

Université Mohamed Khider – Biskra

Faculté des Sciences et de la technologie

Département : Chimie Industrielle

Ref :



جامعة محمد خيضر بسكرة

كلية العلوم و التكنولوجيا

قسم: كيمياء الصناعية

المرجع:

Thèse présentée en vue de l'obtention du Diplôme de

Doctorat LMD en

Chimie Industrielle

Option: Génie des Procédés et Environnement

**ETUDE DE LA POPULATION DES GOUTTES
DANS LES COLONNES D'EXTRACTION
LIQUIDE LIQUIDE**

Présentée par :

Bechka Imane

Soutenue publiquement le

21/12/2017

Devant le jury composé de :

| | | | |
|-------------------------|-----|--------------------|---------------|
| Mr. DEBABECHE Mahmoud | Pr | Président | Univ. BISKRA |
| Mr. HASSEINE Abdelmalek | Pr | Directeur de thèse | Univ. BISKRA |
| Mr. KORICHI Mourad | Pr | Examineur | Univ. OUARGLA |
| Mr. MADANI Hakim | MCA | Examineur | Univ. BATNA |
| Mr. MERZOUGUI Abdelkrim | MCA | Examineur | Univ. BISKRA |
| Mr. NEDJAR Zohir | MCA | Examineur | Univ. BISKRA |

A mon père et ma mère

A mon mari et ma fille

A mes sœurs et mes frères

A toute ma famille

Remerciements

Nous tenons tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce Modeste travail.

Je tiens à remercier profondément et chaleureusement la personne qui a accepté de me confier ce sujet Monsieur HASSEINE Abdelmalek professeur à l'Université de Biskra. Aussi, pour la qualité d'encadrement et pour sa disponibilité. Son soutien, l'étendue de ses connaissances scientifiques, ainsi que sa capacité à trouver des solutions aux problèmes ont permis l'aboutissement de ce travail. Je le remercie également pour les remarques très pertinentes qui ont découlé de la relecture très attentive de ce manuscrit.

Je suis très honorée que Messieurs KORICHI Mourad professeur à l'Université de Ouargla, MADANI Hakim Maître de conférence à l'Université de Batna, MERZOUGUI Abdelkrim et NEDJAR Zohir Maîtres de conférence à l'université de Biskra d'avoir accepté d'être membres de jury.

Ma gratitude va de même à Monsieur DEBABECHE Mahmoud professeur à l'Université de Biskra en acceptant de présider ce jury de thèse.

Je remercie mes parents qui m'ont constamment encouragée et soutenue tout au long de ces années. Sans eux, je n'en serais pas là.

Je remercie mon cher époux pour son soutien quotidien indéfectible et son enthousiasme contagieux à l'égard de mes travaux comme de la vie en général.

Je ne saurais passer sous silence l'apport inestimable des autres membres de ma famille (frères, sœurs, ma belle-famille) qui m'ont soutenue, de près ou de loin durant mes études doctorales.

Je ne saurais terminer sans souligner le soutien amical et chaleureux de ma copine Timedjdhedine Mebarka, de tous les jours qui m'a soutenue durant ce parcours doctoral.



SOMMAIRE

SOMMAIRE

| | |
|------------------------------|-------------|
| RESUMES | I |
| ABSTRACT | II |
| المخلص | III |
| NOMENCLATURE | V |
| LISTE DES FIGURES | VIII |
| LISTE DES TABLEAUX | XI |
| INTRODUCTION GENERALE | 1 |

CHAPITRE I

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

| | |
|--|-----------|
| I.1. Introduction | 9 |
| I.2. Méthodes de résolution de l'équation de bilan de population | 11 |
| I.2.1. Revue des méthodes numériques disponibles | 11 |
| I.2.1.1. Méthodes stochastiques | 11 |
| I.2.1.2. Méthodes d'ordre élevé | 12 |
| I.2.1.3. Méthodes d'ordre zéro | 12 |
| I.2.2. Propriétés des schémas numériques | 13 |
| I.2.2.1. Consistance | 13 |
| I.2.2.2. Ordre d'un schéma | 13 |
| I.2.2.3. Stabilité | 13 |
| I.2.3. Revue des méthodes semi-analytiques disponibles | 14 |
| I.2.3.1. Méthode de décomposition d'Adomian | 14 |
| I.2.3.2. Méthode d'itération variationnelle | 16 |
| I.2.3.3. Méthode de perturbation homotopique | 17 |

CHAPITRE II

MODELISATION DES COLONNES D'EXTRACTION LIQUIDE-LIQUIDE

| | |
|---|-----------|
| II.1. Introduction | 22 |
| II.2. Modélisation des réacteurs agité | 23 |
| II.2.1. Equation de bilan de population | 23 |
| II.2.2. Bilan de population sur une classe de taille $[v, v + dv [$ | 25 |
| II.2.3. Bilan de population sur une classe de particules (gouttes) de taille $[v, v + dv [$ | 26 |

| | |
|---|----|
| II.2.4. Ecriture générale du bilan de population | 29 |
| II.3. Modélisation des colonnes d'extraction liquide liquide | 30 |
| II.3.1. Présentation du système | 31 |
| II.3.1.1. Schéma de la colonne | 31 |
| II.3.1.2. Développement du modèle continu | 32 |
| II.3.1.2a. Bilan sur la phase dispersée | 33 |
| II.3.1.2b. Les conditions aux limites et initiales | 33 |
| II.3.2. L'équation de bilan de population | 36 |
| II.3.3. L'équation de bilan de population pour une CELL différentielle | 37 |
| CHAPITRE III | |
| RESULTATS ET DISCUSSIONS | |
| III.1. Introduction | 41 |
| III.2. Fonction des moments de distribution | 41 |
| III.3. Applications des méthodes d'He à l'équation de bilan de population à l'état stationnaire dans des systèmes à flux continu | 42 |
| III.3.1. L'agrégation pure avec $\check{S}(v, u) = \check{S}_0 = 1$ | 43 |
| III.3.1.1. Méthode de perturbation homotopique | 43 |
| III.3.1.2. La méthode d'itération variationnelle | 44 |
| III.3.2. La rupture pure avec $\Gamma(v) = v$ et $S(v/u) = \frac{2}{u}$ | 47 |
| III.3.2.1. Méthode de perturbation homotopique | 47 |
| III.3.2.2. Méthode d'itération variationnelle | 48 |
| III.3.3. Croissance pure avec $G = 1$ | 51 |
| III.3.3.1. Méthode de perturbation homotopique | 51 |
| III.3.3.2. Méthode d'itération variationnelle | 51 |
| III.3.4. La rupture et l'agrégation simultanées | 54 |
| III.4. Application de la méthode d'itération variationnelle (MIV) aux équations de bilan de population pour les processus d'agrégation, de croissance et de rupture dans une colonne d'extraction liquide liquide | 57 |
| III.4.1. Rupture de gouttes dans la CELL avec la vitesse de la phase dispersée est uniforme | 57 |
| III.4.2. Agrégation de gouttes dans la CELL avec la vitesse de la phase dispersée est uniforme | 59 |

| | |
|--|-----------|
| III.4.3. Agrégation et rupture de gouttes dans la CELL | 61 |
| CONCLUSION GENERALE | 64 |
| REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES | 66 |
| ANNEXE : Article application of He's methods to the steady state population balance equation in continuous flow systems | |



RESUME

RESUME

L'équation de bilan de population a de nombreuses applications en sciences physiques et de l'ingénierie, ou l'une des phases est de nature discrète. De telles applications comprennent la cristallisation, réacteurs à colonnes à bulles, bioréacteurs, populations de cellules microbiennes, aérosols, poudres, polymères et plus. Ce travail présente une étude approfondie des solutions semi-analytique de l'équation de bilan de population pour les processus de particule à flux continu. L'équation de bilan de population a été résolue analytiquement en utilisant la méthode de perturbation homotopique (MPH), et la méthode d'itération variationnelle (MIV) pour les processus de particule où la rupture, la croissance, l'agrégation prennent place. Ces méthodes semi-analytiques à surmonter les difficultés cruciales de discrétisation numérique et la stabilité qui caractérisent souvent les solutions précédentes d'EBPs. Il a été trouvé que les séries des solutions obtenues à l'aide de ces deux méthodes ont convergé exactement aux solutions analytiques disponibles d'EBPs.

Mots clés: bilan de population, équation de rupture, équation de croissance, équation d'agrégation, méthode de perturbation homotopique, méthode d'itération variationnelle.

ABSTRACT

The population balance equation has numerous applications in physical and engineering sciences, where one of the phases is discrete in nature. Such applications include crystallization, bubble column reactors, bioreactors, microbial cell populations, aerosols, powders, polymers and more. These works present a comprehensive investigation of the semi-analytical solutions of the population balance equation (PBE) for continuous flow particulate processes. The general PBE was analytically solved using homotopy perturbation method (HPM) and variational iteration method (VIM) for particulate processes where breakage, growth, aggregation take place. These semi-analytical methods overcome the crucial difficulties of numerical discretization and stability that often characterize previous solutions of the PBEs. It was found that the series solutions obtained using these two methods converged exactly to available analyticals of the PBE.

