaxeur à mouvement planétaire.

2.2 Équations d'échange

2.2.1 Conservation de la quantité de mouvement et de la matière

L'écoulement d'un fluide incompressible visqueux dans un domaine Ω peut être décrit au moyen des équations de Navier-Stokes qui caractérisent la conservation de la quantité de mouvement et de la matière:

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\operatorname{grad}\mathbf{v}\right) + \operatorname{div}\tau + \operatorname{grad} p = \mathbf{f}, \quad \text{dans } \Omega, \tag{2.1}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0, \quad \text{dans } \Omega. \tag{2.2}$$

Dans ces équations, le tenseur des contraintes τ est relié au champ de vitesse par une équation d'état rhéologique de la forme

$$\tau = -2\eta(|\dot{\gamma}|)\dot{\gamma}. \tag{2.3}$$

Dans ce travail, nous utiliserons le modèle newtonien pour lequel

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \mu, \tag{2.4}$$

ainsi que les modèles de la loi de puissance

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = m|\dot{\gamma}|^{n-1}, \tag{2.5}$$

et de Bingham

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \frac{\tau_0}{|\dot{\gamma}|} + \mu, \quad |\tau| \geq \tau_0, \tag{2.6a}$$

$$\tau = 0, \qquad \text{sinon,} \tag{2.6b}$$

obtenus en généralisant, pour toutes les composantes tensorielles, les expressions (1.2) et (1.5). Dans ces équations, le tenseur des vitesses de déformation est défini par

$$\dot{\gamma} = \tfrac{1}{2}[\operatorname{grad}\mathbf{v} + (\operatorname{grad}\mathbf{v})^T]. \tag{2.7}$$

Précisons que, pour un fluide newtonien, les équations de Navier-Stokes deviennent:

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\operatorname{grad}\mathbf{v}\right) - \mu\Delta\mathbf{v} + \operatorname{grad} p = \mathbf{f}, \quad \text{dans } \Omega, \tag{2.8}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0, \qquad \text{dans } \Omega. \tag{2.9}$$

Lors de la simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire, le nombre de Reynolds généralisé que l'on définit comme

$$\mathrm{Re}_g = \frac{\rho N D^2}{\eta(N)}, \tag{2.10}$$

est souvent très petit ($\mathrm{Re}_g << 1$) en raison du caractère très visqueux du milieu. Dans ces circonstances, la contribution du terme d'inertie $\rho(\mathbf{v} \cdot \mathrm{grad}\,\mathbf{v})$ dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement est faible et peut être négligée sans perte de précision significative. Toutefois, par souci de cohérence, nous tenons à mentionner que ce terme a toujours été pris en compte lors des simulations.

2.2.2 Conservation de l'énergie

Lors de la conception de malaxeurs industriels, une attention particulière doit être apportée aux problèmes d'auto-échauffement par dissipation visqueuse. En effet, la durée de malaxage nécessaire pour l'obtention d'un milieu homogène et les niveaux de viscosité mis en jeu font en sorte que la dissipation d'énergie entraîne une augmentation généralement non négligeable de la température en masse. Il s'avère donc important de bien maîtriser les phénomènes d'échange thermiques dans la cuve.

La simulation numérique peut être utilisée pour prédire l'évolution de la température dans un malaxeur à mouvement planétaire. Elle est basée sur la résolution de l'équation de conservation de l'énergie:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathrm{grad}\, T\right) = k \Delta T - \tau(\mathbf{v}) : \dot{\gamma}(\mathbf{v}), \quad \text{dans } \Omega. \tag{2.11}$$

Le nombre de Péclet,

$$Pe = \frac{N D^2}{\alpha}, \tag{2.12}$$

permet de quantifier l'importance du terme convectif par rapport au terme diffusif dans l'équation de conservation de l'énergie. Les fluides rhéologiquement complexes de grande viscosité ont généralement une faible conductibilité thermique. Par conséquent, lors du malaxage de tels fluides, le nombre de Péclet est souvent très grand ($Pe >> 1$). Il convient de noter que, dans ces circonstances, l'équation (2.11) devient une équation de transport par convection avec source de chaleur. Comme on le verra plus loin, cette propriété aura des répercussions lors du choix d'une méthode numérique pour la résolution de cette équation.

Finalement, le nombre de Brinkman,

$$\frac{\eta(N)N^2D^2}{k(T_p - T_{ref})}, \tag{2.13}$$

sert à évaluer l'importance de la dissipation visqueuse par rapport au transfert de chaleur par diffusion résultant d'une différence de températures. Les températures en question sont celle à la paroi (T_p) et une autre généralement prise au sein du fluide loin de cette paroi (T_{ref}). Un nombre de Brinkman supérieur à 2 indique généralement la présence d'un point chaud (Agassant et coll. 1986).

Dans l'équation (2.13), la viscosité est supposée indépendante de la température. Une définition plus générale du nombre de Brinkman permettrait une telle dépendance et ferait intervenir l'énergie d'activation du fluide.

2.2.3 Conditions aux limites

Les équations de conservation de l'énergie (2.11), de la quantité de mouvement (2.1) et de la matière (2.2) doivent être complétées, pour que le problème soit bien posé, par des conditions aux limites. Celles-ci dépendent du système de référence ou repère dans lequel on se place.

Considérons le cas particulier d'un agitateur installé le long de l'axe central d'un réservoir cylindrique sans chicanes. Il est alors avantageux de considérer comme système de référence celui de l'agitateur. Dans un tel repère dit lagrangien, l'agitateur est immobile et la paroi du réservoir est animée d'une vitesse $-\omega$ égale à celle qu'aurait l'agitateur dans le repère du laboratoire, mais de sens contraire. On peut donc, si l'écoulement est périodique dans le repère du laboratoire, considérer que le problème est stationnaire. Par conséquent, un seul maillage est suffisant pour la modélisation par éléments finis de ce procédé et les conditions aux limites sont indépendantes du temps. Par contre, le repère de l'agitateur est soumis à une accélération constante et est, de ce fait, non galiléen. Les équations (2.1) et (2.2) doivent ainsi être modifiées afin de tenir compte des forces centrifuge et de Coriolis (par exemple, Tritton 1988):

$$\rho(\mathbf{v}\cdot\operatorname{grad}\mathbf{v}+\omega\times(\omega\times\mathbf{r})+2\omega\times\mathbf{v})+\operatorname{div}\tau+\operatorname{grad}p=\mathbf{f}, \quad \text{dans } \Omega, \tag{2.14}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v}=0, \quad \text{dans } \Omega. \tag{2.15}$$

Mentionnons que cette approche a été utilisée par Tanguy et coll. (1992) pour la modélisation numérique de l'écoulement dans un réservoir muni d'un ruban hélicoïdal.

Dans le cas des malaxeurs à mouvement planétaire, la situation est fort différente. La cinématique des pales et du carrousel font en sorte qu'aucun

repère lagrangien ne permet de traiter le problème de façon stationnaire. La simulation ne peut donc être que transitoire et la solution du problème est au plus périodique, en régime laminaire. Par conséquent, un maillage tridimensionnel et l'imposition de nouvelles conditions aux limites s'avèrent nécessaires à chaque pas de temps, du moins si l'on s'en tient aux méthodes classiques.

2.3 Méthode des éléments finis

2.3.1 Généralités

La méthode des éléments finis permet la résolution des problèmes aux dérivées partielles avec conditions aux limites. En utilisant des principes du calcul variationnel, elle transforme les équations différentielles en systèmes d'équations algébriques qui peuvent par la suite être résolus à l'aide des algorithmes de l'algèbre linéaire matricielle.

La méthode des éléments finis fait appel à des notions d'analyse fonctionnelle que nous rappelons ici.

2.3.2 Rappel d'analyse fonctionnelle

Soit $L^2(\Omega)$ l'espace des fonctions de carré sommable sur le domaine Ω. On munit cet espace d'une norme et d'un produit scalaire:

$$\|v\|_{0,\Omega} = \left(\int_\Omega |v|^2 d\Omega\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{2.16}$$

$$(u,v) = \int_\Omega uv\, d\Omega. \tag{2.17}$$

On peut alors définir l'espace de Sobolev

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) \middle| \operatorname{grad} v \in [L^2(\Omega)]^3 \right\}, \tag{2.18}$$

et sa norme

$$\|v\|_{1,\Omega} = \left(\|v\|_{0,\Omega}^2 + \|\operatorname{grad} v\|_{0,\Omega}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{avec } \|\operatorname{grad} v\|_{0,\Omega}^2 = \sum_{i=1}^{3} \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{0,\Omega}^2. \tag{2.19}$$

On introduit également l'espace des fonctions nulles sur la frontière Γ de Ω:

$$H_0^1(\Omega) = \left\{ v \in H^1(\Omega) \middle| \, v|_\Gamma = 0 \right\}. \tag{2.20}$$

De façon générale, on peut définir des espaces de Sobolev d'ordre supérieur $H^m(\Omega)$, $m > 1$, en généralisant la définition (2.18). Le lecteur pourra consulter le livre de Ciarlet (1978) pour plus de détails.

2.3.3 Discrétisation des équations de Navier-Stokes

Nous considérons, dans un premier temps, le cas des équations de Stokes qui gouvernent l'écoulement d'un fluide newtonien incompressible visqueux. Celles-ci sont obtenues à partir des équations (2.8) et (2.9) en négligeant la dérivée en temps et le terme d'inertie:

$$-\mu \Delta \mathbf{v} + \operatorname{grad} p = \mathbf{f}, \quad \text{dans } \Omega, \tag{2.21}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{dans } \Omega. \tag{2.22}$$

Si maintenant on suppose, sans perte de généralité, que des conditions aux limites homogènes de Dirichlet sont imposées sur la frontière Γ, alors la solution au problème précédent consiste à trouver $\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)]^3$ et $p \in H^1(\Omega)$ vérifiant (2.21) et (2.22).

La multiplication des équations (2.21) et (2.22) par les fonctions-tests $\psi \in [H_0^1(\Omega)]^3$ et $\phi \in L^2(\Omega)$, et l'utilisation de la formule de Green conduisent alors à la formulation faible

$$a(\mathbf{v},\psi) - b(\psi,p) = (\mathbf{f},\psi),\ \forall \psi \in [H_0^1(\Omega)]^3, \tag{2.23}$$

$$b(\mathbf{v},\phi) = 0,\ \forall \phi \in L^2(\Omega), \tag{2.24}$$

où

$$a(\mathbf{v},\psi) = \mu \int_\Omega \operatorname{grad}\mathbf{v} \cdot \operatorname{grad}\psi\, d\Omega, \tag{2.25}$$

$$b(\mathbf{v},\phi) = \int_\Omega \phi \operatorname{div}\mathbf{v}\, d\Omega. \tag{2.26}$$

Le problème précédent peut être résolu par la méthode des éléments finis de Galerkin. Celle-ci consiste à discrétiser, pour un maillage $\Im_h$ de Ω, la formulation faible (2.23)-(2.24). Pour ce faire, nous associons à $\Im_h$ un espace d'approximation V_h de $[H_0^1(\Omega)]^3$ pour les fonctions $\mathbf{v}$ et ψ, puis un espace d'approximation Q_h de $L^2(\Omega)$ pour les fonctions p et ϕ. On obtient alors le problème discret: trouver $\mathbf{v}_h \in V_h$ et $p_h \in Q_h$ tels que

$$a(\mathbf{v}_h,\psi_h) - b(\psi_h,p_h) = (\mathbf{f},\psi_h),\ \forall \psi_h \in V_h, \tag{2.27}$$

$$b(\mathbf{v}_h,\phi_h) = 0,\ \forall \phi_h \in Q_h. \tag{2.28}$$

Le problème de Stokes est un problème mixte. Par conséquent, le choix d'un élément fini pour sa résolution est soumis à une restriction qui lie les espaces d'approximation V_h et Q_h. Cette relation de compatibilité s'exprime par la condition de Brezzi-Babuska (Babuska 1973, Brezzi 1974) qui garantit entre autres l'existence et l'unicité d'une solution à ce problème. Nous renvoyons le lecteur au livre de Brezzi et Fortin (1991) pour plus de détails concernant le sens de cette condition. Nous nous contenterons de préciser, qu'en pratique, l'utilisation d'un élément fini qui ne satisfait pas la condition de Brezzi-

Babuska peut conduire à une solution erronée, en particulier au niveau de la pression.

On classe généralement les éléments finis en deux catégories selon leur approximation en pression qui peut être continue ou discontinue. L'utilisation d'une approximation continue présente un inconvénient. En effet, avec une telle approximation, l'équation de conservation de la matière ne peut être vérifiée que globalement. Par conséquent, dans la plupart des situations rencontrées en pratique, il est possible que la divergence du champ de vitesse ne soit pas nulle dans un élément. Dans certains cas, cela peut même aller jusqu'à provoquer des oscillations non physiques dans le champ de vitesse (Pelletier et coll. 1989).

Parmi les éléments finis tridimensionnels, on retrouve principalement les hexaèdres et les tétraèdres. Ces derniers, de par leur topologie, sont beaucoup plus flexibles que les hexaèdres et peuvent ainsi s'adapter plus facilement aux formes irrégulières d'une géométrie. Ils permettent, en outre, la génération de maillages non structurés qui comportent habituellement moins d'éléments que les maillages structurés.

Pour les raisons mentionnées ci-haut, il a été convenu, dans le cadre de cette étude, d'utiliser un élément fini tétraédrique à pression discontinue constante par morceaux que l'on dénote $P_1^+ - P_0$ (Figure 2.2). Celui-ci, basé sur l'élément linéaire $P_1 - P_0$ auquel on ajoute 3 degrés de liberté en vitesse au milieu de chaque face, satisfait la condition de Brezzi-Babuska (Bertrand et coll. 1992).

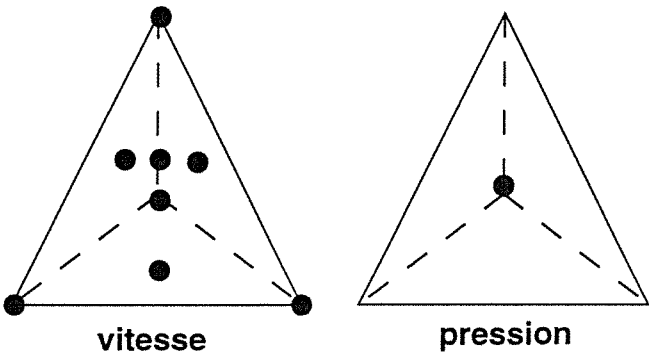

Figure 2.2 élément fini $P_1^+ - P_0$.

L'intégration numérique des équations (2.27)-(2.28) nous permet finalement d'obtenir le système linéaire de Stokes:

$$\mathbf{A}_v\mathbf{V} + \mathbf{B}^T\mathbf{P} = \mathbf{F}_v, \tag{2.29}$$

$$\mathbf{B}\mathbf{V} = \mathbf{0}, \tag{2.30}$$

où $\mathbf{V}$ et $\mathbf{P}$ sont des vecteurs pour la vitesse et la pression, où $\mathbf{A}_v$, $\mathbf{B}^T$ et $\mathbf{B}$ représentent respectivement les matrices de diffusion, de gradient et de divergence, et où $\mathbf{F}_v$ est un vecteur qui tient compte des forces externes.

Enfin, la dérivée en temps et le terme d'inertie qui avaient été omis au départ, peuvent être réinsérés dans les équations. On obtient, après discrétisation de la dérivée en temps par un schéma d'Euler implicite, le système non linéaire de Navier-Stokes:

$$\left[\mathbf{M}_v + \Delta t\left(\mathbf{A}_v + \mathbf{C}_v(\mathbf{V}^{(t+1)})\right)\right]\mathbf{V}^{(t+1)} + \Delta t\mathbf{B}^T\mathbf{P}^{(t+1)} = \Delta t\mathbf{F}_v + \mathbf{M}_v\mathbf{V}^{(t)}, \tag{2.31}$$

$$\mathbf{B}\mathbf{V}^{(t+1)} = \mathbf{0}, \tag{2.32}$$

où Δt représente le pas de temps et où $\mathbf{M}_v$, la matrice masse, et $\mathbf{C}_v(\mathbf{V}^{(t+1)})$, la matrice d'inertie, contiennent toutes deux la masse volumique ρ comme facteur multiplicatif.

2.3.4 Discrétisation de l'équation de conservation de l'énergie

Par analogie avec le cas précédent, on suppose, sans perte de généralité, que des conditions aux limites homogènes de Dirichlet sont imposées sur la frontière Γ, de telle sorte que le problème consiste à trouver, pour $\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3$, $T \in H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ vérifiant l'équation de conservation de l'énergie (2.11).

La multiplication de l'équation (2.11) par la fonction-test $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ et l'utilisation de la formule de Green conduisent alors à la formulation faible:

$$\rho C_p \int_\Omega \frac{DT}{Dt} \varphi \, d\Omega + k \int_\Omega \operatorname{grad} T \cdot \operatorname{grad} \varphi \, d\Omega = -\int_\Omega [\tau(\mathbf{v}) : \dot{\gamma}(\mathbf{v})] \varphi \, d\Omega, \ \forall \varphi \in H_0^1(\Omega), \qquad (2.33)$$

où $\frac{DT}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} T$ est la dérivée matérielle classique.

Ce problème peut être résolu par la méthode des éléments finis. Pour ce faire, on discrétise, pour un maillage $\mathfrak{I}_h$ de Ω, la formulation faible (2.33). Par conséquent, nous associons à $\mathfrak{I}_h$ un espace d'approximation S_h de $H_0^1(\Omega)$ pour la température, puis un espace d'approximation Φ_h de $H_0^1(\Omega)$ pour les fonctions-tests. On obtient alors le problème discret: trouver $T_h \in S_h$ tel que, pour $\mathbf{v}_h \in V_h$,

$$\rho C_p \int_\Omega \frac{DT_h}{Dt} \varphi_h \, d\Omega + k \int_\Omega \operatorname{grad} T_h \cdot \operatorname{grad} \varphi_h \, d\Omega = -\int_\Omega [\tau(\mathbf{v}_h) : \dot{\gamma}(\mathbf{v}_h)] \varphi_h \, d\Omega, \ \forall \varphi_h \in \Phi_h. \ (2.34)$$

Ce problème est particulier, sa nature dépendant directement de la valeur du nombre de Péclet.

Lorsque celui-ci est petit, le transfert de chaleur s'effectue principalement par conduction et le problème est elliptique. Pour sa résolution, une méthode de Galerkin est tout à fait indiquée. On choisit alors $\Phi_h = S_h$.

Par contre, lorsque le nombre de Péclet est grand, le transfert de chaleur est dominée par la convection de telle sorte que l'équation (2.34) devient une équation de transport de type hyperbolique. Dans une telle situation, la méthode de Galerkin est inadéquate. En effet, son utilisation produit généralement des solutions fortement oscillatoires qui sont, à toutes fins pratiques, inexploitables. Par conséquent, d'autres approches doivent être envisagées. Parmi celles-ci , on retrouve les méthodes d'upwinding de type SU et SUPG, la méthode des caractéristiques ainsi que la méthode de Lesaint-Raviart ou Galerkin discontinu. Nous n'insisterons pas ici sur les avantages et les inconvénients de ces méthodes pour lesquelles nous renvoyons le lecteur au livre de Johnson (1992). Nous mentionnerons simplement que, si elles peuvent résoudre une équation de transport, elles présentent toutes plus ou moins la même faiblesse, soit celle d'introduire de la diffusion artificielle dans les solutions. Sur le plan pratique, comme la plupart de ces méthodes sont stables, la précision d'une solution peut être tout de même améliorée en utilisant des maillages plus fins.

Dans ce travail, nous avons opté, à cause de sa simplicité et de sa robustesse, pour une méthode d'upwinding consistante de type SUPG (Grygiel et Tanguy 1991). Celle-ci entre dans la classe des méthodes de Petrov-Galerkin et est donc basée sur l'utilisation d'espaces d'approximation différents pour la température et les fonctions-tests. Elle consiste à choisir pour S_h l'espace des tétraèdres linéaires (Figure 2.3). L'espace d'approximation Φ_h des fonctions-tests est quant à lui construit à partir de S_h de la façon suivante: pour toute fonction de base $\zeta_h \in S_h$, on définit

$$\varphi_h = \zeta_h + \alpha \mathbf{v}_h \cdot \operatorname{grad} \zeta_h, \tag{2.35}$$

où α est un paramètre qui varie proportionnellement avec la valeur ponctuelle du nombre de Péclet. L'utilisation de ces fonctions-tests a pour effet de générer de la diffusion numérique dans le sens de l'écoulement et de régulariser la solution. Précisons enfin que l'utilisation d'une approximation linéaire en température permet un choix optimal de α, ce qui, généralement, n'est pas possible pour les éléments d'ordre supérieur (Hughes 1978).

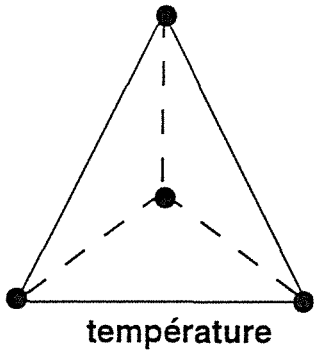

Figure 2.3 Élément fini P_1.

L'intégration numérique de l'équation (2.34) nous permet finalement d'obtenir le système linéaire suivant:

$$\left[\mathbf{M}_{\mathrm{T}} + \Delta t\left(\mathbf{A}_{\mathrm{T}} + \mathbf{C}_{\mathrm{T}}(\mathbf{V}^{(t+1)})\right)\right]\mathbf{T}^{(t+1)} = \Delta t\mathbf{F}_{\mathrm{T}}(\mathbf{V}^{(t+1)}) + \mathbf{M}_{\mathrm{T}}\mathbf{T}^{(t)}, \tag{2.36}$$

où $\mathbf{T}$ est un vecteur contenant la température, $\mathbf{M}_{\mathrm{T}}$ une matrice masse, et où $\mathbf{A}_{\mathrm{T}}$, $\mathbf{C}_{\mathrm{T}}(\mathbf{V}^{(t+1)})$ et $\mathbf{F}_{\mathrm{T}}(\mathbf{V}^{(t+1)})$ dénotent respectivement la matrice de diffusion, la matrice de convection et le vecteur de dissipation visqueuse. Mentionnons également que les matrices $\mathbf{M}_{\mathrm{T}}$ et $\mathbf{C}_{\mathrm{T}}(\mathbf{V}^{(t+1)})$ contiennent toutes deux la capacité calorifique C_p et la masse volumique ρ comme facteurs multiplicatifs.

2.4 Méthode du lagrangien augmenté

2.4.1 Problème d'optimisation avec contraintes

La formulation faible du problème de Stokes (équations (2.27)-(2.28)) découle d'un principe variationnel et peut ainsi être obtenue à partir du problème de minimisation avec contrainte (Fortin et Glowinski, 1982)

$$\underset{\substack{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3 \\ \operatorname{div}\mathbf{v}=0}}{\operatorname{Inf}} \frac{\mu}{2}\int_\Omega |\operatorname{grad}\mathbf{v}|^2 d\Omega - \int_\Omega \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}\,d\Omega. \tag{2.37}$$

Classiquement, on introduit un multiplicateur de Lagrange $p \in L^2(\Omega)$ qui transforme ce problème en un problème de point-selle

$$\underset{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3}{\operatorname{Inf}}\ \underset{p\in L^2(\Omega)}{\operatorname{Sup}}\ L(\mathbf{v},p), \tag{2.38}$$

dans lequel

$$L(\mathbf{v},p) = \frac{\mu}{2}\int_\Omega |\operatorname{grad}\mathbf{v}|^2 d\Omega - \int_\Omega p\operatorname{div}\mathbf{v}\,d\Omega - \int_\Omega \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}\,d\Omega \tag{2.39}$$

est appelé lagrangien.

Le calcul des dérivées au sens de Gâteaux de $L(\mathbf{v},p)$ par rapport à $\mathbf{v}$ et à p nous permet de retrouver la formulation faible ou variationnelle (2.27)-(2.28) du problème de Stokes. On voit donc que la pression peut être considérée comme un multiplicateur de Lagrange qui sert à forcer la contrainte d'incompressibilité.

Une variante de l'approche précédente, souvent employée pour des questions de convergence, consiste à utiliser un lagrangien augmenté à la place du lagrangien classique. On le définit par

$$L_r(\mathbf{v},p) = L(\mathbf{v},p) + \frac{r}{2}\int_\Omega |\operatorname{div}\mathbf{v}|^2\, d\Omega, \tag{2.40}$$

où r est un terme de pénalisation.

On démontre assez facilement que tout point-selle de (2.40) est un point-selle de (2.39) et vice-versa. De plus, on remarque que

$$L_r(\mathbf{v},0) = \tfrac{\mu}{2}\int_\Omega |\text{grad}\,\mathbf{v}|^2 d\Omega - \int_\Omega \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}d\Omega + \tfrac{r}{2}\int_\Omega |\text{div}\,\mathbf{v}|^2 d\Omega \tag{2.41}$$

correspond aux méthodes de pénalisation classiques. L'avantage du lagrangien augmenté provient du fait que la présence du terme $\int_\Omega p\,\text{div}\,\mathbf{v}\,d\Omega$ fait en sorte que la solution exacte du problème de Stokes peut être déterminée sans faire tendre le paramètre r vers l'infini, ce qui n'est pas le cas avec les méthodes de pénalisation.

2.4.2 Algorithme d'Uzawa

Une façon classique de calculer le point-selle du problème (2.38) consiste à utiliser l'algorithme d'Uzawa:

0. Soit $p^{(0)}$ arbitrairement donné.
1. Pour $n = 0,1,2,...$, jusqu'à convergence,
   1.1 Résoudre, $p^{(n)}$ étant connu,

$$a(\mathbf{v}^{(n+1)},\psi) + r(\text{div}\,\mathbf{v}^{(n+1)},\text{div}\,\psi) = (\mathbf{f},\psi) + b(\psi,p^{(n)}),\ \forall\psi\in[H_0^1(\Omega)]^3. \tag{2.42}$$

   1.2 Calculer

$$(p^{(n+1)},\phi) = (p^{(n)},\phi) + \alpha b(\mathbf{v}^{(n+1)},\phi),\ \forall\phi\in L^2(\Omega). \tag{2.43}$$

On constate que l'algorithme d'Uzawa permet la décomposition d'un problème contraint en une suite de problèmes non contraints.

La version matricielle de l'algorithme d'Uzawa découle des équations (2.29) et (2.30):

0. Soit $\mathbf{P}^{(0)}$ arbitrairement donné.
1. Pour $n = 0,1,2,...$, jusqu'à convergence,
   1.1 Résoudre, $\mathbf{P}^{(n)}$ étant connu,

$$[\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B}]\mathbf{V}^{(n+1)} = \mathbf{F}_v - \mathbf{B}^T\mathbf{P}^{(n)}. \tag{2.44}$$

   1.2 Calculer

$$\mathbf{P}^{(n+1)} = \mathbf{P}^{(n)} + \alpha\mathbf{B}\mathbf{V}^{(n+1)}. \tag{2.45}$$

On pourrait démontrer que, si $r > 0$, l'algorithme d'Uzawa converge pour $0 < \alpha < 2r$ et que sa vitesse de convergence augmente avec r. Dans la pratique, on prend souvent r aussi grand que possible, puis on pose $\alpha = r$.

Finalement, il est possible de démontrer qu'il n'existe aucun principe variationnel pour les équations de Navier-Stokes (Leray 1934). Par conséquent, on ne peut établir de formulation variationnelle pour ce problème en minimisant une fonctionnelle quadratique. On peut toutefois utiliser l'algorithme d'Uzawa dans une telle situation, en ajoutant formellement aux équations (2.42) et (2.44) la dérivée en temps de la vitesse ainsi que le terme d'inertie.

2.4.3 Traitement de la rhéologie

Dans l'exposé qui précède, nous avons considéré que la viscosité était constante. Or, la modélisation numérique de l'écoulement d'un fluide non newtonien est plus difficile, en raison notamment de l'équation d'état rhéologique (2.3) qui est non linéaire.

Supposons, sans perte de généralité, que l'écoulement est diffusif et stationnaire. Les équations d'échange (2.1)-(2.2) deviennent alors

$$\operatorname{div}\tau + \operatorname{grad} p = \mathbf{f}, \qquad \text{dans } \Omega, \tag{2.46}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0, \qquad \text{dans } \Omega. \tag{2.47}$$

Posons maintenant

$$\vartheta(|\dot{\gamma}|^2) = 2\eta(|\dot{\gamma}|), \tag{2.48}$$

puis définissons la fonctionnelle $\Theta(y)$ à l'aide de l'équation différentielle

$$\frac{\partial \Theta}{\partial y} = \vartheta(y), \ \Theta(0) = 0. \tag{2.49}$$

On peut alors montrer (Tanguy et coll. 1984) que la solution du problème de Stokes (2.46)-(2.47) est également la solution du problème de minimisation

$$\inf_{\substack{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3 \\ \operatorname{div}\mathbf{v}=0}} \tfrac{1}{2}\int_\Omega \Theta(|\dot{\gamma}|^2)\, d\Omega - \int_\Omega \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}\, d\Omega. \tag{2.50}$$

Comme précédemment, l'utilisation de la méthode du lagrangien augmenté nous permettrait d'éliminer la contrainte d'incompressibilité en transformant (2.50) en un problème de point-selle. Ce dernier serait toutefois non linéaire en vitesse ce qui, sur le plan pratique, est plutôt ennuyeux. On peut alors songer à utiliser un méthode de décomposition-coordination par lagrangien augmenté (Fortin et Glowinski 1982, Tanguy et coll. 1984) pour éliminer cette non-linéarité.

Par conséquent, soit $\sigma \in [L^2(\Omega)]^9$ un tenseur auxiliaire. On démontre que (2.50) est équivalent au problème de minimisation à deux contraintes

$$\inf_{\substack{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3 \\ \operatorname{div}\mathbf{v}=0}} \ \inf_{\substack{\sigma\in[L^2(\Omega)]^9 \\ \sigma=\dot{\gamma}(\mathbf{v})}} \tfrac{1}{2}\int_\Omega \Theta(|\sigma|^2)\, d\Omega - \int_\Omega \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}\, d\Omega, \tag{2.51}$$

qui peut être converti, au moyen de deux multiplicateurs de Lagrange, en un problème de point-selle :

$$\inf_{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3}\ \inf_{\sigma\in[L^2(\Omega)]^9}\ \sup_{p\in L^2(\Omega)}\ \sup_{\lambda\in[L^2(\Omega)]^9} L_{rs}(\mathbf{v},p,\sigma,\lambda), \tag{2.52}$$

où le lagrangien augmenté est défini par

$$L_{rs}(\mathbf{v},p,\sigma,\lambda)=\tfrac{1}{2}\int_\Omega \Theta(|\sigma|^2)\,d\Omega-\int_\Omega p\cdot\operatorname{div}\mathbf{v}\,d\Omega-\int_\Omega \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}\,d\Omega+\tfrac{r}{2}\int_\Omega|\operatorname{div}\mathbf{v}|^2\,d\Omega+\int_\Omega\lambda:(\sigma-\dot\gamma)\,d\Omega+\tfrac{s}{2}\int_\Omega|\sigma-\dot\gamma|^2\,d\Omega. \tag{2.53}$$

Ce problème peut être résolu par un algorithme de type Uzawa pour lequel nous renvoyons le lecteur aux références mentionnées plus haut. Encore ici, les paramètres r et s sont utilisés pour accélérer la convergence de l'algorithme. Nous ajouterons également que cet algorithme implique la résolution de problèmes de Stokes ainsi que celle d'équations non linéaires en $|\sigma|$, ces dernières provenant de la dérivation du lagrangien augmenté (2.53) par rapport à σ. En pratique, chaque composante de σ est approchée par un ensemble de constantes; ces équations non linéaires sont en fait des équations non linéaires à une dimension que l'on résout aisément par un algorithme approprié comme, par exemple, l'algorithme de Newton-Raphson.

CHAPITRE 3
MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS

Ce chapitre est consacré à la méthode des éléments finis virtuels. Nous nous plaçons dans le cadre général des domaines contenant des parties mobiles ou déformables. Après une revue de la littérature concernant les problèmes d'écoulement dans ce type de domaine, nous introduisons la méthode des éléments finis virtuels que nous présentons comme une méthode de domaine fictif (Glowinski 1994a et 1994b). Finalement, nous montrons comment cette méthode peut être combinée aux algorithmes itératifs utilisés pour la résolution des équations de Navier-Stokes.

3.1 Résolution de problèmes d'écoulement dans des domaines contenant des parties mobiles ou déformables

Le problème de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire appartient à la classe des problèmes d'écoulement dans des domaines contenant des parties mobiles ou déformables. Nous présentons maintenant les principales stratégies trouvées dans la littérature pour la résolution de ce type de problème.

Mentionnons, dans un premier temps, une méthode générale conçue par Thompson et coll. (1974), basée sur les coordonnées généralisées. Cette méthode permet la génération de maillages pour des domaines de formes

diverses contenant un nombre quelconque de parties fixes. Développée tout d'abord pour des géométries bidimensionnelles, elle fut par la suite étendue au cas tridimensionnel (Thompson et coll. 1985). Comme elle permet la création de maillages orthogonaux ou quasi orthogonaux, elle est souvent utilisée conjointement avec les méthodes de différences finies ou de volumes finis. Cette méthode pourrait être utilisée pour générer un nouveau maillage à chacun des pas de temps d'une simulation transitoire de l'écoulement dans un domaine à parties mobiles ou déformables. Une telle stratégie serait toutefois très coûteuse.

Demirdzic et Peric (1990) ont pour leur part développé une technique originale de maillages mobiles dans laquelle un seul maillage est créé. Sa topologie est évolutive et tient compte à la fois des parties fixes et mobiles du domaine. Un remaillage s'avère toutefois nécessaire lorsque la grille devient trop déformée et irrégulière.

Pour éviter les remaillages répétitifs et coûteux, Perng et Murthy (1993) ont utilisé une technique mise de l'avant par Rai (1985) pour la simulation de l'écoulement dans un réservoir agité. Cette méthode, dite du "maillage glissant" utilise deux maillages complémentaires, un qui est fixe et qui correspond au réservoir, l'autre qui peut bouger dans le temps et qui caractérise l'agitateur. Par conséquent, les noeuds générés ne coïncident pas à l'interface entre les deux maillages. Une interpolation conservative devient donc nécessaire à chaque pas de temps, ce qui, sur le plan pratique, constitue une opération plutôt délicate. De plus, l'utilisation de cette méthode pour la simulation de procédés de mélange impliquant des agitateurs de forme complexe tels les rubans hélicoïdaux ou les agitateurs à pales engrenées est non triviale. Elle a toutefois permis la simulation

tridimensionnelle de l'écoulement dans des réservoirs munis d'agitateurs plus simples comme les turbines et les ancres (Bakker et coll. 1995, Jaworski et coll. 1995).

