



Simulation numérique: l'atout majeur de l'innovation dans la chimie et les polymères

David Silagy

**Directeur R&D des Polymères Techniques et du CERDATO
ARKEMA, Serquigny, France**

PLAN DE L'EXPOSÉ



- I. **Arkema en 2012**
- II. **La modélisation chez Arkema**
- III. **Les enjeux du Calcul Haute Performance dans l'industrie chimique (HPC)**
- IV. **Exemples illustratifs de nos besoins en HPC**

Arkema en 2012

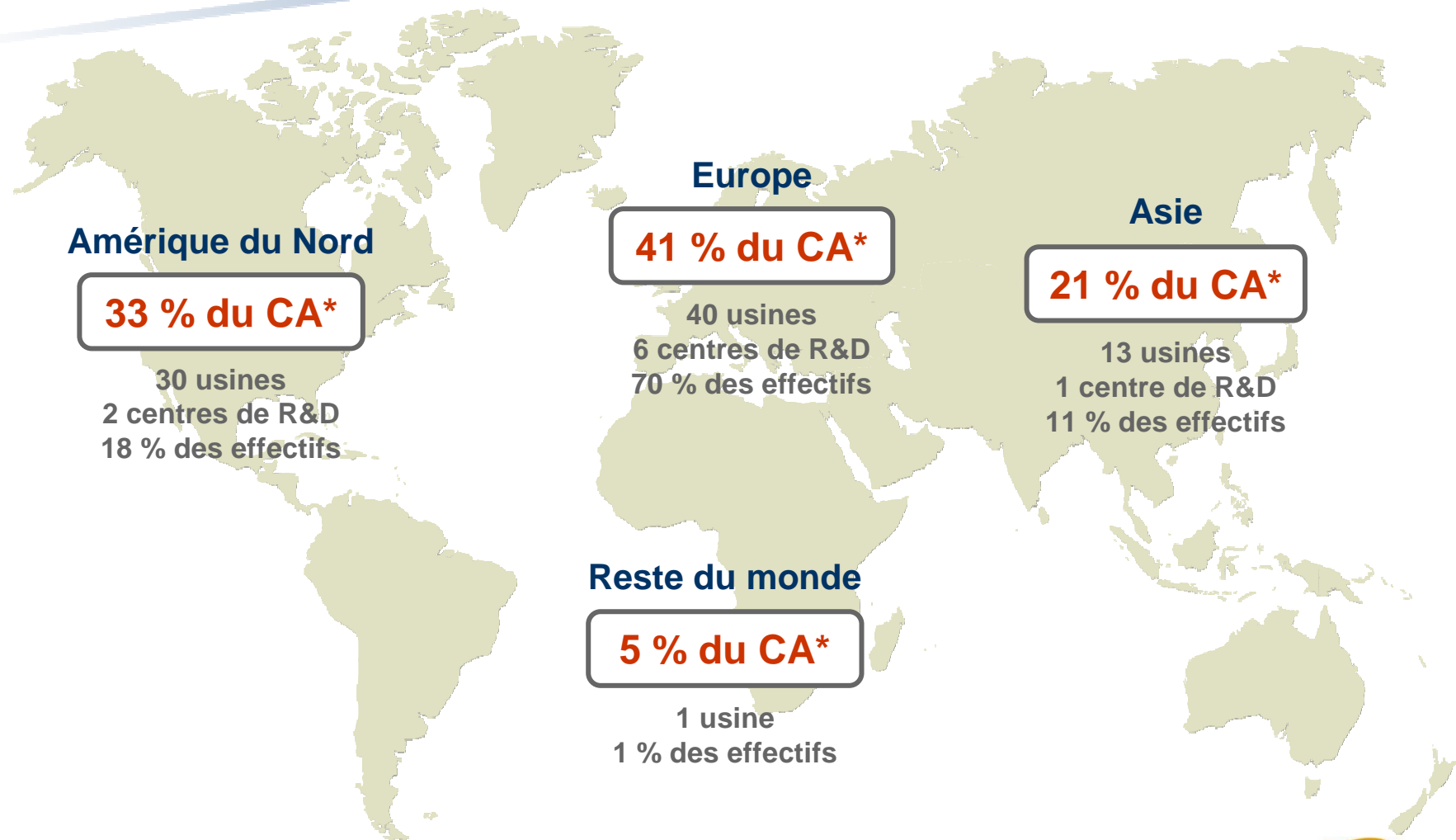


Arkema en bref

- Acteur mondial de la chimie de spécialités
- Positions de n° 1 à n° 3 mondial sur ses principaux métiers
- Chiffre d'affaires 2011 : 5,9 Md€
- 9 centres de recherche
- 84 sites industriels
- 13 200 salariés

