Mélange chaotique thermique de fluides non newtoniens

Kamal EL OMARI* et Yves LE GUER

Laboratoire de Thermique, Énergétique et Procédés (LaTEP), Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA), Av. de l'Université, 64000 Pau - France *(auteur correspondant : kamal.elomari@univ-pau.fr)

Résumé - Dans ce travail nous présentons une étude numérique du mélange et du transfert thermique au sein de fluides très visqueux au comportement rhéologique non newtonien soumis à un régime d'advection chaotique. Le mélangeur est constitué de deux barreaux cylindriques maintenus verticalement dans une cuve cylindrique. Différents indicateurs statistiques ont été utilisés pour caractériser les évolutions temporelles de la valeur moyenne de la température et la déviation standard associée aux variations de celle-ci qui caractérisent l'état d'homogénéisation dans la section du mélangeur. Nous montrons que pour un écoulement non chaotique, l'homogénéisation en température est plus efficace pour un fluide rhéofluidifiant alors que dans le cas d'un fluide rhéoépaississant, le protocole d'agitation alterné (écoulement chaotique) donne un meilleur mélange thermique (extraction de chaleur pariétale et homogénéisation).

Nomenclature

		_	
c_p	chaleur spécifique $(J.kg^{-1}.K^{-1})$	\overline{D}	tenseur taux de déformation
\dot{k}	indice de consistance $(Pa.s^n)$	n	indice de comportement (adimensionnel)
\vec{n}	vecteur normal orienté	p	pression (Pa)
R_3	rayon de la cuve (m)	R_1, R_2	rayons des barreaux (m)
rpm	révolutions par minute	t	temps (s)
T	température (K)	U	vitesse tangentielle $(m.s^{-1})$
\vec{U}	champ de vitesse $(m.s^{-1})$	Pe	nombre de Péclet
Re	nombre de Reynolds	Re_{PL}	nombre de Reynolds généralisé
T^*	température adimensionnée	ε	excentricité (m)
ρ	masse volumique ($kg.m^{-3}$)	Ω	vitesse angulaire $(rd.s^{-1})$
σ	déviation standard	au	période de modulation (s)
=	tanggun dag contraintag vigguaugas		

 $\overline{\tau}$ tenseur des contraintes visqueuses

1 Introduction

Des procédés de mélange sont fréquemment rencontrés dans différents domaines industriels pour lesquels on cherche à la fois à améliorer les échanges de chaleur, de masse et de quantité de mouvement. Le mélange chaotique est particulièrement intéressant lorsque des fluides très visqueux et/ou fragiles sont concernés. Dans ce cas, des écoulements stationnaires classiques (en 2D) ne permettent pas d'obtenir un bon mélange et par conséquent le transfert de chaleur pariétal sera inefficace. Cette situation se rencontre par exemple pour les polymères fondus ou assemblages de polymères, tous au comportement rhéologique non newtonien. Pour eux, les forts cisaillements peuvent induire une dégradation des longues chaînes polymèriques. D'autre part un mauvais mélange peut induire des structures inhomogènes lors de l'assemblage de polymères. Beaucoup de travaux trouvés dans la littérature concernent plus la relation entre mélange chaotique et transfert de chaleur que celle entre mélange chaotique et fluides non-newtoniens. A notre connaissance, à l'heure actuelle, en dépit de l'intérêt industriel manifeste, un seul travail scientifique considérant le couplage entre transfert de chaleur et mélange chaotique pour des fluides rhéologiquement complexes a été publié [1]. L'objectif du travail présenté ici est d'analyser les effets combinés du mélange chaotique et du transfert de chaleur dans le cas de fluides rhéoépaississant et rhéofluidifiant et de comparer les résultats à ceux obtenus pour un fluide newtonien.

2 Formulation du problème

2.1 Géométrie du mélangeur et protocoles d'agitation

Un schéma du mélangeur est présenté sur la Figure 1. Il est composé de deux barreaux cylindriques de rayons identiques qui sont maintenus verticalement à l'intérieur d'une cuve cylindrique. La cuve et les barreaux sont chauffés et peuvent tourner autour de leur axe de révolution avec des vitesses de rotation continues ou non. Les sens de rotation peuvent être différents. Les rayons des barreaux et de la cuve valent respectivement $R_1 = R_2 = 10 mm$ et $R_3 = 50 mm$. L'excentricité des barreaux est fixée à $\varepsilon = 25 mm$.