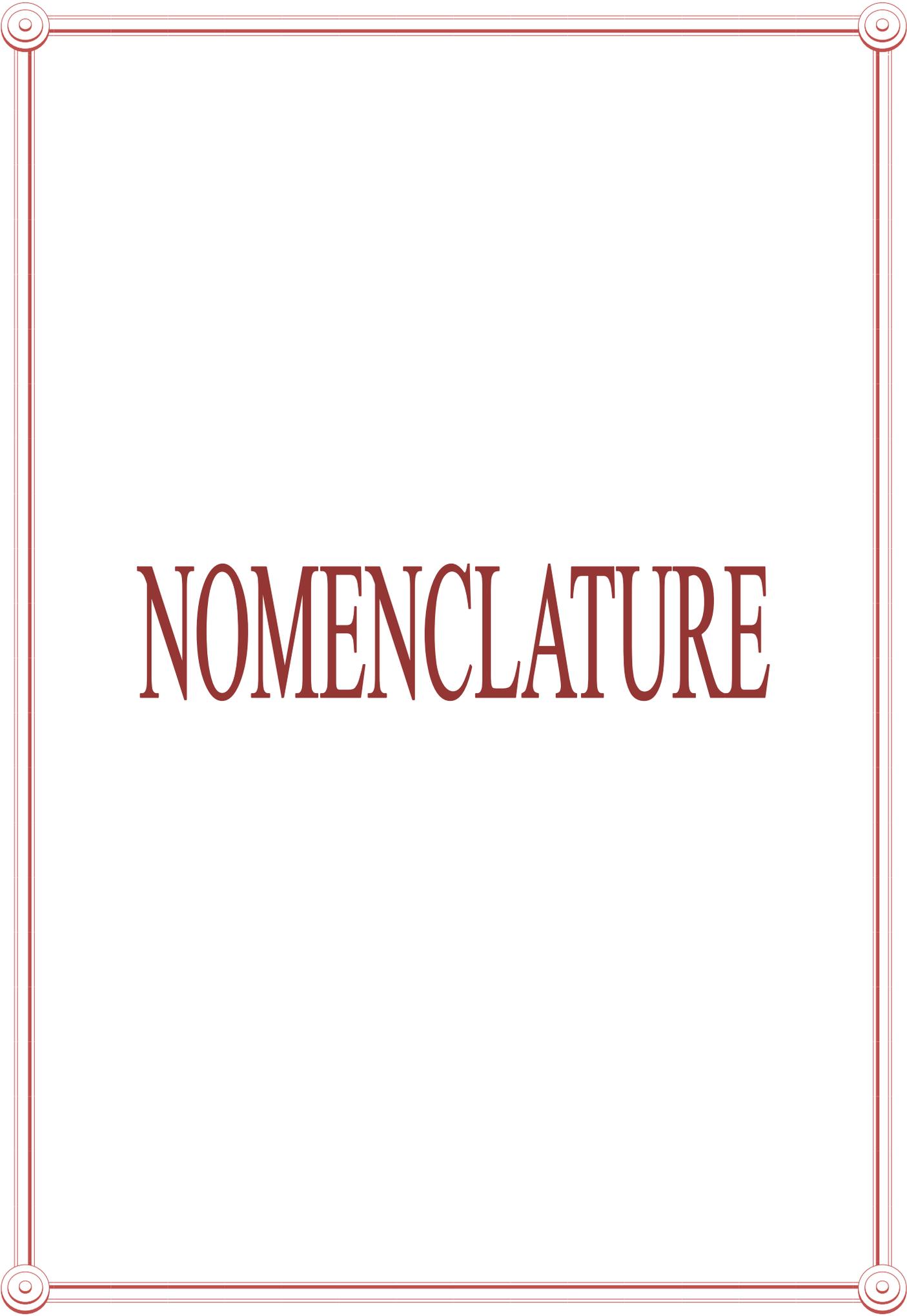
Keywords: Population balance, Breakage equation, Growth equation, Aggregation equation, Homotopy perturbation method, Variational iteration method.

الملخص

تطبيقات عديدة العلوم الفيزيائية والهندسة، حيث واحدة من الا ذات طبيعة غير . وتشمل هذه التطبيقات البلورة، المفاعلات الحيوية، سكان الخلية الميكروبية، والهباء الجوي، والمساحيق، والبوليمرات وغيرها. هذا العمل ي الشبه تحليلية في عمليات التدفق المستمر. تم حل معادلة التوازن السكاني من الناحية التحليلية باستخدام طريقة اضطراب مثلية التموضد و طريقة التكرار التغيري لعمليات الجسيمات حيث الكسر، والنمو، والتجميع تمت دراستها. هذه الطرق شبه تحليلية تتغلب على صعوبات التفريد العددي التي غالبا ما تميز هاتين الطريقتين . وقد تبين أن .

الحلول التحليلية

الكلمات المفتاحية: التجميع، طريقة اضطراب مثلية، طريقة التكرار التغيري.



NOMENCLATURE

NOMENCLATURE

Notation

| | |
|--------------------|--|
| A_c | Section transversale de la colonne (m^2) |
| D_d | Coefficients de diffusion (m^2/s) |
| F | Le flux convectif ($m^{-3}s^{-1}$) |
| G | La vitesse de croissance (m/s) |
| n | Le nombre des particules dans la gamme de taille v à $v+dv$ |
| $n^{feed}(v)dv$ | Nombre de particules dans le flux d'entrée dans la gamme de taille v à $v+dv$ |
| Q_d | Flux de la phases dispersée (m^3/s) |
| U_d | La vitesse de la phase dispersée par rapport aux parois de la colonne ($m.s^{-1}$) |
| v, u | Les volumes des particules (m^3) |
| v_{min}, v_{max} | Volume minimum et maximum de gouttelettes (m^3) |
| z | Coordonnée spatiale (hauteur) (m) |
| z_d | Entrée d'alimentation dispersée (m) |

Lettres grecques

| | |
|-----------|--|
| δ | La fonction de Dirac |
| w | Fraction volumique (hold-up) de la phase dispersée |
| ... | Les termes de source de rupture et de coalescence |
| \bar{a} | Temps de séjour moyen |

$S(v/u)$ Le nombre fractionnaire des particules formées dans la gamme de taille v à $v + dv$

$\Gamma(u)$ La fréquence de rupture des particules entre deux volumes v à $v + dv$

$\tilde{S}(v,u)$ Fréquence d'agrégation entre deux particules de volumes v et u (m^3s^{-1})

$$Pochhammer[a,n] = \Gamma(a+n)/\Gamma(a)$$

Abréviations

EBP Equation de bilan de population.
MPH Méthode de perturbation homotopique
CELL Les colonnes d'extraction liquide-liquide
ODEs Equations différentielles ordinaires.
PSD La distribution de taille de particules
MIV Méthode d'itération variationnelle.



LISTE DES FIGURES

LISTE DES FIGURES

| Figures | Titre | Page |
|--------------------|---|-------------|
| <i>Figure A</i> | Mécanisme d'agrégation des particules | 2 |
| <i>Figure B</i> | Mécanisme de rupture des particules | 3 |
| <i>Figure C</i> | Mécanisme de croissance des particules | 4 |
| <i>Figure D</i> | Mécanisme de nucléation des particules | 4 |
| <i>Figure I.1</i> | Solution exacte, numérique et discrète. | 14 |
| <i>Figure II.1</i> | Bilan de population | 23 |
| <i>Figure II.2</i> | Cuve agitée | 24 |
| <i>Figure II.3</i> | Les différents processus intervenant dans le bilan de population | 25 |
| <i>Figure II.4</i> | Évolution du nombre de particules dans la classe de particules de taille $v + dv$ entre deux instants t et $t + dt$ | 26 |
| <i>Figure II.5</i> | Schéma général d'une colonne d'extraction liquide-liquide à contre-courant | 32 |
| <i>Figure II.6</i> | Bilan sur un volume de référence $A \cdot z$ pour la phase dispersée | 33 |

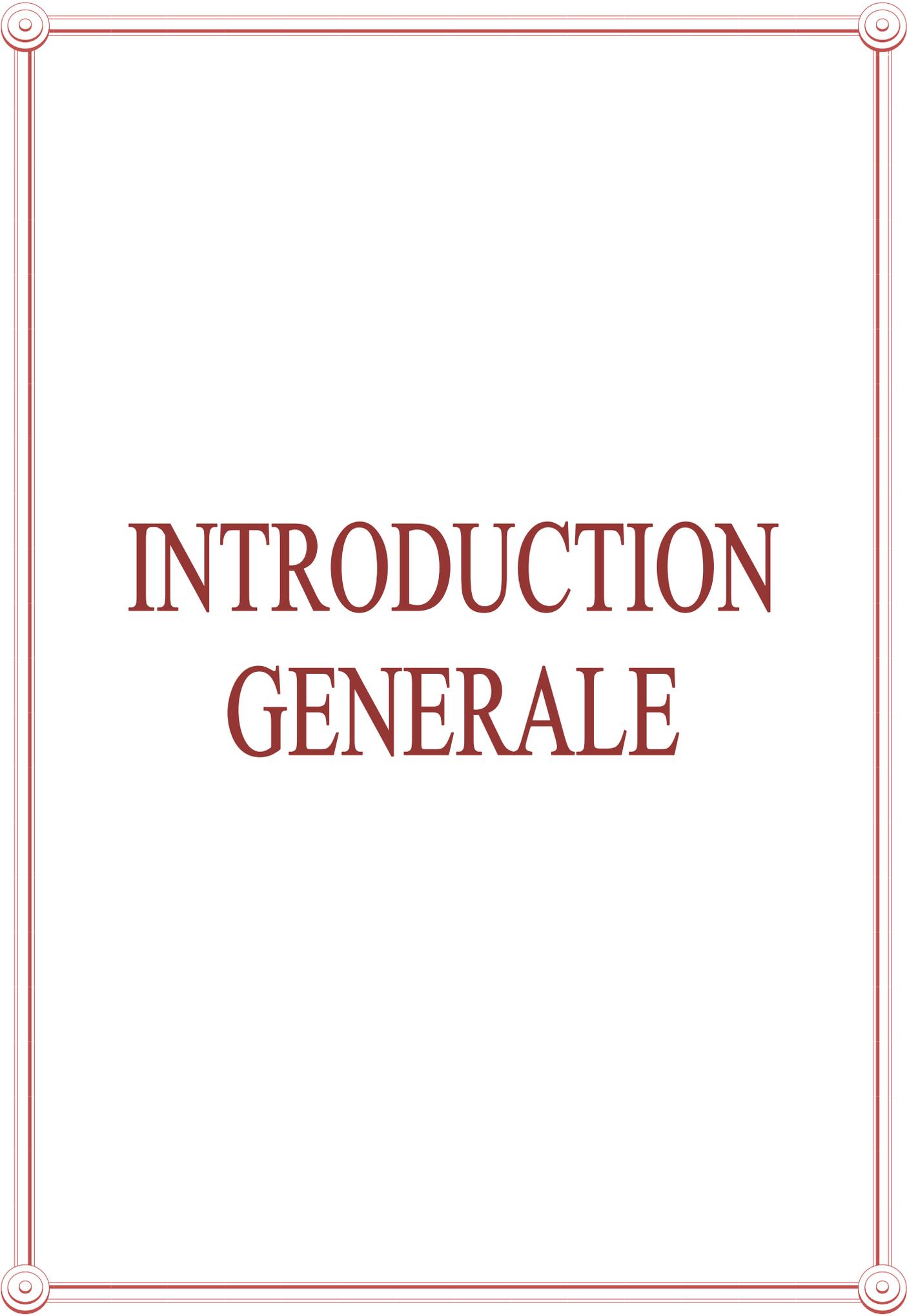
| | | |
|---------------------|---|-----------|
| Figure III.1 | Comparaison entre la MIV et la MPH et la solution analytique [188] pour l'agrégation des particules dans un écoulement homogène avec une distribution uniforme de particules et une fréquence constante d'agrégation. | 46 |
| Figure III.2 | Comparaison entre la VIM et la MPH et la solution analytique [48, 175] pour la rupture des particules dans un écoulement homogène avec une distribution uniforme de particules et un taux de rupture linéaire. | 50 |
| Figure III.3 | Comparaison entre la MIV et la MPH pour la croissance des particules dans un écoulement homogène. | 53 |
| Figure III.4 | La solution approximative pour l'agrégation et la rupture agissant simultanément dans un réacteur à flux continu avec une distribution de l'alimentation sous forme exponentielle. | 56 |
| Figure III.5 | Comparaison entre les solutions MIV et analytiques [82] pour la rupture des gouttes. | 58 |
| Figure III.6 | Comparaison entre les solutions MIV et analytique [172] pour l'agrégation des gouttes. | 60 |
| Figure III.7 | Convergence de la concentration en nombre utilisant la MIV pour l'agrégation et la rupture des gouttes. | 61 |
| Figure III.8 | Comparaison entre les trois cas (rupture, agrégation, agrégation+ rupture). | 62 |