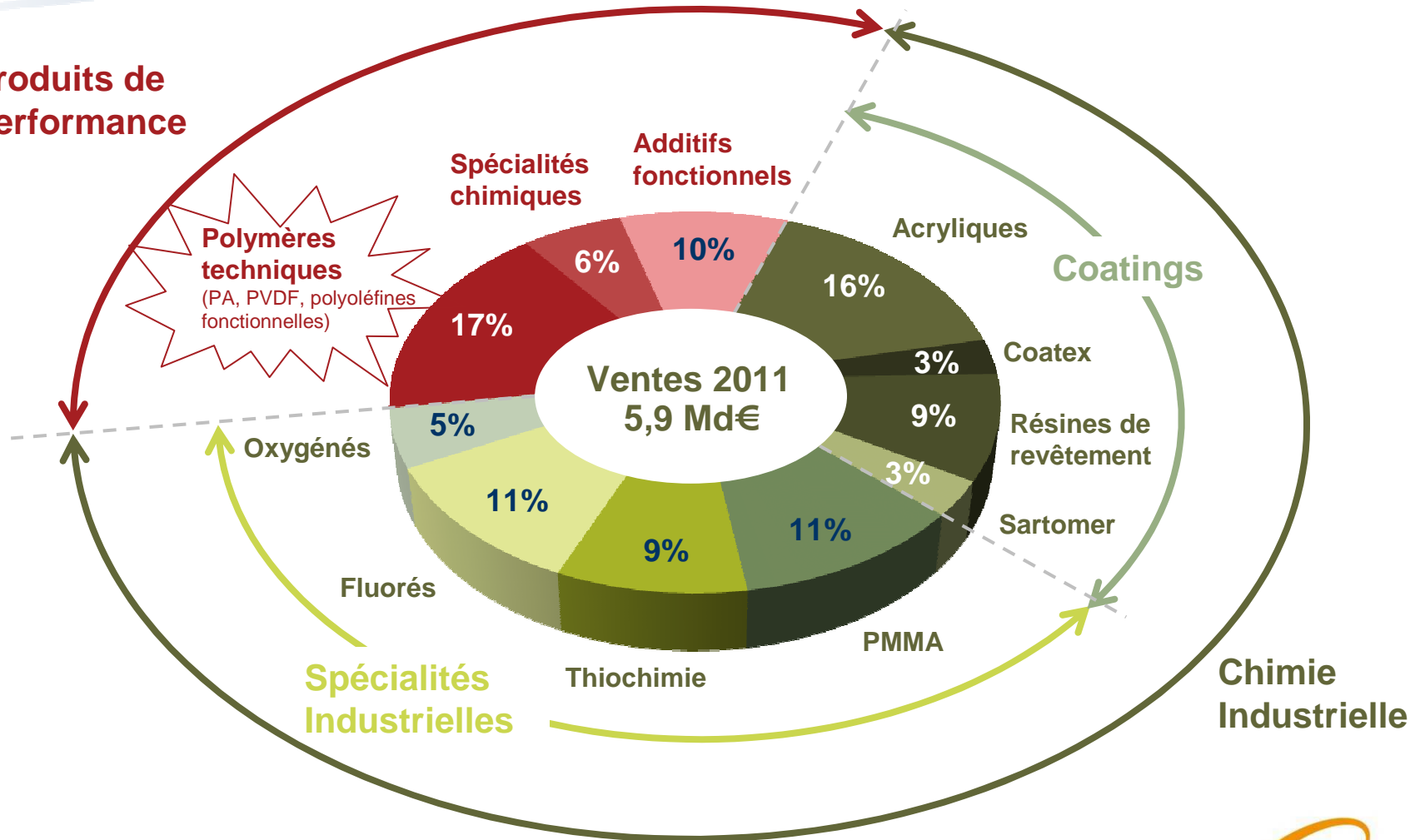


Un bon équilibre par région

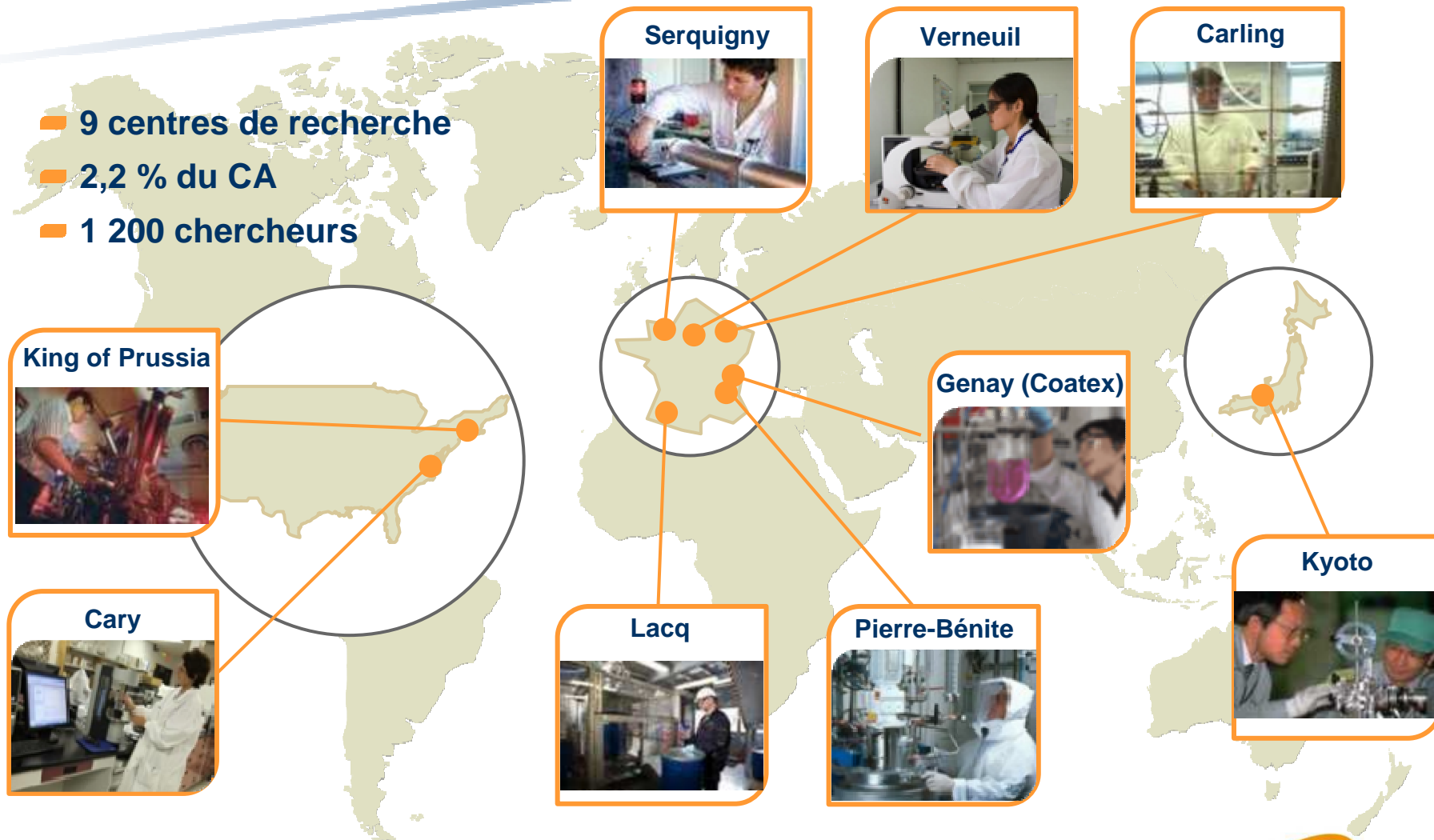


Un bon équilibre par activité

Produits de Performance



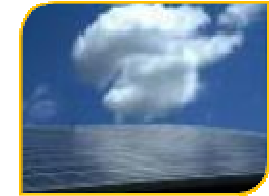
L'innovation au cœur de la stratégie



Une innovation dédiée au développement durable

Nouvelles Energies

- Photovoltaïque
- Batteries Li-ion



Matériaux Biosourcés

- Polymères Biosourcés
- Acide Acrylique



Gestion de l'Eau

- Membranes
- Revêtements Anticorrosion



Allègement

- Remplacement du métal
- Composites Thermoplastiques



La modélisation chez Arkema

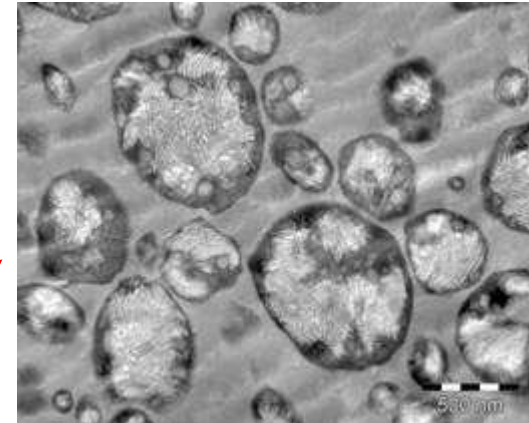


La modélisation au service d'Arkema



Applications

Eco-conception des Matériaux



Science et Génie des Matériaux

Propriétés des substances

Modélisation numérique



Procédés de Polymérisation

Modélisation et simulation des réactions
Modélisation et simulation des écoulements
Contrôle en ligne des procédés



Formulation

Modélisation et simulation des écoulements



Transformation - Plasturgie

Modélisation et simulation des écoulements

Le rôle de la modélisation

Outil d'aide à la décision. Objectifs visés:

- **Apporter un support technique à nos équipes de développement et de procédés dans les domaines de**
 - La CFD / Mélange dans nos réacteurs
 - L'extrusion (monovis, bi-vis,...)
 - Les technologies de transformation (polymères renforcés fibres courtes ou longues, injection, dimensionnement de structures tubulaires multicouches,...)