Figure 1 : (a) Schéma du mélangeur à deux barreaux. (b) Modulations temporelles des vitesses angulaires des barreaux et de la cuve pour les cas d'agitation continus et non continus. Ici la période de modulation τ vaut 30s.

Les écoulements chaotiques sont produits en faisant varier dans le temps la vitesse angulaire des barreaux et de la cuve. Parmi les trois configurations possibles conduisant à des topologies d'écoulement différentes, nous avons choisi la configuration en co-rotation pour les barreaux et la cuve. Nous avons montré dans un travail précédent [2] que cette configuration conduit, pour un fluide newtonien, à des écoulements globalement chaotiques sans l'existence de zones elliptiques de KAM. Pour les écoulements chaotiques, deux types de modulation ont été choisis (cf. Figure 1 (b)) : continue (sinus carré) et non continue (les barreaux sont à l'arrêt toutes les demi-périodes alors que la cuve tourne et vice-versa pour la demi-période suivante) qui sont donnés par les équations (1) suivantes :

$$\begin{aligned}
& \text{Modulations non-continues}: \\
& \Omega_{1,2} &= 30 - 60 \sin^2(\frac{\pi t}{T}) & \text{si} \quad \Omega_{1,2} < 0 \quad \Rightarrow \Omega_{1,2} = 0 \\
& \Omega_3 &= 6 - 12 \sin^2(\frac{\pi t}{T} + \frac{\pi}{2}) & \text{si} \quad \Omega_3 < 0 \quad \Rightarrow \Omega_3 = 0 \\
& \text{Modulations continues}: \\
& \Omega_{1,2} &= 30 - 15 \sin^2(\frac{\pi t}{T}) \\
& \Omega_3 &= 6 - 3 \sin^2(\frac{\pi t}{T} + \frac{\pi}{2})
\end{aligned}$$
(1)

La vitesse angulaire maximale des parois est fixée à : $\Omega_1 = \Omega_2 = 30$ rpm pour les barreaux et à $\Omega_3 = 6$ rpm pour la cuve. Les vitesses tangentielles sont alors identiques et valent $U = 31, 41 \text{ mm.s}^{-1}$. Dans les modélisations, les effets inertiels sont pris en compte car l'hypothèse d'écoulement quasi-stationnaire n'est pas satisfaite lorsque les vitesses pariétales sont modulées comme indiqué ci-dessus.

2.2 Modèle rhéologique

Afin de modéliser l'écoulement des fluides non newtoniens, il est nécessaire de relier le tenseur des contraintes au tenseur des taux de déformation. Pour des fluides newtoniens généralisés, le modèle linéaire $\overline{\tau} = 2 \eta \overline{D}$ établi pour des fluides purement visqueux est étendu en remplaçant la constante représentant la viscosité par une fonction qui dépend du taux de cisaillement. Pour les fluides newtoniens la relation entre les deux tenseurs est simplement linéaire, et le coefficient de proportionalité est défini par la viscosité dynamique du fluide η . Le caractère purement visqueux non newtonien du fluide étudié est représenté par un modèle en loi de puissance du type Ostwald de Waele à la fois pour les cas rhéofluidifiant et rhéoépaississant.