Une autre approche consiste à ignorer les parties mobiles du domaine d'étude lors de la génération de maillage. Ces parties sont plutôt prises en compte a posteriori au moyen de forces fictives dans les équations d'échange. Par exemple, Pelletier et Schetz (1986) ont étudié l'écoulement de l'eau au voisinage de la turbine d'un sous-marin en simulant son effet à l'aide de forces équivalentes calculées à l'intérieur d'un disque. Celles-ci étaient représentées par des fonctions empiriques du rayon, du couple et de la poussée.

En utilisant une stratégie analogue, Hutchings et coll. (1989) ont analysé l'influence des chicanes sur l'écoulement dans une cuve agitée. Ces chicanes n'étaient pas maillées mais plutôt prises en compte dans les équations d'échange par des puits de quantité de mouvement imposés à la paroi de la cuve. Des solutions stationnaires pouvaient être ainsi obtenues facilement. Malheureusement, cette technique n'est valide que dans le cas de géométries très simples pour lesquelles les interactions entre les chicanes et l'agitateur sont négligeables. Pour ce même problème, Kresta et Wood (1991) ont opté pour une stratégie différente; l'emploi de conditions aux limites empiriques de type flux entrant flux sortant pour caractériser l'écoulement dans la zone de mélange.

L'écoulement du sang dans les ventricules du coeur est un autre exemple de problème dans un domaine à parties mobiles ou déformables. Dans le but de le résoudre, Peskin et McQueen (1989) ont développé une technique qu'ils ont baptisée "méthode de la frontière immergée". Dans cette méthode, un

maillage fixe est utilisé et le mouvement des parois musculaires du coeur, les parties déformables, est décrit au moyen d'une série de points de contrôle sur lesquels des forces de tension sont imposées et distribuées dans les éléments finis voisins. Ces forces ne sont pas connues à priori et sont plutôt basées sur des modèles théoriques approximatifs. Mentionnons finalement qu'une variante de cette technique, appelée "méthode de l'interface immergée", a été récemment introduite par Leveque (1994).

Toutes les approches mentionnées ci-haut manquent de généralité et de flexibilité. Soit elles font appel à des empirismes, soit leur applicabilité est très restreinte.

La méthode du domaine fictif ou méthode du domaine imbriqué (Buzbee et coll. 1971) a connu ces derniers temps un certain essor et s'est montrée particulièrement efficace pour la résolution de problèmes aux dérivées partielles dans des domaines de forme compliquée (Young et coll. 1991, Bussoletti et coll. 1991, Glowinski et coll. 1994b). Avec cette méthode, les frontières complexes du domaine d'étude sont englobées dans un domaine auxiliaire de topologie beaucoup plus simple. L'étape de construction de maillage en est ainsi grandement facilitée. Par contre, cette apparente simplification n'est pas sans entraîner certaines complications. En particulier, la gestion de structures de données ayant notamment rapport à la forme exacte du domaine, une opération essentielle de cette méthode, n'est pas triviale, surtout pour les cas tridimensionnels.

Récemment, une nouvelle classe de méthodes de domaine fictif a été développée. Elle est basée sur l'utilisation explicite de multiplicateurs de Lagrange pour le traitement des conditions aux limites devant être imposées sur la frontière des parties internes du domaine d'étude. Ces parties internes,

qui peuvent être mobiles, ne sont pas maillées. Elles sont traitées comme des contraintes cinématiques ponctuelles, puis intégrées dans la formulation variationnelle des équations d'échange au moyen d'une méthode de lagrangien augmenté (Fortin et Glowinski 1982). Sheehy et coll. (1994) ont préconisé cette approche pour le refroidissement de profilés d'extrusion en considérant les canaux du conformateur comme des domaines fictifs bidimensionnels. Par ailleurs, Glowinski et coll. (1994a) ont démontré le potentiel intéressant de ce type de méthode en simulant l'écoulement tridimensionnel d'un fluide newtonien visqueux autour d'une sphère discrétisée de façon fictive.

Quoiqu'elle s'apparente à la méthode de Peskin (1989) quant à l'utilisation de points de contrôle pour le traitement des frontières de forme complexe, la méthode du domaine fictif ne requiert pas l'utilisation de forces empiriques. Elle est donc beaucoup plus flexible sur le plan pratique et semble mieux adaptée pour la résolution de problèmes d'écoulement dans des domaines contenant des parties mobiles, comme dans le cas des malaxeurs à mouvement planétaire.

3.2 Méthode du domaine fictif

3.2.1 Description de la méthode

Soit un domaine Ω de frontière Γ, à l'intérieur duquel se trouve un objet (éventuellement une partie mobile) Ω^* de frontière Γ^*. On présente à la Figure 3.1 un exemple bidimensionnel d'un tel domaine.

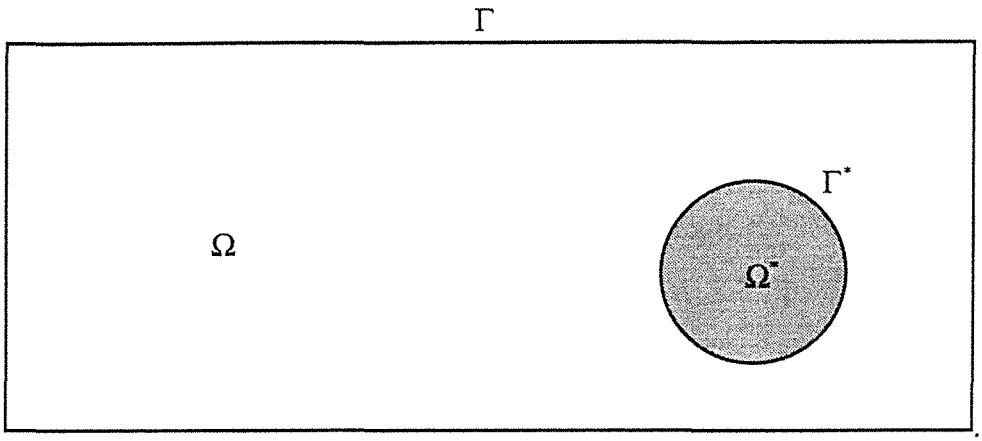

Figure 3.1 Domaine bidimensionnel contenant un objet.

Dans un premier temps, nous considérons l'écoulement diffusif d'un fluide incompressible visqueux dans Ω. Cet écoulement est régi par les équations de Stokes que nous complétons, sans perte de généralité, avec des conditions aux limites de Dirichlet sur la frontière $\Gamma \cup \Gamma^*$:

$$-\mu\Delta\mathbf{v} + \operatorname{grad} p = \mathbf{f}, \quad \text{dans } \Omega \setminus \Omega^*, \tag{3.1}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0, \quad \text{dans } \Omega \setminus \Omega^*, \tag{3.2}$$

$$\mathbf{v} = 0, \quad \text{sur } \Gamma, \tag{3.3}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^*, \quad \text{sur } \Gamma^*. \tag{3.4}$$

Ce problème peut être difficile à résoudre numériquement si la forme du domaine $\Omega \setminus \Omega^*$ est complexe. Il est bien évident que la simulation dans Ω seulement serait plus facile.

La méthode du domaine fictif consiste à traiter l'objet Ω^* comme un obstacle à l'écoulement au moyen de contraintes cinématiques imposées sur sa frontière Γ^*. Le problème devient ainsi équivalent au problème d'optimisation

$$\inf_{\substack{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3 \\ \mathbf{v}|_{\Gamma^*}=\mathbf{v}^*}} \sup_{p\in L^2(\Omega)} L_r(\mathbf{v}, p), \tag{3.5}$$

où $L_r(\mathbf{v},p)$ est le lagrangien augmenté de Stokes donné par (2.40).

De façon naturelle, on peut ramener (3.5) à un problème de point-selle en introduisant un multiplicateur de Lagrange $\lambda \in [L^2(\Gamma^*)]^3$ pour forcer la condition aux limites prescrite sur Γ^*. Nous obtenons

$$\underset{\mathbf{v}\in[H_0^1(\Omega)]^3}{\text{Inf}}\ \underset{p\in L^2(\Omega)}{\text{Sup}}\ \underset{\lambda\in[L^2(\Gamma^*)]^3}{\text{Sup}}\ L_{rs}^*(\mathbf{v},p,\lambda), \tag{3.6}$$

où

$$L_{rs}^*(\mathbf{v},p,\lambda) = L_r(\mathbf{v},p) - \int_{\Gamma^*}\lambda\cdot(\mathbf{v}-\mathbf{v}^*)\,d\Gamma + \tfrac{s}{2}\int_{\Gamma^*}\left|\mathbf{v}-\mathbf{v}^*\right|^2 d\Gamma \tag{3.7}$$

est le lagrangien augmenté associé et où s est un paramètre qui améliore la convergence des méthodes de résolution.

Il aurait été plus rigoureux de prendre λ dans l'espace de Sobolev $[H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma^*)]^3$. Toutefois, cet espace étant plus délicat à manipuler, il a été décidé de choisir $\lambda \in [L^2(\Gamma^*)]^3$, ce qui, en pratique, ne devrait pas poser de problème puisque une fonction $\mathbf{v}^*$ la moindrement régulière implique ce choix (Glowinski, 1994b).

Le problème de point-selle (3.6) peut être résolu à l'aide de l'algorithme d'Uzawa:

0. Soit $p^{(0)}$ et $\lambda^{(0)}$ arbitrairement donnés.
1. Pour $n=0,1,2,...$, jusqu'à convergence,
   1.1 Résoudre, $p^{(n)}$ et $\lambda^{(n)}$ étant connus,

$$\begin{aligned} &a(\mathbf{v}^{(n+1)},\psi) + r(\operatorname{div}\mathbf{v}^{(n+1)},\operatorname{div}\psi) + s(\mathbf{v}^{(n+1)},\psi)_{\Gamma^*} = (\mathbf{f},\psi) + \\ &b(\psi,p^{(n)}) + (\lambda^{(n)},\psi)_{\Gamma^*} + s(\mathbf{v}^*,\psi)_{\Gamma^*},\ \forall\psi\in[H_0^1(\Omega)]^3. \end{aligned} \tag{3.8}$$

   1.2 Calculer

$$(p^{(n+1)},\phi) = (p^{(n)},\phi) + \alpha b(\mathbf{v}^{(n+1)},\phi),\ \forall\phi\in L^2(\Omega). \tag{3.9}$$

1.3 Calculer

$$(\lambda^{(n+1)},\xi)_{\Gamma^*} = (\lambda^{(n)},\xi)_{\Gamma^*} + \beta((\mathbf{v}^{(n+1)} - \mathbf{v}^*),\xi)_{\Gamma^*},\ \forall \xi \in [L^2(\Gamma^*)]^3. \tag{3.10}$$

Dans les équations (3.8) et (3.10), le produit scalaire dans $L^2(\Gamma^*)$ est défini par

$$(\lambda_1,\lambda_2)_{\Gamma^*} = \int_{\Gamma^*} \lambda_1\lambda_2\, d\Gamma. \tag{3.11}$$

Pour les raisons évoquées à la section 2.4.2, on choisit r et s aussi grands que possible puis on pose $\alpha = r$ et $\beta = s$.

Du problème de point-selle (3.6), on tire la formulation variationnelle (on pose $r = s = 0$ pour simplifier la notation)

$$a(\mathbf{v},\psi) = (\mathbf{f},\psi) + b(\psi,p) + (\lambda,\psi)_{\Gamma^*},\ \forall \psi \in [H_0^1(\Omega)]^3, \tag{3.12}$$

$$b(\mathbf{v},\phi) = 0,\ \forall \phi \in L^2(\Omega), \tag{3.13}$$

$$((\mathbf{v} - \mathbf{v}^*),\xi)_{\Gamma^*} = 0,\ \forall \xi \in [L^2(\Gamma^*)]^3. \tag{3.14}$$

Dans la méthode du domaine fictif, il n'est pas nécessaire de mailler volumiquement l'objet Ω^*, d'où l'expression domaine fictif. C'est la raison pour laquelle on peut choisir la vitesse et la pression dans des espaces fonctionnels et des espaces d'approximation définis sur le domaine entier Ω. L'espace d'approximation pour $\lambda \in [L^2(\Gamma^*)]^3$ est quant à lui rattaché à la frontière Γ^* du domaine fictif Ω^*. Par conséquent, à un maillage surfacique $\Im_h^*$ par éléments finis de Γ^*, nous associons un espace d'approximation Λ_h de $[L^2(\Gamma^*)]^3$. Le problème discret revient donc à trouver $\mathbf{v}_h \in V_h$, $p_h \in Q_h$ et $\lambda_h \in \Lambda_h$ tels que

$$a(\mathbf{v}_h,\psi_h) = (\mathbf{f},\psi_h) + b(\psi_h,p_h) + (\lambda_h,\psi_h)_{\Gamma^*},\ \forall \psi_h \in V_h, \tag{3.15}$$

$$b(\mathbf{v}_h,\phi_h) = 0,\ \forall \phi_h \in Q_h, \tag{3.16}$$

$$((\mathbf{v}_h - \mathbf{v}^*),\xi_h)_{\Gamma^*} = 0,\ \forall \xi_h \in \Lambda_h. \tag{3.17}$$

Ce problème entre dans la catégorie des problèmes mixtes. Un critère de stabilité qui assure la convergence uniforme lorsque $h \to 0$ nous est donc fourni par une condition de Brezzi-Babuska qui dicte le choix des espaces d'approximation. À notre connaissance, aucune démonstration quant à la vérification de cette condition pour un élément fini mixte se rapportant aux méthodes de domaine fictif n'est disponible dans la littérature.

3.2.2 Méthode des éléments finis virtuels

Dans ce travail, l'élément fini mixte $P_1^- - P_0$ est utilisé pour l'approximation de la vitesse et de la pression. Par extension, il serait ainsi naturel de prendre pour Λ_h l'espace P_0 des fonctions dont la restriction sur chaque triangle de $\mathfrak{I}_h^*$ est constante. Cependant, une des difficultés inhérentes aux méthodes de domaine fictif demeure le fait qu'on doit être en mesure de calculer facilement des intégrales de surface sur Γ^* (Glowinski 1994a). Techniquement, cela exige la décomposition de Γ^* en sous-régions délimitées par l'intersection des triangles de $\mathfrak{I}_h^*$ et des tétraèdres de $\mathfrak{I}_h$, ce qui est du même ordre de difficulté que la génération d'un maillage pour le domaine réel $\Omega \setminus \Omega^*$. Par conséquent, nous avons opté pour une stratégie différente, toujours basée sur la méthode du domaine fictif, que nous appelons la *méthode des éléments finis virtuels*.

Soit $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ un ensemble de points, que nous appellerons points de contrôle par la suite, définissant la frontière fictive Γ^*. Choisissons maintenant de forcer la contrainte $\mathbf{v}|_{\Gamma^*} = \mathbf{v}^*$ point par point, c'est-à-dire:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{v}^*(\mathbf{x}_i), \ \forall i = 1,2,...,N. \tag{3.18}$$

Cette façon d'imposer fortement la vitesse en chaque point de contrôle n'est pas sans rappeler les méthodes de collocation (Zienkiewicz 1977). La contrainte (3.18) est équivalente, du moins au sens des distributions, à l'équation (3.14) si les composantes de ξ sont des fonctions de Dirac définies par

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)=\begin{cases}\infty \text{ si } \mathbf{x}=\mathbf{x}_i,\\ 0 \text{ si } \mathbf{x}\neq\mathbf{x}_i.\end{cases} \tag{3.19}$$

On constate que cette approche ne nécessite plus l'évaluation d'intégrales de bord sur la frontière fictive Γ^*, ni de maillage surfacique $\mathfrak{I}_h^*$. Le domaine fictif Ω^* est délimité par l'ensemble de points de contrôle $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$. Chaque composante du multiplicateur de Lagrange λ est approchée à l'aide d'une constante par point de contrôle.

Finalement, on donne la version matricielle de l'algorithme d'Uzawa (3.8)-(3.10):

0. Soit $\mathbf{P}^{(0)}$ et $\Lambda^{(0)}$ arbitrairement donnés.
1. Pour $n=0,1,2,...$, jusqu'à convergence,
   1.1 Résoudre, $\mathbf{P}^{(n)}$ et $\Lambda^{(n)}$ étant connus,
   $$[\mathbf{A}_v+r\mathbf{B}^T\mathbf{B}+s\mathbf{D}]\mathbf{V}^{(n+1)}=\mathbf{F}_v-\mathbf{B}^T\mathbf{P}^{(n)}+\mathbf{E}\Lambda^{(n)}+\mathbf{G}. \tag{3.20}$$
   1.2 Calculer
   $$\mathbf{P}^{(n+1)}=\mathbf{P}^{(n)}+\alpha\mathbf{B}\mathbf{V}^{(n+1)}. \tag{3.21}$$
   1.3 Calculer
   $$\Lambda^{(n+1)}=\Lambda^{(n)}+\beta\mathbf{H}\mathbf{V}^{(n+1)}. \tag{3.22}$$

Les termes apparaissant dans les équations (3.20)-(3.22) ont soit la même définition que dans les équations (2.44)-(2.45) ou sont particuliers à la

méthode du domaine fictif. Dans ce dernier cas, leur signification découle directement des équations (3.8)-(3.10).

La méthode du domaine fictif peut être facilement adaptée au traitement de problèmes non stationnaires dans des domaines à parties mobiles. L'utilisation d'un schéma en temps (voir (2.31)-(2.32)) permet alors de décomposer le problème transitoire en une série de problèmes stationnaires. Les points de contrôle dépendent du temps et doivent être mis à jour à chaque itération en fonction de la cinématique des parties mobiles. Cette stratégie sera utilisée pour la simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire.

3.3 Résolution des systèmes linéaires

Dans ce travail, l'équation de conservation de l'énergie et les équations de Navier-Stokes sont résolues de façon découplée, leurs solutions respectives étant recombinées au moyen d'un algorithme de Picard. On est ainsi amené à résoudre les systèmes linéaires décrits en (2.36) et (2.44) (ou (3.20)).

3.3.1 Généralités

Deux types de méthodes peuvent être utilisés pour la résolution de systèmes linéaires: les méthodes directes et les méthodes itératives.

Pour des problèmes de petite taille, les méthodes directes s'avèrent très performantes même sur des stations de travail bas de gamme. Ces méthodes deviennent cependant inefficaces pour la résolution numérique de systèmes

matriciels de grande taille qui peuvent facilement comporter quelques centaines de milliers d'équations. En effet, la mémoire d'ordinateur et le temps de calcul nécessaires lors de l'utilisation de telles méthodes dépend du nombre d'équations à résoudre (NEQ). Pour la résolution des systèmes linéaires (2.36), (2.44) ou (3.20) à l'aide d'une méthode d'élimination de Gauss (LU) couplée à un stockage de type ligne de ciel (Dhatt et Touzot 1981), il est relativement aisé de montrer que ces variations sont respectivement $O(NEQ)^{1.67}$ et $O(NEQ)^{2.33}$ (Axelsson et Barker 1984).

Nombre d'équations en vitesse	Mémoire (MB)	Temps de calcul IBM RISC6000/590
10^4	80	~30 minutes
10^5	36 000	~1 jour
10^6	771 000	~2 ans

Tableau 3.1 Ressources informatiques nécessaires pour la résolution par la méthode d'élimination de Gauss du système matriciel (2.44).

Il est évident, d'après le Tableau 3.1, que la résolution de problèmes de l'ordre de plus de 10^5 équations au moyen de méthodes directes est irréaliste sur les ordinateurs actuels. D'autres méthodes, de type itératif, doivent donc être envisagées dans de tels cas.

Les méthodes de gradient conjugué sont parmi les méthodes itératives celles qui sont les plus populaires pour la résolution de systèmes linéaires issus de problèmes aux dérivées partielles. Elles sont simples à implanter et relativement performantes. De plus, il est possible de démontrer qu'elles convergent pour toute matrice symétrique définie positive (Lascaux et Théodor 1986). Par contre, ces méthodes demeurent sensibles au

conditionnement de telle sorte que leur vitesse de convergence diminue rapidement pour des systèmes linéaires de plus en plus grands. Par conséquent, les méthodes de gradient conjugué sont habituellement préconditionnées pour en augmenter l'efficacité. Une approche possible consiste à utiliser comme préconditionnement une factorisation incomplète de Choleski $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^{\mathrm{T}}$ et à remplacer le système linéaire $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ par le système équivalent $\left[\mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{L}^{-\mathrm{T}}\right]\left\{\mathbf{L}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right\} = \left\{\mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}\right\}$ de convergence plus rapide. On peut alors montrer qu'avec cette méthode, appelée ICCG ou *Incomplete Choleski Conjugate Gradient* , le temps de calcul nécessaire pour la résolution de systèmes linéaires provenant de problèmes tridimensionnels ((2.36), (2.44) ou (3.20)) varie comme $\mathrm{O}\left(NEQ^{1.17}\right)$. De plus, un stockage de type ligne de ciel condensée (Robichaud et Tanguy 1987) fait en sorte que la mémoire requise varie linéairement ($\mathrm{O}(NEQ)$) avec la taille des systèmes.

D'autres classes de méthodes itératives peuvent être utilisées pour la résolution de systèmes linéaires provenant de problèmes aux dérivées partielles.

D'une part, les méthodes dites multigrilles (Lascaux et Théodor 1986, Hackbusch 1982) nécessitent la résolution successive et partielle des équations d'échange sur une famille de maillages. Relativement difficile à implanter, en particulier dans le cas de géométries complexes et de maillages non structurés, celles-ci ont néanmoins l'avantage d'offrir une convergence linéaire.

D'autre part, les méthodes de décomposition de domaine, introduites par Schwarz, consistent à subdiviser le domaine d'étude en sous-domaines, puis à résoudre les équations d'échange sur chacun de ceux-ci (Glowinski et coll. 1983). Ces méthodes présentent un intérêt du fait qu'il est généralement plus

aisé de résoudre plusieurs petits problèmes qu'un seul problème de grande taille. Un couplage des solutions s'avèrent cependant nécessaire; il peut s'effectuer soit par des conditions aux limites communes entre les sous-domaines ou soit en permettant le chevauchement des sous-domaines. La convergence des méthodes de décomposition de domaine est généralement lente et nécessite donc un préconditionnement efficace. De plus, pour des géométries complexes, il n'existe pas de décomposition naturelle. Ces méthodes demeurent toutefois des plus attrayante pour la résolution de problèmes sur les ordinateurs parallèles.

3.3.2 Résolution des systèmes linéaires en température

Le système matriciel décrit en (2.36) permet de calculer la température. Dans le cadre du présent travail, celui-ci est de petite taille, ne dépassant guère 5000 équations. Par conséquent, une méthode directe de type LU convient parfaitement.

3.3.3 Résolution des systèmes de Stokes

L'algorithme d'Uzawa (2.44)-(2.45) permet le traitement de la contrainte d'incompressibilité apparaissant dans les équations de Stokes. Celui-ci nécessite, en particulier, la résolution du système linéaire en vitesse (2.44) communément appelé "problème primal". D'autre part, on peut remarquer que l'équation (2.45) n'est rien d'autre qu'une méthode de descente pour la résolution du "problème dual"

$$\mathbf{BV} = \mathbf{0}, \tag{3.23}$$

qui, à l'aide de (2.44), peut être reformulé comme un système linéaire en pression:

$$\mathbf{B}(\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{P} = \mathbf{B}(\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{F}_v. \tag{3.24}$$

On peut montrer (Fortin et Glowinski 1982) que le nombre de conditionnement du problème dual diminue lorsque r augmente:

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{cond}\left(\mathbf{B}(\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\right) = 1. \tag{3.25}$$

Il en résulte donc que l'utilisation du lagrangien augmenté avec $r > 0$ peut être vue comme une forme de préconditionnement et que plus r est grand plus la convergence de l'algorithme d'Uzawa (2.44)-(2.45) devrait être rapide.

Pour les problèmes 2D, l'utilisation d'une méthode directe pour la résolution de (2.44) est généralement suffisante et on peut choisir r grand ($r = 10^6$ par exemple) pour améliorer la convergence de l'algorithme d'Uzawa.

Les problèmes 3D quant à eux produisent des systèmes linéaires en vitesse dont la taille excède souvent 100 000 équations. Comme l'indique le Tableau 3.1, les méthodes directes deviennent rapidement prohibitives dans de telles situations.

L'utilisation combinée de l'algorithme d'Uzawa et des méthodes itératives pour la résolution de (2.44) est délicate à cause de la propriété suivante:

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{cond}(\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B}) = \infty. \tag{3.26}$$

On voit donc que le choix $r > 0$ produit deux effets diamétralement opposés; d'une part, il améliore le conditionnement du problème dual et d'autre part, il détériore le conditionnement du problème primal. Il n'est donc pas possible de prendre r grand dans l'algorithme d'Uzawa si l'équation (2.44) est résolue

par une méthode itérative. Sa vitesse de convergence est ainsi réduite de façon significative.

Pour accélérer la convergence du problème dual, Robichaud et coll. (1990) ont développé une variante faiblement pénalisée de l'algorithme d'Uzawa. Dans cette méthode, appelée algorithme d'Uzawa incomplet, on prend r petit ($r<10$), et les problèmes primal et dual sont résolus respectivement par une méthode de descente préconditionnée par une factorisation incomplète et une méthode de gradient conjugué, cette dernière étant beaucoup plus rapide que la simple méthode de descente (2.45). Si $\mathbf{S}^{-1}$ est une factorisation incomplète de $\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B}$, cet algorithme se lit comme suit:

0. Soit $\mathbf{V}^{(0)}$ et $\mathbf{P}^{(0)}$ connus.
1. Pour $i = 0,1,2,...,$ jusqu'à convergence,
   1.1 Problème primal

$$\mathbf{R}^{(i)} = \mathbf{F}_v - \mathbf{B}^T\mathbf{P}^{(i)} - (\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B})\mathbf{V}^{(i)}$$

$$c^{(i)} = \frac{(\mathbf{R}^{(i)}, \mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}^{(i)})}{((\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B})\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}^{(i)}, \mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}^{(i)})}$$

$$\mathbf{V}^{(i+1)} = \mathbf{V}^{(i)} + c^{(i)}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}^{(i)}$$

   1.2 Problème dual

   Pour $j = 1,2,$

$$\mathbf{V}^{(j)} = \mathbf{V}^{(i+1)}, \text{ si } j = 1$$

$$\mathbf{P}^{(j)} = \mathbf{P}^{(i+1)}, \text{ si } j = 1$$

$$\mathbf{D}^{(j)} = \begin{cases} \mathbf{B}\mathbf{V}^{(j)}, & \text{si } j = 1 \\ \mathbf{B}\mathbf{V}^{(j)} + b^{(j)}\mathbf{D}^{(j-1)}, & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\text{avec } b^{(j)} = \frac{(\mathbf{B}\mathbf{V}^{(j)}, \mathbf{B}\mathbf{V}^{(j)})}{(\mathbf{B}\mathbf{V}^{(j-1)}, \mathbf{B}\mathbf{V}^{(j-1)})}$$

$$\mathbf{Z}^{(j)} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}^{(j)} \tag{3.27}$$

$$a^{(j)} = \frac{(\mathbf{BV}^{(j)}, \mathbf{BV}^{(j)})}{(\mathbf{BV}^{(j)}, \mathbf{BZ}^{(j)})}$$

$$\mathbf{P}^{(j+1)} = \mathbf{P}^{(j)} + a^{(j)}\mathbf{D}^{(j)}$$

$$\mathbf{V}^{(j+1)} = \mathbf{V}^{(j)} + a^{(j)}\mathbf{Z}^{(j)}$$

1.3 Mises à jour

$$\mathbf{V}^{(i+1)} = \mathbf{V}^{(j+1)}$$

$$\mathbf{P}^{(j+1)} = \mathbf{P}^{(i+1)}$$

Tel qu'il est écrit, l'algorithme d'Uzawa incomplet est très performant pour la résolution de problèmes d'écoulement dans des géométries confinées. On montre alors que la mémoire et le temps de calcul nécessaires pour la résolution varient comme $O(NEQ)$ et $O\left(NEQ^{1.4}\right)$. On présente dans le tableau ci-dessous un résumé des ressources informatiques requises en fonction de la taille du problème.

Nombre d'équations en vitesse	Mémoire (MB)	Temps de calcul IBM RISC6000/590
10^4	7	~10 secondes
10^5	67	~5 minutes
10^6	667	~2 heures

Tableau 3.2 Ressources informatiques nécessaires pour la résolution par la méthode d'Uzawa incomplet du système matriciel (2.44)-(2.45).

Le lecteur pourra apprécier l'avantage de cette méthode sur les méthodes directes en comparant les Tableaux 3.1 et 3.2.

Des essais ont démontré que, dans le cas plus général des géométries ouvertes, cet algorithme n'est pas très robuste et diverge la plupart du temps. Ce manque de robustesse peut être attribué à l'équation (3.27) qui sert à mettre à jour la vitesse et la pression. En effet, cette mise à jour est incorrecte; une utilisation conforme de la méthode du gradient conjugué préconditionné nous donnerait

$$\mathbf{Z}^{(j)} = (\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{D}^{(j)}, \tag{3.28}$$

qui implique la résolution d'un problème de même rang que le problème primal, ce qui est beaucoup plus coûteux que (3.27) qui ne demande qu'une descente et une remontée triangulaires. L'équation (3.27) s'avère donc un compromis entre rapidité et robustesse qui permet à l'algorithme d'Uzawa incomplet d'être très performant dans certains cas. On ne comprend toujours pas, cependant, pourquoi cet algorithme s'est montré jusqu'à maintenant infaillible pour la résolution de problèmes dans des géométries confinées. C'est l'algorithme qui a été utilisé dans ce travail, et une convergence a pu être obtenue de façon systématique.

Afin de pouvoir garantir la convergence lors de simulations dans des géométries ouvertes, nous avons adapté au cas des éléments finis tétraédriques à pression discontinue une variante de l'algorithme d'Uzawa développée par Cahouet et Chabard (1988). Cet algorithme, appelé algorithme d'Uzawa gradient conjugué préconditionné, repose, comme son nom l'indique, sur l'utilisation de la méthode du gradient conjugué pour la résolution découplée des problèmes primal et dual. Il a été utilisé depuis à plusieurs reprises pour prédire l'écoulement dans des géométries ouvertes. Citons, par exemple, une étude sur l'efficacité hydrodynamique de mélangeurs statiques (Bertrand et Tanguy 1994).

Dans l'algorithme d'Uzawa gradient conjugué préconditionné, aucune pénalisation n'est utilisée pour augmenter la vitesse de convergence du problème dual. On utilise plutôt une matrice de préconditionnement facile à construire et dont la forme est déterminée à l'aide d'une analyse spectrale de l'opérateur divergence. Le lecteur pourra consulter Cahouet et Chabard (1988) et Bertrand et Tanguy (en préparation) pour plus de détails. Nous ne donnerons ici que les grandes lignes de cet algorithme:

0. Soit $\mathbf{V}^{(0)}$ et $\mathbf{P}^{(0)}$ connus.
1. Résoudre, en utilisant l'algorithme ICCG, le problème primal
$$\mathbf{A}_v\mathbf{V} = \mathbf{F}_v - \mathbf{B}^T\mathbf{P}, \tag{3.29}$$
2. Résoudre, en utilisant l'algorithme ICCG, le problème dual
$$\mathbf{B}\mathbf{A}_v^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{P} = \mathbf{B}\mathbf{A}_v^{-1}\mathbf{F}_v, \tag{3.30}$$
en mettant à jour, à chaque itération, la vitesse pour qu'elle satisfasse le problème primal.

Les algorithmes itératifs d'Uzawa sont tout à fait compatibles avec la méthode du domaine fictif. L'approche préconisée dans ce travail consiste à utiliser directement l'algorithme d'Uzawa incomplet pour les problèmes primal et dual (équations (3.20) et (3.21)), puis à faire appel à un algorithme d'Uzawa standard pour la mise à jour du multiplicateur de Lagrange Λ:

0. Soit $\mathbf{P}^{(0)}$ et $\Lambda^{(0)}$ arbitrairement donnés.
1. Pour $n = 0,1,2,...$, jusqu'à convergence,
   1.1 $\mathbf{P}^{(n)}$ et $\Lambda^{(n)}$ étant connus, trouver $\mathbf{P}^{(n+1)}$ et $\mathbf{V}^{(n+1)}$ à l'aide de l'algorithme d'Uzawa incomplet.
   1.2 Calculer
$$\Lambda^{(n+1)} = \Lambda^{(n)} + \beta\mathbf{H}\mathbf{V}^{(n+1)}. \tag{3.31}$$

Dans la pratique, on prend $\beta = s = 10$. Avec un tel choix, le système linéaire (3.20) est bien conditionné et l'algorithme global converge en quelques itérations.

On voit que l'itération définie en 1.3 dans l'algorithme précédent est en fait une méthode de descente pour la détermination du multiplicateur de Lagrange Λ. On aurait pu, comme précédemment dans le cas de la pression, développer un algorithme de type Uzawa gradient conjugué préconditionné (Glowinski 1994a) et chercher une matrice de préconditionnement efficace comme solution de rechange à l'emploi du terme de pénalisation s. Toutefois, nous avons jugé qu'une telle démarche n'était pas essentielle pour la réalisation des présents travaux.

3.3.4 Traitement des problèmes non linéaires

Les algorithmes itératifs précédents ont été introduits dans le contexte des équations de Stokes et n'incluaient donc pas le terme (non linéaire) d'inertie présent dans les équations de Navier-Stokes (2.31)-(2.32). Il est toutefois possible de convertir un problème de Navier-Stokes en une série de problèmes de Stokes de plusieurs façons.

Une stratégie efficace lorsque le nombre de Reynolds n'est pas trop grand ($\mathrm{Re} < 10$) consiste à ajouter le terme d'inertie dans le membre de droite et à itérer jusqu'à la convergence (méthode de Picard). Plus précisément, cela revient à remplacer l'équation (2.44) par:

$$[\mathbf{A}_v + r\mathbf{B}^T\mathbf{B}]\mathbf{V}^{(n+1)} = \mathbf{F}_v - \mathbf{B}^T\mathbf{P}^{(n)} - \mathbf{C}_v(\mathbf{V}^{(n)})\mathbf{V}^{(n)}. \qquad (3.32)$$

Si cette approche ne fonctionne pas, il est possible de linéariser les équations de Navier-Stokes au moyen de l'algorithme de Newton-Raphson. Toutefois, le système linéaire obtenu n'est plus symétrique et, par conséquent, les algorithmes d'Uzawa incomplet et d'Uzawa gradient conjugué préconditionné ne sont plus adéquats. On peut alors faire appel à d'autres types de méthodes itératives comme les méthodes GMRES, CGS, Bi-CGSTAB et QMR (Barrett et coll. 1994).

Récemment, nous avons modifié la méthode d'Uzawa gradient conjugué préconditionné en remplaçant l'algorithme de gradient conjugué utilisé pour la résolution des problèmes primal et dual par un algorithme Bi-CGSTAB. Cette méthode, appelée méthode d'Uzawa Bi-CGSTAB préconditionné, a déjà permis de résoudre un problème d'écoulement non rampant ($\mathrm{Re} = 100$) dans un réservoir cylindrique muni d'une ancre (Bertrand et Tanguy, en préparation).