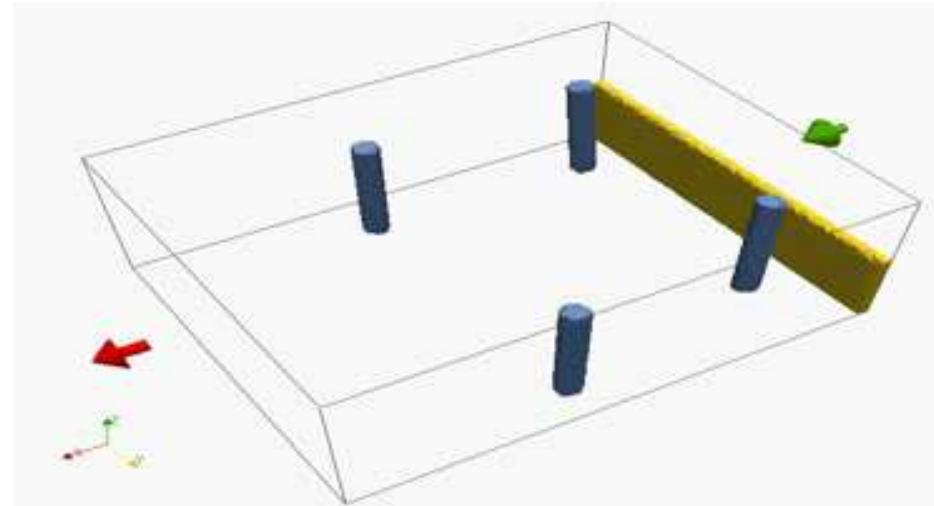
en utilisant une approche numérique et expérimentale

- **Gagner du temps et de l'argent**
 - Réduire la méthodologie essai-erreur
 - Valider ou préciser les exigences techniques
 - Anticiper les problèmes au dégoulotage
 - Améliorer la précision de la réponse technique
- **Développer nos connaissances et notre compréhension**

La modélisation dans l'industrie chimique

Des processus physico-chimiques complexes...

- Rhéologie non newtonienne
- Ecoulements multiphasiques
- Polydispersion
- Milieux réactionnels
- Phénomènes interfaciaux
- Matériaux composites
- Chimie moléculaire
- Géométries complexes
- and many more...!!!

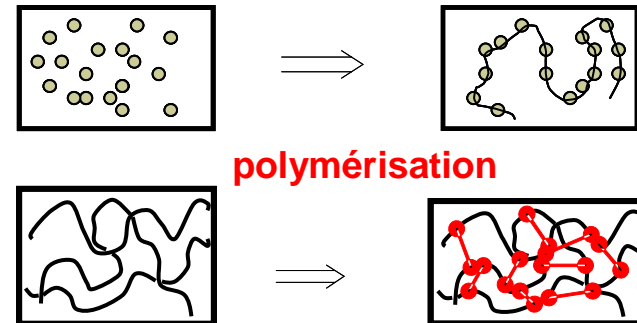


Une Modélisation Simple et Efficace: le contrôle en ligne des procédés de polymérisation

Le contrôle ex-post de la polymérisation est cher, tardif et imparfait



approche spectroscopique vibrationnelle sur base NIR



obtention d'un signal en ligne avec « signature » du produit très riche: humidité, avancée de la réaction, terminaison moléculaire, rigidité...



Construction d'un **modèle de corrélation** qui permet de corréler une **signature vibrationnelle / numérique** avec une propriété



Le calcul numérique permet de **transformer une mesure en un panel de propriété**

Enjeux du HPC



Les polymères: un problème d'échelles!



Nos produits sont multi-échelles...