LISTE DES TABLEAUX

LISTE DES TABLEAUX

| Tableaux | Titre | Page |
|-----------------------------|--|-------------|
| <i>Tableau III.1</i> | Les moments analytiques de distribution de densité et les indices d'agrégation | 46 |
| <i>Tableau III.2</i> | Les moments analytiques de distribution de densité et les indices de rupture. | 50 |
| <i>Tableau III.3</i> | Les moments analytiques de distribution de la densité pour la croissance. | 53 |



INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Les colonnes d'extraction liquide-liquide (CELL) sont l'un des principaux équipements de contact multiphase, qui a reçu une large acceptation industrielle dans de nombreux domaines de l'ingénierie, tels que les industries hydrométallurgique, nucléaire, pétrochimique, pharmaceutique et alimentaire. Cependant, la conception optimale de ces équipements n'a pas encore été réalisée et dépend toujours des méthodes de mise à l'échelle fastidieuses et coûteuses des installations pilotes à l'échelle de laboratoire. Ceci est dû à la nature complexe des interactions macroscopiques en phase dispersée ainsi qu'au transfert de masse d'interphase microscopique se produisant dans le champ turbulent d'écoulement continu. Ces interactions macroscopiques telles que la rupture de particules, l'agrégation et la croissance couplées au transfert de masse d'interphase ont pour résultat une population distribuée de particules. Cette population n'est pas seulement distribuée dans le domaine spatial de l'équipement de contact, mais également distribuée au hasard par rapport à l'état de particules (propriétés) telles que la taille, la concentration et l'âge.

La technique d'extraction liquide-liquide est l'objet de nombreuses études expérimentales et numériques. Leur diverses utilisations industrielles sont une des explications à une recherche si approfondie. En effet, tant dans différents secteurs industriels tels que pharmaceutiques, alimentaires, chimiques, pétrochimiques etc. [1, 2]. Son avantage réside dans sa simplicité et surtout sa haute performance, l'efficacité et le coût relatif de l'équipement utilisé qui permet d'atteindre des degrés de séparation assez élevés [3, 4].

Dans un équipement de contact liquide-liquide tel que des colonnes d'extraction liquide liquide, on utilise maintenant une modélisation basée sur le bilan de population de particules pour décrire le comportement hydrodynamique complexe de la phase dispersée. L'équation de bilan de population (EBP) est utilisée pour modéliser les processus de particule comme la cristallisation [5, 6], la granulation [7–10], la polymérisation [11-13], le génie chimique [14, 15], l'aérosol [16], et biologique [17]. Par conséquent de cette importance de l'extraction liquide-liquide, des programmes de recherche sont constamment élaborés, touchant les deux aspects: expérimental et modélisation.

Les processus particuliers sont bien connus dans diverses branches de l'ingénierie, y compris les processus de cristallisation, de broyage, de précipitation, de polymérisation, d'aérosol et d'émulsion. Ces processus se caractérisent par la présence d'une phase continue et une phase dispersée composée de particules avec une distribution de propriétés. Les particules peuvent être des cristaux, des grains, des gouttes ou des bulles et peuvent avoir plusieurs propriétés comme la taille, la composition, la porosité et l'enthalpie, etc. Dans de nombreuses applications, la taille d'une particule est considérée comme la seule propriété de particules pertinente. Il est relativement facile à mesurer et donc couramment utilisé pour caractériser une particule. Il peut être déterminé sous différentes formes telles que respectivement une longueur, une surface ou un volume typiques. Il pourrait s'agir d'un diamètre dans le cas d'une sphère, d'une longueur latérale pour un cube, d'une surface ou d'un volume pour des particules plus compliquées. Les particules peuvent changer leurs propriétés dans un système en raison de plusieurs mécanismes. Cependant, les mécanismes les plus communs que nous avons considérés dans ce travail sont l'agrégation, la rupture, la nucléation et la croissance. Une brève description de ces mécanismes est donnée ci-dessous.

➤ **L'agrégation:**

L'agrégation ou l'agglomération est un processus dans lequel deux particules ou plus se combinent pour former une grande particule. Le nombre total de particules diminue dans un processus d'agrégation alors que la masse reste conservée. Ce processus est le plus fréquent dans les industries de transformation des poudres. L'agglomération de petites particules réduit la formation de poussière et améliore ainsi leurs propriétés de manipulation. Un autre avantage de la poudre agglomérée qu'elle est un taux de dissolution plus élevé, elle réduit la formation de globules, ou la flottation de la poudre. Une représentation schématique de l'agrégation est donnée dans la figure A.



Figure A. Mécanisme d'agrégation des particules [18].

L'agglomération dans le lit fluidisé s'effectue si après le séchage des ponts liquides, des ponts solides apparaissent. Ceci est réalisé grâce à l'addition délibérée d'un liant soluble. Le liquide lie les particules ensemble par une combinaison de forces capillaires et visqueuses jusqu'à ce que des liaisons plus permanentes soient formées par un séchage ultérieur. Dans la

littérature il existe un grand nombre de modèles théoriques disponibles pour prédire si deux particules en collision resteront ensemble. Ces modèles impliquent une large gamme d'hypothèses différentes sur les propriétés mécaniques des particules et les caractéristiques du système.

L'agrégation des gouttes liquides s'appelle coagulation. Alors que dans l'agglomération des particules solides, les particules originales restent intactes, en coagulation, les gouttes originales deviennent une partie indiscernable des gouttes formées nouvellement [19].

➤ **La rupture:**

Dans un processus de rupture, les particules se divisent en deux ou plusieurs fragments. La rupture a un effet significatif sur le nombre de particules. Le nombre total de particules dans un processus de rupture augmente tandis que la masse totale reste constante. Une représentation graphique de la rupture est illustrée à la figure B.



Figure B. Mécanisme de rupture des particules [18].

En cas de rupture des granules, il existe deux phénomènes distincts à considérer :

1. Rupture des granulés humides dans le granulateur.
2. Attrition ou fracture des granulés séchés dans le granulateur, séchage ou traitement ultérieur.

Pour une description détaillée, les lecteurs sont référencés à [20]. La rupture des granulés humides influencera et peut contrôler la distribution finale de tailles des granulés, en particulier dans les granulateurs à fort cisaillement. Dans certaines circonstances, les bris peuvent être utilisés pour limiter la taille maximale des granules ou pour aider à distribuer un classeur visqueux. D'autre part, l'attrition des granules secs conduit à la génération des amendes poussiéreuses. Comme l'objectif de la plupart des processus de granulation est de supprimer les amendes, il s'agit généralement d'une situation désastreuse à éviter.

➤ **La croissance:**

Les particules grandissent lorsqu'une matière non particulaire ajoute à la surface d'une particule. La croissance n'a aucun effet sur le nombre de particules, mais le volume total de particules augmente. La taille d'une particule augmente continuellement dans ce processus. Une représentation graphique de la croissance est donnée par la figure C.

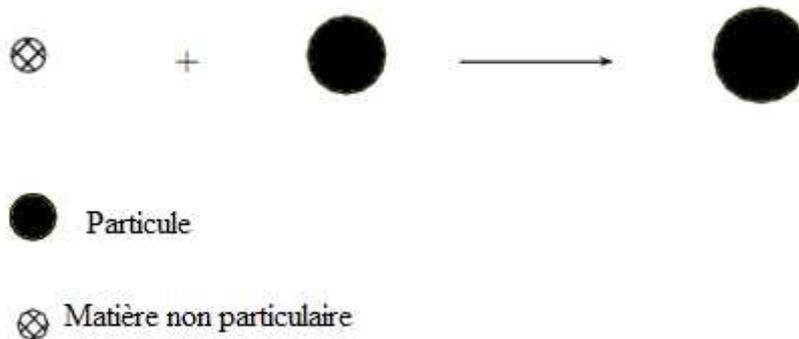


Figure C. Mécanisme de croissance des particules [18].

Dans un lit fluidisé, un liquide (solution ou masse fondue) est pulvérisé sur les particules solides par une buse d'injection sous forme de gouttes. Une partie des gouttes est déposée sur les particules, et elles sont distribuées par diffusion. Le transfert intensif de chaleur et de masse, en raison du flux de gaz environnant, entraîne une augmentation rapide de la dureté du film fluide par séchage si le produit initial est une solution ou une masse fondue, ou par refroidissement si le produit pulvérisé est fondu. Le solvant s'évapore dans le gaz chaud non saturé de fluidisation, et les particules solides restantes augmentent à travers la pulvérisation, l'étalement et le durcissement multiples, ayant un effet semblable à l'oignon sur la surface des particules, voir par exemple [21]. Ce phénomène est connu sous le nom de croissance.

➤ **La nucléation:**

La formation d'une nouvelle particule par condensation de matière non particulaire s'appelle nucléation. Les noyaux sont généralement traités comme les plus petites particules possibles dans le système. Une représentation graphique de la nucléation est donnée à la figure D.

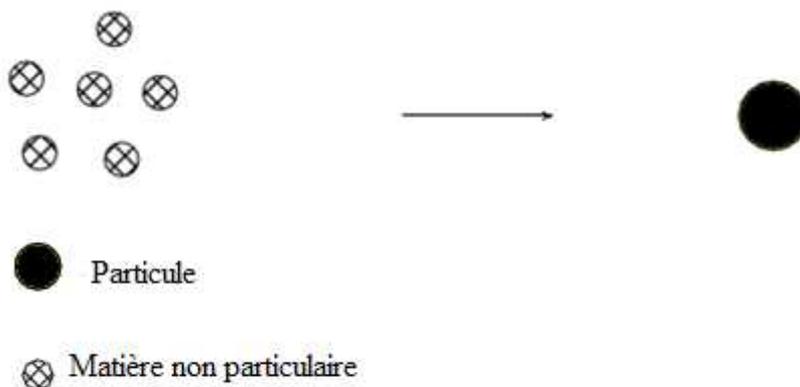


Figure D. Mécanisme de nucléation des particules [18].

La nucléation a également un effet significatif sur le nombre total de particules mais moins d'effet sur le volume total de particules.