CHAPITRE 4

VALIDATION DE LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS

Dans ce chapitre, nous nous proposons de tester la précision de la méthode des éléments finis virtuels. Deux problèmes seront considérés: un problème bidimensionnel de solution analytique connue et un problème tridimensionnel de mélange pour lequel des données expérimentales sont disponibles.

4.1 Validation 2D : problème de Couette-Hatschek

4.1.1 Présentation du problème

Nous nous intéressons, en premier lieu, à la simulation de l'écoulement laminaire entre deux cylindres concentriques de rayons R et κR (Figure 4.1). Dans ce problème, le cylindre intérieur est stationnaire et le cylindre extérieur tourne à une vitesse angulaire Ω_0 = 10 tours/minute. De plus, on choisit R= 1 m et κ= 0,5.

La solution analytique d'un tel problème peut être obtenue en intégrant les équations de Stokes en coordonnées cylindriques (par exemple, Bird et coll. 1960):

$$v_\theta = \Omega_0 R \frac{\left(\frac{\kappa R}{r} - \frac{r}{\kappa R}\right)}{\left(\kappa - \frac{1}{\kappa}\right)}. \qquad (4.1)$$

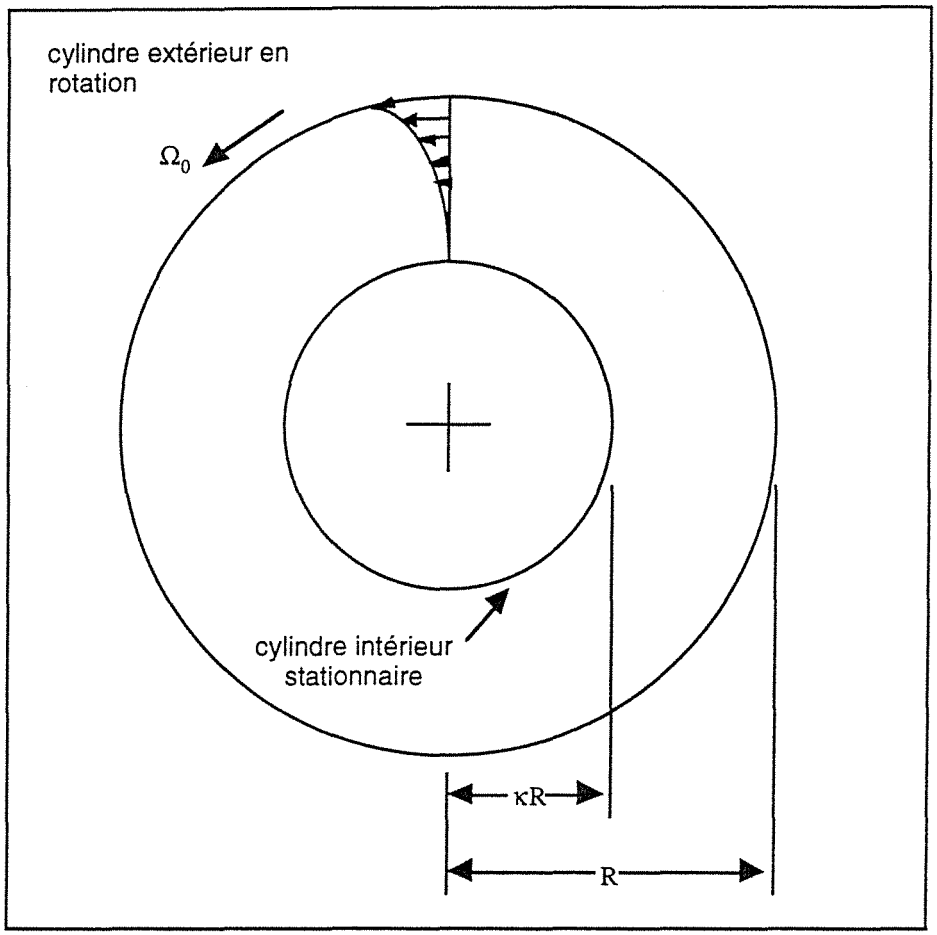

Figure 4.1 Problème de Couette-Hatschek.

Ce problème a été résolu à l'aide de la méthode des éléments finis virtuels. La vitesse et la pression ont été discrétisées à l'aide de l'élément quadratique de Crouzeix-Raviart (Figure 4.2) (Crouzeix et Raviart 1973) communément appelé $P_2^+ - P_1$:

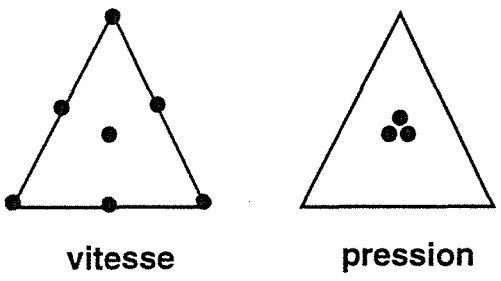

Figure 4.2 Élément fini $P_2^+ - P_1$.

Chaque composante du multiplicateur de Lagrange λ a été approchée à l'aide d'une constante par point de contrôle. Au plus deux points de contrôle, c'est-à-dire deux contraintes cinématiques de la forme (3.18), ont été admis par triangle. Une telle limitation est nécessaire afin de ne pas surcontraindre le problème. En effet, un trop grand nombre de contraintes cinématiques dans le même élément fini peut entraîner un phénomène de "locking", le nombre de degrés de liberté disponibles étant insuffisant pour satisfaire ces contraintes.

Des simulations ont été réalisées sur 4 maillages de tailles de maille différentes. Nous présentons dans le Tableau 4.1 les caractéristiques de ces maillages.

Taille de maille (h)	Nombre d'éléments	Nombre de noeuds	Nombre de points de contrôle	Nombre d'équations en vitesse
0,1	697	1 458	71	2 664
0,05	2 834	5 795	137	11 086
0,033	6 230	12 649	201	24 546
0,025	11 221	22 694	264	44 384

Tableau 4.1 Caractéristiques des maillages utilisés pour la simulation du problème de Couette-Hatschek.

À titre d'exemple, la Figure 4.3 montre le maillage et les points de contrôle pour h=0,025.

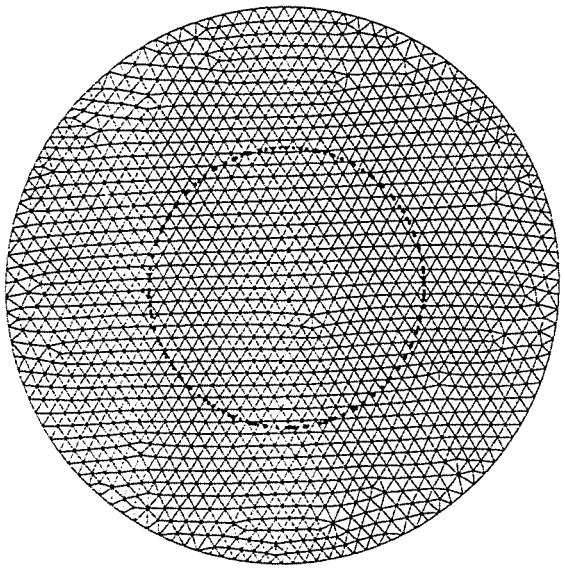

Figure 4.3 Maillage et points de contrôle (h=0,025) pour le problème de Couette-Hatschek.

4.1.2 Résultats

Le champ de vitesse ainsi que les lignes de courant obtenus avec ce maillage (h=0,025) sont présentés aux Figures 4.4 et 4.5. Ces résultats sont tout à fait conformes à la solution analytique (4.1); la vitesse à l'intérieur du cylindre intérieur est négligeable et les lignes de courants sont des cercles concentriques.

Finalement, un graphique de la convergence de la méthode des éléments finis virtuels est donné à la Figure 4.6. On peut y observer que, selon toute vraisemblance, la méthode est stable et linéaire pour la norme dans $L^{\infty}(\Omega)$. Précisons que la méthode serait quadratique si, au lieu du choix (3.18), on choisissait les fonctions-tests ξ et le multiplicateur de Lagrange λ dans l'espace d'approximation P_0 (constants dans chaque triangle de $\mathfrak{T}_h^*$). Comme nous l'avons dit auparavant, une telle méthode est par contre plus difficile à

implanter. Mentionnons cependant qu'elle a déjà été employée dans quelques problèmes simples en 2D et 3D (Glowinski 1994a et Glowinski 1994b).

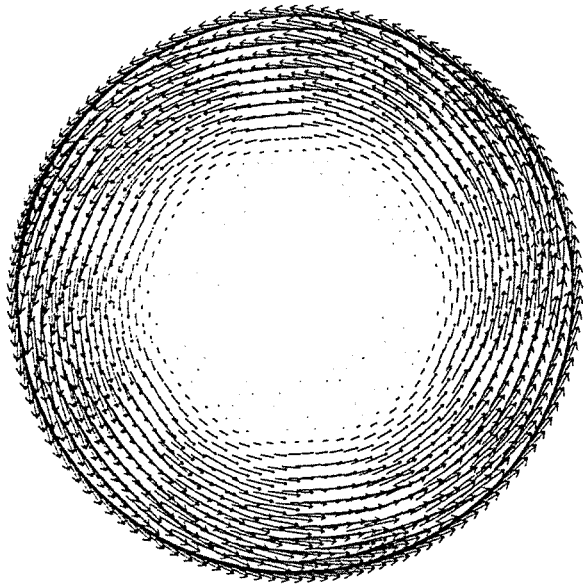

Figure 4.4 Champ de vitesse pour le problème de Couette-Hatschek (h=0,025).

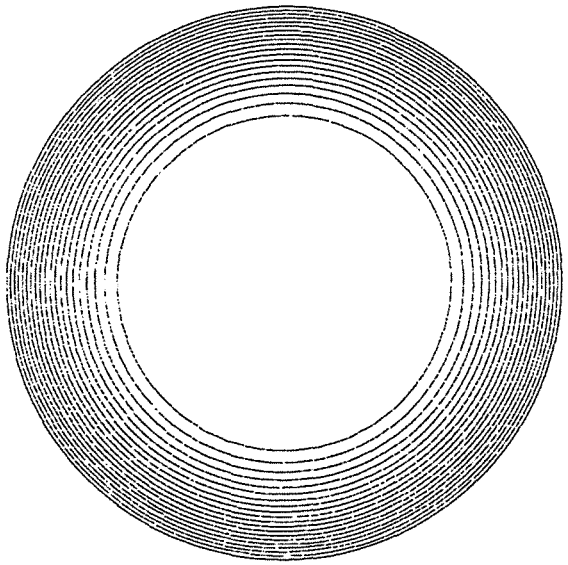

Figure 4.5 Lignes de courant pour le problème de Couette-Hatschek (h=0,025).

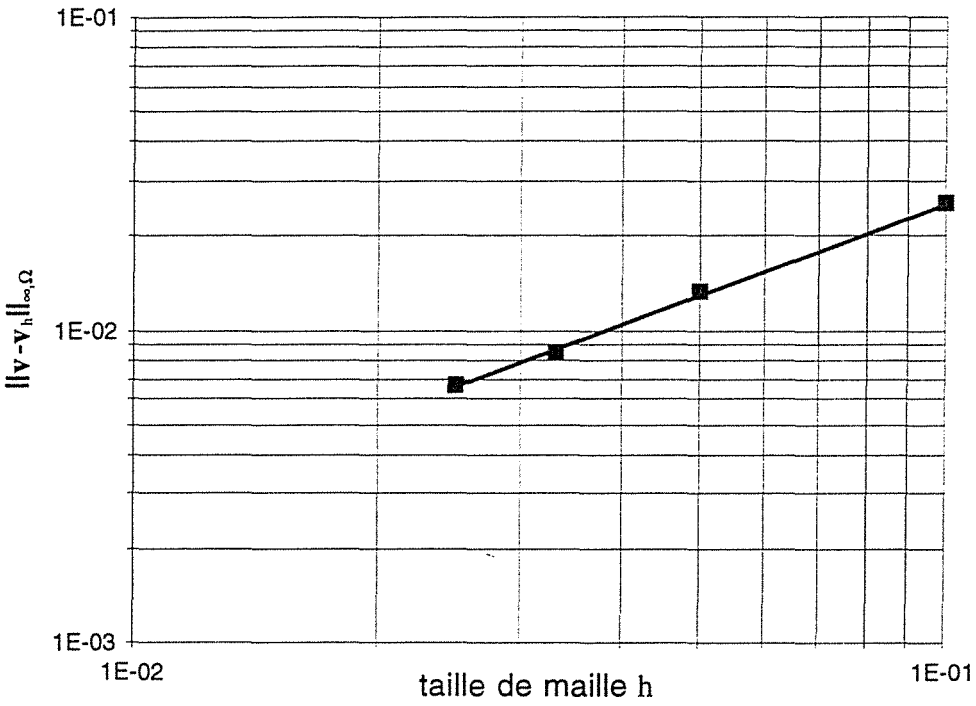

Figure 4.6 Convergence de la méthode des éléments finis virtuels.

4.2 Validation 3D : agitation à l'aide d'un ruban hélicoïdal

4.2.1 Présentation du problème

Nous considérons maintenant la simulation de l'écoulement d'un fluide visqueux incompressible dans un réservoir cylindrique muni d'un ruban hélicoïdal tournant à 20 tours/minute (Figure 4.7).

Le fluide est une solution aqueuse inélastique de Xanthane (0.5% en poids). Son comportement peut être décrit adéquatement à l'aide du modèle de la loi de puissance (Tanguy et coll. 1992):

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = 3{,}82|\dot{\gamma}|^{-0.84}. \tag{4.2}$$

La masse volumique de ce fluide est de 1000 kg/m^3 à 23 °C.

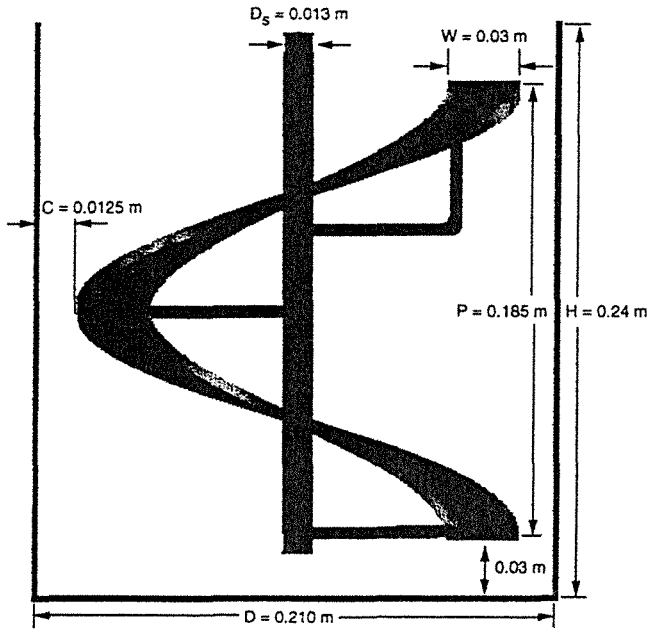

Figure 4.7 Caractéristiques géométriques du réservoir cylindrique muni d'un ruban hélicoïdal.

Pour cette simulation, nous avons considéré le repère de l'agitateur. Comme ce repère est lagrangien, le problème consiste à résoudre les équations de Stokes stationnaires (2.14)-(2.15) qui comprennent les forces centrifuges et de Coriolis. Les conditions aux limites sont les suivantes:

- une condition d'adhérence sur l'agitateur, $\mathbf{v}^*(\mathbf{x}_i) = 0,\ \forall i = 1,2,...,N$;
- la vitesse de rotation (20 tours/minute) en fond de cuve et sur les parois;
- une condition de surface libre (la surface est supposée plane).

Deux maillages ont été utilisés: un de type standard pour la méthode des éléments finis classique (Figure 1.5), puis un autre pour la méthode des éléments finis virtuels qui est en fait le maillage du réservoir (Figure 4.8). Dans ce dernier cas, deux discrétisations de la surface de l'agitateur ont été considérées. Elles correspondent à deux ensembles de points de contrôle distincts. De plus, pour les raison évoquées à la section précédente, au plus 2 points de contrôle ont été admis par tétraèdre. Les caractéristiques de ces maillages sont résumées dans le Tableau 4.2.

Maillage	Nombre d'éléments	Nombre de noeuds	Nombre d'équations en vitesse	Nombre de points de contrôle
standard	47 195	105 383	299 146	-
fictif 1	37 481	84 000	237 487	1 186
fictif 2	37 481	84 000	237 487	1 817

Tableau 4.2 Caractéristiques des maillages utilisés pour la simulation de l'écoulement dans un réservoir cylindrique muni d'un ruban hélicoïdal.

4.2.2 Résultats

Nous allons maintenant comparer les résultats obtenus à l'aide de la méthode des éléments finis virtuels à ceux obtenus expérimentalement et au moyen d'une méthode d'éléments finis classiques de type Galerkin. Des valeurs du temps de circulation et du couple seront présentées.

Les temps de circulation peuvent être mesurés expérimentalement à l'aide d'une technique thermique décrite dans Brito-De La Fuente (1992). Numériquement, ils sont calculés (Tanguy et coll. 1992) en intégrant dans le temps la vitesse d'une particule de façon à obtenir sa position dans le réservoir. Dans le cas présent, les particules sont injectées au haut du réservoir.

Le couple peut être obtenu en évaluant l'intégrale:

$$\int_{\Gamma}(\mathbf{n}\cdot\tau)\times\mathbf{r}\,d\Gamma, \tag{4.3}$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal par rapport à la frontière du réservoir Γet $\mathbf{r}$ est le rayon-vecteur entre Γ et l'axe central du réservoir.

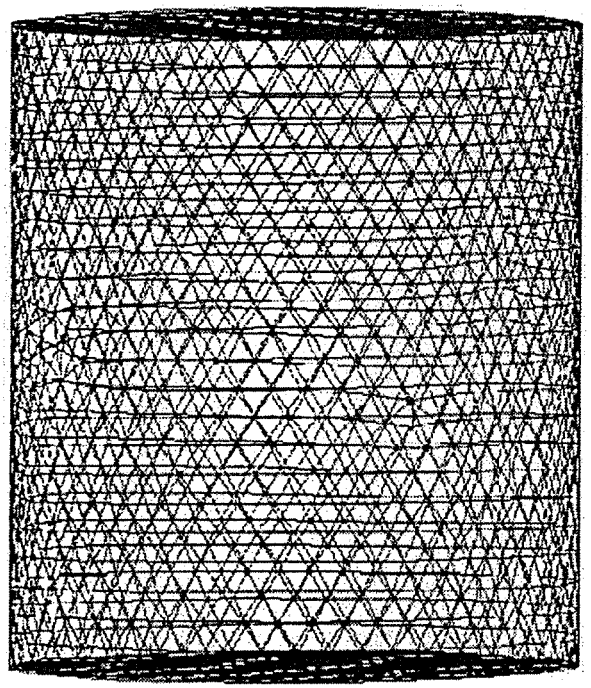

Figure 4.8 Maillage du réservoir cylindrique.

Les résultats obtenus sont présentés dans le Tableau 4.3.

Provenance des résultats	Temps de circulation (s)	Couple (N·m)
standard	77	0,062
fictif 1	152	0,063
fictif 2	86	0,067
expérimental	87	0,042

Tableau 4.3 Valeurs du temps de circulation et du couple.

Les trois maillages donnent des valeurs de couple qui sont du même ordre que celle mesurée expérimentalement.

La situation est quelque peu différente dans le cas du temps de circulation. On remarque que le nombre de points de contrôle a un effet important sur la précision du résultat. En effet, si les temps de circulation obtenus avec le maillage standard et le maillage fictif 2 sont très près du temps de circulation expérimental, on voit qu'il n'en est rien avec le maillage fictif 1 qui comporte moins de points de contrôle. Ce phénomène peut être expliqué à l'aide de la Figure 4.9 qui contient, pour les trois maillages, ce qu'il est convenu d'appeler le *tube de pompage axial*, défini comme le lieu géométrique à l'intérieur duquel la composante axiale de la vitesse est négative. On remarque dans cette figure que le volume du tube obtenu avec le maillage fictif 1 est sous-estimé par rapport à ceux obtenus avec les deux autres. Il est très probable que le faible nombre de points de contrôle utilisé dans ce maillage fait en sorte que l'agitateur est légèrement poreux. Par conséquent, il n'est pas surprenant qu'une particule prenne plus de temps pour revenir à son point de départ, d'où un temps de circulation plus grand.

Finalement, nous présentons à la Figure 4.10, pour chacun des trois maillages, des plages de couleur correspondant à la norme du champ de vitesse sur un plan de coupe médian. Ces résultats mettent clairement en évidence la qualité des solutions calculées à l'aide de la méthode des éléments finis virtuels.

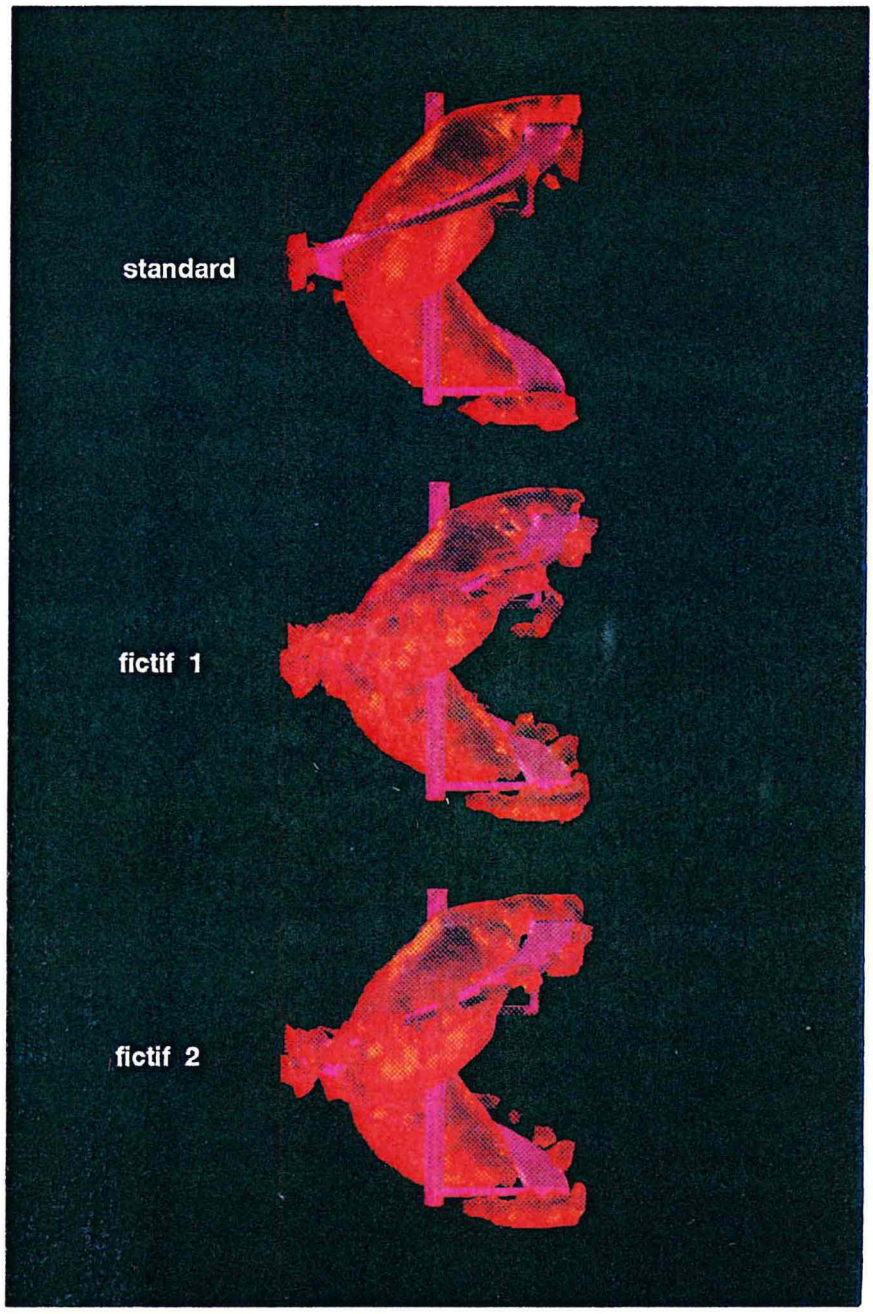

Figure 4.9 Tubes de pompage axial.

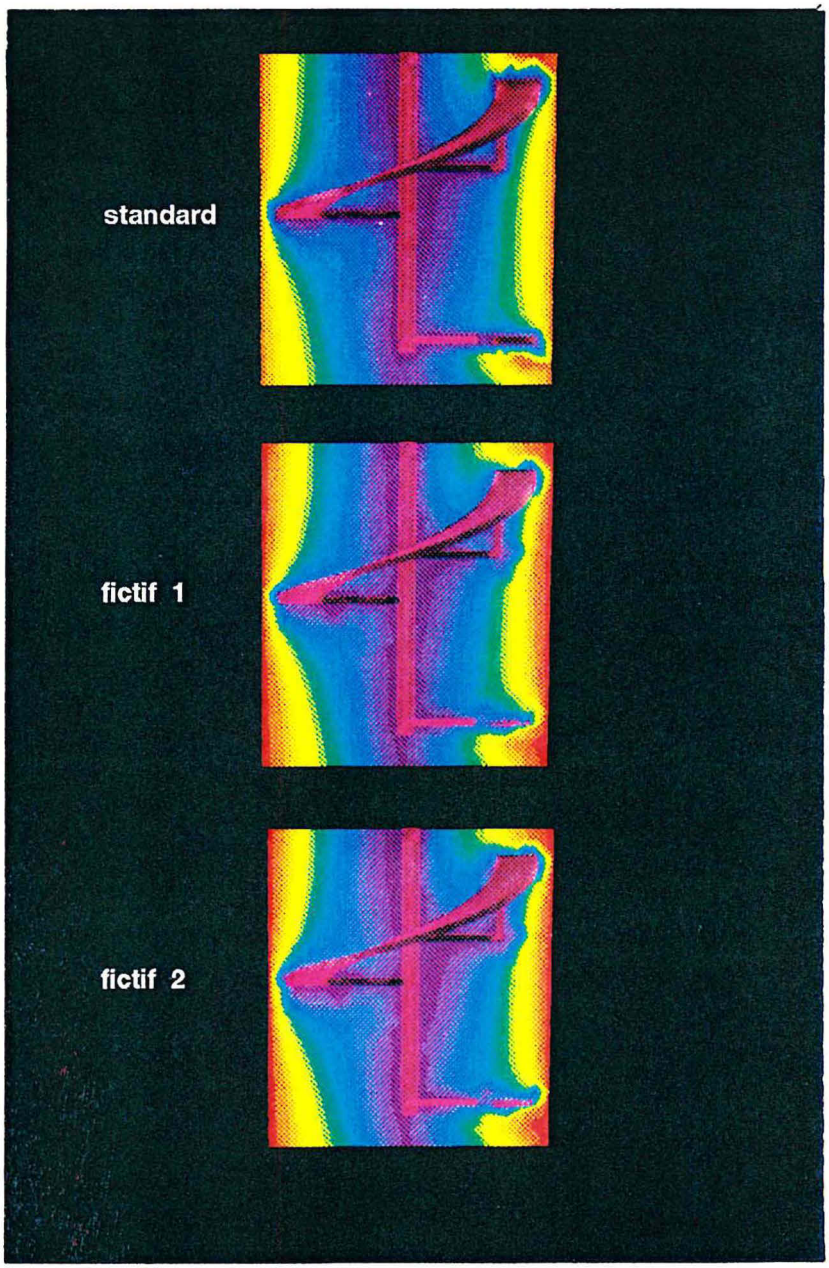

Figure 4.10 Norme du champ de vitesse sur un plan de coupe médian.

CHAPITRE 5
RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Le but de ce chapitre est de simuler, à l'aide de la méthode des éléments finis virtuels, l'écoulement non isotherme dans un malaxeur à mouvement planétaire. Plusieurs résultats de vitesse et de température sont présentés. L'efficacité de ce système d'agitation est illustrée au moyen de patrons de dispersion obtenus en calculant la trajectoire d'un agglomérat de particules. Finalement, nous discutons de l'influence de la rhéologie sur les mécanismes d'agitation.

5.1 Présentation du problème

5.1.1 Type de malaxeur

Pour cette simulation, le système considéré est un malaxeur à mouvement planétaire fabriqué par la société Baker-Perkins.

Il s'agit d'un malaxeur de laboratoire de 1 gallon US muni de deux pales torsadées dont une est pleine et l'autre évidée (Figure 5.1). Les dimensions caractéristiques de ce système sont les suivantes:

- diamètre du malaxeur : 0,216 m;
- hauteur du malaxeur : 0,127 m;

- distance entre les axes de révolution des pales : 0,075 m;
- jeu à la paroi : 0,003 m.

Le volume utile de ce type de malaxeur peut être beaucoup plus grand. Par exemple, la Société Nationale des Poudres et Explosifs (S.N.P.E.) utilise des malaxeurs à mouvement planétaire Baker-Perkins d'une capacité pouvant aller jusqu'à 1800 gallons US pour la fabrication des propergols solides.

5.1.2 Paramètres physiques

Le fluide considéré pour la simulation est supposé homogène. De masse volumique $\rho = 1700$ kg/m^3, il est faiblement rhéofluidifiant et son comportement peut être décrit adéquatement au moyen du modèle de la loi de puissance:

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = 500|\dot{\gamma}|^{-0,2}, \tag{5.1}$$

ce qui correspond à un indice de rhéofluidifiance $n = 0,80$.

Du point de vue thermique, la conductibilité du fluide est égale à 0,69 W/m·K et sa capacité calorifique à 1200 J/kg·K.

Nous supposons de plus que tous les paramètres physiques précédents sont indépendants de la température.

5.1.3 Conditions opératoires

Dans ce système d'agitation, la vitesse du carrousel V_c détermine la vitesse de la pale pleine V_p et la vitesse de la pale évidée V_e selon les rapports suivants:

$$\frac{V_e}{V_p} = \frac{V_p}{V_c} = 2. \tag{5.2}$$

En conditions normales d'utilisation, la vitesse du carrousel varie typiquement de 15 à 30 tours/minute. Dans le cadre de cette étude, les vitesses suivantes ont été considérées:

- V_c = 15 tours/minute;
- V_p = 30 tours/minute;
- V_e = 60 tours/minute.

Finalement, la température initiale du milieu est égale à 20 °C et une température de régulation de 60 °C est maintenue à la paroi du malaxeur.

5.1.4 Stratégie de résolution

La simulation a été effectuée à l'aide de la méthode des éléments finis virtuels en considérant les pales comme des domaines fictifs dont la position dépend du temps.

Le maillage du réservoir a été créé à l'aide du logiciel I-DEAS de la société SDRC (Figure 5.1). La surface des pales est représentée par un ensemble de points de contrôle. Pour les raisons évoquées à la section 4.1, au plus 2

points de contrôle sont admis par tétraèdre. Les caractéristiques numériques de ce problème sont résumées dans le Tableau 5.1.

Nombre d'éléments $P_1^+ - P_0$ ou P_1	17 552
Nombre de noeuds pour le problème thermique	3 492
Nombre de noeuds pour le problème fluide	39 072
Nombre d'équations en température	2 638
Nombre d'équations en vitesse	109 072
Nombre de points de contrôle pour la pale pleine	1 449
Nombre de points de contrôle pour la pale évidée	1 125

Tableau 5.1 Caractéristiques numériques du maillage utilisé pour la simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire Baker-Perkins.

En ce qui concerne la température, les conditions aux limites suivantes sont imposées:

- une température égale à 60 °C sur la paroi et au fond du réservoir;
- une condition adiabatique au haut du réservoir.

Précisons qu'aucune condition aux limites n'est imposée explicitement sur la paroi des pales. Ce choix implique une condition adiabatique puisque, dans un tel cas, la formulation variationnelle nous assure que le flux thermique est nul à travers les parois. Mentionnons également que, pour les besoins de la simulation, la conductibilité thermique des pales est supposée égale à celle du fluide.

Les conditions aux limites pour la vitesse sont les suivantes:

- une condition d'adhérence sur la paroi et au fond du réservoir;
- un condition de surface libre (la surface est supposée plane);

- sur chacun des points de contrôle $\mathbf{x}_i$, $\forall i = 1,2,...,N$, la vitesse est égale à celle des pales.

Dans un premier temps, les équations de Navier-Stokes non stationnaires ont été résolues à l'aide d'un pas de temps Δt = 0,2 s. Avec ce choix, l'écoulement est simulé pour 20 positions différentes des pales par tour de carrousel. Une rotation de 18° du centre de masse du carrousel par rapport au centre du malaxeur est effectuée à chacune des itérations en temps. À chaque fois, les points de contrôle doivent être déplacés pour tenir compte du mouvement des pales. Un seul maillage volumique est nécessaire pour l'ensemble de la simulation, soit celui du malaxeur sans les pales.

Comme les propriétés physiques sont supposées indépendantes de la température, le champ de vitesse peut être calculé une fois pour toutes, pour chaque position de pales. La simulation de l'écoulement sur plusieurs tours a démontré que la solution était périodique. En fait, on a observé qu'un seul tour était nécessaire pour établir cette solution et que la variation au deuxième tour était négligeable. Ce phénomène, imputable à la grande viscosité du milieu, signifie que la mise en mouvement est quasi instantanée.

On a par la suite résolu le problème thermique pour 50 tours de carrousel en prenant un pas de temps dix fois plus petit, soit Δt = 0,02 s. Comme la vitesse n'était connue qu'à chaque intervalle de 0,2 s, une interpolation noeud par noeud à l'aide d'un algorithme FFT (par exemple, Burden et Faires 1989) a permis d'évaluer le champ de vitesse de manière continue dans le temps. En d'autres termes, la vitesse au noeud i est approchée par une série de Fourier de la forme

$$\mathbf{v}_h^i = \mathbf{a}_0^i + \mathbf{a}_n^i \cos nt + \sum_{k=1}^{n-1} (\mathbf{a}_k^i \cos kt + \mathbf{b}_k^i \sin kt), \tag{5.3}$$

où n représente le nombre d'harmoniques et où les coefficients $\mathbf{a}_k^i$, $k=1,2,...,n$, et $\mathbf{b}_k(\mathbf{x})$, $k=1,2,...,n-1$, sont calculés à partir de l'ensemble des valeurs prises par la vitesse en ce noeud au cours d'un tour complet de carrousel. Dans ce travail, des interpolations à 10 harmoniques ont été effectuées.

Finalement, nous présentons dans le Tableau 5.2 le temps de calcul nécessaire pour la résolution des problèmes thermique et fluide sur une station de travail IBM RISC6000/590.