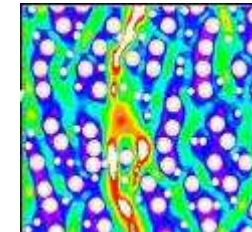
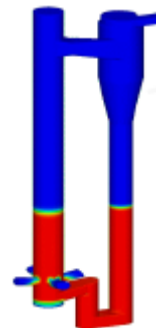
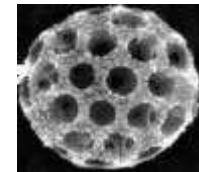
Notre conception est multi-échelles...

Notre analyse est multi-échelles...



↓
Notre modélisation doit l'être aussi!

↓
Paradigme HPC



Le design sous le prisme du scale-up

Design scale-up

Laboratoire



Pilote



Usine

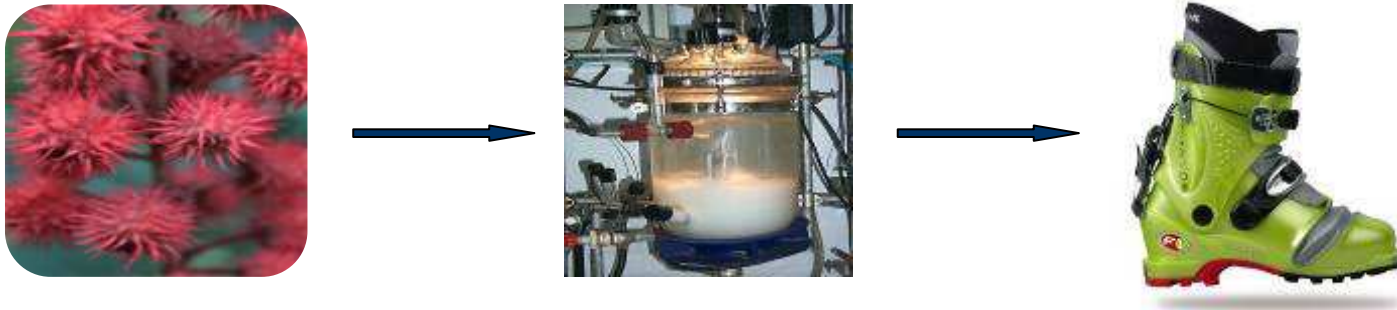


La modélisation doit assister ce dimensionnement
→ ressources informatiques croissantes

Nécessité du HPC

L'analyse sous le prisme du scale-up

Notre métier va de la synthèse d'un polymère jusqu'à sa mise en forme en produits applicatifs



→ Le spectre de notre analyse scientifique est intrinsèquement multi-échelles

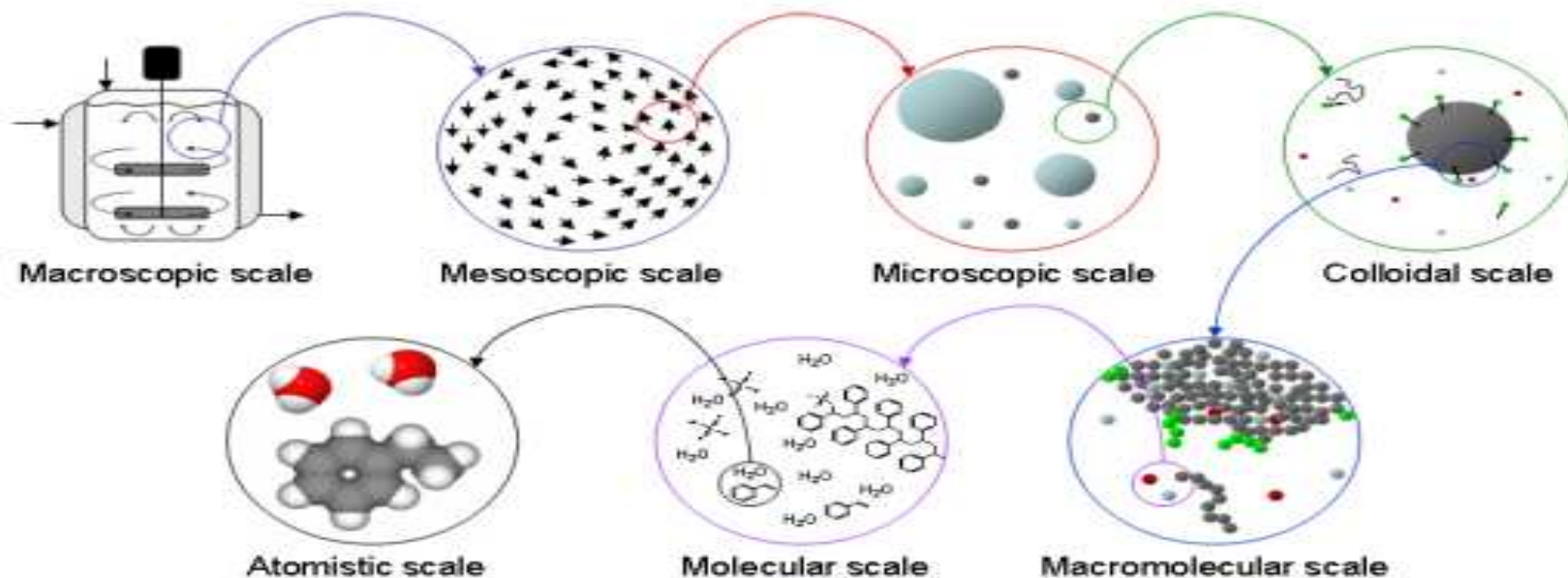


Figure 1.1 Emulsion polymerization as a multi-scale process

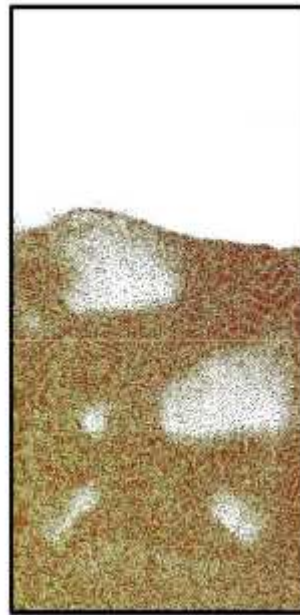
La modélisation multi-échelle

Pour répondre aux exigences de l'analyse multi-échelles, la simulation doit s'adapter...
plus le niveau de détail augmente, plus les besoins informatiques deviennent prioritaires