Dans la littérature, la nucléation est considérée comme l'apparition de particules dans la cellule de plus petite taille. Cette considération est motivée par des problèmes de mesure de la taille des particules. En particulier dans la cristallisation, il n'est pas possible de distinguer entre les noyaux de différentes tailles en raison de résolutions insuffisantes des appareils de mesure dans cette gamme de particules de petites tailles. Un autre problème est la formation de noyaux dans une gamme qui est plus petite que la plus petite gamme mesurable. Par croissance et agglomération, ces particules deviennent visibles. Ce processus est souvent appelé nucléation [22]. Dans l'agglomération à lit fluidisé où les particules sont formées dans une plage de 50 μm à 2000 μm , la nucléation est signalée dans une large gamme de tailles de particules.

À la suite des mécanismes mentionnés ci-dessus, les particules changent leurs propriétés et, par conséquent, un modèle mathématique appelé bilan de population est nécessaire pour décrire le changement de la répartition de la propriété des particules. Les bilans de population décrivent l'évolution dynamique de la distribution d'une ou plusieurs propriétés.

Dans ce cadre [14, 23] sont parmi les premiers à introduire l'équation du bilan de population (EBP) dans la modélisation des processus de génie chimique, impliquant des opérations à la phase dispersée. De tels procédés comprennent des opérations unitaires réalisées dans les réacteurs agités discontinus et continus, ainsi que dans des équipements de contact différentiels tels que la cristallisation [24,25], Bulle [26], et des colonnes d'extraction liquide-liquide (CELL) [27,28]. Pour une bonne compréhension de la modélisation mathématique des colonnes d'extraction liquide-liquide, leurs avantages et leurs inconvénients, le lecteur intéressé pourrait se référer à [29].

La modélisation de ces phénomènes, basée sur les bilans de population, offre non seulement le maintien en phase dispersée (concentration volumique), mais aussi toute propriété intégrale associée à la distribution de particules (gouttes), telle que la taille moyenne des particules [30, 31,32]. Dans une colonne d'extraction liquide liquide l'EBP est habituellement formulé comme une loi de conservation en termes de concentration volumique (masse pour une densité de phase dispersée constante) [33, 30, 34, 36, 27]. Le modèle différentiel résultant prend en compte le transport des gouttes, La rupture, la croissance et l'agrégation ainsi que les conditions aux limites nécessaires, bien que ces dernières ne soient pas clairement énoncées dans la littérature.

L'application de l'approche de bilan de population devrait fournir des informations précieuses si aucune modélisation soignée de la rupture et de l'agrégation, ainsi que les lois sur le transport des gouttes n'est prise en considération. Cependant, en raison des récentes recherches approfondies pour déterminer la cinétique de rupture de gouttes, la croissance et l'agrégation, ainsi que le transport de gouttes à partir d'expériences de gouttes simples et d'essais, il devient plus possible d'introduire des modèles plus réalistes pour ces paramètres cinétiques et les lois de transport [37-44, 32].

L'équation de bilan de population donne lorsqu'elle est résolue, une description statistique complète du système, c'est-à-dire une fonction de densité en nombre pour un ensemble de gouttes en termes de taille, de concentration ou d'autres coordonnées internes.

Objectif de l'étude

Notre effort se concentrera sur la résolution. Nous simulons le problème sous MATHEMATICA en utilisant les méthodes semi analytique tels que MPH et MIV. Ces nouvelles techniques ont atteint un grand intérêt en mathématiques appliquées et en génie des procédés, car ils permettent la solution d'équations fonctionnelles linéaire et non linéaire de toutes sortes (algébrique, différentielle ordinaire, différentielle partielle, intégrale différentielle à retard, . . .) sans discrétisation des équations ou l'approximation des opérateurs par des schémas de linéarisation ou de perturbation, qui change le problème physiquement.

Organisation du mémoire

Le présent manuscrit sanctionnant ce travail est entamé par cette introduction générale qui donne une idée sur l'importance et l'intérêt du thème abordé, tout en soulignant les objectifs visés.

Le premier chapitre est consacré à l'intérêt pratique du thème, résidant derrière l'importance primordiale d'étudier les écoulements diphasiques. Ainsi, une étude bibliographique est rapportée sur les écoulements dans les colonnes d'extraction liquide liquide, ensuite à l'étude des méthodes de résolution de l'équation de bilan de population telles que : les méthodes numériques (méthodes stochastiques, méthodes d'ordre zéro, méthodes d'ordre élevé), les méthodes semi analytiques (la méthode d'itération variationnelle, et la méthode de perturbation homotopique).

Le deuxième chapitre représente les équations du modèle, et détaille la modélisation des réacteurs agités, ainsi que la modélisation des colonnes d'extraction liquide liquide.

Le troisième chapitre représente les résultats issus à la résolution des systèmes d'équations différentielles d'agrégation, de rupture ,de croissance et de la rupture et l'agrégation simultanée par MPH et MIV, qui sont comparés aux résultats analytiques disponibles, et ensuite l'application de la MIV aux équations de bilan de population pour les processus d'agrégation, de croissance et de rupture dans une colonne d'extraction liquide liquide.



CHAPITRE I

CHAPITRE I

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

I.1. Introduction

L'équation du bilan de population (EBP) peut être résolue analytiquement pour certaines formes très simples des fonctions de rupture, d'agrégation et de croissance. Cela conduit certainement à une discussion sur les méthodes numériques pour résoudre l'EBP. Cependant que les solutions analytiques connues sont très utiles pour évaluer la précision des schémas numériques. Il existe une énorme littérature publiée pour résoudre les EBP spatialement homogènes, où des revues récentes ont pu être trouvées dans [44] et [45]. Ces méthodes peuvent être classées en méthodes d'ordre zéro et supérieur, où les méthodes d'ordre zéro représentent la fonction de densité numérique par une valeur constante dans des intervalles contigus [46]. D'autre part, les méthodes d'ordre élevées se rapprochent de la fonction de densité en nombre par un polynôme d'ordre élevé, généralement de degré trois, sur des éléments finis ou des polynômes continus [47,48]. Un sous-groupe important des méthodes d'ordre zéro est celui des méthodes dites cohérentes internes par rapport aux propriétés intégrales sélectionnées. Par consistance interne, Il est signifié que la propriété intégrale souhaitée associée à la densité en nombre moyenne obtenue à partir d'équation de bilan de population discrète doit être la même que celle obtenue à partir de son homologue continu [44]. Cette cohérence interne permet de prédire les propriétés intégrales souhaitées avec précision, et améliore en même temps la précision de la distribution des gouttes prédites sur les grilles grossières [44].

Attarakih et al [45] ont étendu la technique de pivot fixe de Kumar et Ramkrishna [49] pour des systèmes à écoulement continu, notamment pour décrire l'hydrodynamique d'une colonne d'extraction liquide liquide (CELL) CDR. Le schéma étendu est appelé la technique de pivot fixe généralisé (PFG), ils ont trouvé suffisamment cette méthode rapide pour simuler le comportement hydrodynamique de la CELL susmentionnée.

Une autre manière de résoudre l'EBP, est d'utiliser la méthode des moments (MDM), où la dimensionnalité d'EBP par rapport aux coordonnées internes est réduite en intégrant tout

ou une partie entre eux. Comme indiqué dans [14] la MDM souffre de problèmes de fermeture, c'est-à-dire la difficulté d'exprimer l'EBP en termes d'un ensemble complet et fini de moments. Ce problème a été récemment traité et examiné par Diemer et Olsen [50].

Ramkrishna [44] a évalué de nombreuses variantes de la MDM, pour résoudre l'EBP pour la rupture de particules dans un réacteur discontinu, il a conclu que la règle de fermeture interpolatrice basée sur les polynômes de Lagrange utilisant le logarithme des moments comme une variable dépendante, et l'indice des moments comme indépendant, est une approche suffisamment précise.

Une méthode générale et suffisamment précise pour surmonter le problème de fermeture susmentionné est introduite par McGraw [51] est appelée la méthode des moments quadratique (MDMQ). La méthode est basée sur le travail de Gordon [52] où ils ont reformulé le problème de l'intégration de type Gauss par rapport à toute fonction de poids arbitraire. Au lieu des polynômes d'ordre élevé utilisés pour trouver les points en quadrature de Gauss et les abscisses, l'approche de Gordon [52] consiste à utiliser les moments de la distribution de faible ordre pour trouver ces points et ces abscisses en résolvant un problème de valeurs propres bien conditionné, ils ont trouvé que la méthode produit des résultats numériques précise sans aucune connaissance préalable de la fonction de densité en nombre, ou de simplification, de séparation des fréquences de rupture et de coalescence. La MDMQ est largement testée et validée, où elle s'est avérée d'être une méthode efficace fournit un compromis entre la pleine rigueur et les solutions numériques réalisables [53-57, 51]. Cependant, Wright et al [57] ont été parmi les premiers qui ont essayé d'étendre cette méthode aux EBP bivariables. Ils ont étendu la MDMQ (c'est ce qu'on appelle la méthode de moments quadratiques bivariable (MDMQBV)) pour simuler des nanoparticules inorganiques subissant simultanément la coagulation et la rupture. Rosner et Pyknen [58] ont suivi la même approche, et ils ont rapporté des problèmes de calcul concernant la routine, qui trouve les points en quadrature. Piskunov et Golubev [59] ont essayé de trouver les nœuds en quadrature, et les exprimant comme racines d'un polynôme de coefficients inconnus. Ce problème de la recherche des racines est un problème bien connu mal conditionné, surtout lorsque l'ordre polynomial est supérieur à quatre. Gordon [52] a essayé une combinaison de ces coefficients polynomiaux, et des dérivées temporelles des points et nœuds de la quadrature. Cependant, le problème de la matrice mal conditionnée composée des coefficients dérivés du temps est intrinsèquement impliqué dans l'algorithme. Malgré ces difficultés, la MDMQ représente une approche attrayante pour la résolution des EBP, où

leurs complexités empêchent parfois les méthodes de discrétisation directe d'être appliquées facilement.

Une combinaison de coagulation et de la croissance a été utilisée par Tsang et Hippe [60]. Meng et al [61] présentent un modèle résolu en taille et chimiquement pour la dynamique des aérosols dans une formulation en masse volumique. Gelbard et Seinfeld [62-64] ont résolu les équations dynamiques couplées à l'aide de collocation orthogonale avec des éléments finis. Lushnikov [65] a utilisé les fonctions génératrices pour résoudre analytiquement l'équation de coagulation de particules constituées de monomères de deux sortes, selon les hypothèses d'une coagulation constante et notamment des distributions initiales. Pilinis [66] a établi les équations dynamiques pour des particules multiples et résout les équations en utilisant une technique de Galerkin avec des éléments linéaires.