Calcul isotherme de l'écoulement pour $n=1,00$ (1 tour de carrousel)	35 heures
Calcul isotherme de l'écoulement pour $n=0.80$ (1 tour de carrousel)	50 heures
Calcul de la température (50 tours de carrousel)	20 heures

Tableau 5.2 Temps de calcul nécessaire pour la simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire Baker-Perkins.

Pour le calcul de la température, le temps indiqué correspond à 50 tours de carrousel ou 10 000 pas de temps. On en conclut qu'un pas de temps nécessite environ 7 secondes.

En ce qui concerne le calcul de l'écoulement, une stratégie de chargement a été adoptée. Elle consiste à effectuer une première simulation avec $n=1,00$ puis à utiliser le résultat obtenu comme estimé initial d'une deuxième simulation pour laquelle $n=0,80$. Chaque simulation a nécessité une cinquantaine d'itérations d'Uzawa (équation 3.31) à chaque pas de temps.

5.2 Résultats

5.2.1 Étude de la température

Pour cette simulation, le nombre de Péclet est de l'ordre de 10^5. L'utilisation d'une technique d'upwinding s'est avéré nécessaire pour stabiliser la solution. Cela a probablement eu pour effet d'introduire de la diffusion artificielle dans cette solution. Malgré tout, les résultats présentés peuvent servir à prédire, d'un point de vue qualitatif, les phénomènes thermiques caractérisant le procédé de malaxage. D'autres simulations à l'aide de maillages beaucoup plus fins seraient nécessaires pour juger de la précision de ces résultats.

5.2.1.1 Homogénéisation thermique

Nous présentons aux Figures 5.2 et 5.3 l'évolution de la température au cours du malaxage. Dans ces figures, le champ de température obtenu après 2, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35 et 40 tours de carrousel est représenté au moyen d'isovaleurs tracées sur un plan de coupe à mi-hauteur (vues plongeante et en perspective).

On peut noter que la mise en température est relativement rapide, soit de l'ordre de 25 tours ou 100 secondes. Nous pensons que ce temps est sous-estimé à cause de l'utilisation d'une condition aux limites de Dirichlet (température imposée) à la paroi. Vraisemblablement, une couche solide isolante se forme à la paroi lors du malaxage. Son influence serait sans doute mieux décrite au moyen d'une condition aux limites de Cauchy qui feraient intervenir un coefficient de transfert de chaleur.

On voit également que le fluide est thermiquement homogène, sauf dans la région de l'entrefer à la paroi. En effet, la température du milieu est supérieure d'une dizaine de degrés à la température de régulation à la paroi. Compte tenu du fait que la viscosité du fluide a été supposée constante pour cette simulation, cette augmentation de température est probablement surestimée de quelques degrés. Un calcul plus précis nécessiterait la connaissance de l'énergie d'activation du fluide.

Le phénomène d'auto-échauffement est attribuable à la dissipation visqueuse occasionnée par la friction pale/pale et pales/paroi. Un léger pic de température se forme près de la pale pleine. Notons que sa présence, qui n'a pas été vérifiée expérimentalement, est compatible avec la valeur du nombre de Brinkman (2.13) qui, pour cette simulation, est approximativement égal à 3,5.

5.2.1.2 Régime établi

La Figure 5.4 montre l'allure du champ de température lorsque le régime thermique périodique est établi, soit pour le 46ème tour. 5 résultats sont présentés dans les mêmes conditions qu'à la Figure 5.2 et correspondent au champ de température à tous les 1/5 de tour de carrousel. On peut entre autres observer que l'homogénéisation thermique demeure acceptable et que la température moyenne reste constante à environ 70 °C. On remarque également que le transfert de chaleur est principalement de nature convective.

Finalement, nous présentons à la Figure 5.5 la puissance dissipée par friction dans le malaxeur dans les mêmes conditions que précédemment. Ce champ est obtenu en évaluant le bilan d'énergie macroscopique

$$\int_{\Omega} \tau : \dot{\gamma} \, d\Omega. \tag{5.4}$$

On peut déceler dans le réservoir 3 zones distinctes de dissipation visqueuse qui évoluent dans le temps en fonction de la cinématique du malaxeur. La dissipation maximale a lieu dans la région entre les pales et également entre celles-ci et la paroi. On remarque que cette dissipation devient négligeable lorsqu'on s'éloigne des pales. Il existe enfin une zone de transition située juste en amont et en aval des pales et dans laquelle une faible dissipation se produit.

L'énergie de dissipation visqueuse après 1 tour de carrousel, définie par

$$\int_0^T \int_{\Omega} \tau : \dot{\gamma} \, d\Omega \, dt, \tag{5.5}$$

où T= 4 s, est représentée à la Figure 5.6 sur un plan de coupe à mi-hauteur. Le champ obtenu est très homogène, ce qui indique qu'il ne semble pas exister de zones sur-cisaillées dans le malaxeur.

5.2.2 Étude de l'écoulement

Nous nous intéressons maintenant à l'étude de l'écoulement dans le malaxeur à mouvement planétaire.

Nous présentons aux Figures 5.7 à 5.16 des vues plongeante et en perspective du champ de vitesse en régime périodique établi pour différentes positions du carrousel dans le malaxeur. Ces résultats mettent clairement en

évidence la grande complexité de l'écoulement dans la région des pales. On note en particulier la présence de forts gradients de vitesse dans l'entrefer et l'amortissement rapide de la vitesse lorsqu'on s'éloigne de la zone cisaillée. On peut également remarquer dans les Figures 5.13 et 5.15 la présence de petites recirculations entre la paroi et la pale pleine. Finalement, les vues en perspectives illustrent de façon assez claire que la composante axiale de la vitesse est relativement petite, ce qui semble indiquer que le niveau de pompage vertical induit par les pales est plutôt faible.

Nous illustrons aux Figures 5.17 (vue plongeante) et 5.18 (vue en perspective) le patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules sans masse injectées à mi-hauteur derrière la pale évidée et représentées à l'aide de couleurs distinctes du bleu au rouge. Les trajectoires obtenues correspondent au mouvement de chacune de ces particules au cours de 3 tours de carrousel. On remarque que la dispersion induite par les pales est très efficace et que le pompage vertical est plus important que celui auquel on s'attend à la seule vue du champ de vitesse. Un examen plus attentif de la Figure 5.18 révèle toutefois que, même après 3 tours de carrousel, les couleurs ne sont pas très bien mélangées verticalement et que seul l'ordre initial du bleu au rouge est quelque peu altéré. L'image que l'on obtient après projection des trajectoires sur l'axe vertical est celle d'un agglomérat de particules qui, sous l'action des pales, a subit un léger mouvement de torsion, d'étirement et de repli. Clairement, plusieurs tours de carrousel sont nécessaires pour un cycle complet de pompage. La situation est tout à fait différente dans le plan médian où le mélange des couleurs (Figure 5.17) indique que les pales permettent un malaxage radial et tangentiel très efficace.

Afin d'évaluer l'importance du cisaillement dans le malaxeur, nous montrons à la Figure 5.19 les isovaleurs de $\dot{\gamma}_{r\theta}$ sur un plan de coupe à mi-hauteur (vue plongeante) à tous les 1/5 de tour de carrousel. On remarque que le niveau maximal de cisaillement est de l'ordre de 10 s^{-1} et est atteint à la paroi près de la pale pleine. Ce résultat est tout à fait compatible avec les résultats sur la température présentés dans les Figures 5.2, 5.3 et 5.4. En effet, on observe que l'échauffement le plus important se produit dans les régions de cisaillement maximal, sauf dans la couche limite où la thermorégulation joue pleinement son rôle.

Finalement, le champ de pression est illustré sur la Figure 5.20 dans les mêmes conditions que précédemment. On y distingue un phénomène de surpression-dépression en amont et en aval des pales.

5.2.3 Influence de la rhéologie

En général, l'efficacité d'un système de mélange dépend de la rhéologie du milieu. Nous allons maintenant examiner les patrons d'écoulement obtenus pour différents fluides de la loi de puissance et viscoplastiques.

5.2.3.1 Loi de puissance

Nous considérons 3 fluides de la loi de puissance dont les paramètres physiques sont ceux de la section 5.2.1 sauf pour l'indice de puissance qui prend les valeurs 0,50, 1,00 et 1,40.

Les patrons de dispersion caractéristiques sont présentés aux Figures 5.21 à 5.26. Comme dans le cas précédent pour lequel n=0,80, on peut voir que le mélange est efficace dans tous les cas. On remarque, cependant, une légère perte d'efficacité en ce qui a trait au pompage vertical du fluide rhéoépaississant (n=1,40) de viscosité apparente plus grande.

5.2.3.2 Viscoplasticité

Nous considérons finalement le malaxage d'un fluide viscoplastique de masse volumique ρ= 1700 kg/m^3, de viscosité newtonienne μ= 500 Pa·s et de seuil de contrainte τ_0= 5000 Pa. Si on choisit la vitesse du carrousel (15 tours/minute) comme vitesse caractéristique, les paramètres précédents impliquent que le nombre de Bingham

$$Bi = \frac{\tau_0}{\mu N}, \tag{5.6}$$

est égal à 40 pour cette simulation.

Le patron de dispersion caractéristique est illustré sur les Figure 5.27 et 5.28. On peut y observer que le mélange est efficace. Comme dans le cas du fluide rhéoépaississant (n=1,40), on peut toutefois noter une perte d'efficacité au niveau du pompage vertical par rapport à celui obtenu pour un fluide newtonien (Figure 5.23). Cette perte est probablement attribuable à une viscosité apparente plus grande que dans le cas newtonien.

CHAPITRE 6

CONCEPT DE METZNER ET OTTO POUR LES FLUIDES VISCOPLASTIQUES

La consommation de puissance est un des paramètres les plus importants lors de la conception de systèmes d'agitation. Dans le cas des fluides obéissant à un modèle de la loi de puissance, la puissance consommée peut être prédite au moyen de corrélations faisant intervenir le concept de Metzner et Otto. L'objectif de ce chapitre est de montrer, à partir de calculs numériques, que ce concept demeure valable pour des fluides viscoplastiques, corroborant ainsi les travaux expérimentaux de Nagata (1975). Deux systèmes d'agitation sont considérés: une ancre, un système simple qui a été souvent étudié, et le malaxeur à mouvement planétaire présenté précédemment pour lequel aucune corrélation n'est disponible.

6.1 Analyse dimensionnelle

Nous nous intéressons à la consommation de puissance dans une cuve agitée contenant un fluide viscoplastique. Si le concept de Metzner et Otto est valide, on peut écrire :

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} = \frac{K_p \mu_a}{\rho N D^2}, \tag{6.1}$$

où

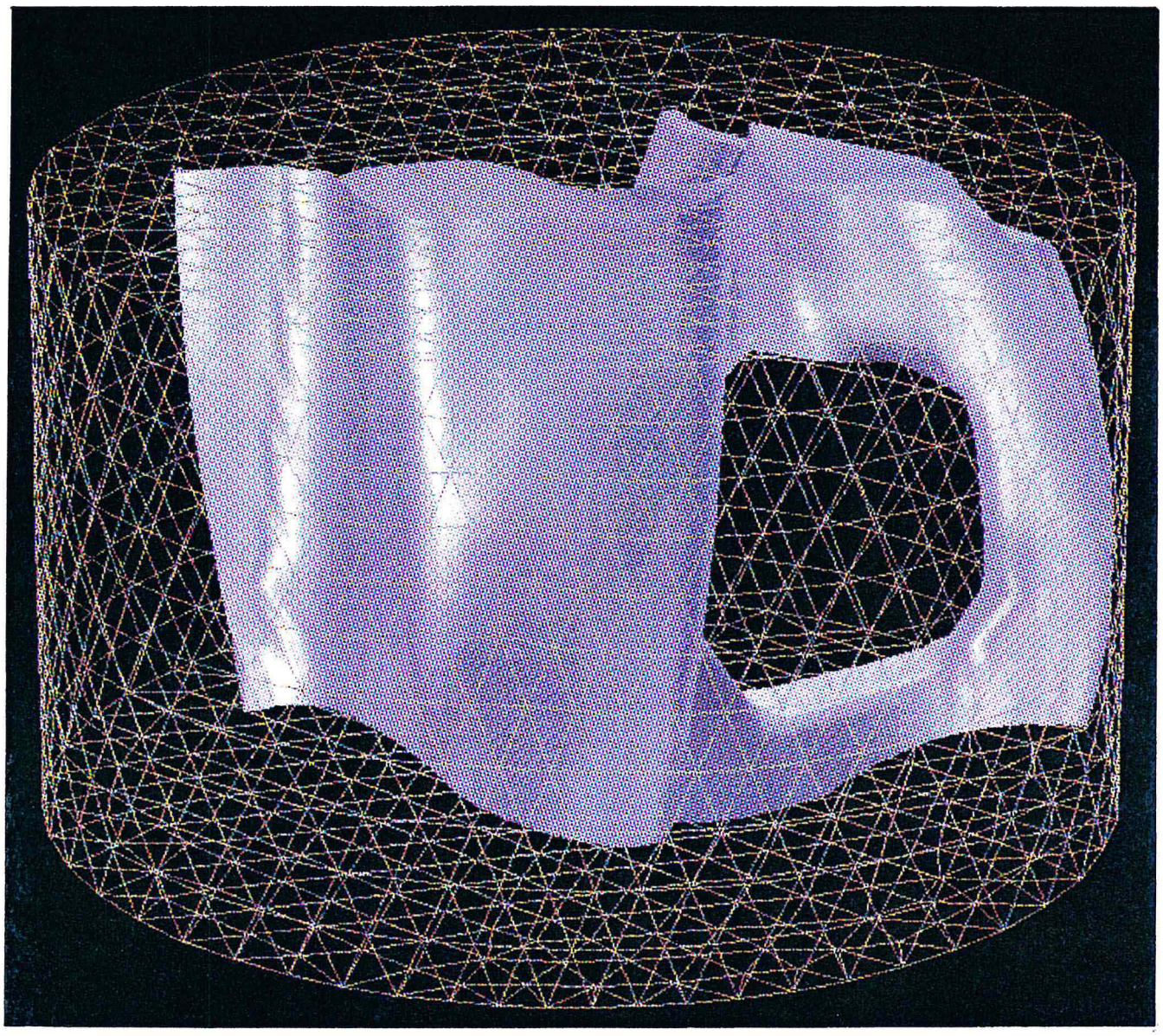

Figure 5.1 Malaxeur planétaire Baker-Perkins à deux pales torsadées.

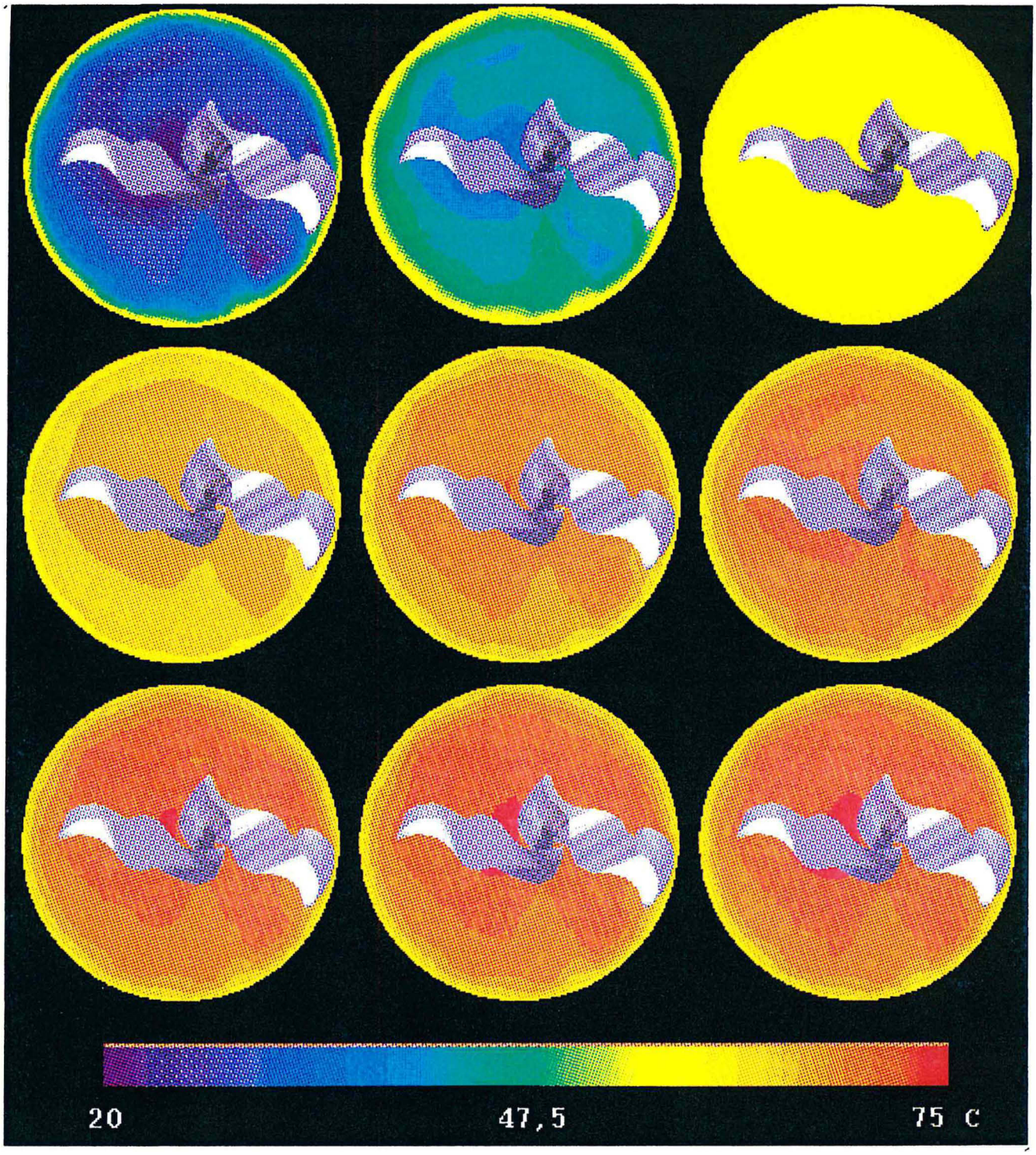

Figure 5.2 Évolution du champ de température lors du malaxage (vue plongeante).

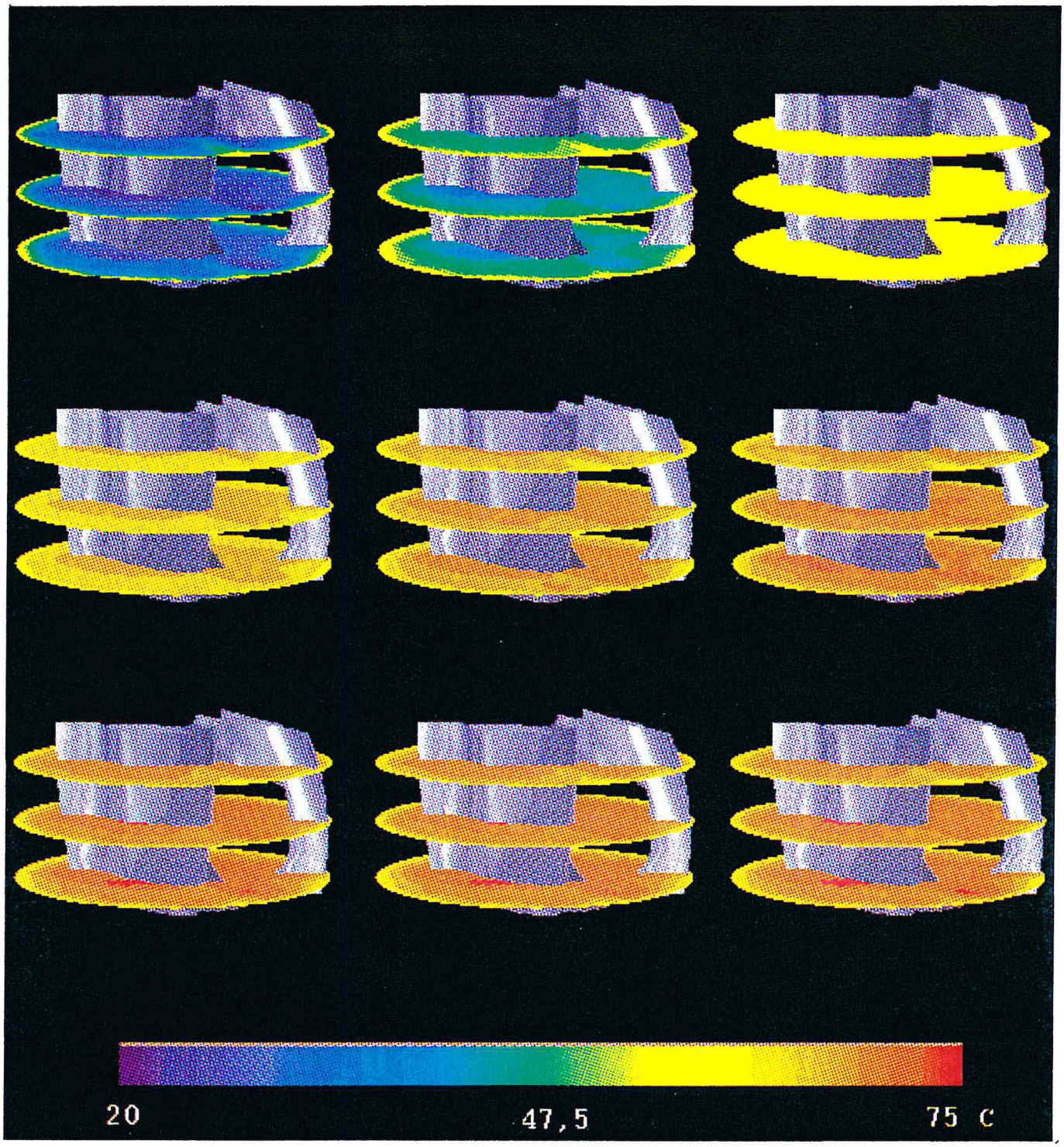

Figure 5.3 Évolution du champ de température lors du malaxage (vue en perspective).

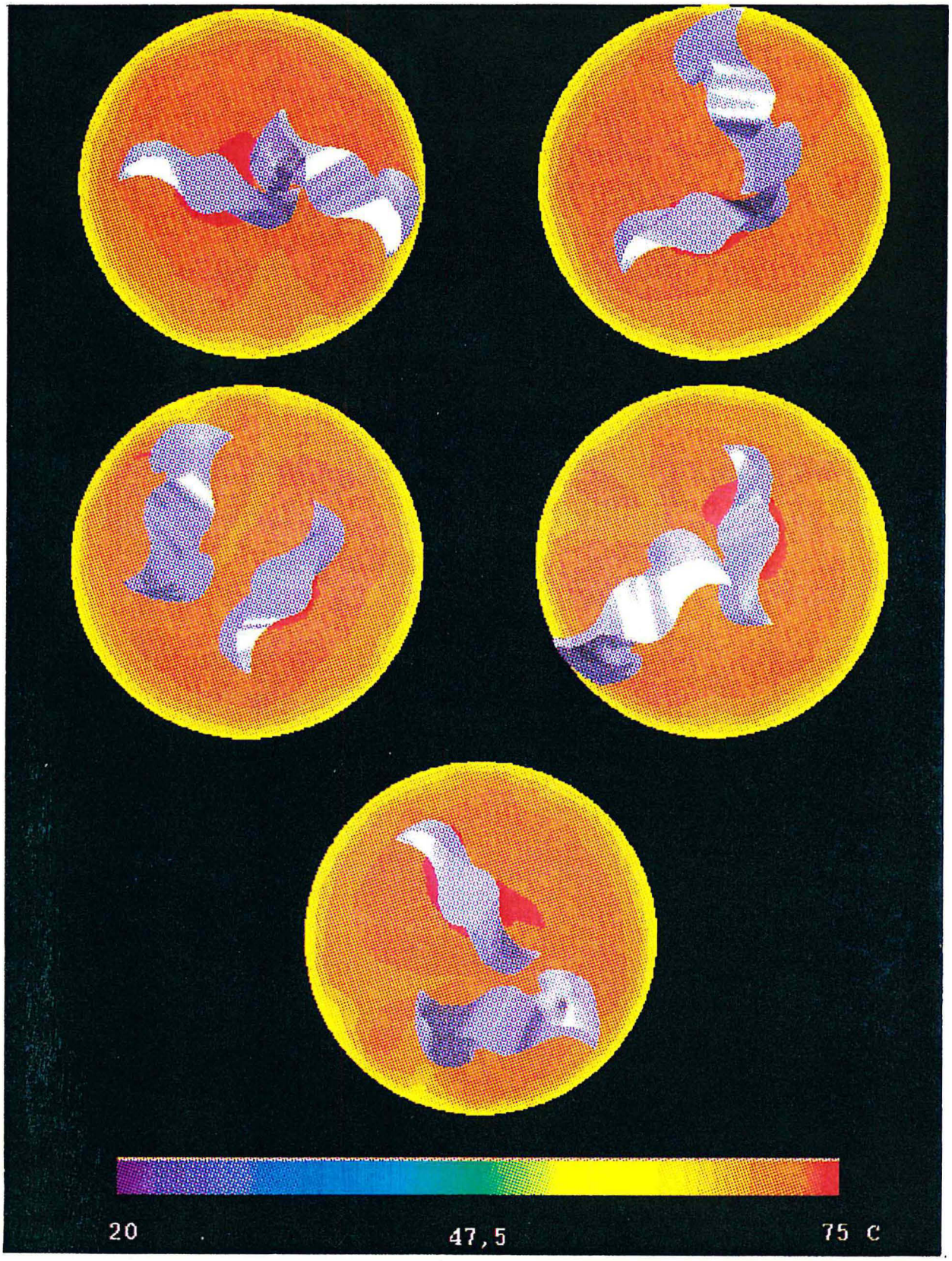

Figure 5.4 Champ de température en régime périodique établi.

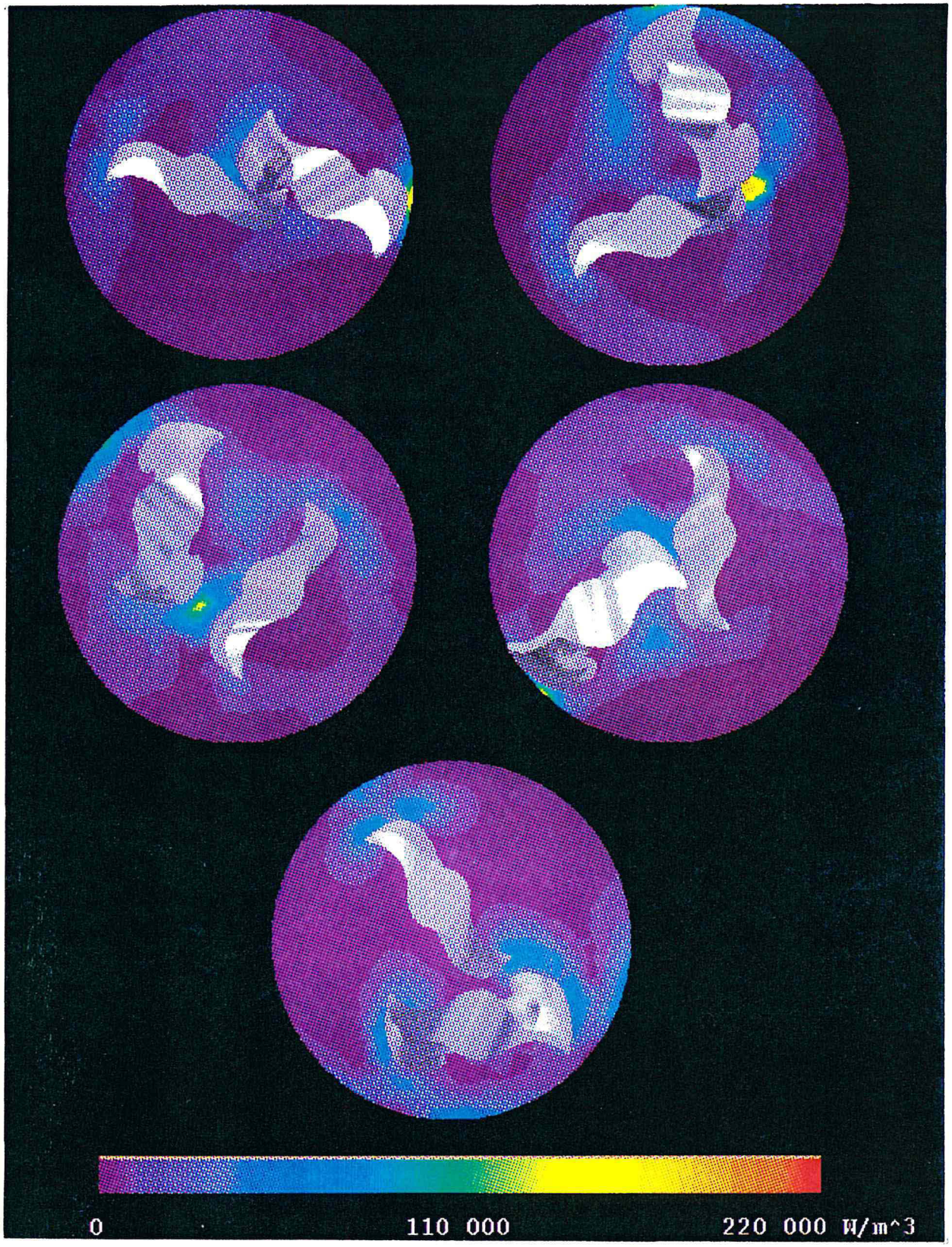

Figure 5.5 Puissance dissipée par friction en régime périodique établi.

Figure 5.6 Énergie de dissipation visqueuse après 1 tour de carrousel.

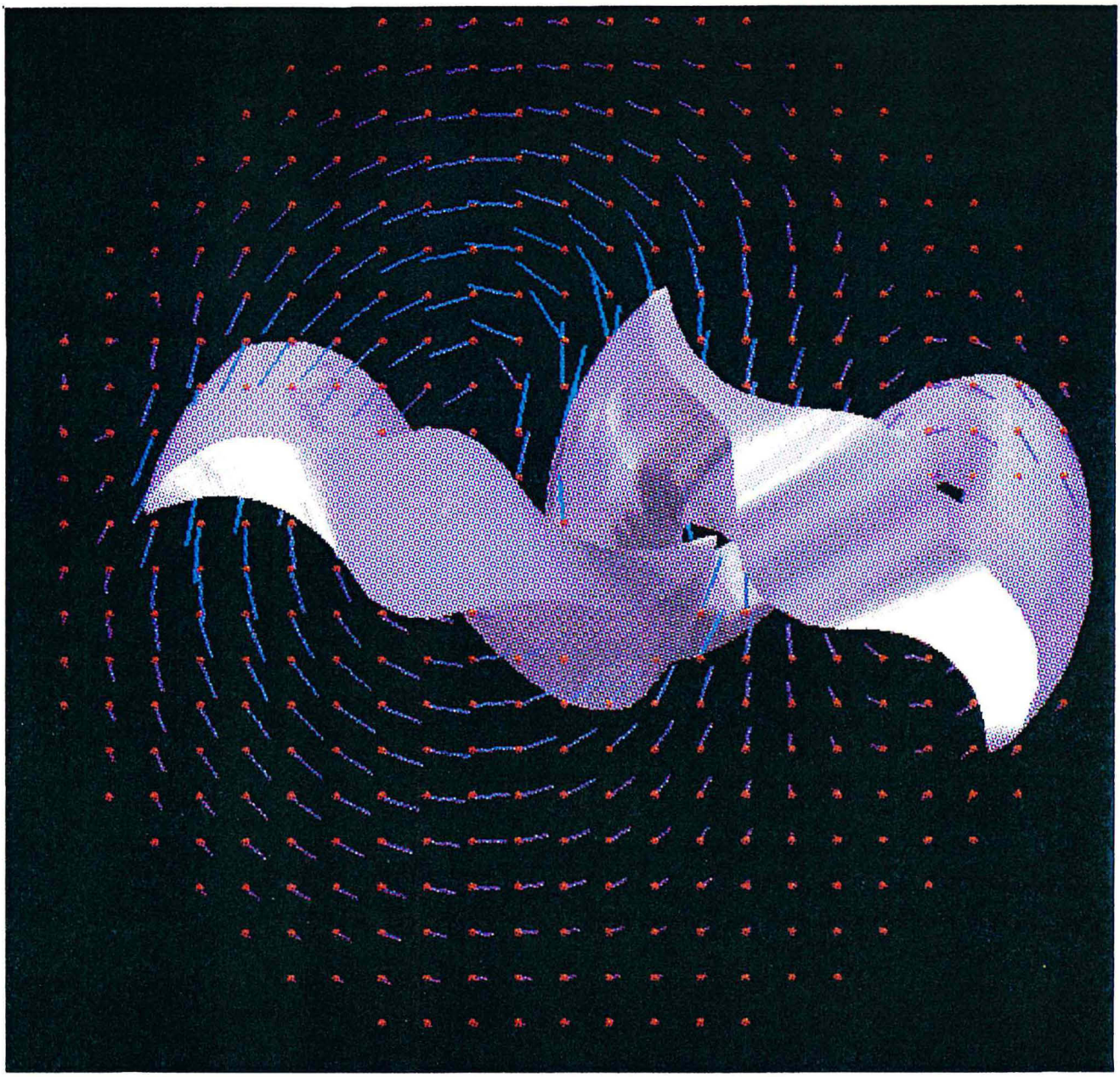

Figure 5.7 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 0°).