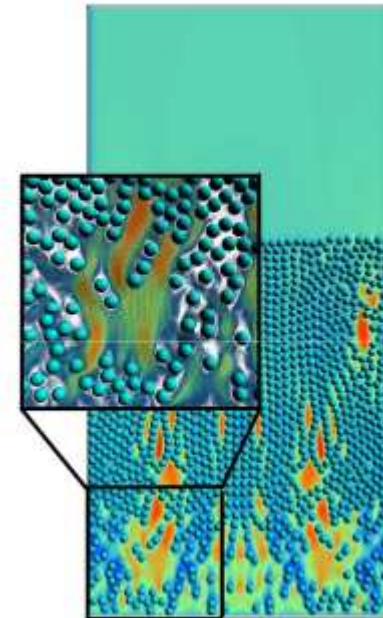
Modèle macroscopique



Modèle mésoscopique

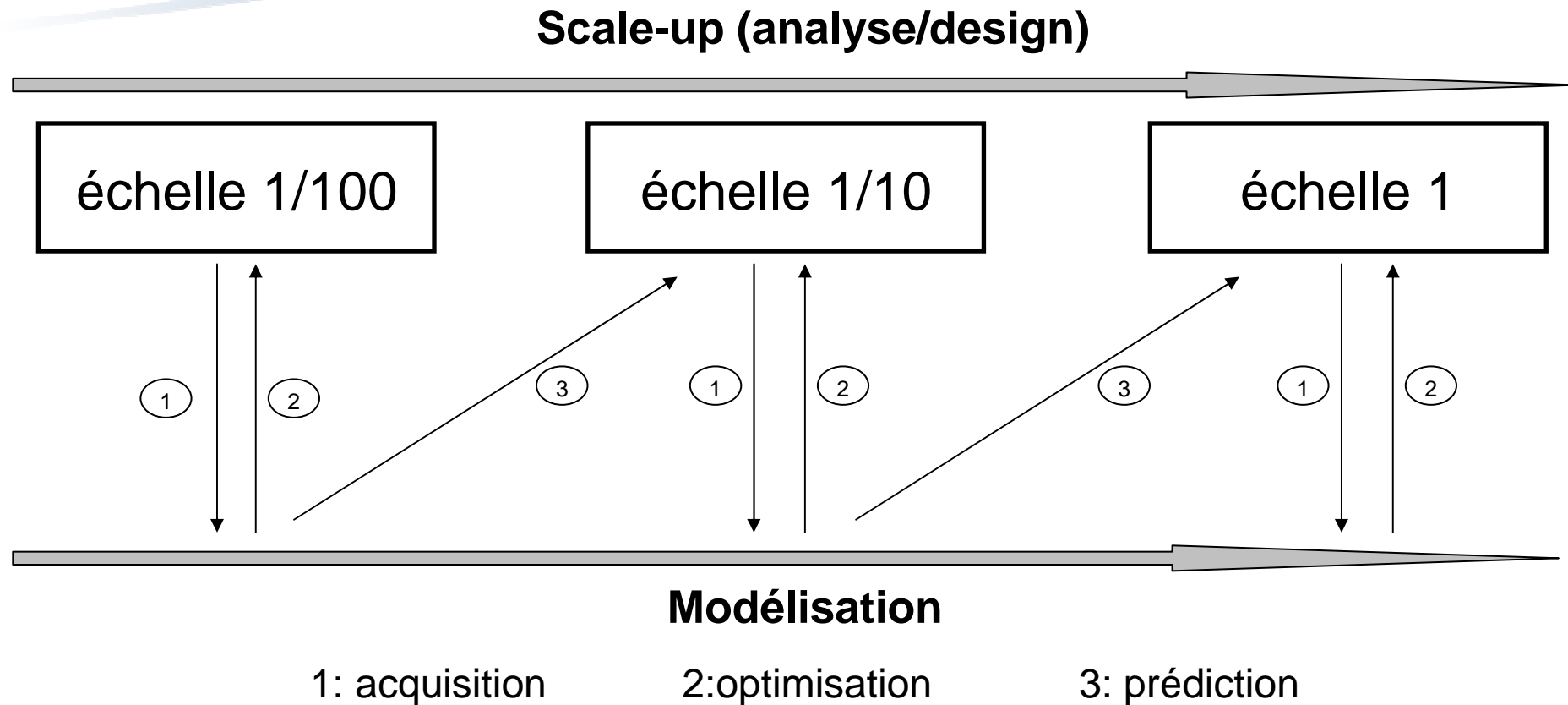


Direct Numerical Simulation (DNS)



Paradigme HPC indispensable

Le HPC comme outil de certification



**Son rôle important impose
un impératif de certification**

Certification: « uncertainty management »

Quantifier les erreurs, valider les résultats

La validation est partie intégrante du processus de modélisation.
Elle se fait par confrontation expérimentale et « convergence en maillage ».
Les besoins en ressources informatiques sont énormes.