L'équation de la croissance des densités en nombre a une forme d'une équation d'advection, avec la "vitesse d'écoulement" égal à la dérivée du volume par rapport au temps [67]. Différentes méthodes de résolution des équations de croissance ont été proposées dans [68-71]. Dhaniyala et Wexler [72] ont comparé plusieurs schémas numériques pour la modélisation de croissance des aérosols. Nguyen et Dabdub [73] ont utilisé une approche semi-Lagrange pour résoudre l'équation de croissance.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressées aux méthodes semi-analytiques des modèles continus (des distributions continues de taille et des équations dynamiques générales sous forme continue).

I.2. Méthodes de résolution de l'équation de bilan de population

La résolution de l'équation de bilan de population est complexe. Plusieurs méthodes ont été proposées pour résoudre cette équation. Dans les sections suivantes, une brève description de ces méthodes est faite.

I.2.1. Revue des méthodes numériques disponibles

Une étude intéressante de plusieurs méthodes numériques pour les équations dynamique de particules est donnée dans [74]. Généralement, les méthodes numériques les plus fréquemment utilisées pour la solution d'EBP pourraient être regroupées en trois catégories: méthodes stochastiques, méthodes d'ordre élevé et d'ordre zéro, qui sont décrites comme suit :

I.2.1.1. Méthodes stochastiques

Les approches stochastiques, qui sont différenciées des méthodes de différences finies, sont des techniques conçues pour la simulation du comportement du système par le générateur

des nombres aléatoires utilisé pour l'identification des fonctions probabilistes régissant le comportement du système [75].

Cette approche de simulation stochastique a l'avantage de pouvoir simuler l'EBP multi variable à propos de la coordonnée interne, lorsque les autres méthodes numériques deviennent extrêmement coûteuses. La présentation d'algorithmes actuellement utilisés pour la simulation stochastique d'EBP dans un réservoir agité discontinu. La simulation directe et les algorithmes de flux massique se trouvent dans [76].

I.2.1.2. Méthodes d'ordre élevé

La plupart des méthodes d'ordre supérieur essaient d'approximer la fonction de distribution par un ensemble de fonctions linéairement indépendantes d'ordre supérieur à zéro, par la méthode des éléments finis. Gelbard et Seinfeld [63] ont résolu l'EBP pour la coalescence de gouttes dans un réacteur agité discontinu utilisant la collocation orthogonale à éléments finis avec des polynômes cubiques, et mettant à l'échelle logarithmique le diamètre des gouttes.

Nicmanis et Hounslow [48] ont résolu l'EBP pour un réacteur agité continu à l'état stationnaire utilisant les méthodes de Galerkin et de collocation orthogonale en éléments finis avec des polynômes cubiques. Malgré leur précision, l'inconvénient majeur de ces méthodes est la charge de calcul excessive imposée par l'évaluation des intégrales doubles.

Cette particularité a lieu lorsque les fonctions de rupture et de coalescence dépendent d'une certaine propriété intégrale associée à la population, telle que le hold-up de la phase dispersée qui dépend du temps.

Mahoney et Ramkrishna [77] ont abordé cette question, en plus les difficultés associées aux singularités de la fonction à intégrer, où des suggestions sont présentées pour supprimer ces singularités pour des fréquences de coalescence spécifiques. Wulkow et al [78] ont résolu l'EBP pour le procédé de cristallisation, ils ont utilisé la méthode de Galerkin en éléments finis, qui est adaptable à la taille et à l'ordre des gouttes.

L'inconvénient principal de cette méthode est la difficulté de dissocier les fréquences dépendantes du temps (coalescence et rupture) des variables dépendants du temps, et par conséquent le coût de calcul informatique est augmenté excessivement, surtout lorsqu'il y a plus d'une coordonnée dans l'EBP est impliquée. Une revue approfondie de ces méthodes doit être trouvée dans [75,44].

I.1.2.3. Méthodes d'ordre zéro

Les méthodes d'ordre zéro comme rapporté dans [46] sont celles concernées par une représentation de la distribution de population, après division de la taille de gouttes en un

nombre fini de classes, par une valeur constante (polynôme d'ordre zéro) dans chaque classe. De cette façon l'équation originale intégral-différentielle partielle est transformée en système d'équations aux dérivées ordinaires pour lesquelles la solution numérique est bien établie.

Les méthodes d'ordre zéro pourraient être classées en deux grandes classes selon [49]: schémas de discrétisation internes cohérents et incohérents par rapport aux propriétés intégrales sélectionnées.

I.2.2. Propriétés des schémas numériques

Un certain nombre de notions est nécessaire lors de la résolution des lois de conservation scalaire au moyen de leurs équivalents discrétisés. Les trois principales sont la convergence, la stabilité et la consistance. Ces trois propriétés permettent de relier la solution exacte des équations continue à la solution exacte des équations discrétisées et à la solution numérique obtenue. Ces différents liens, résumés sur la **figure I.1**, sont:

I.2.2.1. Consistance :

Pour vérifier la consistance des schémas, on vérifie l'identité (à un certain ordre de dérivation près) entre l'équation différentielle de départ et l'équation discrétisée après avoir effectué un développement limité de Taylor des valeurs discrètes de cette dernière équation.

Le schéma est dit consistant si lorsque l'on fait tendre Δx et Δt vers zéro, on retrouve les équations aux dérivées partielles de départ :

$$F_{i+\frac{1}{2}}(v, \dots, v) = F(v)$$

Ceci signifie que si tous les arguments de $F_{i+\frac{1}{2}}$ sont égaux à v alors le flux numérique est le même que le flux physique en $U = v$.

I.2.2.2. Ordre d'un schéma

L'exactitude d'un schéma numérique mesure la qualité de l'approximation de la solution exacte du problème. L'erreur totale est obtenue en retranchant la solution exacte du problème de la solution discrétisée. Cette erreur est fonction de Δt^q et Δx^p où Δx et Δt sont respectivement le pas d'espace et de temps de discrétisation. L'ordre du schéma numérique est alors q dans le temps et p dans l'espace.

I.2.2.3. Stabilité

Un schéma est stable si l'erreur entre la solution exacte du problème et la solution discrétisée reste bornée dans le temps et /ou dans l'espace. La plupart des schémas ont une stabilité conditionnée par le choix de Δx et Δt . Nous rappelons que les schémas numériques de type explicite sont stables sous la condition CFL (Courant-Friedrich-Lewy).

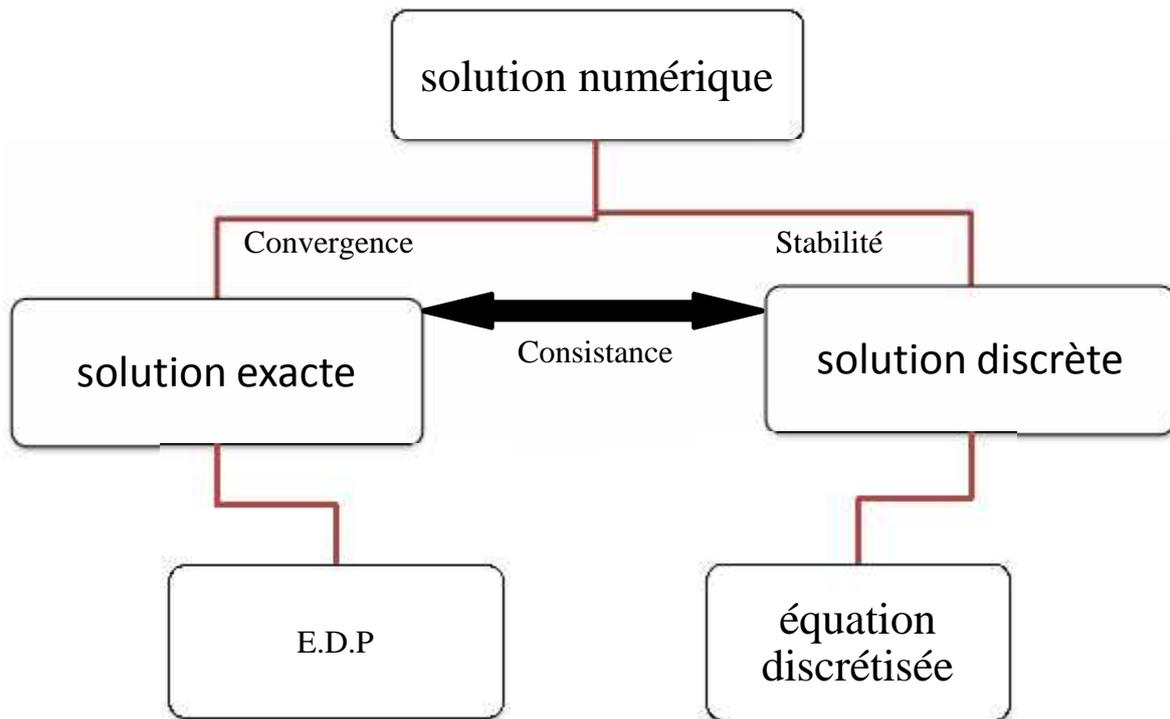


Figure I.1. Solution exacte, numérique et discrète.

I.2.3. Revue des méthodes semi-analytiques disponibles

Les solutions analytiques connues sont très utiles pour évaluer la précision des schémas numériques. Les méthodes semi-analytiques sont proposées pour résoudre les modèles mathématiques, et comme l'équation du bilan de population est une équation intgro-différentielle, ces méthodes ont été appliquées pour obtenir des solutions officielles ou bien la solution exacte. Les méthodes semi-analytiques seront introduites telles que la méthode d'Adomian, la méthode d'itération variationnelle et la méthode de perturbation homotopique.

I.2.3.1. Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)

La méthode de décomposition d'Adomian a été introduite pour la première fois depuis le début des années 1980 par George Adomian président du Centre de mathématiques appliquées de l'université de Géorgia [79], pour résoudre un large éventail de problèmes dont les modèles mathématiques donnent une équation ou un système d'équation impliquant algébrique, différentiel, intégral et intgro-différentiel [79,80, 81].

La méthode de décomposition d'Adomian calcule précisément la solution en série, présente un grand intérêt pour les sciences appliquées, l'ingénierie, la physique, la biologie et la chimie et d'autres domaines [82, 83]. Le but de cette méthode est de trouver une théorie unifiée pour la solution des équations aux dérivées partielles (EDP), un objectif qui a été

remplacé par la théorie plus générale de la méthode homotopique. L'aspect crucial de la méthode est l'emploi des polynômes d'Adomian qui permettent la convergence de solution de la partie non linéaire de l'équation, sans linéariser le système.

La méthode de décomposition d'Adomian (MDA) donne la solution comme une série de puissance infinie, qui converge habituellement à la solution exacte [84].