La relation non linéaire entre la viscosité apparente η et le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ est donnée par la loi constitutive :

$$\eta\left(\dot{\gamma}\right) = k\left(\dot{\gamma}\right)^{n-1} \tag{2}$$

avec les constantes empiriques k pour l'indice de consistance et n pour l'indice de comportement. Le tenseur des contraintes visqueuses est alors exprimé par :

$$\overline{\overline{\tau}} = 2\eta \left(\dot{\gamma} \right) \overline{\overline{D}} \quad \text{où} \quad \dot{\gamma} = \sqrt{2 tr \left(\overline{\overline{D}}^2 \right)} \quad \text{et} \quad \overline{\overline{D}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\nabla} V + (\overline{\nabla} V)^T \right)$$
(3)

Nous considérerons trois indices de comportement, n = 0, 5, n = 1 et n = 1, 5, respectivement associés aux fluides rhéofluidifiant, newtonien et rhéoépaississant. L'indice de consistance est lui adapté pour chaque cas non newtonien traité pour obtenir le même nombre de Reynolds généralisé que celui obtenu pour l'écoulement du fluide newtonien (i.e. $Re = \frac{\rho U \cdot 2 \cdot (R_3 - R_1)}{\mu} = 1$

1,66). Ce nombre de Reynolds généralisé Re_{PL} peut être écrit pour le modèle de loi de puissance comme :

$$Re_{PL} = \frac{\rho \cdot (2(R_3 - R_1))^n}{k \cdot U^{n-2}}$$
(4)

Le fluide newtonien considéré a les propriétés thermophysiques listées dans le Tableau 1.

Viscosité dynamique (μ)	1,5 <i>Pa.s</i>
Masse volumique (ρ)	990 $kg.m^{-3}$
Conductivité thermique (λ)	$0,15 W.m^{-1}K^{-1}$
Chaleur spécifique (c_p)	$1000 W.kg^{-1}K^{-1}$
Nombre de Péclet (Pe)	16584

Tableau 1 : Propriétés du fluide newtonien.

2.3 Condition thermique imposée à la paroi

Une condition de type Dirichlet est imposée aux parois en rotation. Elles sont maintenues à une température chaude T_{hot} . Au départ, la température initiale du fluide froid est T_{cold} . On définit la température adimensionnelle comme :

$$T^* = \frac{T - T_{cold}}{T_{hot} - T_{cold}} \tag{5}$$

Alors $T_{cold}^* = 0$ et $T_{hot}^* = 1$, et le maximum de différence de température entre les parois et le fluide sera toujours 1. Les parois chauffées jouent le rôle d'une source de chaleur qui est dissipée de façon continue au sein du fluide. Le flux pariétal changera donc dans le temps et le long des parois et dépendra des conditions locales d'écoulement.

3 Indicateurs de mélange et énergétique

Afin de quantifier l'efficacité du processus de réchauffage des fluides newtonien et non newtoniens considérés, nous utilisons deux mesures : la valeur moyenne de la température adimensionnée T_m^* et sa déviation standard σ . Ces quantités sont définies comme (la sommation est effectuée pour toutes les cellules c du maillage de surface respective A_c) :

$$T_m^* = \frac{1}{\sum_c A_c} \left(\sum_c A_c T_c^* \right) \quad \text{et} \quad \sigma = \left[\frac{1}{\sum_c A_c} \sum_c \left(A_c (T_c^* - T_m^*)^2 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \tag{6}$$

L'évolution de la température moyenne peut être considérée comme un indicateur de l'énergie totale fournie au fluide lors du procédé de mélange [2, 3], alors que la déviation standard rend compte du niveau d'homogénéisation de la température dans le mélangeur. Un mélange efficace requiert des valeurs proches de 1 pour T^* et de 0 pour σ .

4 Modélisation numérique

Les équations de Navier-Stokes instationnaires, de continuité et de l'énergie sont considérées dans leur forme intégrale pour modéliser l'écoulement des fluides incompressibles :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho \, \vec{U} \, \mathrm{d}V + \int_{S} \rho \, \vec{U} \vec{U} \cdot \vec{n} \, \mathrm{d}S = \int_{V} -\vec{\nabla} p \, \mathrm{d}V + \int_{S} \bar{\vec{\tau}} \cdot \vec{n} \, \mathrm{d}S \tag{7}$$

$$\int_{S} \vec{U} \cdot \vec{n} \, \mathrm{d}S = 0 \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho c_{p} T \, \mathrm{d}V + \int_{S} \rho c_{p} T \vec{U} \cdot \vec{n} \, \mathrm{d}S = \int_{S} \lambda \vec{\nabla} T \cdot \vec{n} \, \mathrm{d}S \tag{9}$$