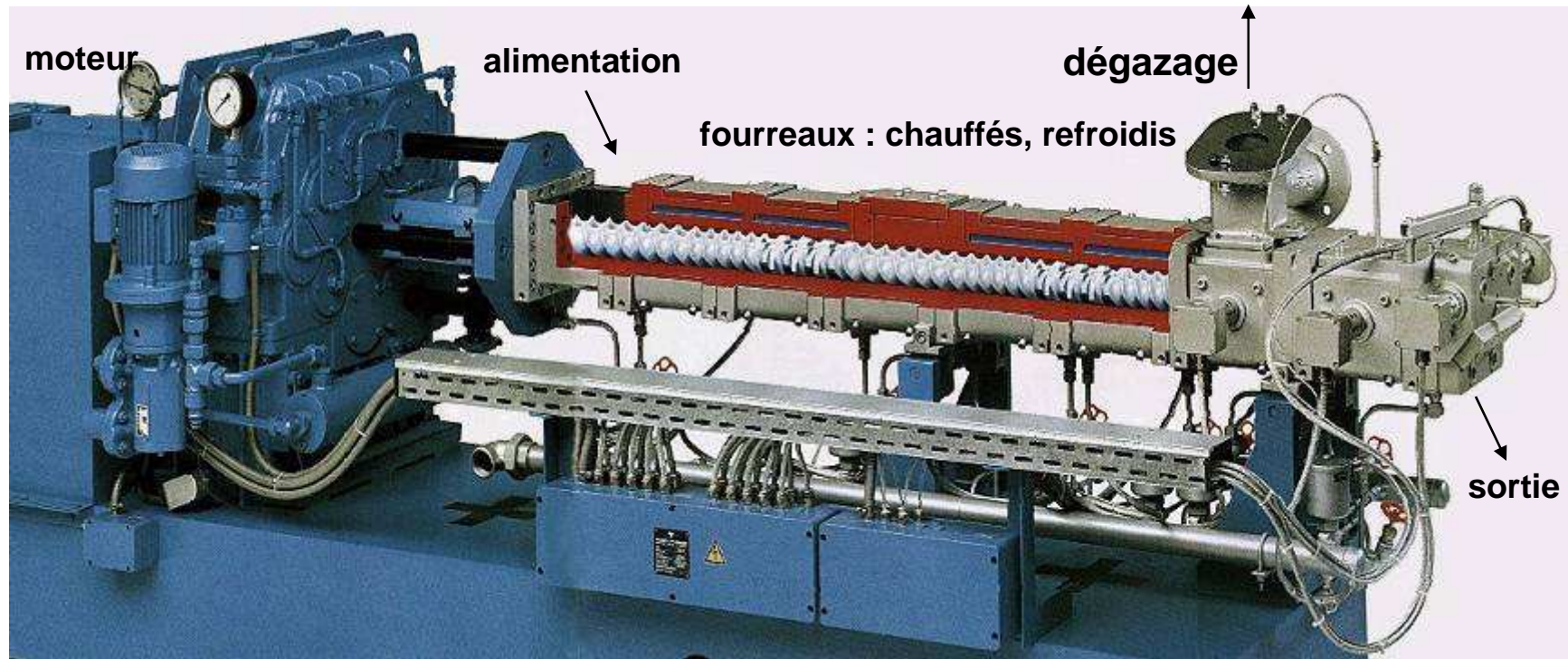
Le paradigme HPC est
notre moyen de mise en
œuvre

Exemples de nos besoins HPC



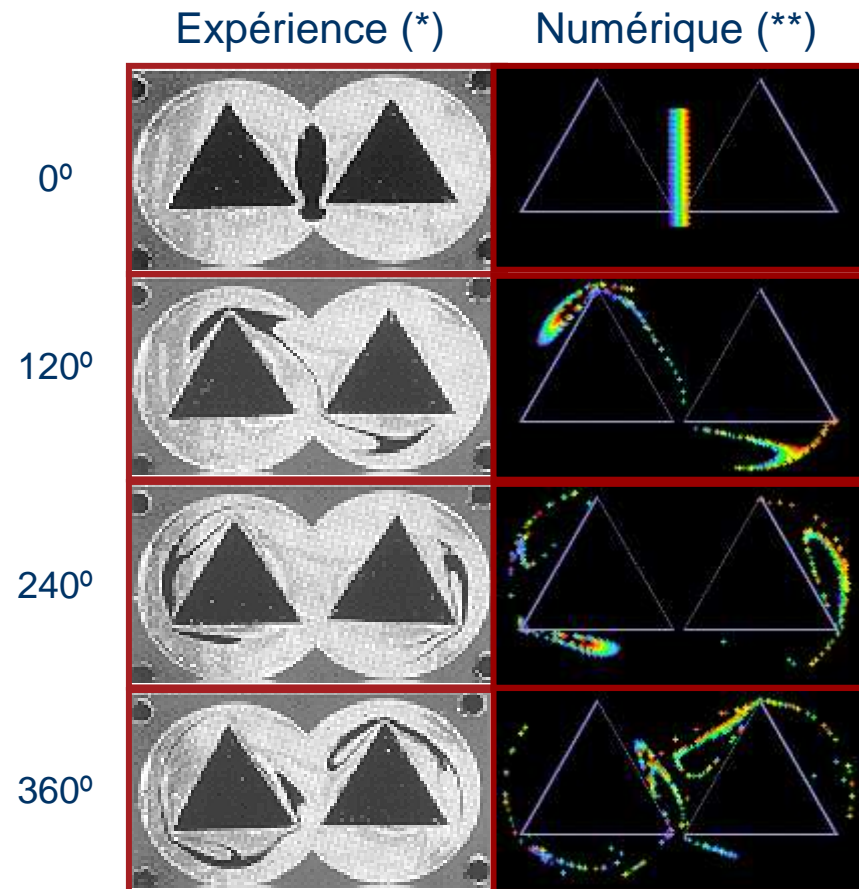
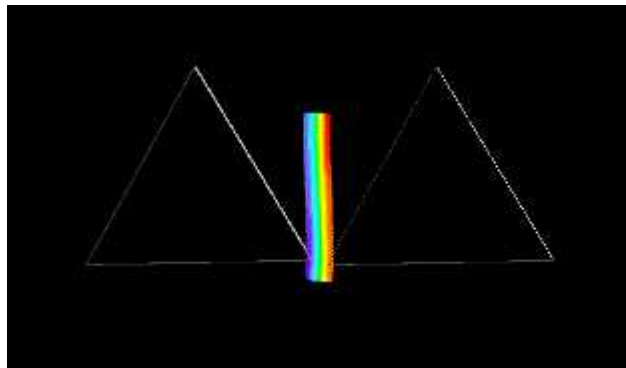
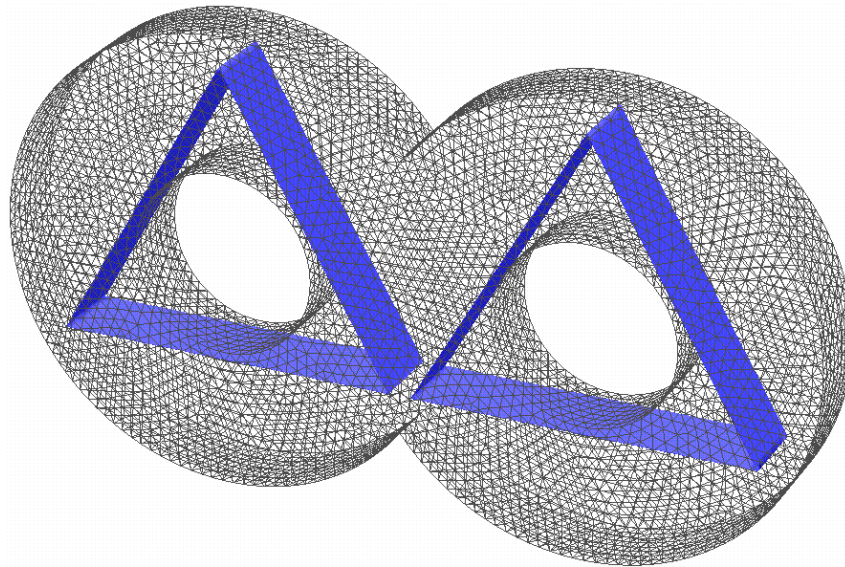
Compoundage et extrusion réactive.