La forme générale d'une équation différentielle peut être écrite comme suit :

$$Fu = g. \quad (\text{I.1})$$

$$F = R + L + N. \quad (\text{I.2})$$

En substituant l'équation (I.1) dans l'équation (I.2) on obtient :

$$Ru + Lu + Nu = g. \quad (\text{I.3})$$

Où L est un opérateur facilement inversible, R est le reste de l'opérateur linéaire, N correspond aux termes non linéaires,

Nous pouvons écrire l'équation (I.3) comme suit :

$$Lu = g - Lu - Nu. \quad (\text{I.4})$$

En multipliant l'équation (I.4) par L^{-1} , on obtient :

$$L^{-1}(Lu) = L^{-1}g - L^{-1}(Lu) - L^{-1}(Nu). \quad (\text{I.5})$$

Où $L^{-1} = \int \dots \int (\cdot) dt^n$ est l'inverse de l'opérateur L .

Par conséquent, l'équation (I.5) devient :

$$u = u_0 - L^{-1}(Ru) - L^{-1}(Nu). \quad (\text{I.6})$$

Où

$$L^{-1}(Lu) = u - u(0) + tu'(0). \quad (\text{I.7})$$

Donc, u peut être présenté comme une série :

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} U_n. \quad (\text{I.8})$$

Le terme non-linéaire de $N(u)$ sera décomposé par la série infinie des polynômes d'Adomian A_n [85, 86] :

$$A_n = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \{ \cdot \}^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \{ \cdot \}^i u_i \right) \right]_{\{ \cdot \}=0} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{I.9})$$

Concernant la convergence de la méthode de décomposition d'Adomian, elle a été intensivement étudiée par [87-89].

I.2.3.2. Méthode d'itération variationnelle (MIV)

La méthode d'itération variationnelle a été proposée pour la première fois par le mathématicien chinois He [90-94]. Qu'il est un modificateur Lagrange général modifié [95] pour résoudre efficacement, facilement et avec précision, une grande classe de problèmes non linéaires avec des approximations qui convergent rapidement vers des solutions précises.

Donc cette méthode est maintenant largement utilisée dans de nombreux domaines tels que la physique [96], la chimie [97], les sciences biomédicale [98] et les sciences de l'ingénierie pour étudier les équations aux dérivées partielles linéaires et non linéaires [99, 100]. D'autre part, l'un des sujets intéressants parmi les chercheurs est de résoudre les équations integro-différentielles. En fait, les équations integro-différentielles se posent dans de nombreux processus physiques tels que le processus de formation du verre [101], la nano hydrodynamique [102], la condensation par goutte [103] et l'ondulation du vent dans le désert [104].

J.H. He a utilisé la méthode d'itération variationnelle pour résoudre certaines équations integro-différentielles [105]. Ce mathématicien chinois [105] choisit une solution approximative initiale sous forme de solution exacte avec des constantes inconnues. Dans [106] la méthode d'itération variationnelle a été appliqué pour résoudre le système d'équations integro-différentielles linéaires. Elle est appliquée avec succès à l'équation différentielle ordinaire autonome [107], aux équations à dérivées partielles non linéaires à coefficients variables [108], aux équations de Schrödinger de Vries Burgers (KDV), du KDV généralisé et des eaux peu profondes [109], aux équations de Burgers et de Burgers couplées [110], à l'équation différentielle partielle de Helmholtz [111], et récemment à des équations différentielles fractionnaires non linéaires avec dérivée différentielle de Caputo [112], et d'autres domaines [113-115, 116-119].

Nous pouvons écrire la forme générale de l'équation différentielle voir l'équation (I.1) comme suit [94] :

$$F = L + N \tag{I.10}$$

En substituant L'équation (I.1) dans l'équation (I.10) on obtient :

$$Lu + Nu = g \tag{I.11}$$

Où L un opérateur linéaire, N un opérateur non linéaire, g un terme inhomogène.

Selon la méthode d'itération variationnelle, on peut construire une correction fonctionnelle comme suit

$$U_{n+1} = U_n(t) + \int_0^t \left(U_n(\langle) + N\tilde{u}(\langle) - g(\langle) \right) d\langle . \quad (\text{I.12})$$

Où λ est un multiplicateur général de Lagrange [120] qui peut être identifié de manière optimale par la théorie variationnelle, l'indice n désigne l'approximation d'ordre n , \tilde{u} est considéré comme une variation limitée [121], qui signifie $u\tilde{u} = 0$. Pour des problèmes linéaires, la solution exacte peut être obtenue par une seule étape d'itération due au fait que le multiplicateur de Lagrange peut être identifié exactement. Dans des problèmes non linéaires, pour déterminer le multiplicateur de Lagrange de manière simple, les termes non linéaires doivent être considérés comme des variations limitées. Par conséquent, la solution exacte peut être obtenue par $u = \lim_{n \rightarrow \infty} U_n$.

La convergence du MIV a été étudiée dans [122]. Il a obtenu quelques résultats sur la vitesse de convergence de cette méthode.

I.2.3.3. Méthode de perturbation homotopique(MPH)

La méthode de perturbation homotopique est introduite par le chercheur chinois Dr. Ji Huan He en 1998 est devenue un outil élégant entre les mains des chercheurs qui cherchent des solutions simples mais efficaces à des problèmes complexes dans de nombreux domaines de la science et de la technologie. Dans une série de documents He [123,124], il a décrit et affiné la MPH, et montré son utilité par des équations différentielles non linéaires. En règle générale, la MPH tend à produire des solutions plus élégantes par rapport aux autres techniques concurrentes telles que la méthode d'analyse homotopique (MAH), les méthodes de perturbation régulières, etc., mais ce n'est pas au prix de la précision. En général, les solutions produites par la MPH sont aussi précises que les solutions données par les autres méthodes approximatives. Récemment, He a fourni un compte du MPH hautement fiable dans une monographie [125].

La MPH est en fait un couplage de la méthode de perturbation traditionnelle et de l'homotopie en topologie [126]. La méthode fournit une convergence très rapide de série de solutions dans la plupart des cas, généralement seulement quelques itérations produisent des solutions très précises.

Cette méthode a été appliquée aux équations intégrales fonctionnelles [127], à l'équation couplée de diffusion et de réaction [128], à l'équation de Helmholtz et à l'équation

du cinquième ordre de KdV [129], au modèle épidémique [130], détermination de la relation fréquence-amplitude d'un oscillateur non linéaire avec discontinuité [131], solution d'onde itinérante de l'équation de KdV [132]. Momani et Odibat [133,134] ont proposé une MPH modifiée et l'ont utilisé pour les équations différentielles partielles non linéaires d'ordre fractionnaire et l'équation différentielle quadratique de Riccati d'ordre fractionnaire. Elle a été appliquée au flux de film mince d'un fluide de quatrième classe dans un plan incliné [135], à l'équation intégrale non linéaire de Voltera-Fredholm [136], au VIE singulier du second ordre [137] et au problème de programmation linéaire appliqué aux techniques d'optimisation dans diverses industries [138], au modèle de réaction enzymatique ampérométrique appliqué en chimie nucléaire [139], à des modèles de population continus pour des espèces uniques et intéressantes en économie [140], aux équations différentielles fonctionnelles [141], à l'équation de dynamique de gaz fractionnaire [142], à la chaleur fractionnaire et les équations ondulatoires [143]. Comme il est dit dans Belendez et al [144], l'étude des problèmes non linéaires est d'une importance cruciale non seulement dans tous les domaines de la physique, mais aussi dans l'ingénierie et dans d'autres disciplines, puisque la plupart des phénomènes dans notre monde sont essentiellement non linéaires et sont décrits par les équations non linéaires.

Il est très important de résoudre des problèmes non linéaires, et en général il est souvent plus difficile d'obtenir une approximation analytique que numérique pour le problème non linéaire donné. Belendez et al [144,145] ont fait une bonne enquête sur cette méthode. Belendez et al [145] ont utilisé la méthode de perturbation homotopique pour obtenir des approximations analytiques d'ordre supérieur aux solutions périodiques à un oscillateur non linéaire avec des discontinuités pour lesquelles la force de rappel élastique est une force antisymétrique et constante. Un excellent accord entre les périodes approximatives et l'exacte a été démontré et discuté.

Pour illustrer le concept de base de la méthode de perturbation homotopique, l'équation différentielle suivante non linéaire est considérée comme [123, 146, 147, 148] :

$$A(u) - f(r) = 0, r \in \Omega \quad (\text{I.13})$$

Avec des conditions aux limites :

$$S\left(u, \frac{\partial u}{\partial n}\right) = 0, r \in \partial \Omega \quad (\text{I.14})$$

Où r est une variable appartenant à un domaine donné de Ω , u est en fonction de x . Elle doit être déterminée en résolvant l'équation (I.13).

A : est un opérateur différentiel général agissant sur la fonction u .

f : est une fonction analytique connue en fonction de r , et : sont les conditions aux limites dans Ω .

Généralement A : est un opérateur peut être divisé en deux parties L et N comme

$$A(u) = L(u) + N(u)$$

Où L : un opérateur linéaire,

N : un opérateur non linéaire,

Donc, l'équation (I.1), peut être réécrite comme suit :

$$L(u) + N(u) - f(r) = \quad (I.15)$$

Par la technique d'homotopie [149, 150], nous construisons une homotopie $v(r, p)$:

$\Omega \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$:

$$h(v, p) = (1-p)[L(v) - L(u_0)] + p[A(v) - f(r)] = 0, p \in [0, 1], r \in \Omega. \quad (I.16a)$$

$$h(v, p) = [L(v) - L(u_0)] + p[N(v) - f(r)] = 0. \quad (I.16b)$$

Où $p \in [0, 1]$: est un paramètre d'intégration,

u_0 : est une première approximation de l'équation (I.13), qui la satisfait évidemment les conditions aux limites dans l'équation (I.15) que nous avons :

$$h(v, 0) = L(v) - L(u_0) = 0. \quad (I.17)$$

$$h(v, 0) = A(v) - f(r) = 0. \quad (I.18)$$

Le processus de changement de p à partir de zéro à l'unité. En topologie, cela est appelé déformation, et $L(v) - L(u_0)$, $A(v) - f(r)$ sont appelés homotopiques.