où $\overline{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses. L'intégration se fait sur un volume V délimité par une surface S orientée par le vecteur unitaire sortant \vec{n} . Les équations de conservation (7, 8 et 9) sont résolues au moyen du code Tamaris développé au Laboratoire. Il utilise une méthode de volumes finis non structurés appliquée à des maillages hybrides. Les valeurs des variables (\vec{U} , p et T) sont stockées au centre des cellules. Les cellules peuvent avoir des formes différentes. Pour plus de détails concernant les méthodes numériques employées ainsi que les validations du code aussi bien dans le cas de fluides newtoniens que non newtoniens on se référera à nos précédents travaux [2, 3, 4]. Une validation particulière en cavité entraînée pour les trois comportements rhéologiques du fluide décrits ci-dessus a été réalisée.

5 Résultats et discussion

Après une étude de sensibilité du résultat à la taille du maillage, un maillage comportant 10680 cellules a été choisi, des cellules régulières placées près des parois dans les zones de forts gradients amélioreront la résolution des calculs.

5.1 Motifs des écoulements



Figure 2 : Motifs des écoulements pour les trois comportements rhéologiques après 100 s : (gauche) fluide rhéofluidifiant, (milieu) fluide newtonien et (droite) fluide rhéoépaississant. (ligne haute) Champs de température et (ligne basse) lignes de courant. La période de modulation est $\tau = 30s$.

Sur la Figure 2 sont présentés les motifs des champs de température avec les lignes de courant correspondantes pour les trois comportements rhéologiques différents dans le cas d'un protocole d'agitation alterné. Nous observons pour chaque cas que, lorsque la paroi extérieure tourne, des lignes de courant fermées se développent sur une couche de fluide relativement épaisse. La rotation des barreaux provoque elle l'apparition de deux zones de recirculation centrales d'autant plus importantes que le fluide est visqueux. En général, à chaque période du protocole d'agitation, l'augmentation de la viscosité provoque l'émergence d'un long filet

fluide chaud qui se déplace de la paroi vers le centre du mélangeur (cf. aussi [2]). Le fluide rhéofluidifiant draine moins le fluide pariétal vers le centre ce qui explique la persistance de zones froides. Nous pouvons noter aussi sur cette figure que les champs de températures sont le résultat de la combinaison des étirements et repliements successifs de filets de fluide chaud associés à la diffusion thermique.

5.2 Évolutions temporelles des températures adimensionnelles

Pour les trois comportement rhéologiques, les évolutions temporelles de la valeur moyenne des températures adimensionnelles T_m^* et de sa déviation standard σ sont représentés Figure 3 pour les protocoles d'agitation : (a) non modulé, (b) modulé continu et (c) modulé non continu. La température fixe imposée aux parois joue le rôle d'une source pour l'évolution du scalaire, alors la température moyenne ne sera pas constante dans le temps mais évoluera asymptotiquement vers $T_m^* = 1$. Les comportements observés pour les fluides newtonien et rhéoépaississant sont exactement semblables pour les cas d'agitation non modulé et modulée continue avec une efficacité de mélange plus importante pour le fluide rhéofluidifiant (Figure 3(a) et (b)). Cette situation est inversée dans le cas de l'agitation modulée non continue pour laquelle le fluide rhéoépaississant donne une meilleure efficacité de mélange (Figure 3(c)). Pour une modulation non continue de la vitesse pariétale la décroissance exponentielle dans le temps de la déviation standard associée aux champs de température est toujours plus rapide que celle obtenue pour les deux autres cas d'agitation (Figure 3 (a) et (b)). Ce résultat sera confirmé par l'évolution des fonctions de distribution de probabilités des températures adimensionnées T_m^* (cf. paragraphe suivant).



Figure 3 : Pour les trois comportements rhéologiques, évolutions temporelles de la moyenne de la température et de sa déviation standard pour les protocoles d'agitation : (a) non modulé, (b) modulé continu et (c) non continu.