Besoin de maîtriser le procédé et la chimie



Modélisation de la dispersion de charge

Maillage ~500 000 éléments



(*): Avalosse & Crochet (1997)

(**): Giguère (2004)

Perspectives



■ Actuellement:

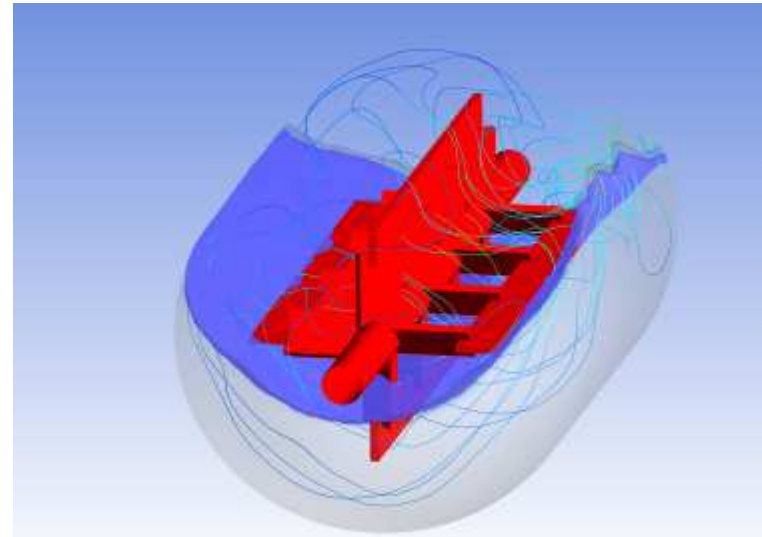
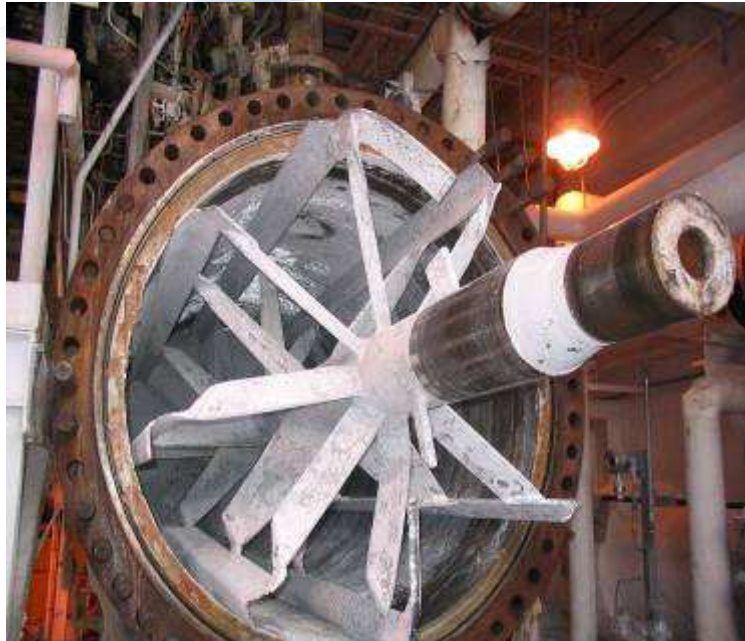
- Simulation 3D d'un élément de vis
- Précision limitée (effets de cisaillement important → nécessité d'adapter nos maillages)

■ Ambitions:

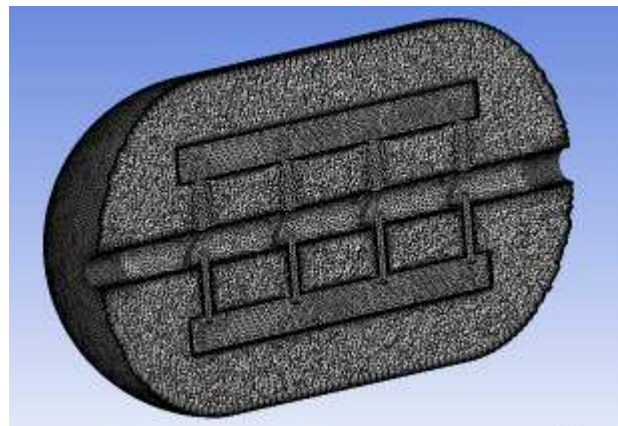
- Modéliser fidèlement l'ensemble de l'extrudeuse.
- Passer des simulations à plusieurs centaines de millions d'éléments.

■ En Pratique: un gain de 30% de productivité sur une extrudeuse sans aucun investissement !