On suppose que la solution de l'équation (I.16a) et (I.16b) peut être écrite comme une série de puissance de p :

$$v = v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots \quad (I.19)$$

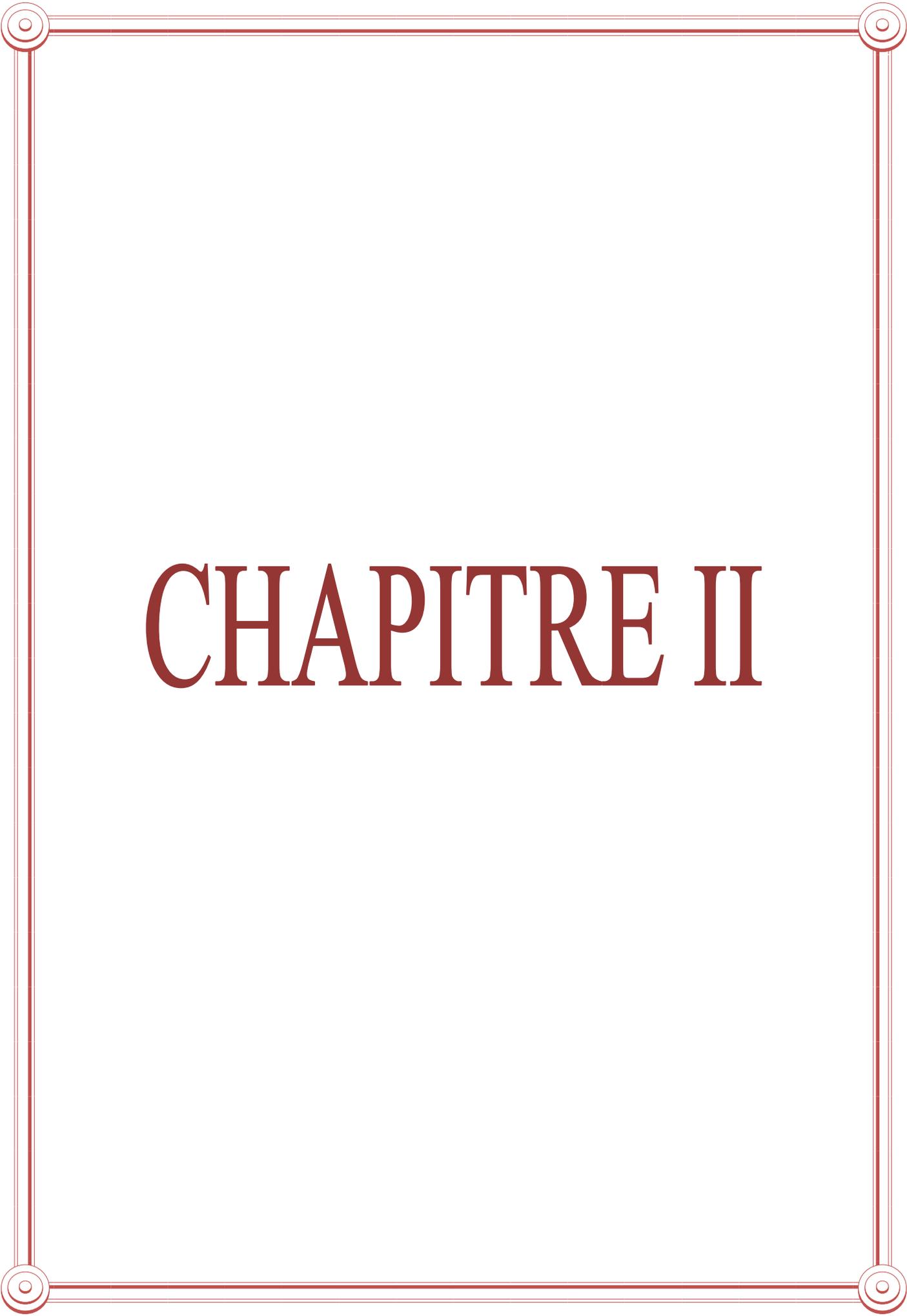
On pose $p = 1$ conduire à la solution approchée de l'équation (I.13) :

$$u = \lim_{p \rightarrow 1} v = v_0 + v_1 + v_2 + \dots \quad (I.20)$$

La convergence de cette méthode a été prouvée par le mathématicien chinois He [151].
L'équation (I.16a) peut être réécrite comme :

$$h(v, p) = p \left[L(u_0) + N(v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots) - f(r) \right] + \left[L(v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots) - L(u_0) \right] = 0. \quad (\text{I.21})$$

Les méthodes semi-analytiques présentées dans ce chapitre (MIV et MPH) sont appliquées dans notre travail pour résoudre l'équation du bilan de population. Nous avons constaté que ceux-ci se caractérisent par la simplicité et la facilité de trouver une solution plus rapide que celles des méthodes numériques.



CHAPITRE II

CHAPITRE II

MODELISATION DES COLONNES D'EXTRACTION LIQUIDE-LIQUIDE

II.1. Introduction

La modélisation des procédés industriels est d'un grand intérêt industriel. Elle permet de prédire la qualité des produits obtenus par différent processus dans différentes condition opératoires, a priori sans avoir besoin de construire des unités expérimentales. Cela est d'autant plus intéressant lorsqu'il s'agit de produits dangereux ou radioactifs. Par exemple la prédiction de la distribution de taille de particules (DTP) est un élément clé pour le contrôle de la qualité des produits. Sa modélisation nécessite l'introduction de l'équation de bilan de population au système d'équations.

La séparation des phases, est un problème majeur dans plusieurs industries, car la présence d'une phase dispersée peut produire l'érosion ou la dégradation des équipements. Les processus physiques de la séparation ne sont généralement pas complètement compris en raison de la complexité des phénomènes, différents acteurs impliqués, tels que, la coalescence la rupture, la croissance et la nucléation de la phase dispersée, résultant en un système complexe de phase polydispersée [152].

Généralement, la modélisation des équipements de séparation telle que les contacteurs liquide-liquide, complètement agités et différentiels, est basée sur l'approche de bilan de population des particules (gouttes) qui est surtout utilisée pour décrire le comportement hydrodynamique complexe de la phase dispersée [153]. Ça complexité due aux phénomènes de rupture et de coalescence, qui résultent dans une population distribuée des particules.

Dans ce cadre, il apparaît que dans [154, 155], les auteurs étaient parmi les premiers à introduire le modèle de l'équation de bilan de populations dans la modélisation de certains procédés de génie chimique faisant intervenir une phase dispersée de tels processus incluent les opérations unitaires effectuées dans les réacteurs agités continus et discontinus, ainsi que

dans des contacteurs différentiels tel que rapporté par exemple dans [156,157] pour la cristallisation, et dans [158,159] pour les colonnes d'extraction liquide-liquide.

Ce chapitre est constitué de deux parties, la première partie représente la modélisation des réacteurs agités, et la deuxième est consacrée à la modélisation des colonnes d'extraction liquide liquide.

II.2. Modélisation des réacteurs agités

II.2.1. Equation de bilan de population

L'équation du bilan de population a été utilisée pour la modélisation de variétés de systèmes particuliers. Un bilan de population (BP) est une manière de décrire l'évolution au cours du temps et dans l'espace d'une population d'entités dénombrables qui possèdent un certain nombre de propriétés. Il existe différents modèles de bilan de population mais ils sont tous appropriés pour décrire les processus de transport et de cinétique réactionnelle des systèmes de phase dispersée. L'équation du bilan de population (EBP) fait alors le lien entre la cinétique réactionnelle, l'hydrodynamique du réacteur et la propriété des gouttes. La distribution continue des gouttes dans un réacteur bien agité est généralement décrite par une fonction de densité en nombre $n(v, t)$, qui possède de nombreuses définitions suivant les propriétés étudiées de la population. Ainsi, à chaque goutte correspondante des coordonnées de la vectrice propriété $\zeta (x_1, \dots, x_p)$ qui caractérisent son état interne (longueur, surface, densité).

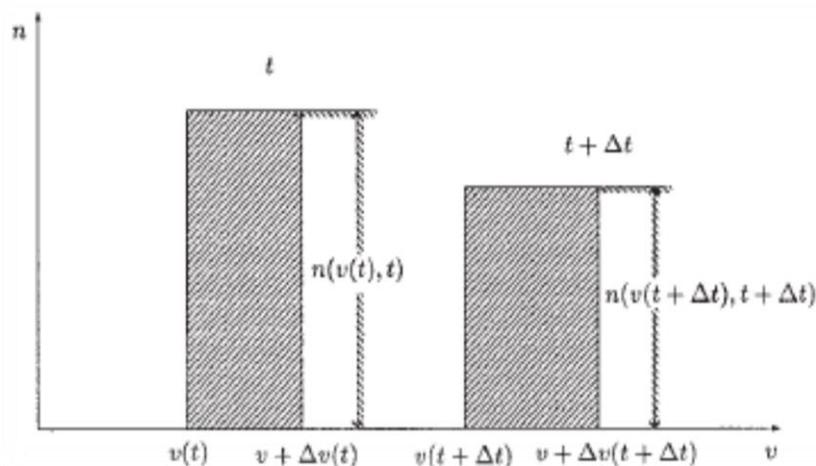


Figure II.1. Bilan de population [160].

Le caractère poly dispersé de la phase est représenté par une loi de distribution de volume, notée $n(v, t)$. L'intégration de cette distribution sur l'ensemble des tailles présentes conduit à la fraction de volume de réacteur occupée par la phase dispersée à un volume v dans le réacteur au temps t , c'est-à-dire la rétention $\phi(v, t)$, d'où

$$\phi(v, t) = \int_0^{v_{\max}} v n(v, t) dv \quad (\text{II.1})$$

V_{\max} représente le volume maximal de particule, observé dans le réacteur.

Le développement du modèle est basé sur l'équation qui résulte d'un bilan volumique autour d'un volume élémentaire dans le corps du réacteur et qui fait intervenir quatre contributions : les entrées, les sorties, le terme de production et enfin le terme d'accumulation.

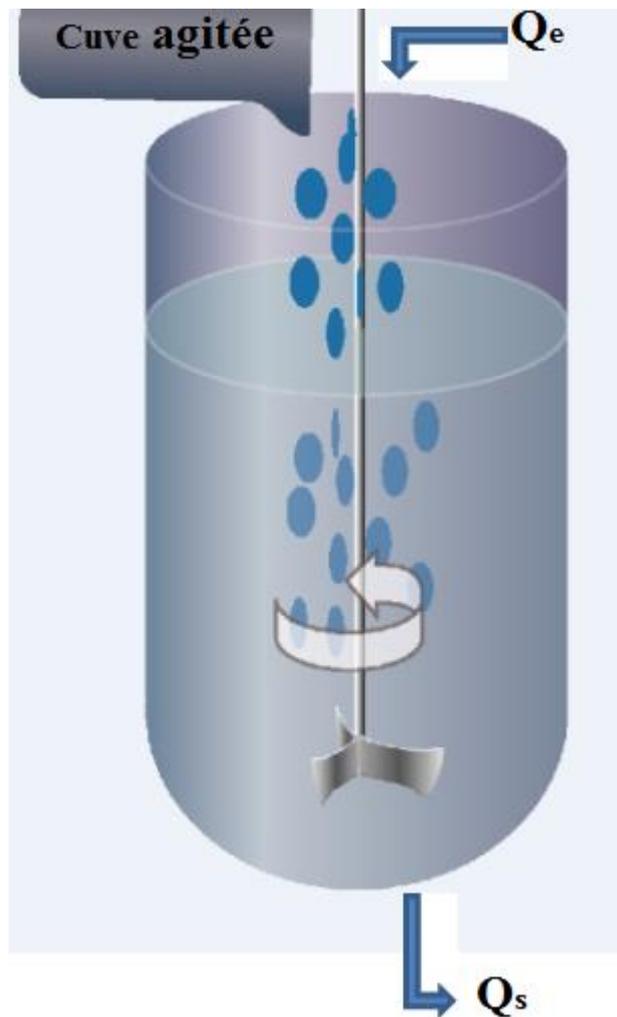


Figure II.2. Cuve agitée.