5.3 Fonctions de distribution de la probabilité du scalaire température

Nous nous intéressons ici aux fonctions de distribution de la probabilité (PDFs) de la température adimensionnée T^* pour toute la section du mélangeur. Les PDFs des champs de T^* sont visibles sur la Figure 4 pour trois protocoles d'agitation et deux temps différents. Sur chaque figure les trois comportements fluides sont comparés. Nous remarquons la présence d'un pic bien marqué qui correspond aux températures les plus probables. A droite de ce pic, pour le cas non modulé (Figure 4 (a)), nous observons de petites oscillations qui sont le signe de la persistance de gradients de température au sein du fluide. Ensuite, avec le temps, à mesure que le pic se déplace vers les hautes températures, ces oscillations sont comprimées vers $T^* = 1$. Dans ce cas, le fluide rhéofluidifiant donne la meilleure efficacité de mélange thermique. Dans le cas de l'agitation modulée continue (Figure 4(b)), le même type de comportement que pour la Figure 4 (a) est observé, les PDFs sont juste translatées un peu plus vers $T^* = 1$, la différence de comportement du fluide rhéofluidifiant par rapport à ceux des deux autres fluides est aussi très atténuée. Dans le cas de l'agitation modulée non continue, c'est au contraire le fluide rhéofluidifiant qui donne le moins bon mélange thermique. Le pic de T^* conserve une queue vers les températures froides qui indique la persistance de zones froides mal mélangées (cf. Figure 2, à gauche). En observant la Figure 4 (c), nous pouvons conclure que l'écoulement chaotique

obtenu pour un protocole d'agitation modulé non continu donne toujours de meilleurs résultats et qu'il est particulièrement efficace pour les fluides rhéoépaississants.



Figure 4 : Fonctions de distribution de probabilités T^* pour les trois comportements rhéologiques à deux temps différents et pour les protocoles d'agitation (a) non modulé, (b) modulé continu et (c) alterné.

6 Conclusion

Des simulations numériques du mélange chaotique de fluides non newtoniens avec transfert de chaleur ont été réalisées au sein d'un mélangeur à deux barreaux. Trois protocoles d'agitation différents ont été choisis : non modulé, modulé continu et alterné (non continu). Les deux derniers permettent l'obtention du mélange chaotique. Différents indicateurs ont été utilisés pour évaluer les propriétés statistiques du mélange thermique. En considérant la condition de température imposée en paroi, les conclusions principales suivantes peuvent être établies :

- pour l'écoulement non chaotique, le mélange thermique le plus efficace est obtenu pour le fluide rhéofluidifiant,
- pour les trois comportements rhéologiques, une meilleure efficacité du mélange thermique est obtenue pour le protocole d'agitation alterné,
- pour le protocole d'agitation alterné, le mélange thermique le plus efficace est obtenu pour le fluide rhéoépaississant. Pour le fluide rhéofluidifiant, des zones de non mélange froides subsistent.

D'autres études permettront d'étudier l'influence d'une contrainte seuil et l'effet de la thermodépendance des propriétés physiques des fluides complexes sur le mélange thermique chaotique. Un autre objectif sera d'être capable de modéliser le comportement thermique sous écoulement d'émulsions très concentrées [5].

Références

- [1] DR LESTER, M. RUDMAN et G. METCALFE : Low Reynolds number scalar transport enhancement in viscous and non-Newtonian fluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(3-4):655–664, 2009.
- [2] K. EL OMARI et Y. LE GUER : Alternate rotating walls for thermal chaotic mixing. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53:123–134, 2010.
- [3] K. EL OMARI et Y. LE GUER : A numerical study of thermal chaotic mixing in a two rod rotating mixer. *Computational Thermal Science*, 1:55–73, 2009.
- [4] K. EL OMARI et Y. LE GUER : Thermal chaotic mixing of power law fluids in a mixer with alternately-rotating walls. *Int. J. of Non-Newtonian Fluid Mech.*, 2010.
- [5] S. CAUBET, Y. LE GUER, B. GRASSL, K. EL OMARI et E. NORMANDIN : A low-energy emulsification batch mixer for concentrated oil-in-water emulsions. *accepté dans AIChE Journal*, 2010. http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00395299.