Polymérisation en émulsion



Modélisation 3D multiphasique de l'écoulement



Maillage de 4 millions de nœuds

Perspectives



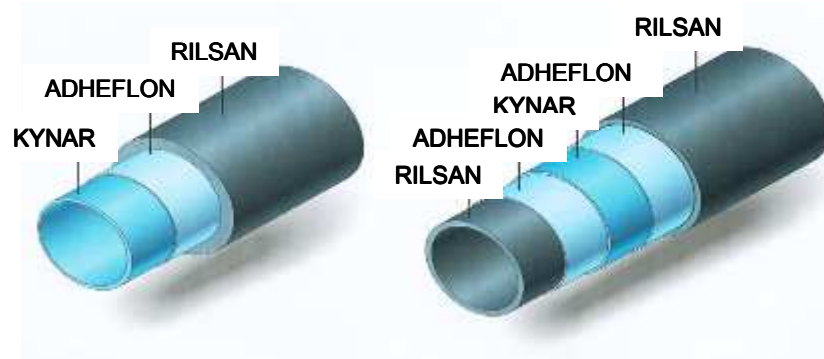
■ Actuellement:

- Echelle macro : taille des gouttes \ll taille de maille
- Pas de description de la cinétique réactionnelle

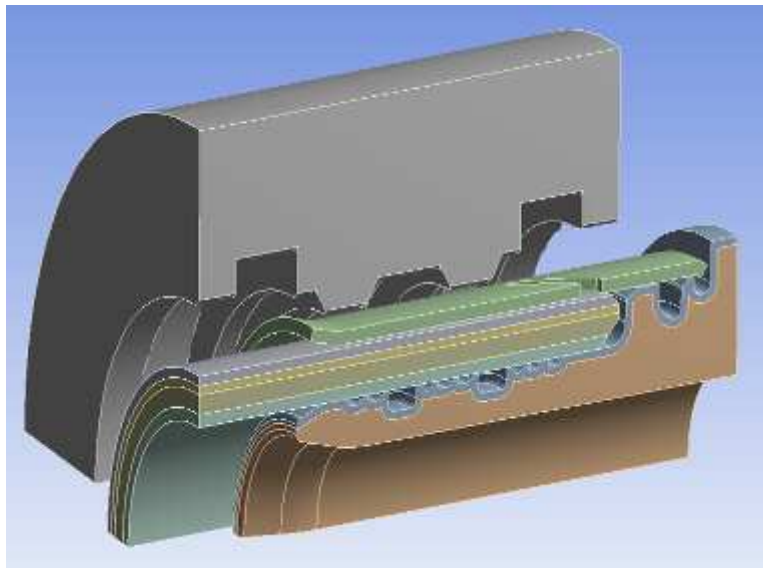
■ Ambitions:

- Passage à l'échelle méso: prise en compte de la polydispersion
- Passage à l'échelle micro: prise en compte de la chimie de polymérisation

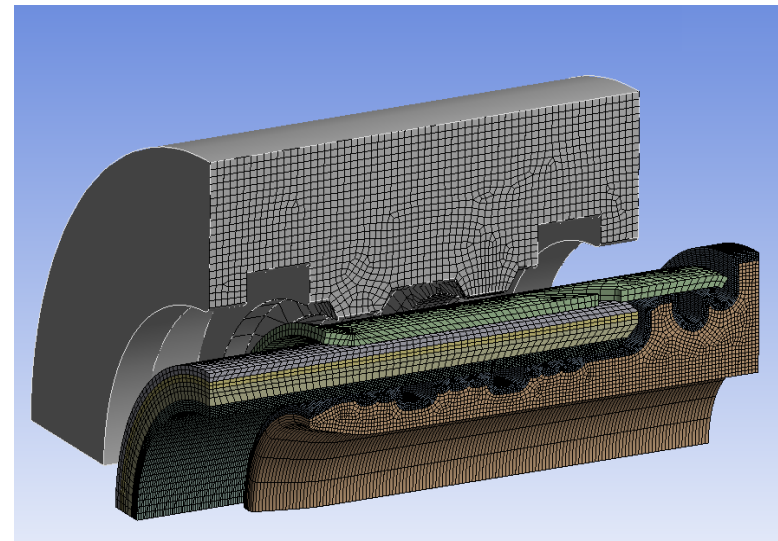
Calcul mécanique de structure multicouches



Exemples de structure multicouches



Structure multimatériaux



Maillage de 1,5 millions de nœuds

Perspectives



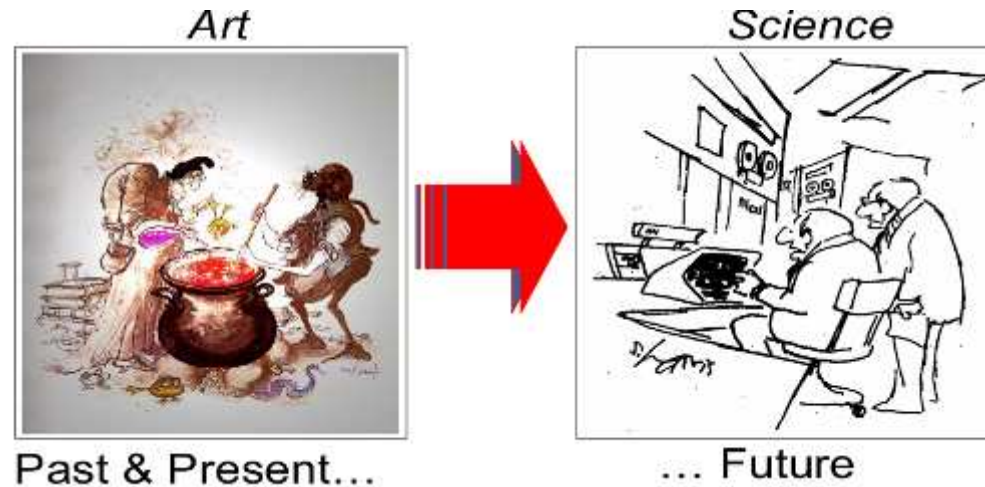
■ Actuellement:

- Géométrie simplifiée
- Modèles élasto-plastiques

■ Ambitions:

- Considérer la géométrie complète de la structure
- Modèles élasto-visco-plastiques, modèles de rupture, endommagement,...

Conclusions



- **Arkema met la modélisation au cœur de son métier à toutes les étapes de la conception**
 - Contrôle en ligne
 - Ecoulements dans les réacteurs et les extrudeuses
 - Prédiction des propriétés pour l'eco-conception des Matériaux
- **Le HPC est l'outil indispensable de mise en œuvre**