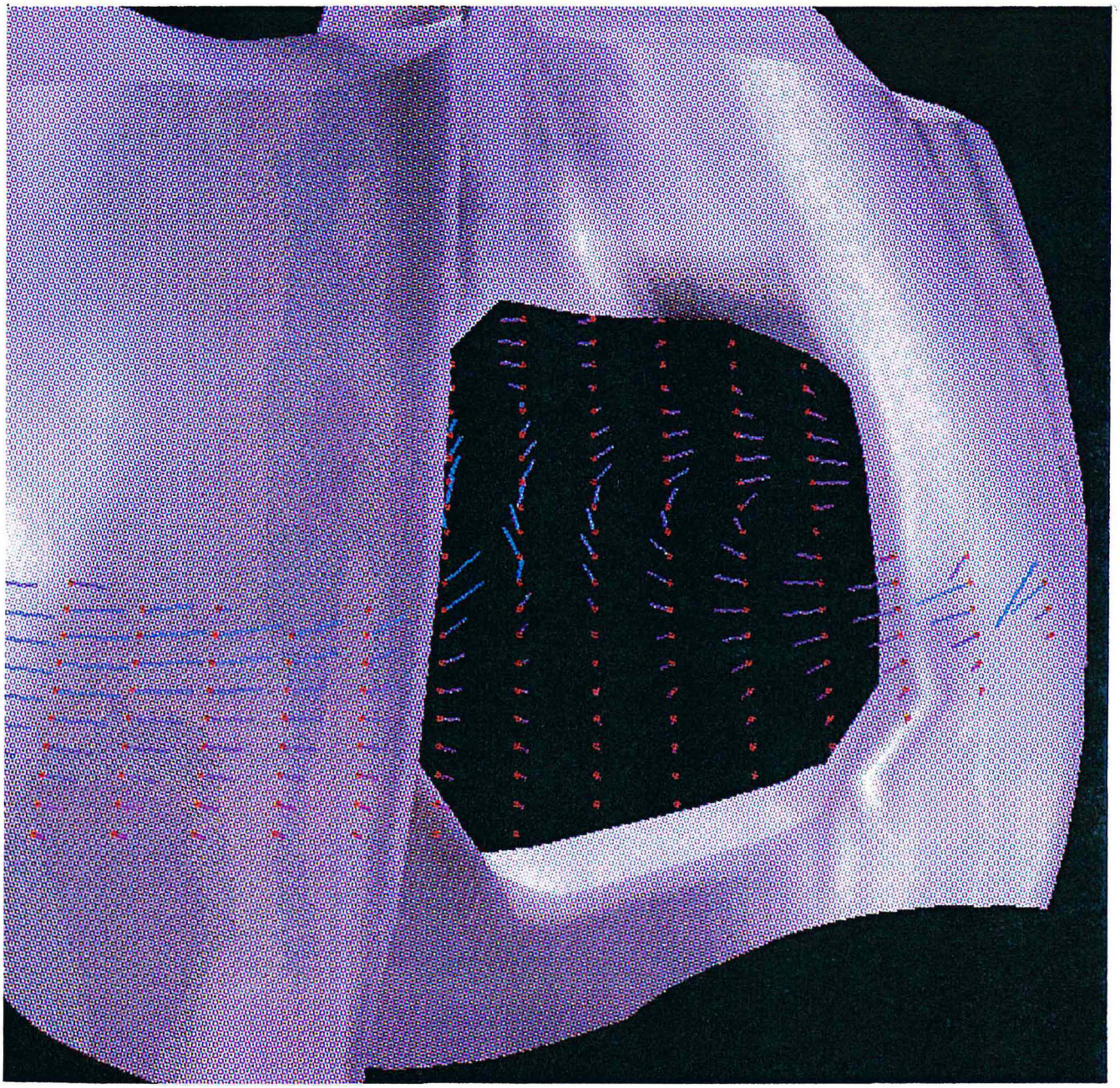

Figure 5.8 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 0°).

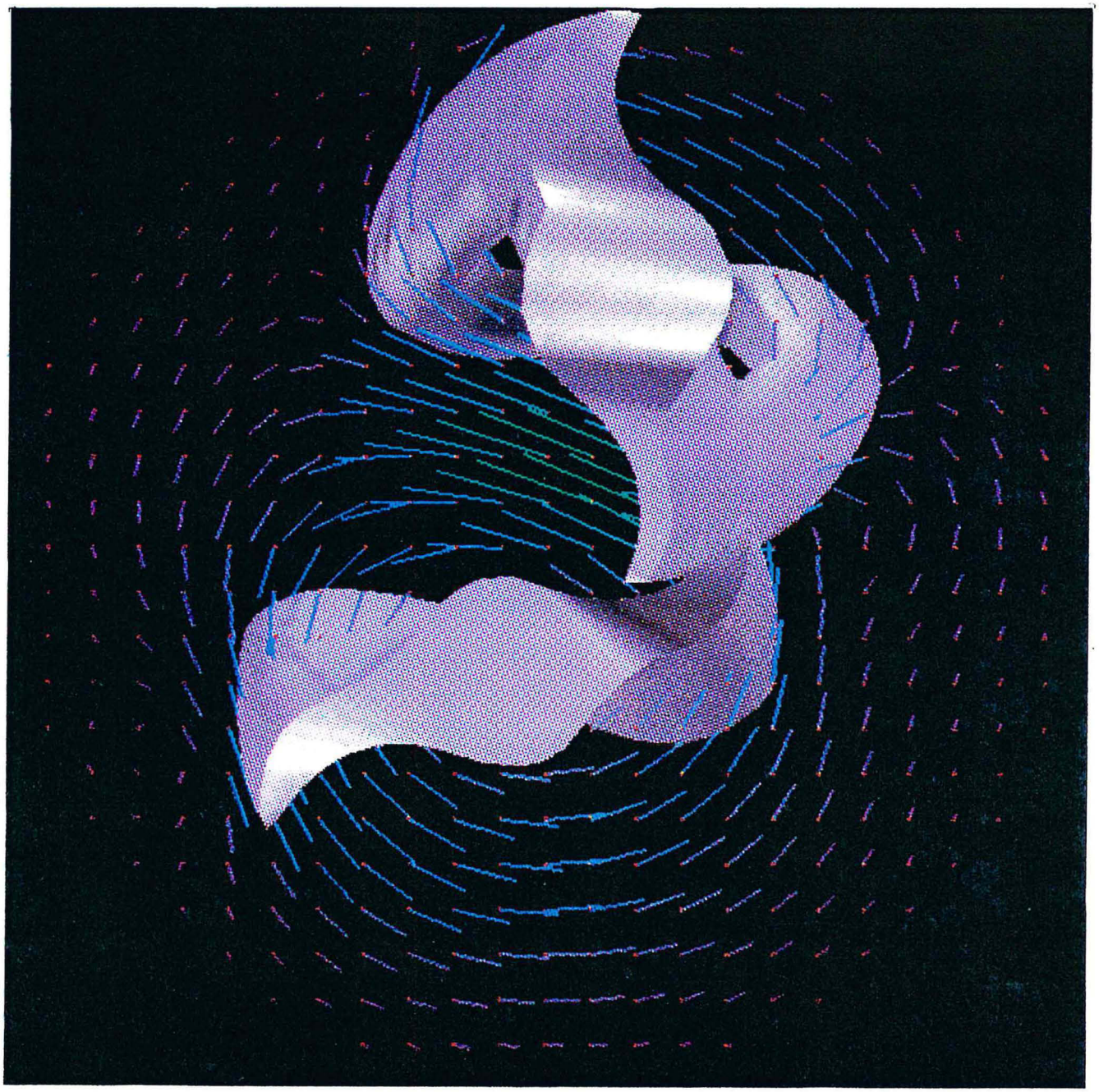

Figure 5.9 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 72°).

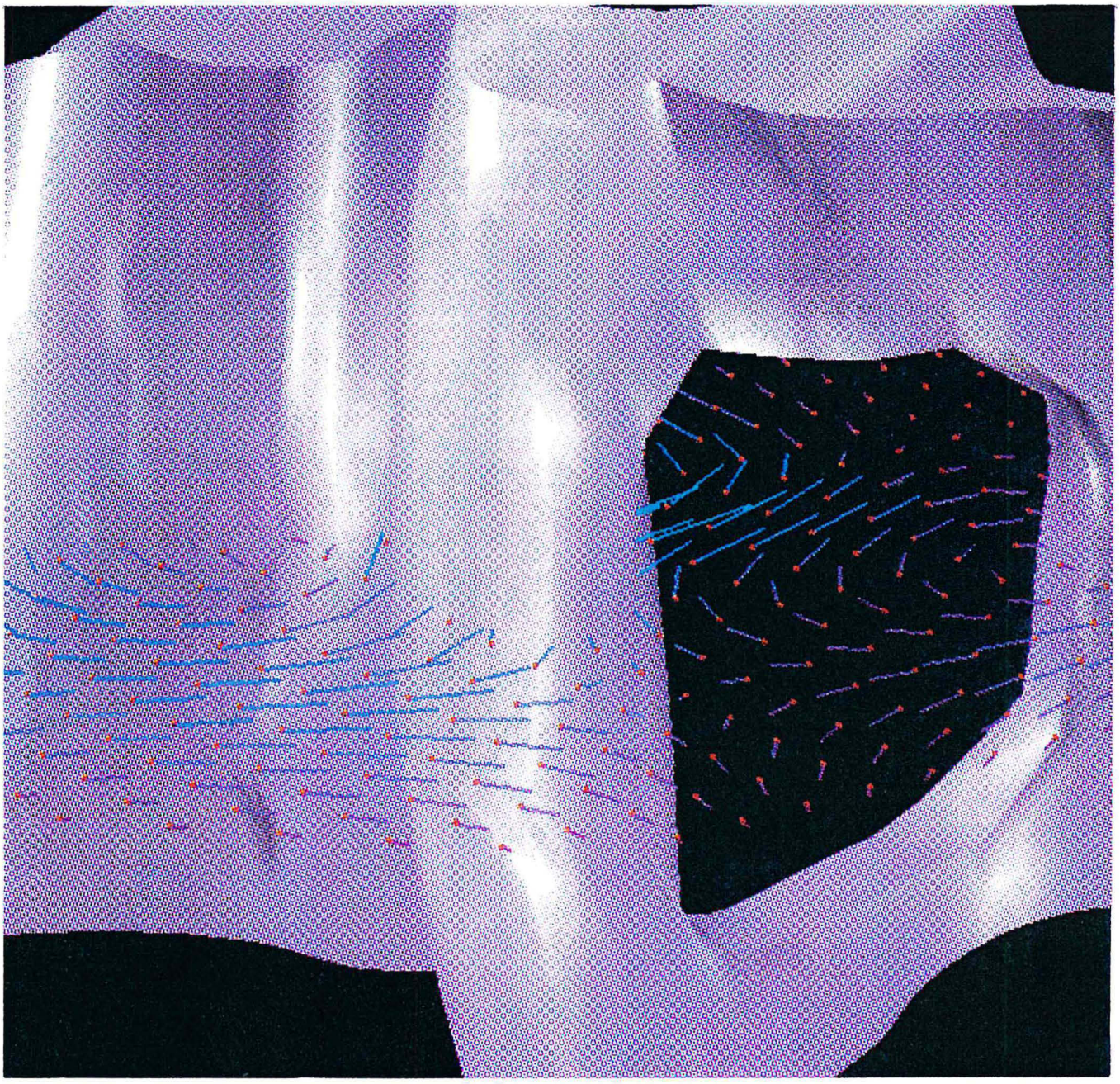

Figure 5.10 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 72°).

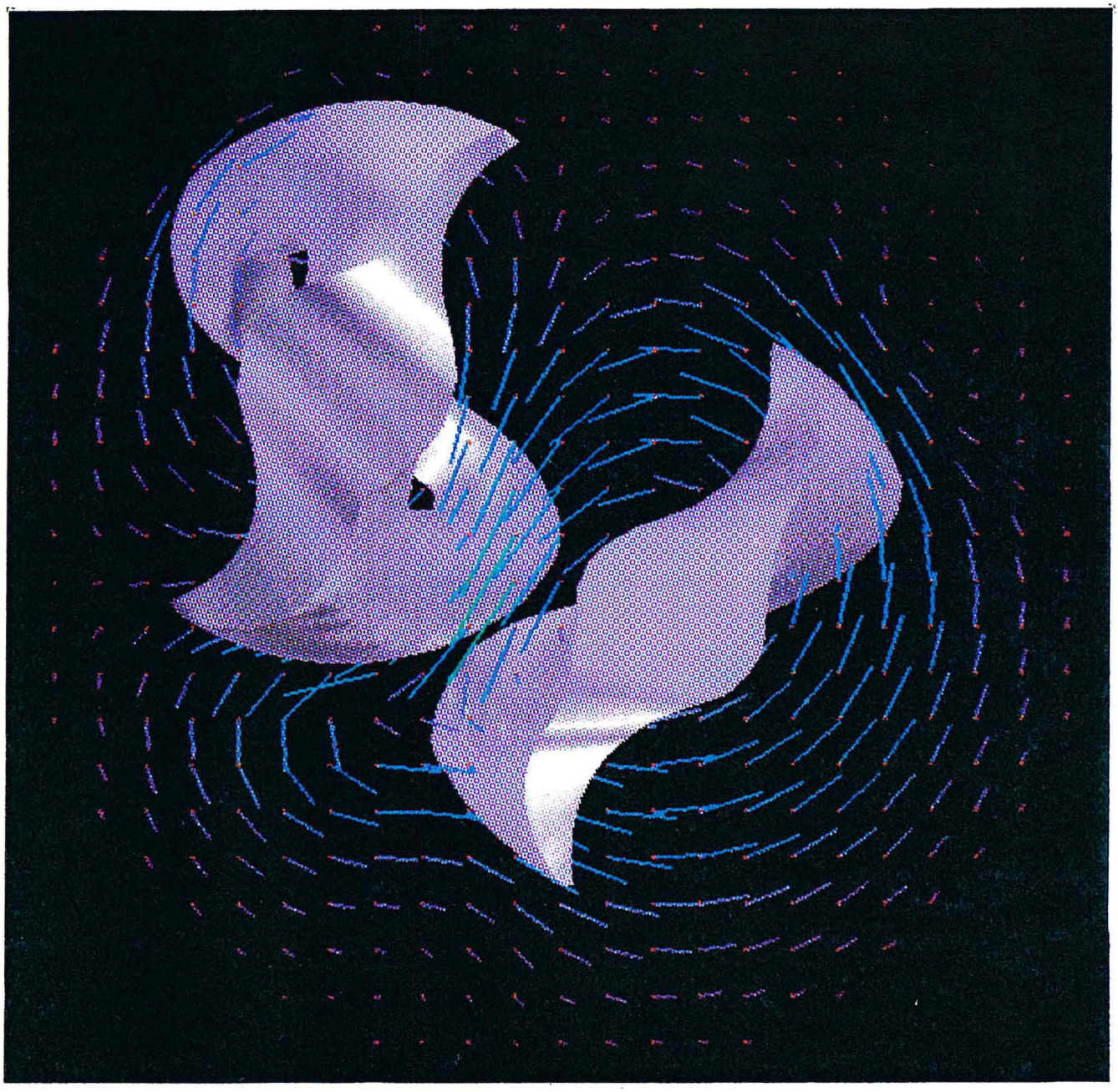

Figure 5.11 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 144°).

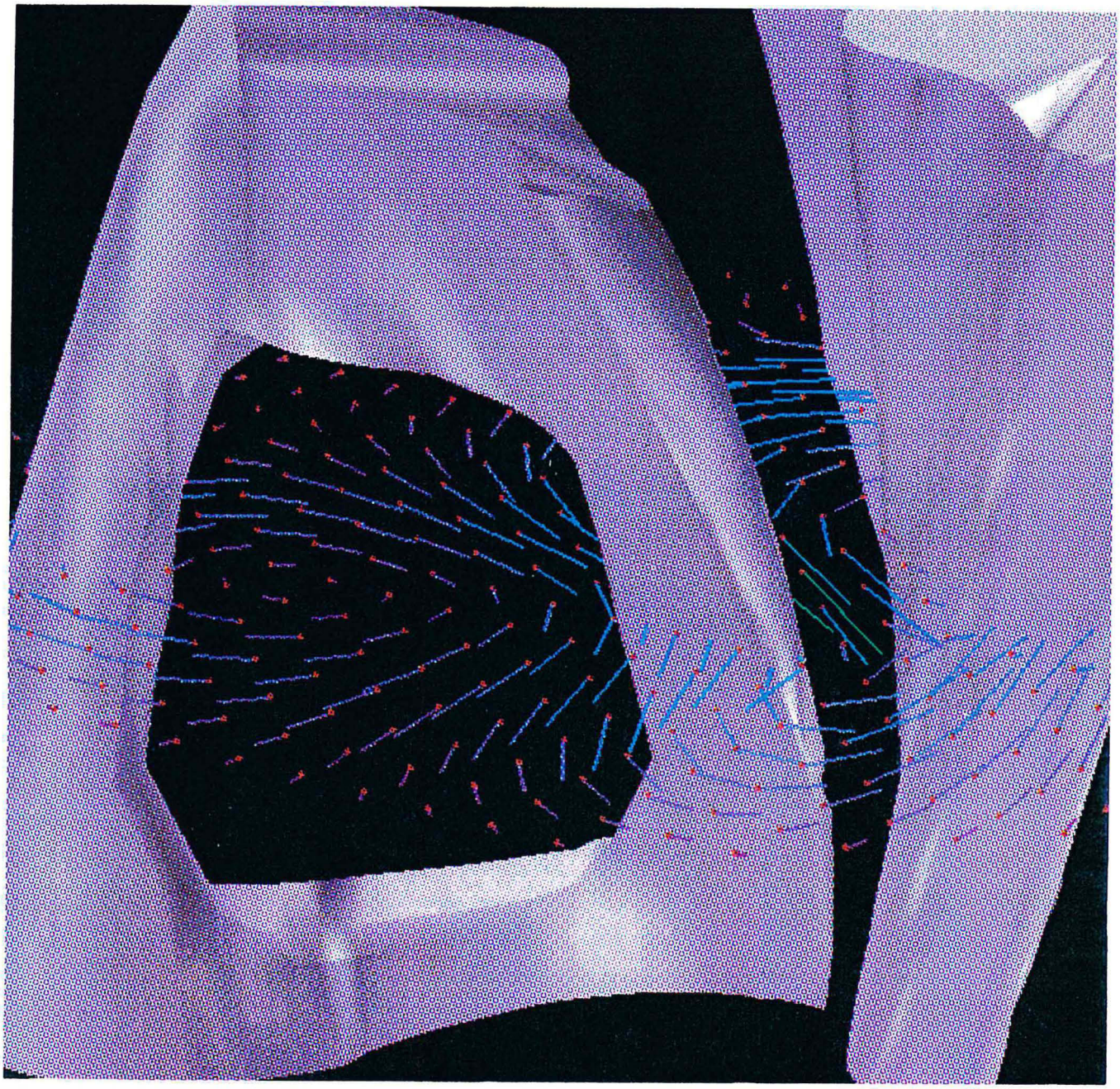

Figure 5.12 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 144°).

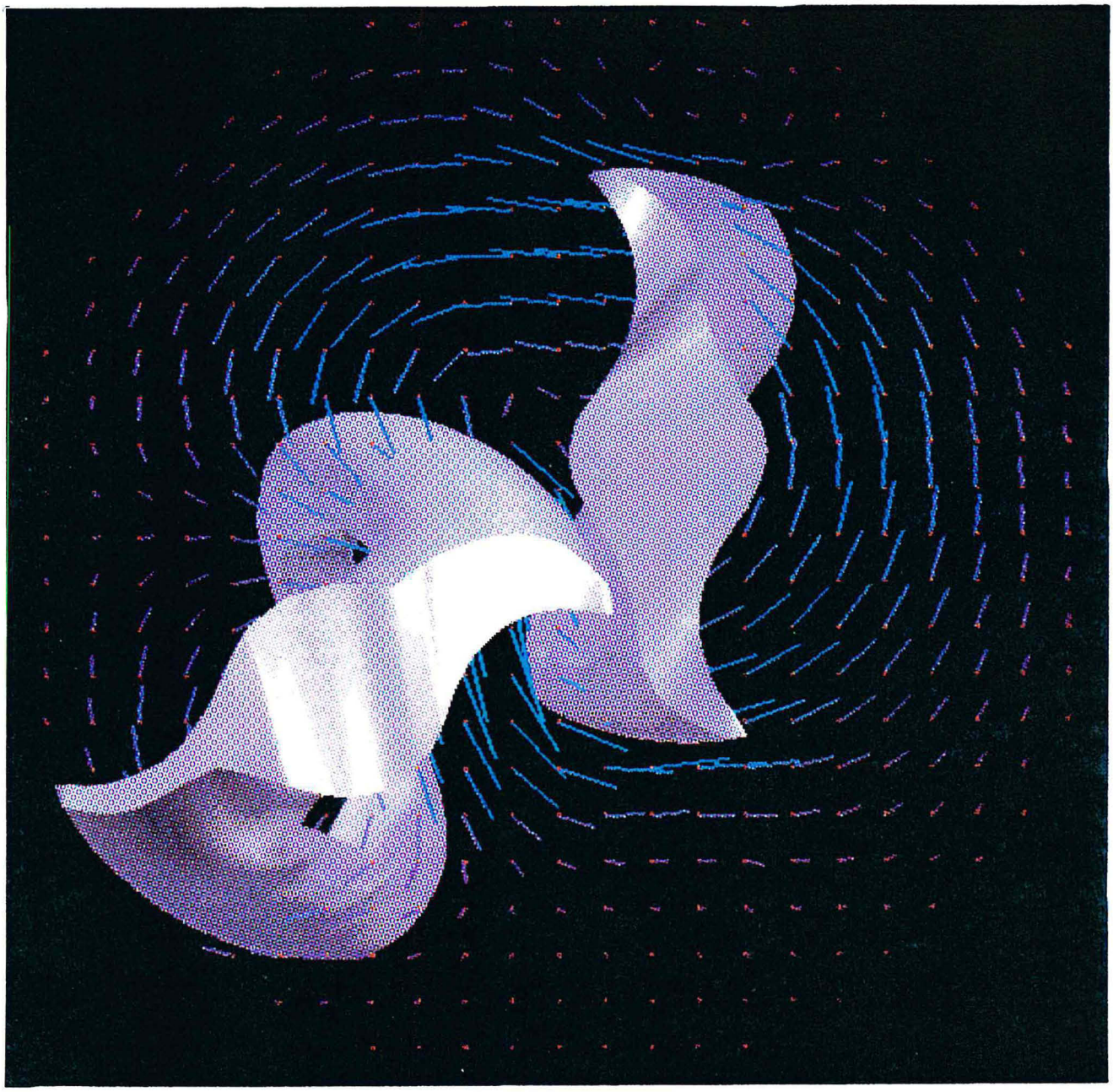

Figure 5.13 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 216°).

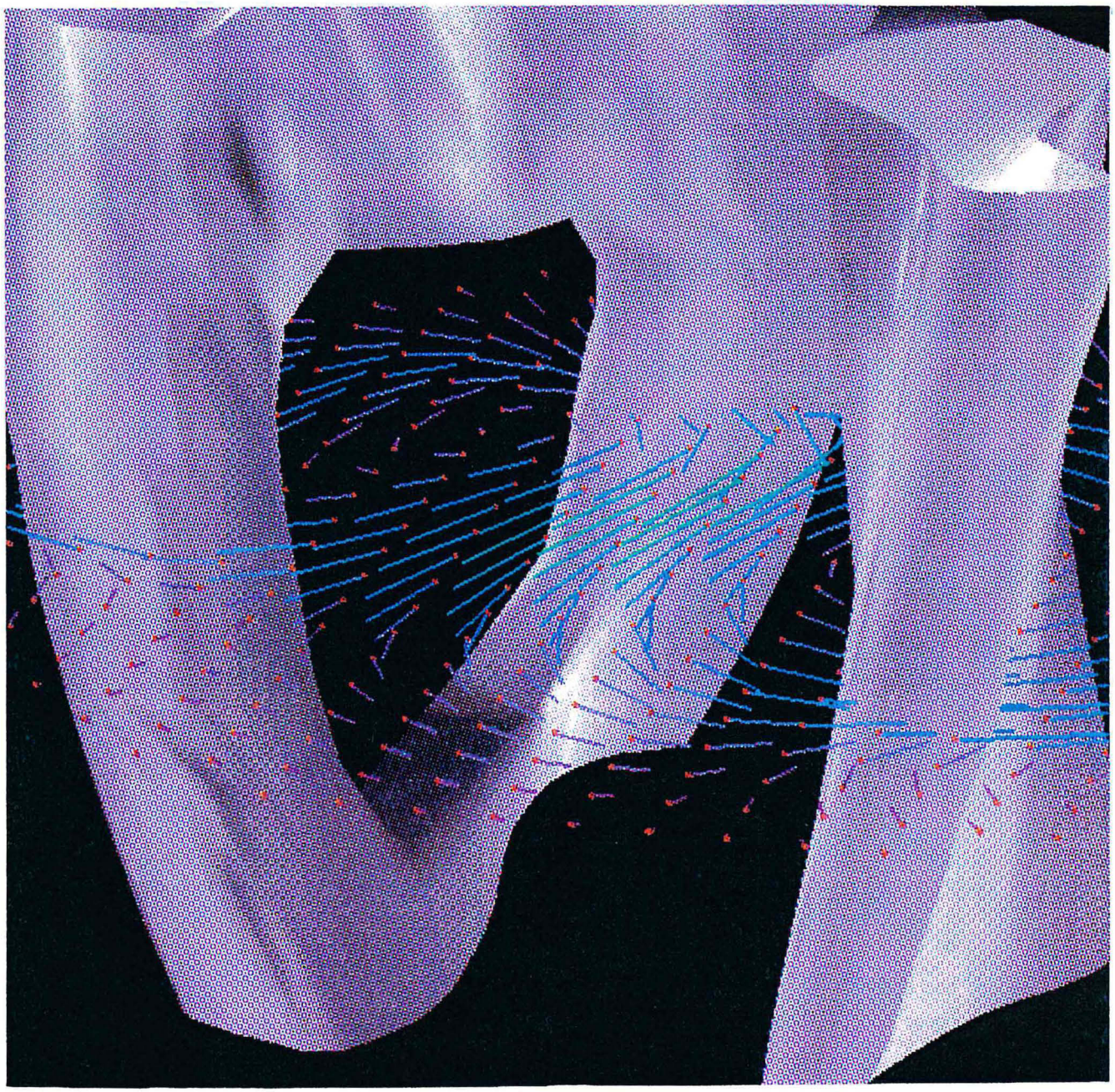

Figure 5.14 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 216°).

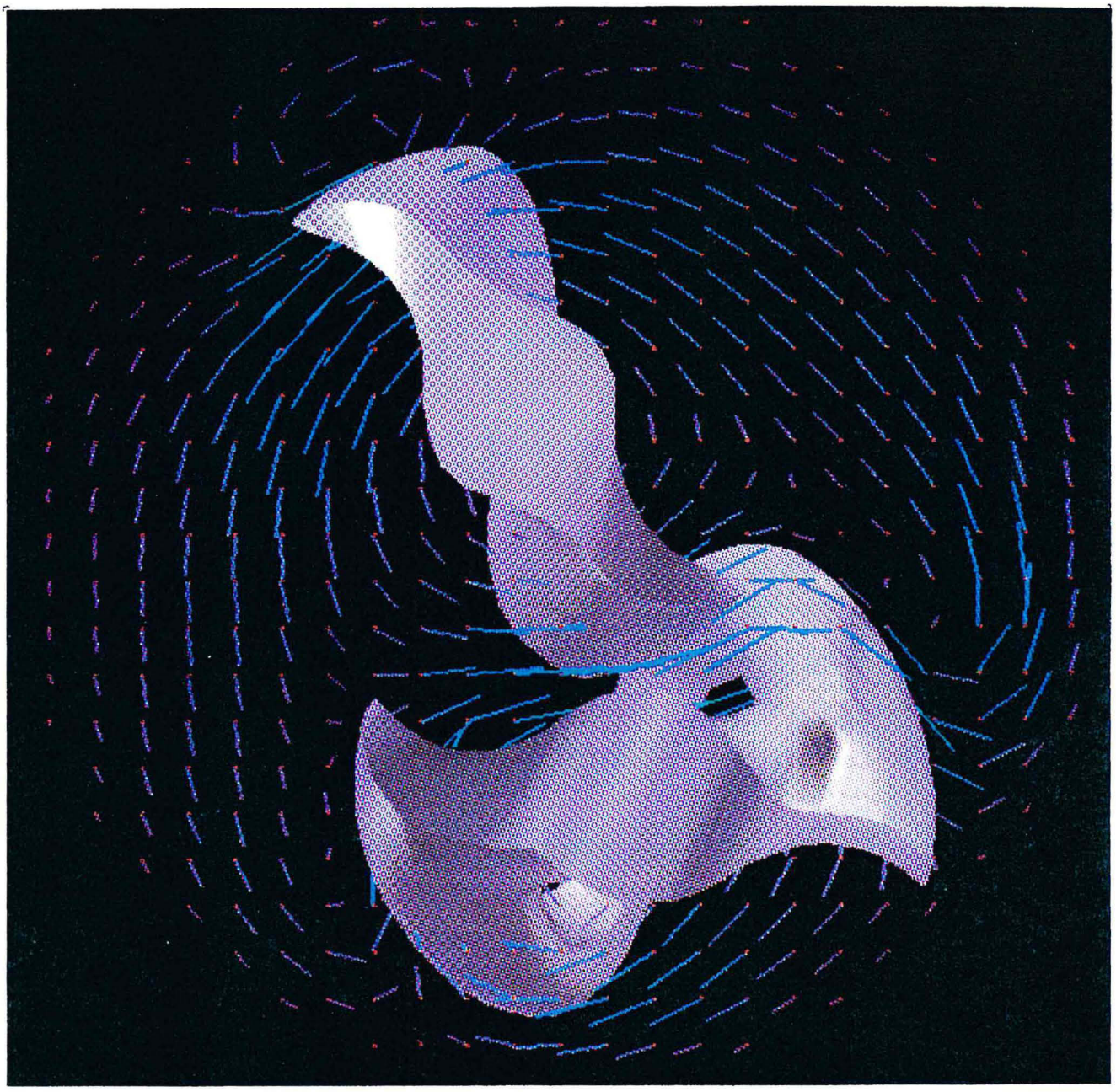

Figure 5.15 Vue plongeante du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 288°).

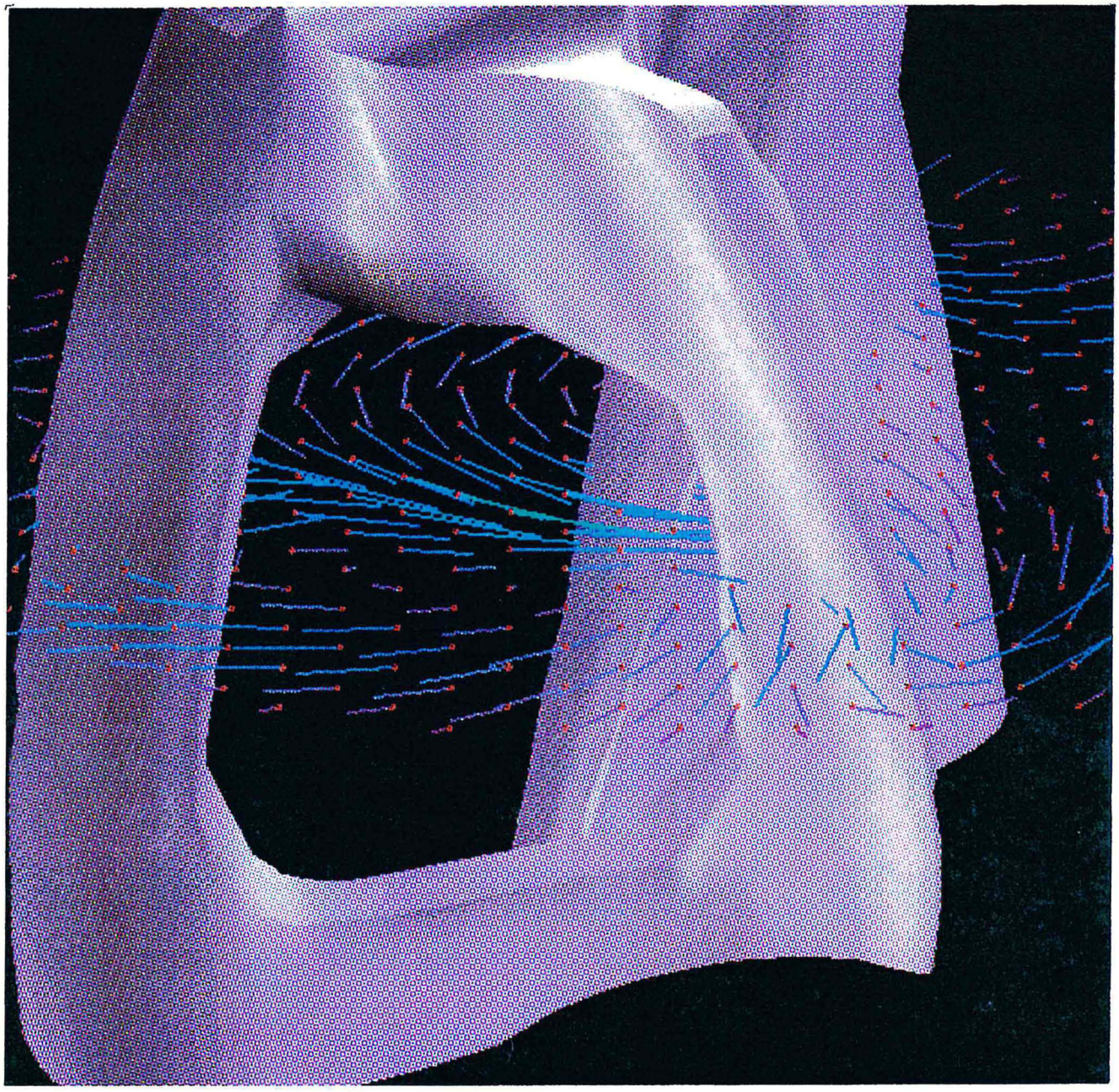

Figure 5.16 Vue en perspective du champ de vitesse sur un plan de coupe à mi-hauteur (position 288°).

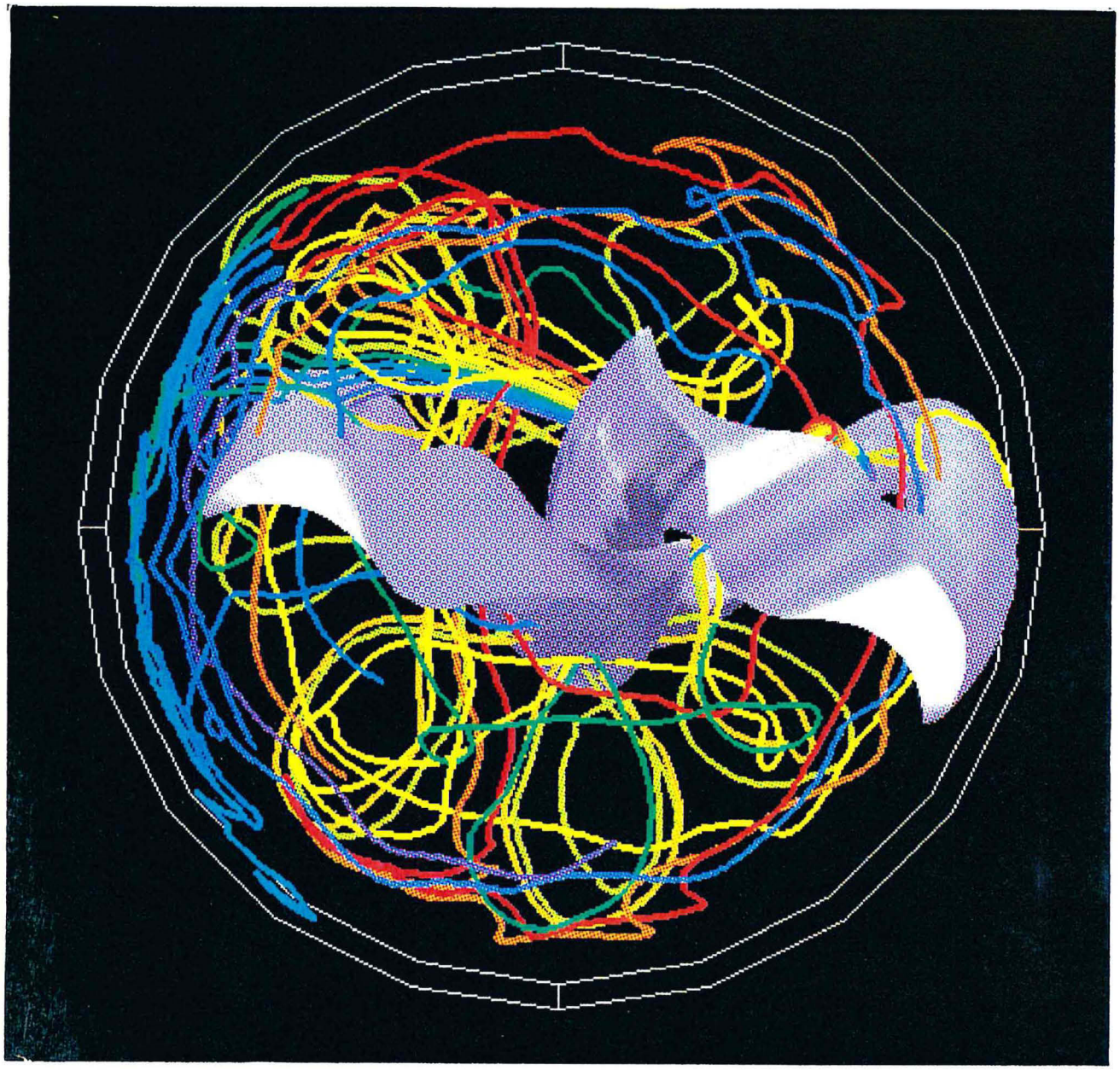

Figure 5.17 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur.

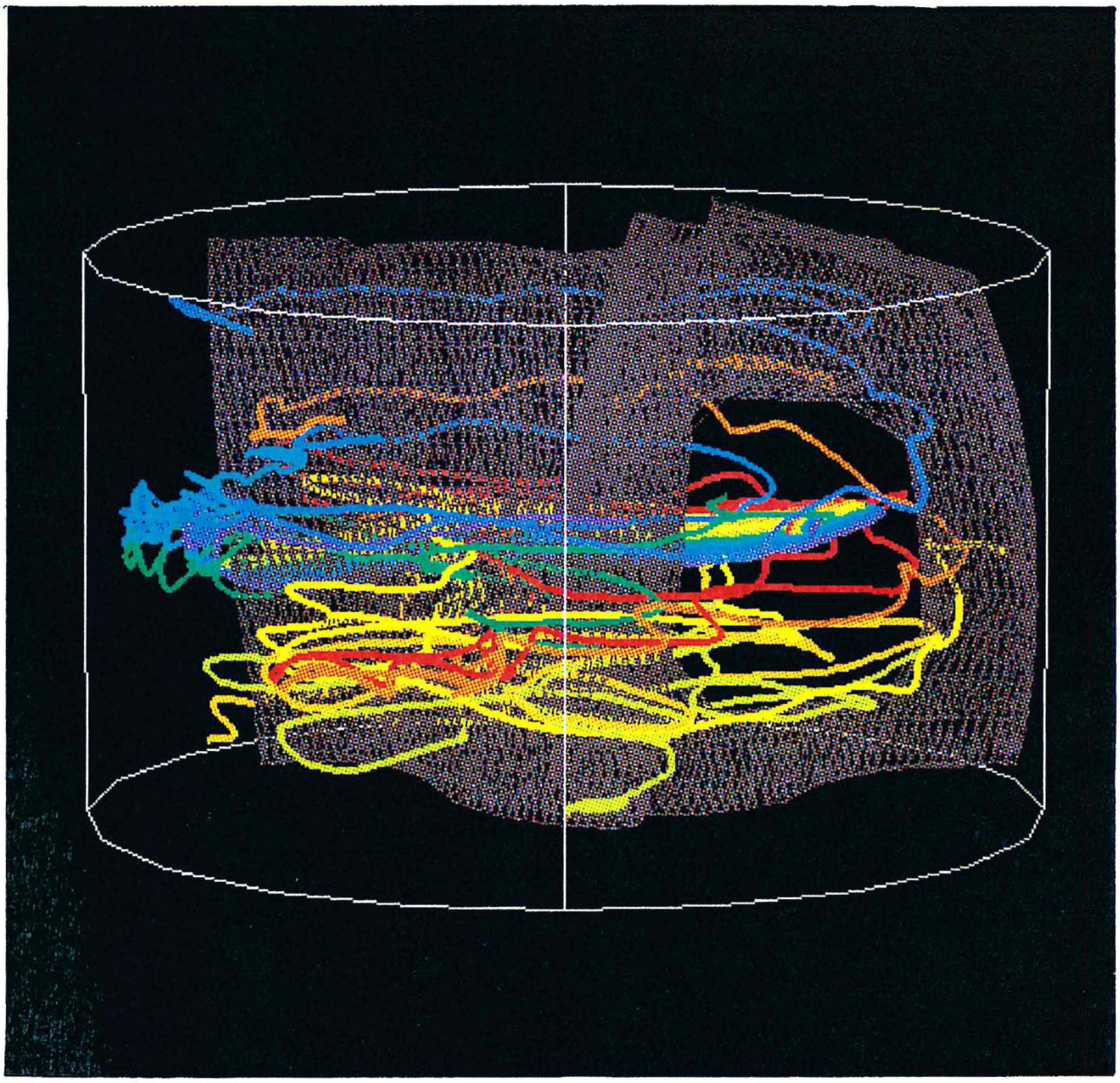

Figure 5.18 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur.

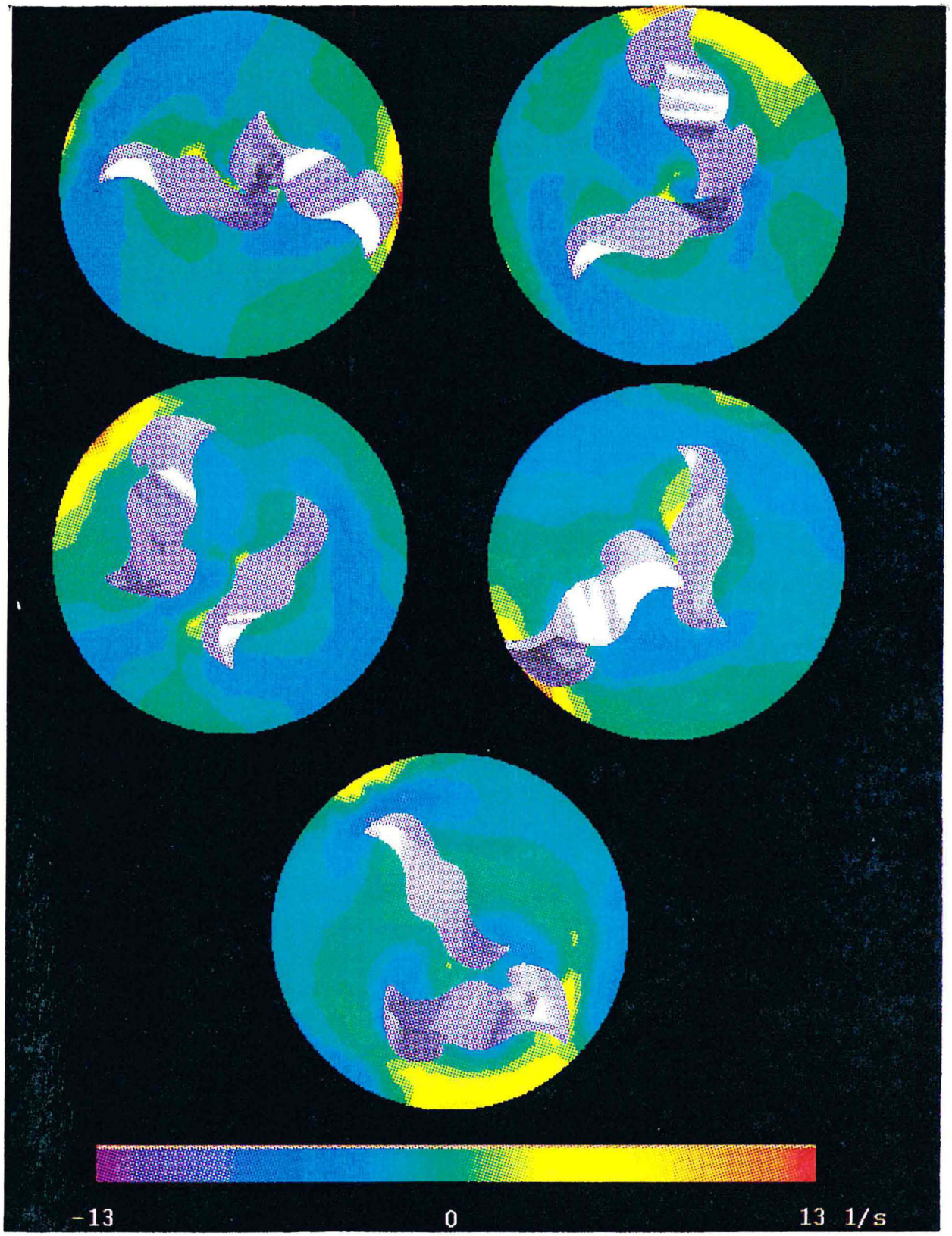

Figure 5.19 Champ de vitesse de cisaillement en régime périodique établi.

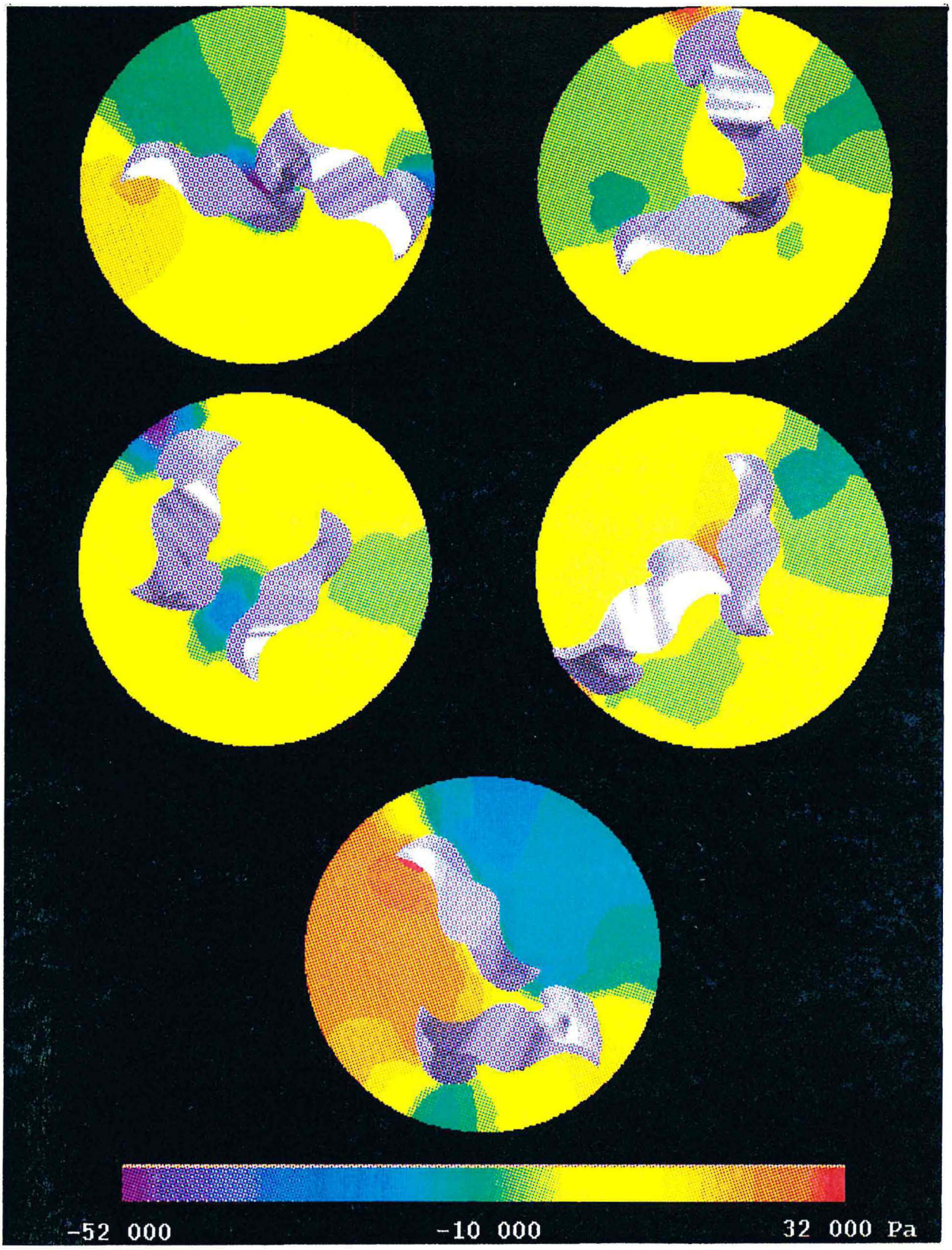

Figure 5.20 Champ de pression en régime périodique établi.

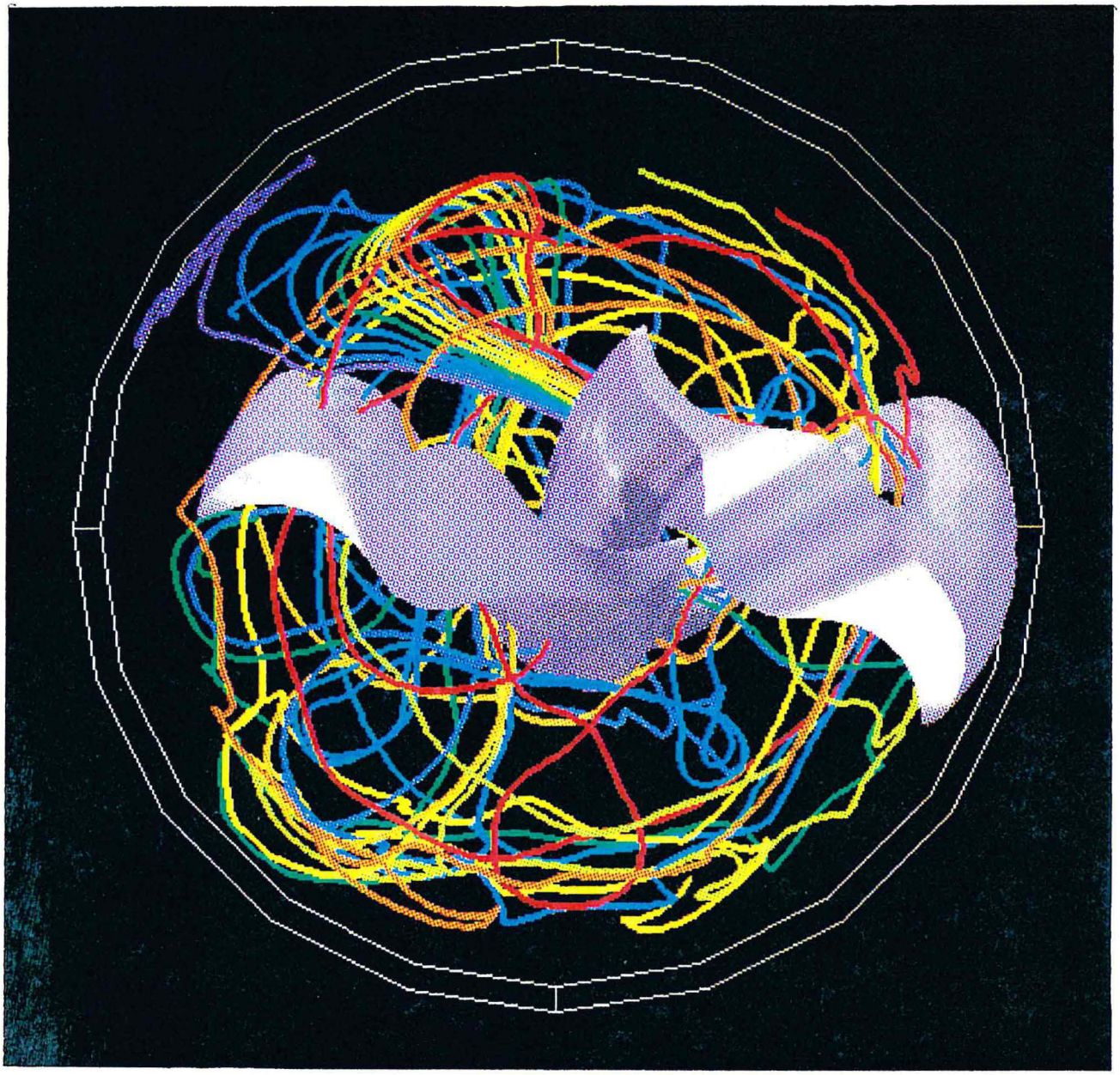

Figure 5.21 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=0,50).

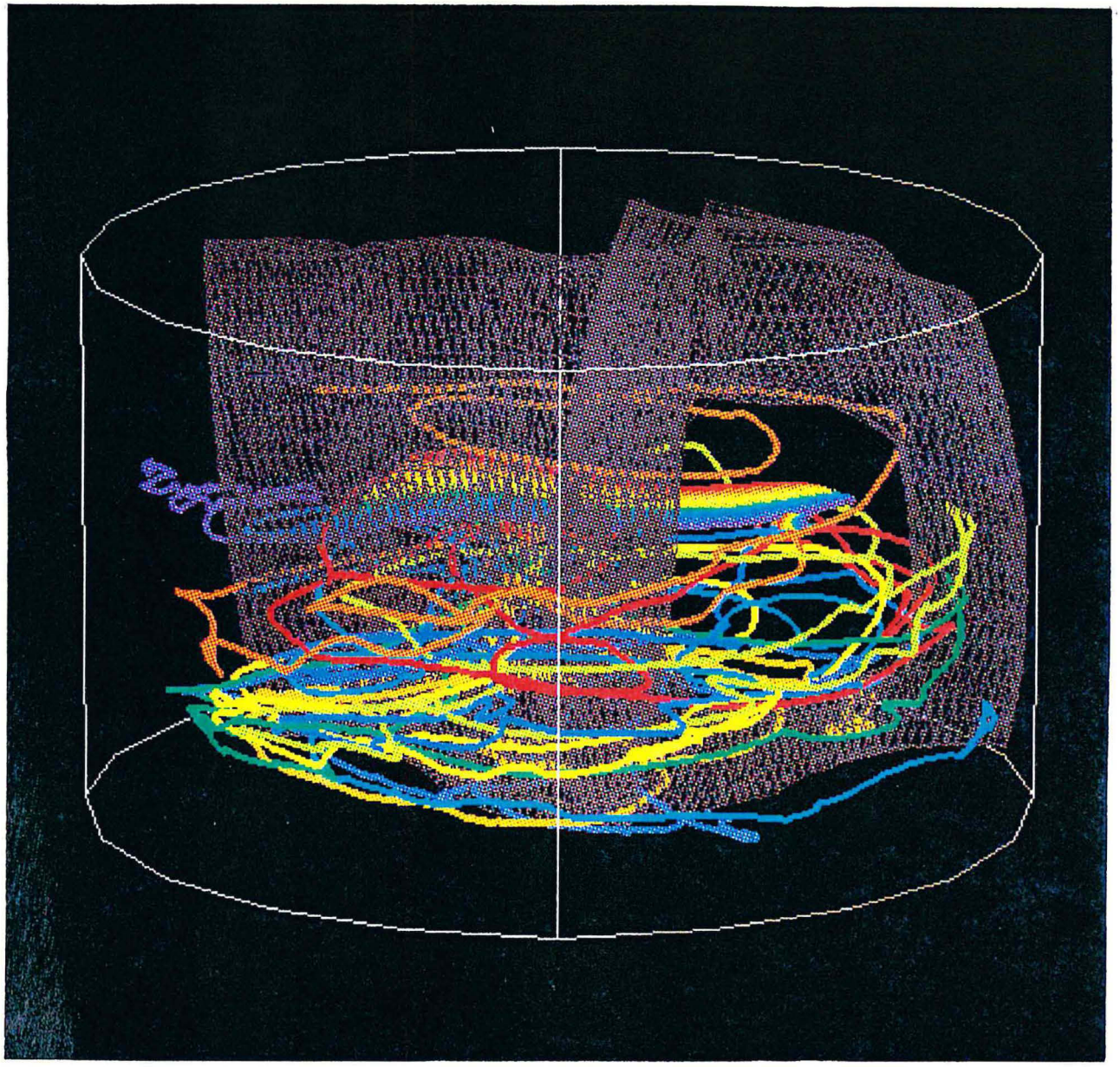

Figure 5.22 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=0,50).

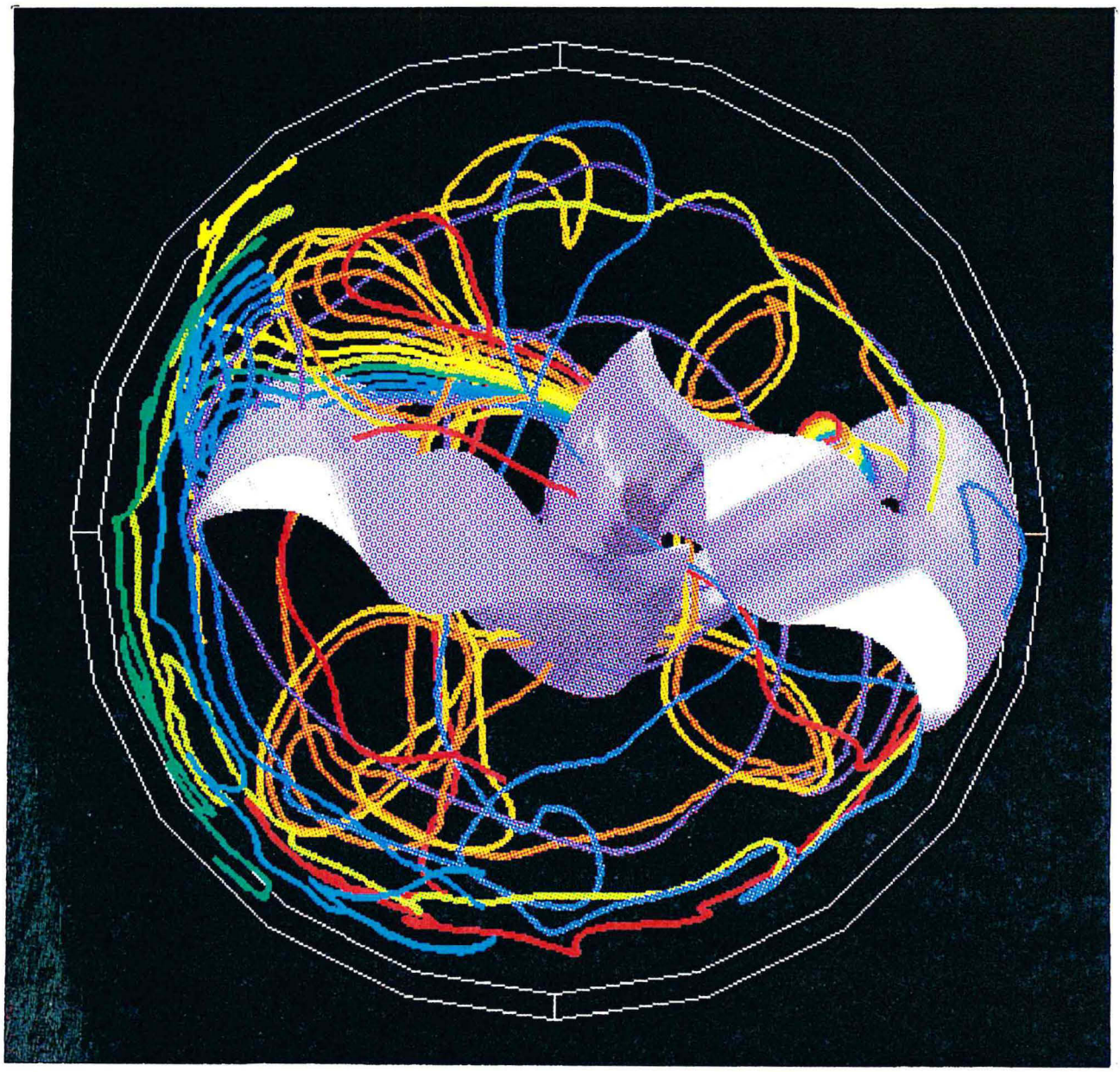

Figure 5.23 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,00).

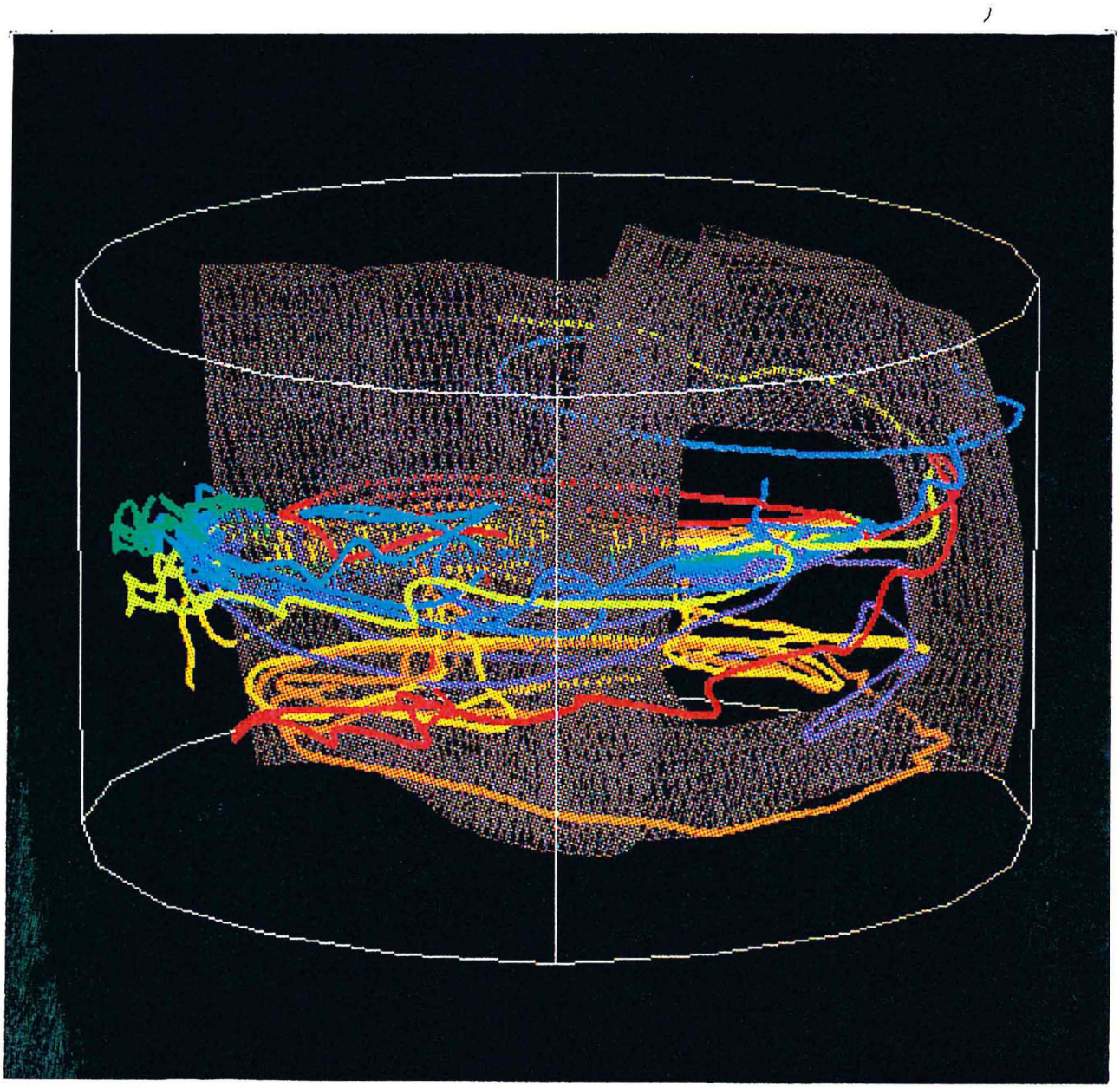

Figure 5.24 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,00).

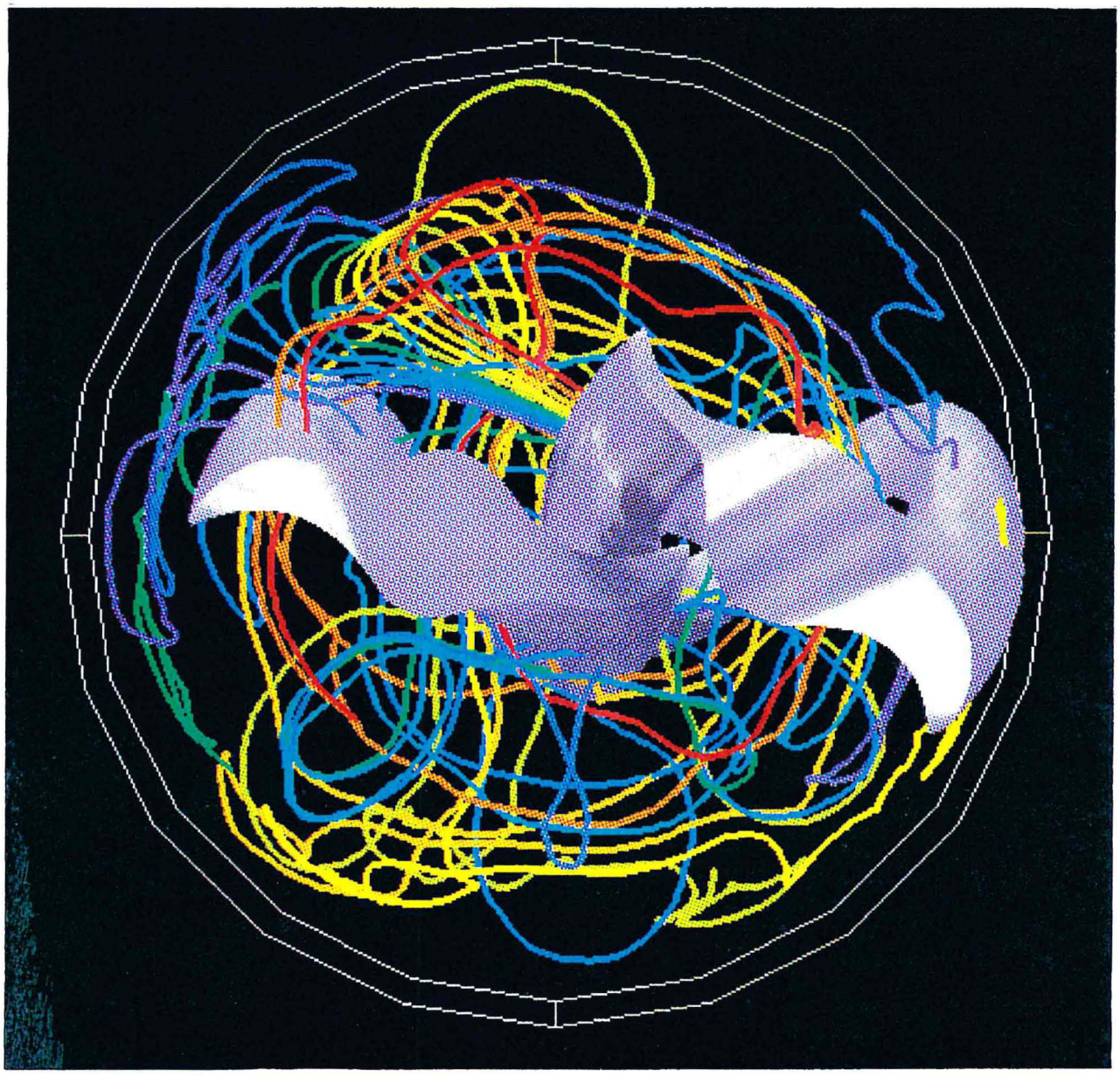

Figure 5.25 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,40).

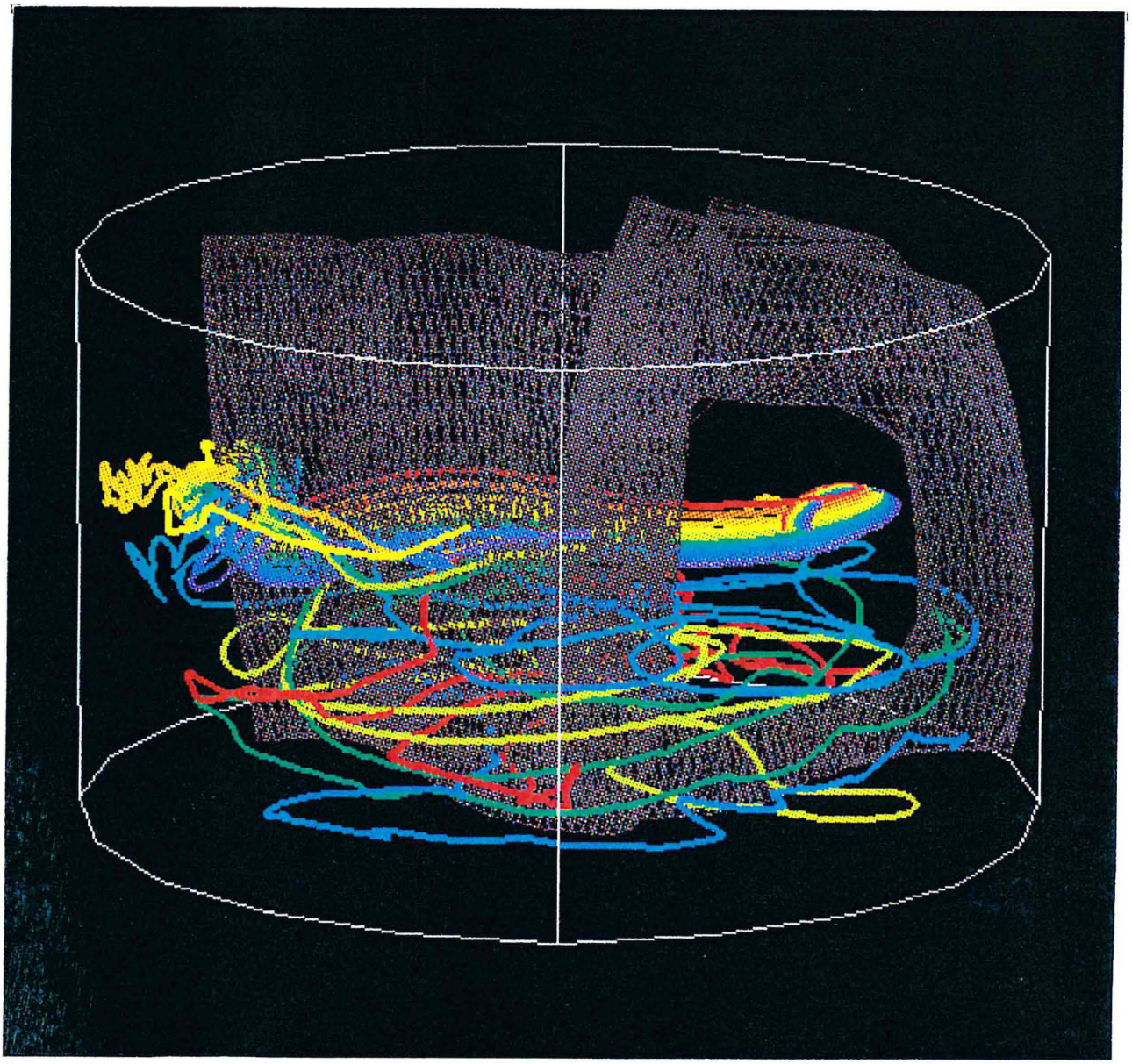

Figure 5.26 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (n=1,40).

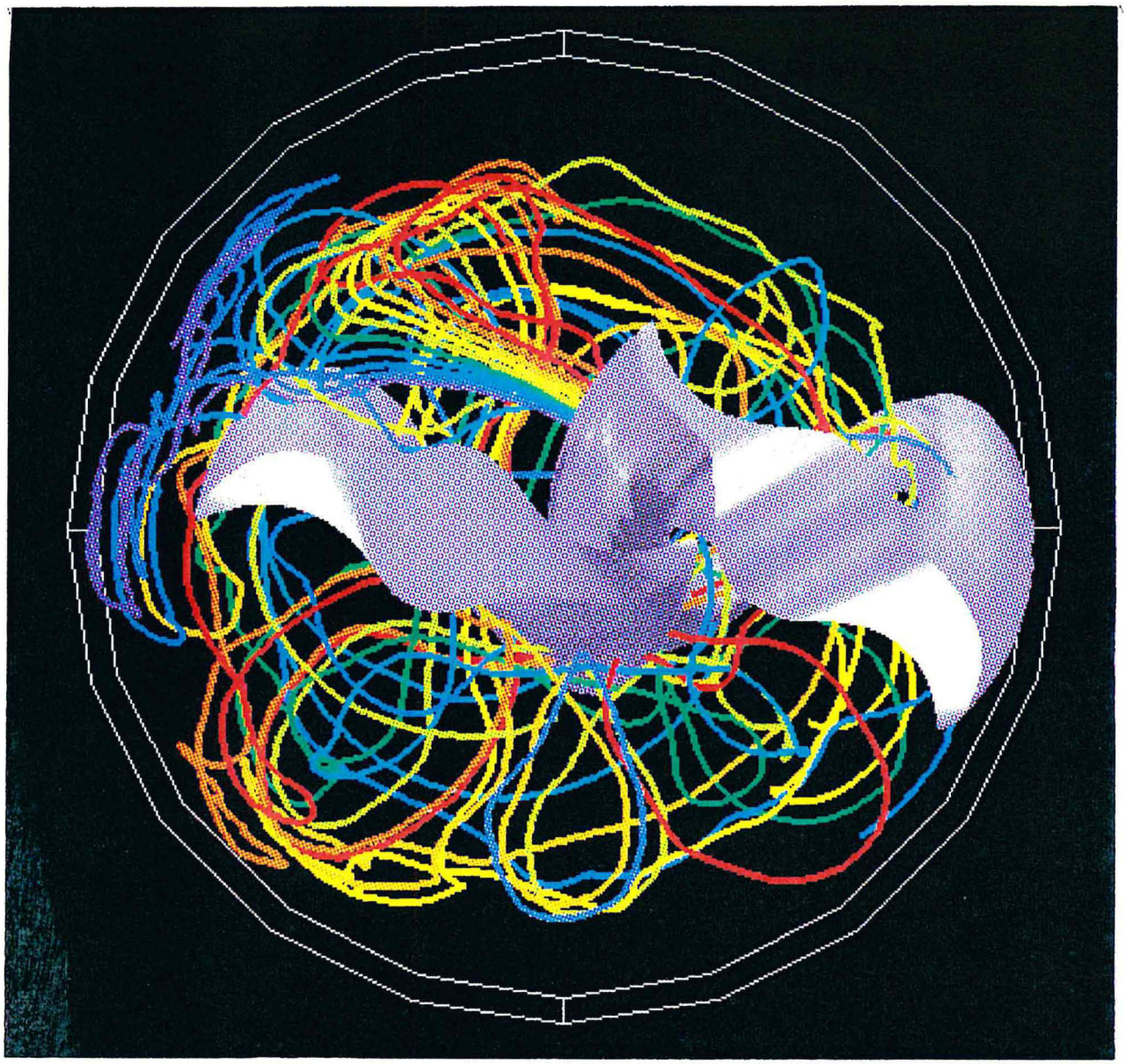

Figure 5.27 Vue plongeante du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur ($\tau_0 = 5000$).

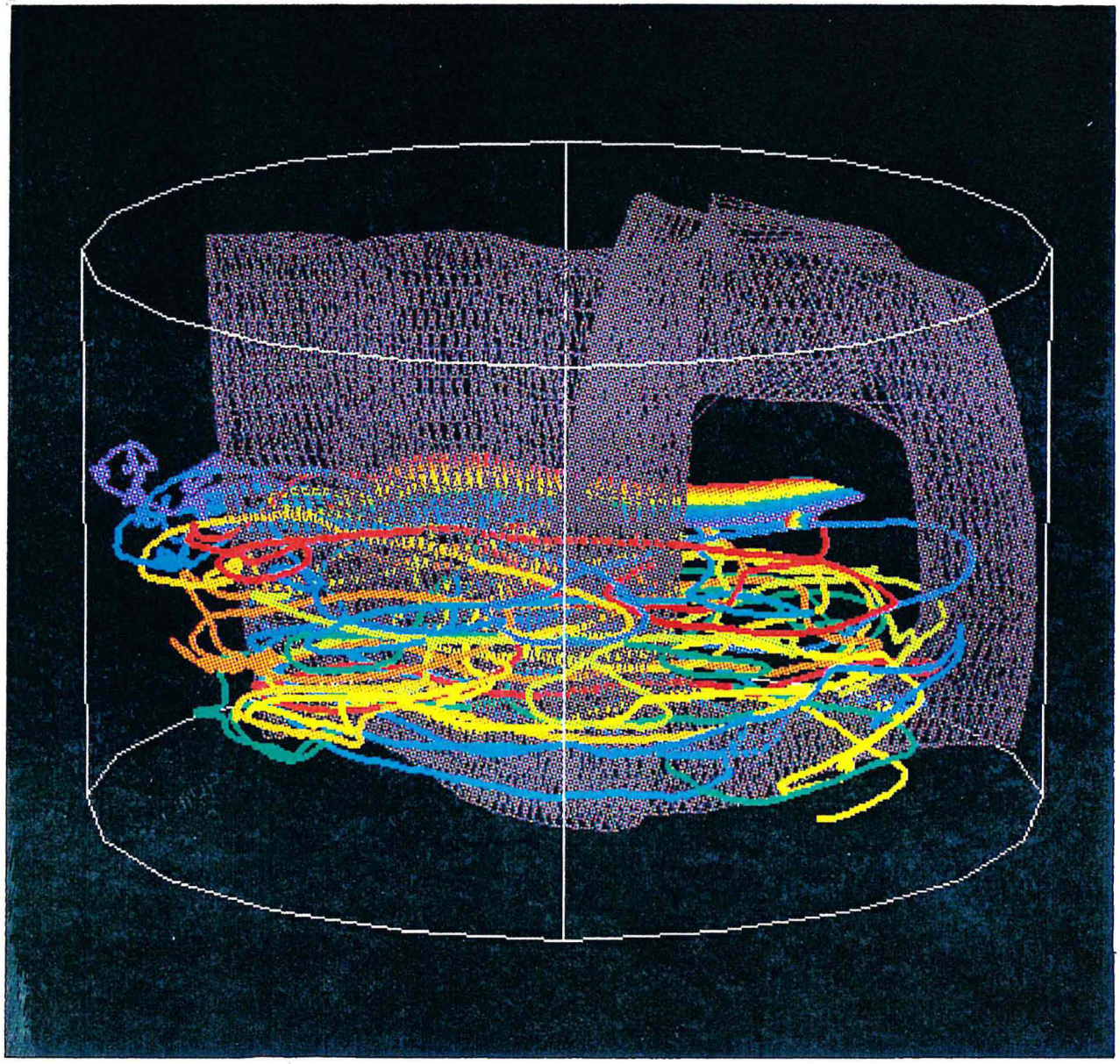

Figure 5.28 Vue en perspective du patron de dispersion d'un agglomérat de 10 particules injectées à mi-hauteur (τ_0= 5000).

$$\mu_a = \mu + \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}_a},\ \dot{\gamma}_a > 0, \tag{6.2}$$

et où le cisaillement de procédé est proportionnel à N:

$$\dot{\gamma}_a = K_s N. \tag{6.3}$$

La substitution de (6.2) dans (6.1) donne alors:

$$N_p = \frac{K_p \mu}{\rho N D^2} + \frac{K_p \tau_0}{\rho N D^2 (K_s N)}. \tag{6.4}$$

Dans cette expression, le premier terme représente la puissance nécessaire pour contrer la résistance visqueuse alors que le deuxième terme contient la puissance additionnelle servant à vaincre le seuil de contrainte. Nagata (1975) a utilisé une expression similaire pour la prédiction de la puissance consommée par différents types d'agitateurs (ancre, ruban hélicoïdal, turbine).

Soit Re_μ le nombre de Reynolds newtonien défini par

$$\mathrm{Re}_\mu = \frac{\rho N D^2}{\mu}, \tag{6.5}$$

de telle sorte que

$$Bi = \frac{He}{\mathrm{Re}_\mu} = \frac{\tau_0}{N\mu}, \tag{6.6}$$

où Bi est le nombre de Bingham (5.6) et He le nombre de Hedström (1.15). On tire alors de (6.4) que

$$N_p = \frac{K_p}{\mathrm{Re}_\mu}\left[1 + \frac{Bi}{K_s}\right] \tag{6.7}$$

ou encore

$$N_p = N_{p_0}\left[1+\frac{Bi}{K_s}\right], \tag{6.8}$$

où N_{p_0} représente le nombre de puissance dans le cas limite newtonien $\tau_0 = 0$. Il en découle une expression pour K_s similaire à la relation (1.14) obtenue dans le cas des fluides rhéofluidifiants obéissant au modèle de la loi de puissance:

$$K_s = \frac{Bi}{\left(\frac{N_p}{N_{p_0}}\right)-1}. \tag{6.9}$$

Le lecteur pourra remarquer que, comme dans le cas rhéofluidifiant, l'évaluation de K_s ne nécessite que 2 mesures de puissance. De plus, lorsque K_s est connu, l'expression (6.8) peut être utilisée afin de prédire la puissance requise pour le mélange de tout fluide viscoplastique.

Du nombre de Reynolds généralisé pour un fluide de Bingham

$$\mathrm{Re}_g = \frac{\rho N D^2}{\mu + \frac{\tau_0}{N}} \tag{6.10}$$

et de l'équation (6.8), il découle que

$$N_p = K_p\left[\mathrm{Re}_\mu^{-1} + \frac{1}{K_s}\left(\frac{\tau_0 / N + \mu}{\rho N D^2}\right) - \frac{\mathrm{Re}_\mu^{-1}}{K_s}\right], \tag{6.11}$$

d'où

$$N_p = K_p\left[\left(\frac{K_s - 1}{K_s}\right)\mathrm{Re}_\mu^{-1} - \frac{\mathrm{Re}_g^{-1}}{K_s}\right], \tag{6.12}$$

ou encore

$$N_p = \mathrm{Re}_g^{-1}\left[K_p K_s^{-1}(K_s - 1)(Bi+1)^{-1} + K_s^{-1}\right], \tag{6.13}$$

d'après l'identité

$$Bi = \frac{\mathrm{Re}_\mu}{\mathrm{Re}_g} - 1. \tag{6.14}$$

Par analogie avec l'équation (1.11) introduite par Rieger et Novak (1973), le terme entre crochets dans (6.13) est une expression pour la constante de puissance d'un fluide de Bingham qui ne dépend que du nombre de Bingham:

$$K_p(Bi) = N_p \mathrm{Re}_g = \left[\frac{1+(Bi+1)^{-1}(K_s-1)}{K_s}\right] K_p. \tag{6.15}$$

Par conséquent, le tracé de $\log N_p$ en fonction de $\log \mathrm{Re}_g$ pour différentes valeurs de Bi en régime laminaire devrait donner une famille de droites parallèles et de pente égale à -1. De plus, on tire de (6.15) que, pour une valeur donnée de Bi, le terme

$$\log\left[\frac{1+(Bi+1)^{-1}(K_s-1)}{K_s}\right] \tag{6.16}$$

est proportionnel à la "distance" entre la courbe de puissance correspondante et la courbe de puissance newtonienne.

6.2 Validation du concept de Metzner et Otto pour les fluides viscoplastiques

Les relations introduites à la section précédente vont maintenant être mises en perspective à partir de calculs numériques de la puissance dans deux systèmes d'agitation: un réservoir cylindrique muni d'un ancre et le malaxeur à mouvement planétaire du chapitre 5.

6.2.1 Ancre

Nous nous intéressons tout d'abord à l'écoulement isotherme dans un réservoir cylindrique muni d'une ancre. Ce système est identique à celui utilisé par Kaminoyama (1990).

6.2.1.1 Description du problème

Les caractéristiques géométriques du système d'agitation sont données à la Figure 6.1.

Les propriétés physiques des fluides viscoplastiques étudiés sont les suivantes:

- $1 \leq \mu \leq 10$ Pa·s;
- $0 \leq \tau_0 \leq 1000$ Pa;
- $\rho = 1000$ kg/m^3.

Les vitesses de rotation de l'ancre ont été choisies dans l'intervalle 8-80 tours/minute.

Le diamètre du réservoir et la vitesse de l'agitateur sont désignés comme dimensions caractéristiques. Dans ces conditions, les nombres de Bingham et de Hedström varient entre 0 et 7 500 et 0 et 32 400 respectivement.

La simulation a été effectuée à l'aide d'une méthode d'éléments finis standard en utilisant le repère (lagrangien) de l'agitateur. Comme le repère est non galiléen, les équations de Stokes (2.14)-(2.15) ont été résolues.

Le maillage comprend 7 936 éléments $P_1^+ - P_0$, ce qui implique la résolution d'un système linéaire de 49 675 équations en vitesse.

Les conditions aux limites suivantes ont été imposées:

- $\mathbf{v} = \omega \times \mathbf{r}$ au fond et à la paroi du réservoir;
- $\mathbf{v} = 0$ sur l'agitateur;
- une condition de surface libre (la surface est supposée plane).

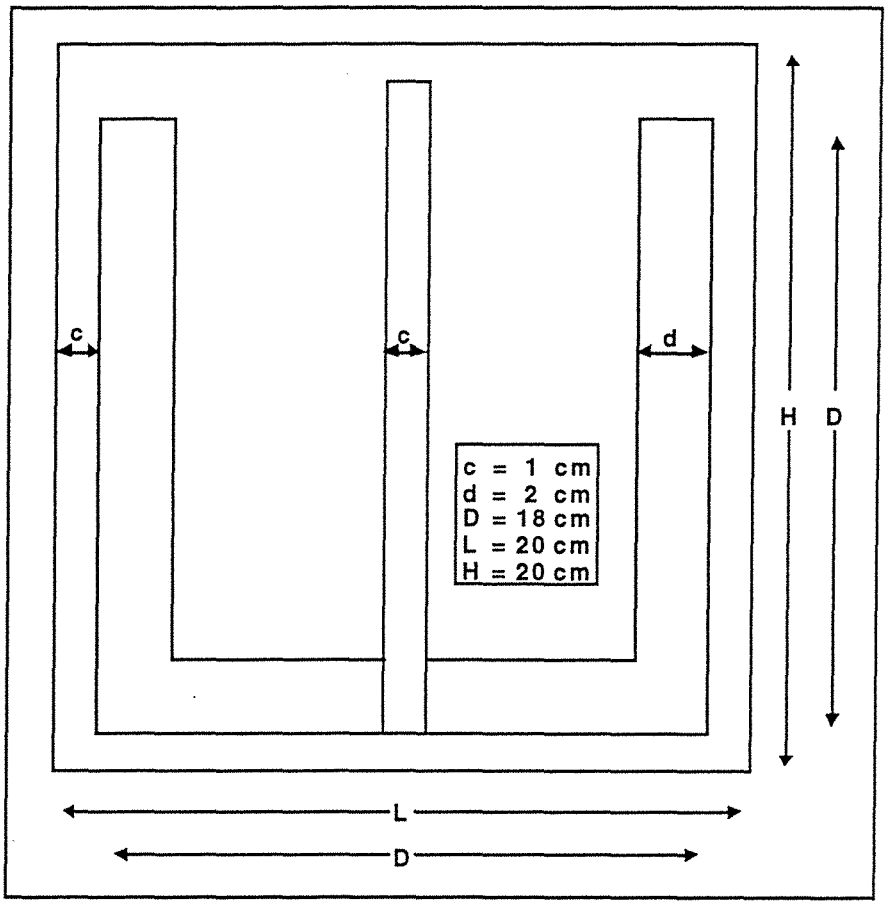

Figure 6.1 Caractéristiques géométriques du réservoir et de l'ancre.

6.2.1.2 Résultats

Nous présentons à la Figure 6.2 la variation de N_p en fonction de Re_g pour différentes valeurs de Bi. Ce résultat est conforme à l'équation (6.15); en

régime laminaire, les courbes de puissance sont des droites parallèles de pente égale à -1.

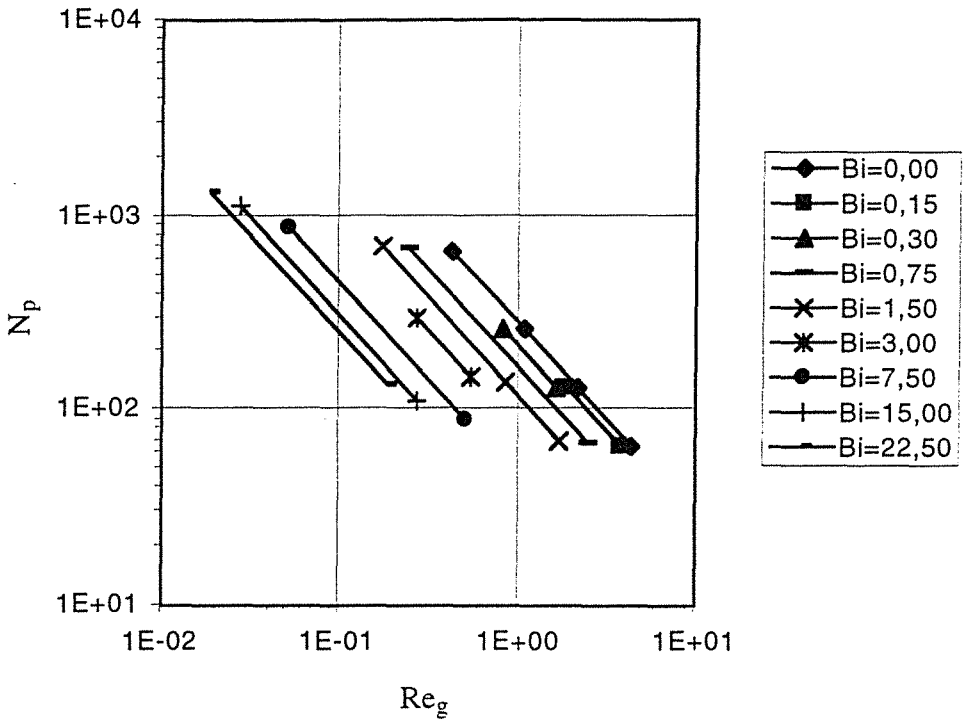

Figure 6.2 Graphe de N_p en fonction de Re_g.

On peut voir dans la Figure 6.2 que, pour une valeur donnée de Re_g, le logarithme de N_p décroît lorsque Bi augmente. D'après (6.15), lorsque $\mathrm{Re}_g = 1$, le logarithme de N_p est égal au logarithme de $K_p(Bi)$. On en conclut donc que $\log K_p(Bi)$ diminue lorsque Bi augmente. Cette propriété est confirmée à la Figure 6.3 qui contient le graphe de $K_p(Bi)$ en fonction de Bi.

Il est possible de calculer K_s en utilisant les équations (1.9), (6.9), (6.13) et (6.15). Nous présentons à la Figure 6.4 un histogramme de K_s en fonction de Bi. On voit clairement que, pour $Bi \in [0,7500]$, la variation de K_s est faible.

Les équations (6.2) et (6.3) permettent le calcul de la viscosité de procédé μ_a. On peut alors obtenir de l'identité (6.1) une courbe généralisée mettant en relation le nombre de puissance N_p et le nombre de Reynolds du procédé (Figure 6.5):

$$\mathrm{Re}_a = \frac{\rho N D^2}{\mu_a}. \tag{6.17}$$

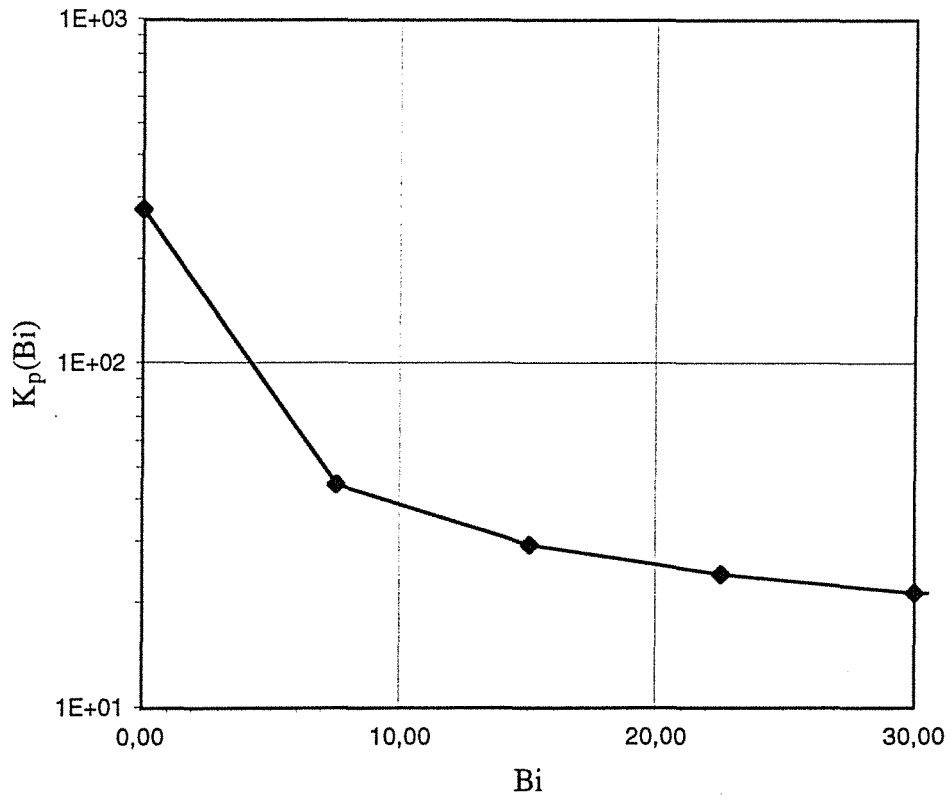

Figure 6.3 Graphe de $K_p(Bi)$ en fonction de Bi.

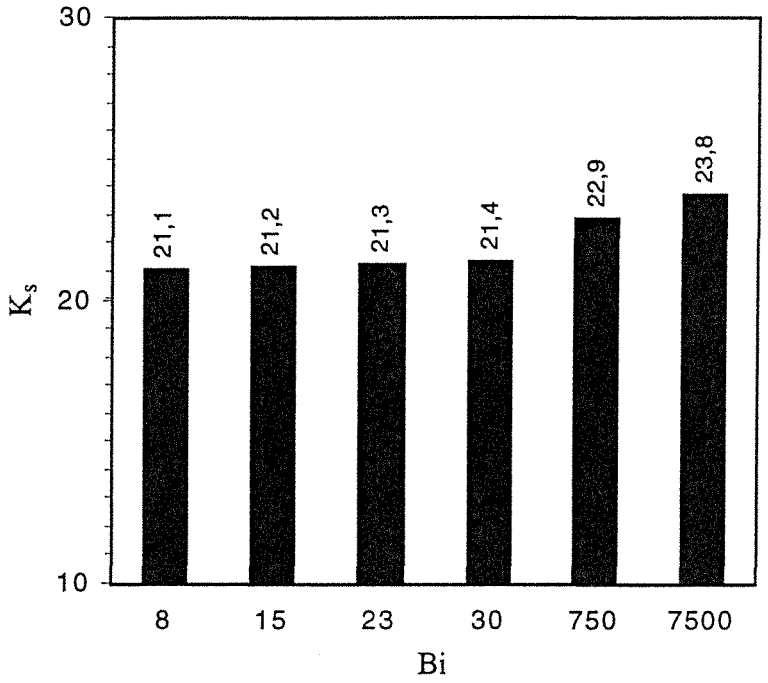

Figure 6.4 Histogramme de K_s en fonction de Bi.

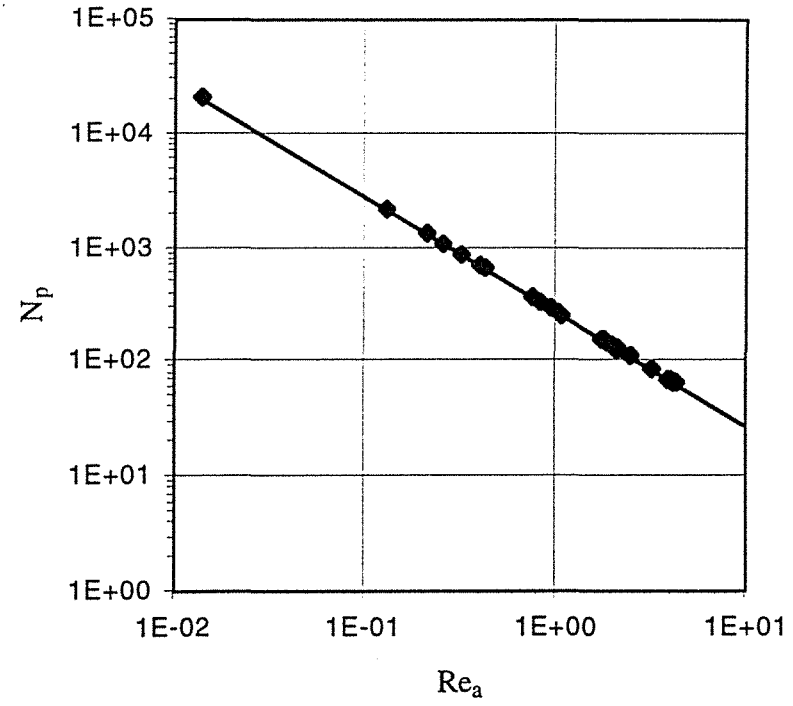

Figure 6.5 Courbe généralisée pour la puissance consommée.

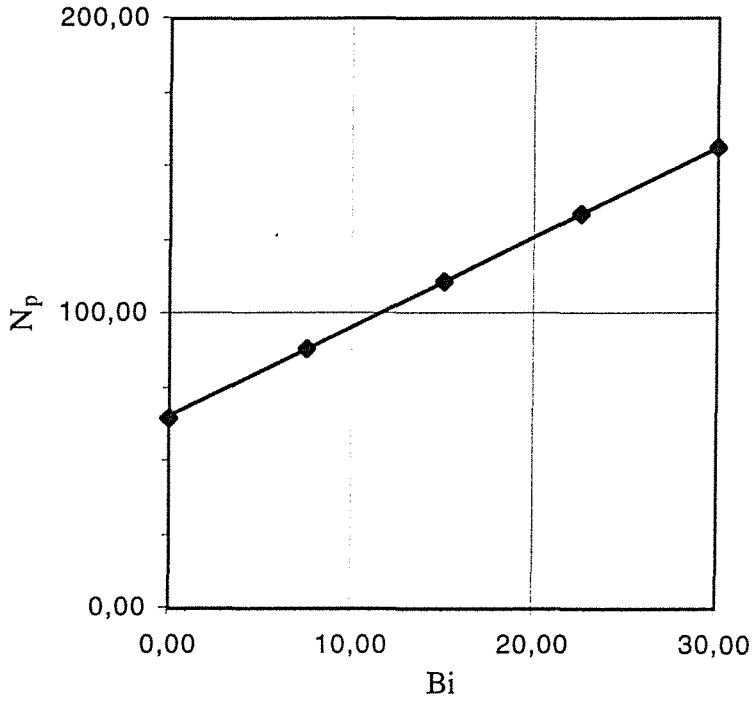

Figure 6.6 Graphe de N_p en fonction de Bi.

Finalement, si on suppose que K_s est constant, l'équation (6.8) implique que N_p est proportionnel à Bi. Cette propriété, qui a déjà été observée par Tanguy et coll. (1994), est illustrée à la Figure 6.6.

6.2.2 Malaxeur à mouvement planétaire

Nous considérons maintenant l'écoulement isotherme dans le malaxeur à mouvement planétaire.

6.2.2.1 Description du problème

Les caractéristiques géométriques et les conditions opératoires du malaxeur sont décrites à la section 5.1.

Les propriétés physiques des fluides viscoplastiques étudiés sont les suivantes:

- $5 \leq \mu \leq 500$ Pa·s;
- $0 \leq \tau_0 \leq 5000$ Pa;
- $\rho = 1700$ kg/m^3.

Dans le cas d'une ancre ou d'un ruban hélicoïdal, le choix des grandeurs caractéristiques est naturel; on prend généralement pour diamètre et vitesse caractéristiques le diamètre du réservoir et la vitesse de l'agitateur. Dans le cas d'un malaxeur à mouvement planétaire, plusieurs options sont envisageables. Dans ce travail, le diamètre du réservoir et la vitesse du carrousel sont considérés comme les dimensions caractéristiques. Dans ces conditions, les nombres de Bingham et de Hedström varient entre 0 et 40 et 0 et 149 respectivement.

6.2.2.2 Résultats

La puissance consommée au cours d'un tour de carrousel est présentée à la Figure 6.7. Les oscillations sont attribuables au changement de position relative des pales au cours du temps; ce changement de configuration entraîne une variation du cisaillement moyen dans le malaxeur. La valeur maximale de la puissance consommée est atteinte après un demi-tour. À ce moment, une grande partie de la pale évidée est très près de la paroi. De plus, au centre du malaxeur, les deux pales entrent pratiquement en contact

l'une avec l'autre. Il s'ensuit un cisaillement moyen important et, par conséquent, une puissance consommée relativement grande.

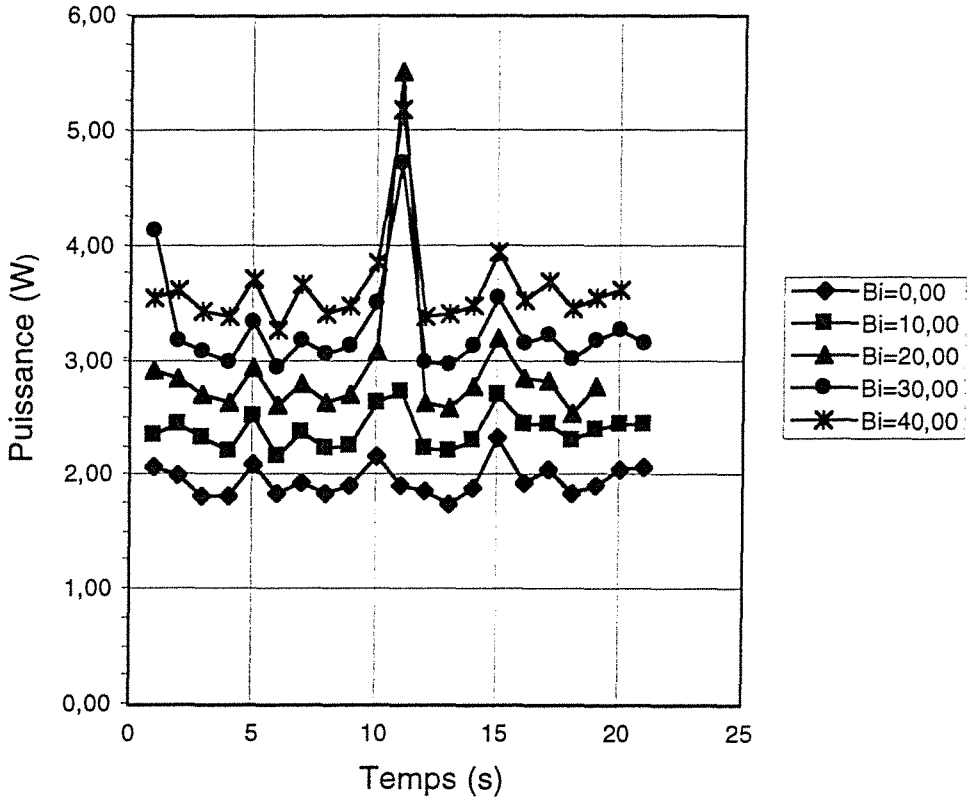

Figure 6.7 Graphe de la puissance consommée en fonction du temps.

On peut remarquer à la Figure 6.7 que la consommation de puissance augmente avec le nombre de Bingham. Ce phénomène est dû à la présence de zones "solides" dont la taille croît avec la valeur du seuil de contrainte. Plus la taille de ces zones solides est importante, plus la viscosité moyenne du milieu est grande et, par conséquent, plus la puissance nécessaire pour malaxer est grande. Pour de faibles valeurs du nombre de Bingham, la puissance varie très peu (15% par rapport à la moyenne) au cours du temps. On remarque toutefois que les fluctuations s'accentuent au fur et à mesure que le nombre de Bingham augmente. Nous croyons que ce phénomène s'explique par un effet de plus en plus marqué de la position des pales sur les

structures d'écoulement. Plus le nombre de Bingham est grand, plus la viscosité apparente est sensible aux variations de cisaillement.

Les corrélations qui suivent font intervenir la puissance consommée. Elle est égale à la moyenne des valeurs obtenues au cours d'un tour de carrousel.

Nous présentons à la Figure 6.8 la variation de N_p en fonction de Re_g pour différentes valeurs de Bi. Ce résultat est conforme à l'équation (6.15); en régime laminaire, les courbes de puissance sont des droites parallèles de pente égale à -1.

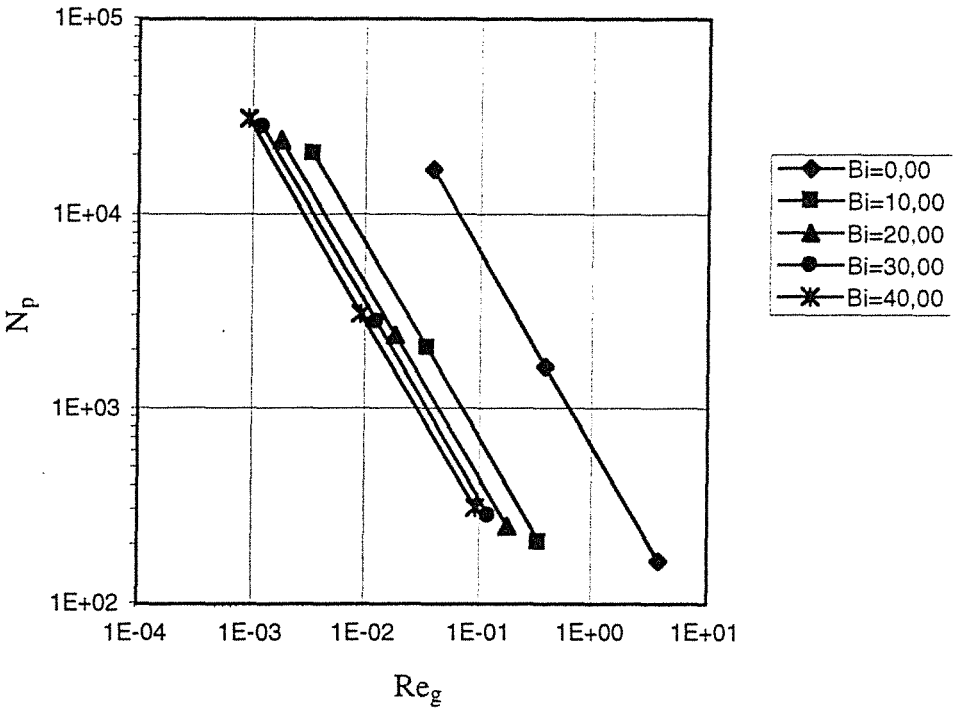

Figure 6.8 Graphe de N_p en fonction de Re_g.

Comme à la section 6.2.1.2, on tire de l'équation 6.15 et de la figure précédente que le logarithme de $K_p(Bi)$ diminue lorsque Bi augmente. Le graphe de $K_p(Bi)$ en fonction de Bi confirme ce fait (Figure 6.9).

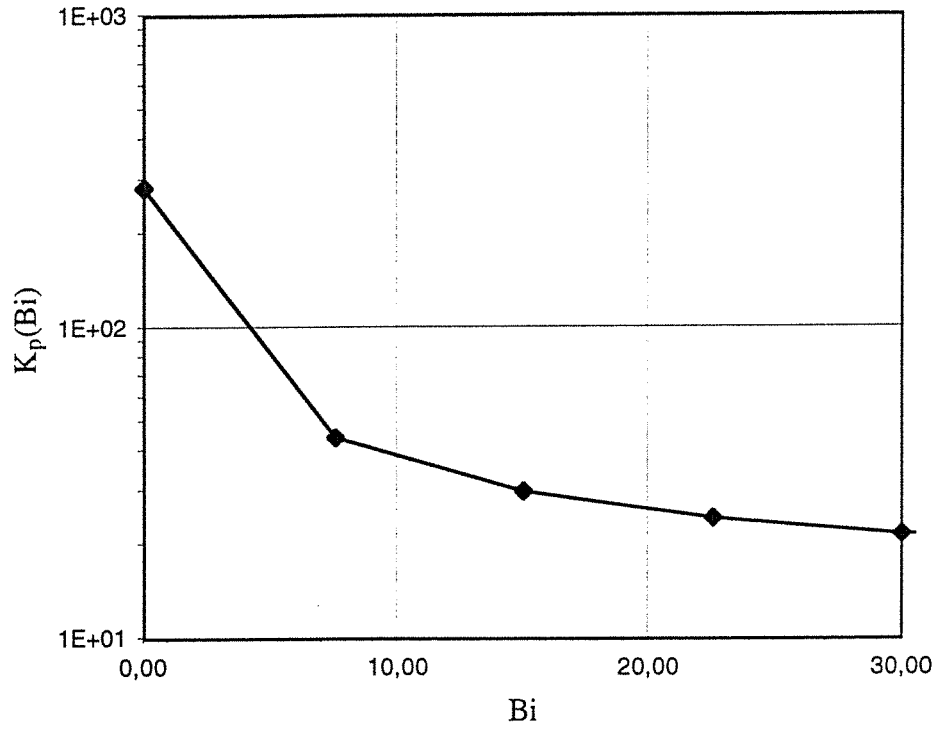

Figure 6.9 Graphe de $K_p(Bi)$ en fonction de Bi.

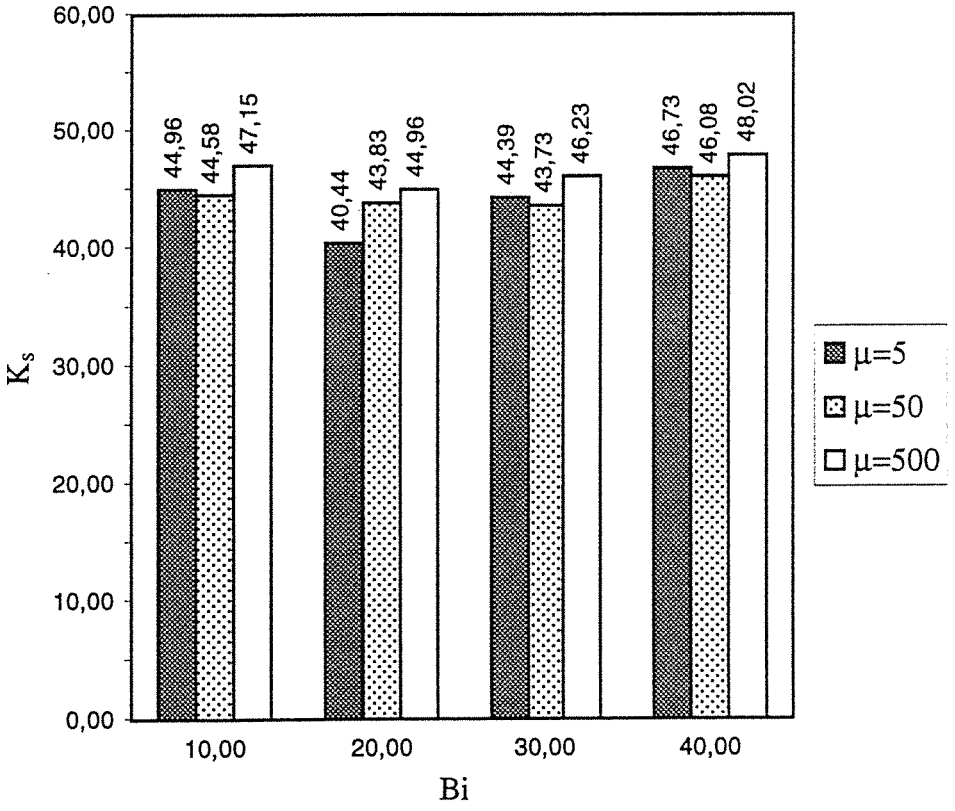

Figure 6.10 Histogramme de K_s en fonction de Bi.

Comme dans le cas de l'ancre, il est possible de calculer K_s en utilisant les équations (1.9), (6.9), (6.13) et (6.15). Nous présentons à la Figure 6.10 un histogramme de K_s en fonction de Bi. On voit que, pour $Bi \in [0,40]$, la valeur de K_s varie légèrement autour de 45, soit environ 2 fois la valeur obtenue pour l'ancre (~22).

En utilisant la relation (6.1), on obtient une courbe généralisée mettant en relation le nombre de puissance N_p et le nombre de Reynolds du procédé (Figure 6.11):

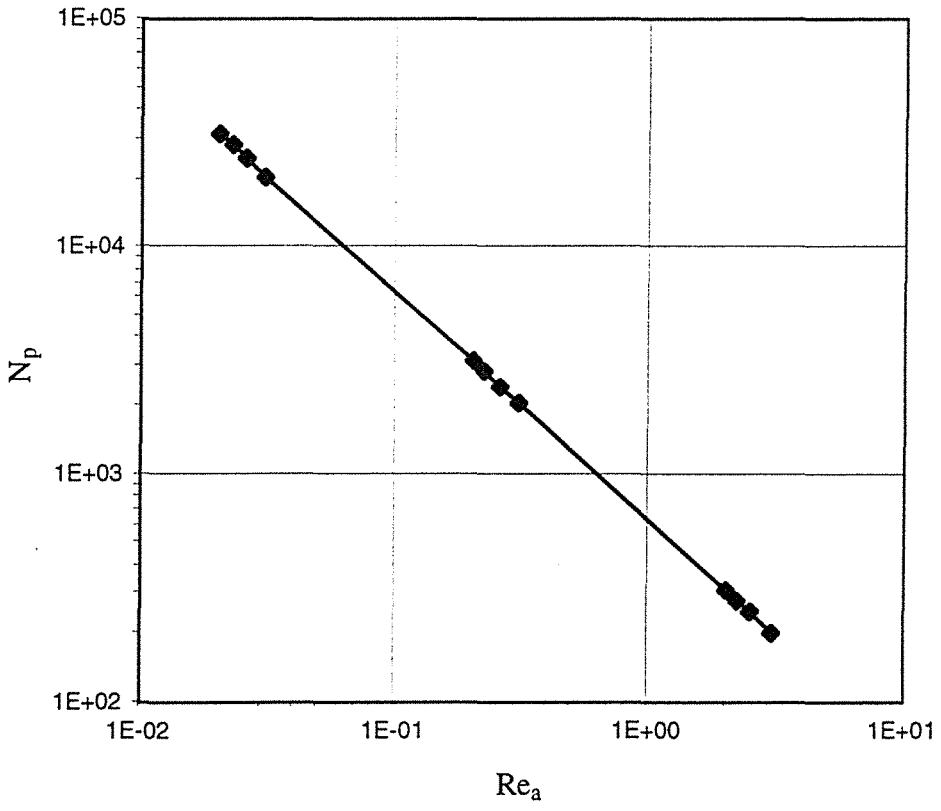

Figure 6.11 Courbe généralisée pour la puissance consommée.

De plus, comme K_s ne varie que très peu, l'équation (6.8) implique que N_p est proportionnel à Bi. Cette propriété est illustrée à la Figure 6.12.

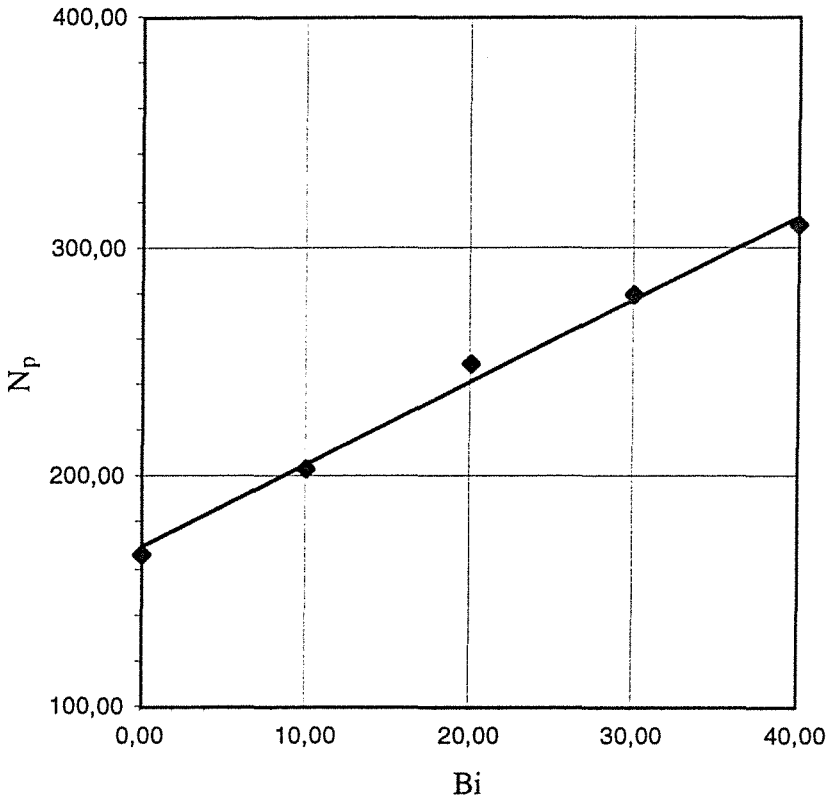

Figure 6.12 Graphe de N_p en fonction de Bi.

Les nombres adimensionnels introduits dans ce chapitre dépendent de la vitesse caractéristique N et du diamètre caractéristique D. Dans le cas du malaxeur, nous avons choisi le diamètre du réservoir et la vitesse du carrousel comme paramètres caractéristiques. Un autre choix nous donnerait des nombres adimensionnels différents.

Soit N^* et D^* d'autres paramètres caractéristiques. Il découle des identités (1.9) et (1.12) que la relation entre les nouveaux nombres adimensionnels N_p^*, K_p^* et K_s^* et ceux correspondant à N et D est donnée par:

$$K_p^* = K_p\left[\frac{N}{N^*}\right]^2\left[\frac{D}{D^*}\right]^3, \tag{6.18}$$

$$N_p^* = N_p\left[\frac{N}{N^*}\right]^3\left[\frac{D}{D^*}\right]^5, \tag{6.19}$$

$$K_s^* = K_s\left[\frac{N}{N^*}\right]. \tag{6.20}$$

$K_p^*(Bi)$ ne peut être obtenu directement de $K_p(Bi)$. Il peut toutefois être calculé à partir des expressions (6.15), (6.18) et (6.20).

À titre d'exemple, supposons que $D = D^*$ et que la vitesse caractéristique est celle de la pale évidée, soit $N^* = 4N = 60$ tours/minute. On obtient alors: $K_p^* = K_p / 16$, $N_p^* = N_p / 64$ et $K_s^* = K_s / 4 \approx 11$. Bien sûr, la valeur prédite du cisaillement de procédé ne dépend pas du choix des paramètres caractéristiques. En effet, nous avons:

$$\dot{\gamma}_a = K_s^* N^* = K_s\left[\frac{N}{N^*}\right]N^* = K_s N. \tag{6.21}$$

Il en est de même de la puissance consommée:

$$P = \rho N^{*3} D^{*5} N_p^* = \rho N^{*3} D^{*5} N_p\left[\frac{N}{N^*}\right]^3\left[\frac{D}{D^*}\right]^5 = \rho N^3 D^5 N_p. \tag{6.22}$$

CHAPITRE 7
CONCLUSION

Le but de ce travail consistait à mettre au point une méthode numérique efficace pour la modélisation tridimensionnelle du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides visqueux rhéologiquement complexes.

L'algorithme proposé, appelé "méthode des éléments finis virtuels" appartient à la classe des méthodes de domaine fictif. Il consiste à prendre en compte les parties mobiles d'une géométrie au moyen de techniques d'optimisation avec contraintes. Plus précisément, la surface des parties mobiles est discrétisée au moyen de points de contrôle sur lesquels des contraintes cinématiques sont imposées. Ces contraintes sont intégrées aux équations d'échange à l'aide d'une méthode de lagrangien augmenté.

La méthode des éléments finis virtuels peut être vue comme une variante de la méthode du domaine fictif proposée par Glowinski (1994a et 1994b). Elle est toutefois plus simple à implanter en raison de l'absence d'intégrales de surface dans la formulation variationnelle sous-jacente. Par contre, elle est moins précise et la question du nombre maximal de points de contrôle par éléments reste encore à éclaircir. Il serait intéressant, dans le cadre de travaux futurs, de comparer les résultats obtenus dans cette thèse à ceux que l'on obtiendrait avec la méthode du domaine fictif.

Dans la méthode des éléments finis virtuels, la vitesse et la pression sont calculées à l'aide de l'algorithme d'Uzawa incomplet (Robichaud et coll. 1990). L'utilisation combinée d'un lagrangien augmenté et d'un algorithme d'Uzawa standard permet la mise à jour des multiplicateurs de Lagrange utilisés pour forcer les contraintes cinématiques. La vitesse de convergence de cet algorithme est augmentée au moyen d'un terme de pénalisation. Si celui-ci est trop petit, la convergence est lente. S'il est trop grand, la vitesse de convergence de l'algorithme d'Uzawa incomplet diminue de façon importante. Dans la pratique, nous avons constaté qu'un paramètre de pénalisation de l'ordre de 10^1-10^2 constituait un choix optimal. Il serait avantageux de développer un algorithme de type Uzawa gradient conjugué préconditionné pour la mise à jour de ces multiplicateurs de Lagrange et de chercher une matrice de préconditionnement efficace comme solution de rechange à l'emploi d'un terme de pénalisation.

Dans ce travail, la méthode des éléments finis virtuels a été utilisée pour simuler l'écoulement non isotherme d'un fluide rhéofluidifiant dans un malaxeur bipale à mouvement planétaire. Seul le réservoir du malaxeur a été maillé; le mobile d'agitation a été pris en compte au moyen de points de contrôle sur lesquels des contraintes cinématiques ont été imposées.

La simulation a permis de mettre en évidence la complexité du champ de vitesse dans la région des pales ainsi que l'amortissement rapide du mouvement du fluide après le passage du mobile. On a constaté, en suivant la trajectoire de particules dans le malaxeur, que la dispersion induite par les pales était efficace mais que le niveau de pompage vertical était plutôt faible. Des études quantitatives pourraient être menées afin d'en connaître plus sur l'efficacité de ce type de système. Il serait intéressant, par exemple, de

calculer les temps de circulation et de mélange dans ce type de malaxeur et de les comparer à ceux obtenus avec des mobiles plus simples (ruban hélicoïdal, ancre).

La simulation a également permis de prédire l'évolution du champ de température au cours du temps. Nous avons pu montrer que la mise en température était d'environ 100 secondes et que le milieu devenait thermiquement homogène sauf dans les zones cisaillées. Nous pensons que la mise en température prédite pour ce type de fluide est trop rapide. Ce phénomène est vraisemblablement dû à l'utilisation de conditions de Dirichlet à la paroi. Une simulation plus réaliste pourrait être effectuée avec une condition de Cauchy faisant intervenir un coefficient de transfert de chaleur. D'autre part, les calculs prédisent un auto-échauffement d'une dizaine de degrés dans le malaxeur. Compte tenu du fait que la viscosité du fluide a été considérée comme indépendante de la température, nous croyons que ce niveau d'échauffement est surestimé de quelques degrés. Un calcul plus précis pourrait être fait si on connaissait l'énergie d'activation du fluide. Finalement, la solution thermique a été stabilisée à l'aide d'une technique d'upwinding. Il serait important de faire d'autres simulations, avec des maillages plus fins, pour juger de la quantité de diffusion artificielle dans la solution obtenue.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Agassant J. F., P. Avenas et J. P. H. Sargent, La mise en forme des matières plastiques, Tec & Doc - Lavoisier, Paris, 1986.

Axelsson O. et V. A. Barker, Finite Element Solution of Boundary Value Problems, Academic Press, 1984.

Babuska I., The Finite Element Method With Lagrangian Multipliers, Num. Math., 20, 179-192, 1973.

Bakker A., R. Laroche, M. H. Wang et R. Calabrese, Sliding Mesh Simulation of the Flow Pattern of Axial Pumping Impellers at Low and Intermediate Reynolds Numbers, 15th North American Mixing Conference, Banff, 1995.

Barrett R., M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine et H. Van der Vorst, Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM, Philadelphia, 1994.

Beazley K. M., Industrial Aqueous Solutions, Wiley, 1980.

Bertrand F., M. Gadbois et P. A. Tanguy, Tetrahedral Elements for Fluid Flow Problems, Int. J. Num. Meth. Eng., 33, 1251-1267, 1992.

Bertrand F., F. Thibault, P. A. Tanguy et L. Choplin, Three-Dimensional Modelling of the Mixing of Highly Viscous Polymers With Intermeshing Impellers, AIChE Symposium Series, Process Mixing - Chemical and Biochemical Applications, 299, 106-116, 1994.

Bertrand F. et P. A. Tanguy, Towards an Efficient Iterative Method for Solving the Navier-Stokes Equations Using the 3D Crouzeix-Raviart Element, en préparation.

Bird R. B., G. C. Dai et B. J. Yarusso, Reviews in Chem. Eng, 1, 1, 1983.

Bird R. B., W. E. Stewart et I. N. Lightfoot, Transport Phenomena, John Wiley, 1960.

Brezzi F., On the Existence, Uniqueness and Approximation of Saddle-Point Problems Arising from Lagrangian Multipliers, RAIRO Analyse Numérique, 8, 129-151, 1974.

Brezzi F. et M. Fortin, Mixed and Hybrid Finite Element Methods, Springer-Verlag, 1991.

Brito-De La Fuente E., Mixing of Rheological Complex Fluids With Helical Ribbon and Helical Screw Ribbon Impellers, thèse de Ph. D., Université Laval, Québec, 1992.

Brodkey R. S., The Phenomena of Fluid Motions, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1967.

Burden R. L. et J. D. Faires, Numerical Analysis, PWS-KENT Publishing Company, 1989.

Bussoletti J. E., F. T. Johnson, S. S. Samanth, D. P. Young et R. H. Burkhart, EM-TRANAIR: Steps Toward Solution of General 3D Maxwell's Equations, Computer Methods in Applied Sciences and Engineering, R. Glowinski éd., Nova Science, New York, 49-72, 1991.

Buzbee B. L., F. W. Dorr, J. A. George et G. H. Golub, The Direct Solution of the Discrete Poisson Equation on Irregular Regions, SIAM J. Num. Anal., 8, 722-736, 1971.

Cahouet J. et J. P. Chabard, Some Fast 3D Finite Element Solvers for the Generalized Stokes Problem, Int. J. Num. Meth. Fluids, 8, 869-895, 1988.

Ciarlet P. G., The Finite Element Method for Elliptic Problems, North-Holland, Amsterdam, 1978.

Coulson J. M., J. F. Richardson, J. R. Backhurst et J. H. Harker, Chemical Engineering, Volume 1, 4th edition, Pergamon Press, New York, 1993.

Crouzeix M. et P.A. Raviart, Conforming and Non-Conforming Finite Element Methods for Solving the Stationary Stokes Equations, RAIRO Analyse Numérique, 7, 33-76, 1973.

Demirdzic I. et M. Peric, Finite Volume Method for the Prediction of Fluid Flow in Arbitrarily Shaped Domains With Moving Boundaries, Int. J. Num. Meth. Fluids, 10, 771-790, 1990.

Dhatt G. et G. Touzot, Une présentation de la méthode des éléments finis, Les Presses de l'Université Laval, Québec, 1981.

Edwards M. F., J. C. Godfrey et M. M. Kashani, Power Requirement for the Mixing of Thixotropic Liquids, Journal of Non-Newt. Fluid Mech., 1, 309-322, 1976.

Fortin M. et R. Glowinski, Méthodes de lagrangien augmenté, Dunod, Paris, 1982.

Glowinski R., Q. V. Dinh et J. Périaux, Domain Decomposition Methods for Nonlinear Problems in Fluid Dynamics, Comm. in Appl. Mech. Eng., 40, 27-109, 1983.

Glowinski R., T.-W. Pan et J. Périaux, A Fictitious Domain Method for External Incompressible Viscous Flow Problems Modeled by Navier-Stokes Equations, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 112, 133-148, 1994a.

Glowinski R., T.-W. Pan et J. Périaux, A Fictitious Domain Method for Dirichlet Problem and Applications, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 111, 283-303, 1994b.

Gray J.B., Chem. Eng. Progr., 59, 55-59, 1963.

Grygiel J. M. et P. A. Tanguy, Finite Element Solution for Advection-Dominated Thermal Flows, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 93, 277-289, 1991.

Hall K. R. et J. C. Godfrey, The Mixing Rates of Highly Viscous Newtonian and Non-Newtonian Fluids in a Laboratory Sigma-Blade Mixer, Trans. Instn. Chem. Engrs., 46, 205-213, 1968.

Hiraoka S., I. Yamada, et K. Mizoguchi, Numerical Analysis of Flow Behavior of Highly Viscous Non-Newtonian Fluid in Agitated Vessel With Paddle Impeller, J. Chem. Eng. Jpn., 11, 487-493, 1978.

Hiraoka S., I. Yamada et K. Mizoguchi, Two-Dimensional Model Analysis of Flow Behavior of Highly Viscous Non-Newtonian Fluid in Agitated Vessel With Paddle Impeller, J. Chem. Eng. Jpn., 12, 56-62, 1979.

Holland F. A. et F. S. Chapman, Liquid Mixing and Processing in Strirred Tanks, Reinhold Pub. Co., New York, 1966.

Hoogendorn C.J. et A.P. Den Hartog, Model Studies on Mixers in the Viscous Flow Region, Chem. Eng. Sci., 22, 1689-1698, 1967.

Hughes T. J. R., A Simple Scheme for Developing Upwind Finite Elements, Int. J. Num. Meth. Eng., 12, 1359-1365, 1978.

Hutchings B. J., B. R. Patel et R. J. Weetman, Computation Prediction of Flow Fields in Mixing Tanks With Experimental Verification, ASME Annual Winter Meeting, San Francisco, 1989.

Jaworski Z., M. L. Wyszyaski, R. B. Badham, I. P. T. Moore, A. W. Nienow, N. G. Ozcan-Taskin et J. McKemmie, Sliding Mesh CFD Flow Simulations for Stirred Tanks, 15th Biennial North American Mixing Conference, Banff, 1995.

Jensen W. P. et R. T. Talton, Design of Mixers for Viscous Materials, AIChE-IChemE Symposium Series, 10, 82-88, 1965.

Johnson C., Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method, Cambridge University Press, 1992.

Johnson R. T., AIChE Annual Meeting, 1965.

Kaminoyama M., K. Akabane, K. Arai , F. Saito et M. Kamiwano, Numerical Analysis of Flow Behavior of Bingham Fluid in an Anchor Impeller Mixer, Proc. of the CIC Conference, Halifax (Canada), 1990.

Käppel M., Development and Application of a Method for Measuring the Mixture Quality of Miscible Liquids. III. Applications of the New Method for Highly Viscous Newtonian Liquids, Int. Chem. Eng., 19, 571-590, 1979.

Kresta S. M. et P. E. Wood, Prediction of the Three-Dimensional Turbulent Flow in Stirred Tank, AIChE J., 37, 448, 1991.

Kuriyama M., K. Arai et S. Saito, Numerical Solution for the Flow of Highly Viscous Fluid in Agitated Vessel with Anchor Impeller, AIChE J., 28, 385-391, 1982.

Lascaux P. et R. Théodor, Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur, Tome II, Masson, Paris, 1986.

Leray J., Essai sur les mouvements plans d'un liquide visqueux que limitent des parois, J. Math. Pures Appl., 13, 331, 1934.

Leveque R. J. et Z. Li, The Immersed Interface Method for Elliptic Equations With Discontinuous Coefficients and Singular Sources, SIAM J. Num. Anal., 31, 1019-1044, 1994.

Metzner A. B. et R. E. Otto, Agitation of Non-Newtonian Fluids, AIChE J., 3, 3-10, 1957.

Midoux N., Mécanique et rhéologie des fluides en génie chimique, Tec & Doc - Lavoisier, Paris, 1993.

Murakami Y., T. Hirose, T. Yamato, H. Fujiwara et M. Ohshima, Improvement in Mixing of High Viscosity Liquid by Additional Up-And-Down Motion of a Rotating Impeller, J. Chem. Eng. Jpn., 13, 318-323, 1980.

Nagata S., T. Yokoyama et M. Yanagimoto, Chem. Eng. Jpn, 21, 278, 1957.

Nagata S., M. Nishikawa, T. Katsube et K. Takaish, Mixing of Highly Viscous Non-Newtonian Liquids, Int. Chem. Eng., 12, 175-182, 1972.

Nagata S., Mixing Principles and Applications, Wiley, 1975.

Nienow A. W. et T. P. Elson, Aspects of Mixing in Rheologically Complex Fluids, Chem. Eng. Res. Des., 66, 5-15, 1988.

Ohta M., M. Kuriyama, K. Arai et S. Saito, A Two-Dimensional Model for the Secondary Flow in an Agitated Vessel With Anchor Impeller, J. Chem. Eng. Jpn., 18, 81-84, 1985.

Oldshue J., Fluid Mixing Technology, McGraw-Hill, 1983.

Pelletier D. H. et J. A. Schetz, Finite Element Navier-Stokes Calculation of Three-Dimensional Turbulent Flow Near a Propeller, AIAA Journal, 24, 1409-1416, 1986.

Pelletier D., A. Fortin et R. Camarero, Are Finite Element Solutions of Incompressible Flows Really Incompressible (or How Simple Flows can Cause Headaches !), Int. J. Num. Meth. Fluids, 9, 99-112, 1989.

Perng C. Y. et J. Murthy, A Moving Mesh Technique for the Simulation of Flow in Mixing Tanks, AIChE Annual Meeting, Miami Beach, 1992.

Peskin C. S. et D. M. McQueen, A Three-Dimensional Computational Method for Blood Flow in the Heart: I. Immersed Elastic Fibers in a Viscous Incompressible Fluid, J. Comp. Phys., 81, 372-405, 1989.

Peters D. C. et J. M. Smith, Fluid Flow in the Region of Anchor Agitator Blades, Trans. Instn. Chem. Engrs., 45, 360-366, 1967.

Rai M. M., Navier-Stokes Simulations of Rotor-Stator Interaction Using Patched and Overlaid Grids, AIAA-85-1519, Reno, 1985.

Rieger F. et V. Novak, Power Consumption of Agitators in Highly Viscous Non-Newtonian Liquids, Trans. Instn. Chem. Engrs., 51, 105-111, 1973.

Robichaud M. P. et P. A. Tanguy, Finite Element Solution of Three-Dimensional Incompressible Fluid Flow Problems by a Preconditioned Conjugate Residual Method, Int. J. Num. Meth. Eng., 24, 447-457, 1987.

Robichaud M. P., P. A. Tanguy et M. Fortin, An Iterative Implementation of the Uzawa Algorithm for 3D Fluid Flow Problems, Int. J. Num. Fluids, 10, 429-442, 1990.

Roper J. A. et J. Attal, Evaluation of High-Speed Runnability Using Pilot Coater Data, Rheological Measurements and Computer Modeling, TAPPI Coating Conference Proceedings, TAPPI Press, Atlanta, 107-113, 1993.

Shearer C. J., Mixing of Highly Viscous Liquids : Flow Geometries for Streamline Subdivision and Redistribution, Chem. Eng. Sci., 28, 1091-1098, 1973.

Sheehy P., P.A. Tanguy et D. Blouin, Finite Element Model for Complex Profile Calibration, Polym. Eng. Sci., 34, 650-655, 1994.

Skelland A. H. P., Mixing and Agitation of Non-Newtonian Fluids, dans Handbook of Fluids in Motion, N. P. Cheremisinoff et R. Gupta (éd.), Ann Arbor Science, New York, 179-209, 1983.

Smith J. M., Industrial Needs for Mixing Research, Trans. I. Chem. E., 68, Part A, 3-6, 1990.

Tanguy P. A., M. Fortin et L. Choplin, Finite Element Simulation of Dip Coating, II: Non-Newtonian Fluids, Int. J. Num. Meth. Fluids, 4, 459-475, 1984.

Tanguy P. A., L. Choplin, R. Lacroix, F. Bertrand, E. Brito-De La Fuente et J. C. Leuliet, Agitation de fluides visqueux rhéologiquement complexes avec des agitateurs de proximité, 3ème congrès français de génie des procédés, Compiègne, France, 1991.

Tanguy P. A., R. Lacroix, F. Bertrand, L. Choplin et E. Brito-De La Fuente, Mixing of Rheologically Complex Fluids With an Helical Ribbon Screw Impeller: Experimental and 3D Numerical Results, 7th European Conference on Mixing, Brugges, Belgique, 1991.

Tanguy P. A., R. Lacroix, F. Bertrand, L. Choplin et E. Brito-De La Fuente, Finite Element Analysis of Viscous Mixing With an HRS Impeller, AIChE J., 38, 939-944, 1992.

Tanguy P. A., F. Bertrand et E. Brito-De La Fuente, Mixing of Viscoplastic Fluids With Anchor Impellers, Proc. of the 8th Europ. Conf. on Mixing, Cambridge, UK, 1994.

Tanguy P. A., F. Bertrand et E. Brito-De La Fuente, On the Determination of the Process Viscosity in Stirred Tanks, à paraître dans J. Chem. Eng. Jpn..

Tatterson G. B., Fluid Mixing and Gas Dispersion in Agitated Tanks, McGraw-Hill, 1991.

Thompson J. F., F. C. Thames et C. W. Mastin, Automatic Numerical Generation of Body-Fitted Curvilinear Coordinate System for Field Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies, J. Comp. Phys., 15, 299-319, 1974.

Thompson J. F., Z. U. A. Warsi et C. W. Mastin, Numerical Grid Generation, Formulation and Applications, North-Holland, 1985.

Tritton D. J., Physical Fluid Dynamics, Oxford, 1988.

Ulbrecht J. J. et P. Carreau, Mixing of Viscous Non-Newtonian Liquids, dans Mixing of Liquids by Mechanical Agitation, J. J. Ulbrecht et G. R. Patterson (éd.), Gordon and Breach Science Pub, New York, 1, 93-137, 1985.

Young D. P., R. G. Melvin, M. B. Bieterman, F. T. Johnson, S. S. Samanth et J. E. Bussoletti, A Locally Refined Finite Rectangular Grid Finite Element Method. Application to Computational Physics., J. Comp. Phys., 92, 1-66, 1991.

Zienkiewicz O. C., The Finite Element Method, McGraw-Hill, New York, 1977.

INSTITUT NATIONAL
POLYTECHNIQUE
DE LORRAINE

AUTORISATION DE SOUTENANCE DE THESE DU DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

o0o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :
Monsieur BERTRAND Joël, Directeur de Recherche CNRS, ENSIGC Toulouse,
Monsieur DEMAY Yves, Professeur, Institut Non Linéaire Sophia Antipolis Valbonne.

Le Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, autorise :

NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 5 4 5 0 1
VANDŒUVRE CEDEX

Monsieur BERTRAND François

à soutenir devant l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE, une thèse intitulée :
"Modélisation 3D du procédé de malaxage à mouvement planétaire de fluides visqueux rhéologiquement complexes".

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

Spécialité : **"GENIE DES PROCEDES"**

Service Commun de la Documentation
INPL
Nancy-Brabois

Fait à Vandoeuvre le, **21 Novembre 1995**
Le Président de l'I.N.P.L.,
M. LUCIUS

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE NANCY

TEL. 33/83.59.59.59
FAX. 33/83.59.59.55