II.2.2. Bilan de population sur une classe de taille $[v, v + dv [$

Prenons un sous-ensemble ou classe de particules (gouttes) dont les tailles sont comprises entre v et $v + dv$. Ce sous-ensemble peut être alimenté ou vidé comme nous l'avons par différents processus : nucléation, croissance, agrégation, rupture, dissolution...

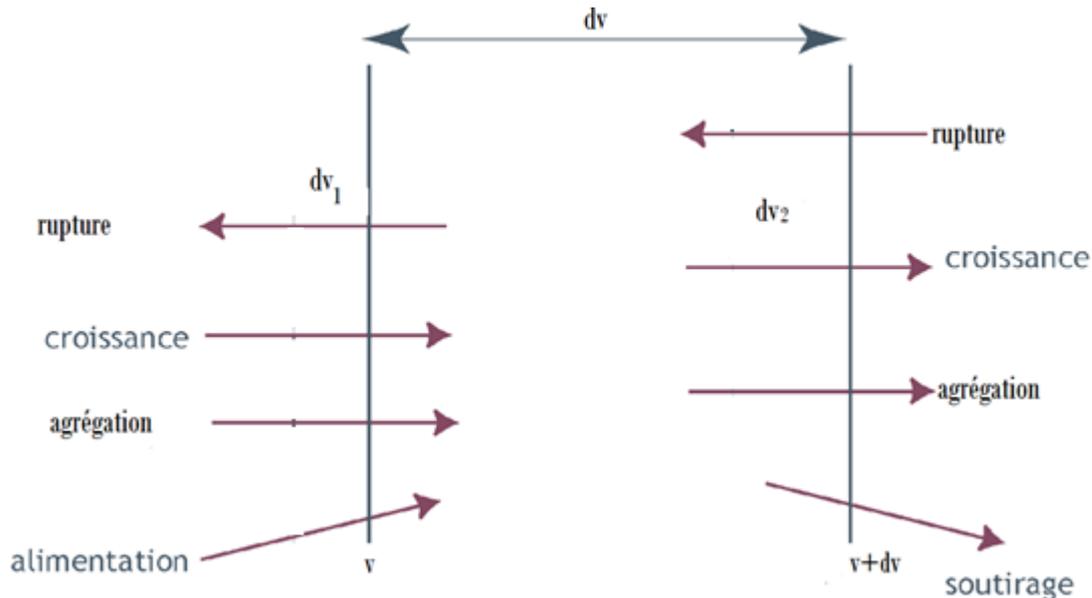


Figure II.3. Les différents processus intervenant dans le bilan de population [161].

Mathématiquement, le bilan de population consistera à exprimer que sur une enceinte et sur une classe de taille donnée, on a :

[Nombre de particules (gouttes) entrant dans une classe] = [nombre de particules sortant de cette classe] + [accumulation de particules dans cette classe].

Soit un réacteur agité de volume V , alimenté par un débit Q_e d'une suspension caractérisée par sa densité de population n_e . On soutire un débit volumique Q_s , la distribution granulométrique du débit de soutirage est celle présente dans le réacteur. Posons la population de particules suivantes à l'instant t en suspension dans une solution sursaturée uniformément [161] :

- $N(t) = \int_0^{v_{\max}} n(v, t) dv$: nombre de particules (gouttes) de taille appartenant à la classe $[v, v + dv [$.

Par souci de simplification, nous supposons que la vitesse de croissance des particules $G = \frac{dv_1}{dt}$ est indépendante de la taille des particules.

À l'instant $t + dt$, les particules (gouttes) auront donc toutes grossi de $dv_1 = Gdt$.

II.2.3. Bilan de population sur une classe de particules (gouttes) de taille $[v, v + dv[$

On considère l'évolution du nombre de particules dans une classe de taille $[v, v + dv[$ entre deux instants t et $t + dt$

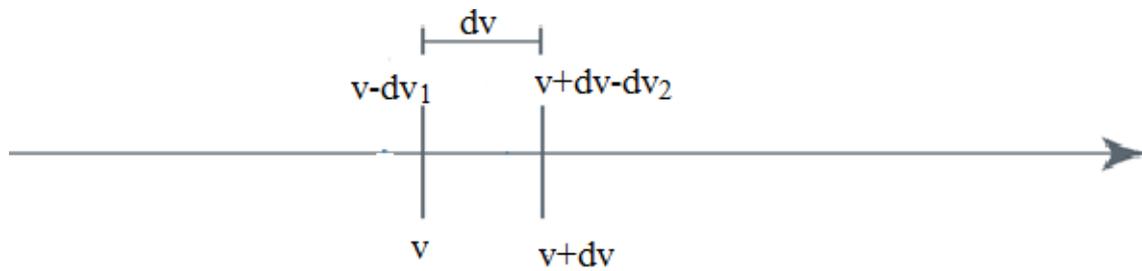


Figure II.4. Évolution du nombre de particules dans la classe de particules de taille $[v, v + dv[$ entre deux instants t et $t + dt$ [161].

Entre t et $t + dt$, les particules sont rentrés dans la classe des particules de taille qui se trouvaient à $v - dv_1$ et sont sorties des particules qui se trouvaient à $v + dv - dv_2$.

Toute particule ayant une augmentation de taille par croissance strictement inférieure à dv_2 restera dans la classe $[v, v + dv[$ et toute particule ayant une augmentation de taille supérieure ou égale à dv_2 sortira de la classe $[v, v + dv[$ par croissance.

dv_1 et dv_2 représentent donc l'augmentation de taille que doivent présenter des particules pour respectivement entrer dans la classe et sortir de la classe $[v, v + dv[$. Avec $dv_1 \leq dv$ et $dv_2 \leq dv$.

dv_1 et dv_2 peuvent être calculées grâce à la vitesse de croissance des particules [161] :

$$dv_1 = G(v - dv_1, t)dt + dG(v - dv_1, t)dt \quad (\text{II.2})$$

$$dv_2 = G(v + dv - dv_2, t)dt + dG(v + dv - dv_2, t)dt \quad (\text{II.3})$$

Par la suite les termes $dG(v - dv_1, t)$ et $dG(v + dv - dv_2, t)$ qui sont des termes du second ordre seront négligés et nous retiendrons $dv_1 = G(v - dv_1, t)dt$ et $dv_2 = G(v + dv - dv_2, t)dt$.

Soit un élément de volume dV dans le réacteur centré autour d'un point de coordonnée z . Dans cet élément de volume, la vitesse de croissance dépend de la taille des particules et de la sursaturation locale S et sera notée $G(v, z, t)$.

Le bilan des éléments entrant dans la classe $[v, v + dv[$ et sortant de cette classe donne :

- Nombres de particules entrant dans la classe $[v, v + dv[$ par la croissance :

$$n(v - dv_1, z, t) dV dv_1$$

- Nombres de particules entrant dans la classe $[v, v + dv[$ par la rupture :

$$R_{BR}^{(e)}(v, z, t) dv dt$$

- Nombres de particules entrant dans la classe $[v, v + dv[$ par l'agrégation :

$$R_{AG}^{(e)}(v, z, t) dv dt$$

- Avec le débit d'alimentation est $Q_e \cdot n_e(v, t) dv dt$

- Nombres de particules sortant de la classe $[v, v + dv[$ par la croissance :

$$n(v + dv - dv_2, z, t) dV dv_1$$

- Nombres de particules sortant de la classe $[v, v + dv[$ par la rupture :

$$R_{BR}^{(s)}(v, z, t) dv dt$$

- Nombres de particules sortant de la classe $[v, v + dv[$ par l'agrégation :

$$R_{AG}^{(s)}(v, z, t) dv dt$$

- Avec le débit de soutirage est $Q_s \cdot n_s(v, t) dv dt$

$$\text{Avec } dv_1 = G(v - dv_1, z, t)dt \text{ et } dv_2 = G(v + dv - dv_2, z, t)dt$$

Si on reprend le bilan : [nombre de particules entrant dans une classe] - [nombre de particules sortant de cette classe] = [accumulation de particules dans cette classe]

Le bilan sur la classe $[v, v + dv [$ conduit donc à [161]:

$$\begin{aligned}
 d \left(\int_V n(v, z, t) dv dV \right) &= Q_e n_e(v, t) dv dt - Q_s n_s(v, t) dv dt \\
 &+ \int_V \left(R_{AG}^{(e)} + R_{BR}^{(e)} - R_{AG}^{(s)} + R_{BR}^{(s)} \right) dv dV dt \\
 &+ \int_V n(v - dv_1, z, t) dv_1 dV - \int_V n(v + dv - dv_2, z, t) dv_2 dV
 \end{aligned} \tag{II.4}$$

On met $\left(R_{AG}^{(e)} + R_{BR}^{(e)} - R_{AG}^{(s)} + R_{BR}^{(s)} \right) = \rho(v, t)$, qui est le taux net de production de particules par coalescence et rupture, l'équation (II.4) devient :

$$\begin{aligned}
 d \left(\int_V n(v, z, t) dv dV \right) &= Q_e n_e(v, t) dv dt - Q_s n_s(v, t) dv dt + \int_V \rho(v, t) dv dV dt \\
 &+ \int_V n(v - dv_1, z, t) dv_1 dV - \int_V n(v + dv - dv_2, z, t) dv_2 dV
 \end{aligned} \tag{II.5}$$

On notera que l'intervalle de temps dt doit être choisi suffisamment court pour que dv_1 et dv_2 est inférieurs à dv . La différence $dv_1 - dv_2$ est un second ordre infiniment petit et peut donc être négligé devant dv , un premier ordre infiniment petit [161].

En remplaçant dv_1 et dv_2 dans (II.5) :

$$\begin{aligned}
 d \left(\int_V n(v, z, t) dv dV \right) &= \left(Q_e n_e(v, t) - Q_s n_s(v, t) \right) dv dt + \int_V \rho(v, t) dv dt dV \\
 &+ \int_V \left(n(v - dv_1, z, t) G(v - dv_1, z, t) - \right. \\
 &\left. n(v + dv - dv_2, z, t) G(v + dv - dv_2, z, t) \right) dt dV
 \end{aligned} \tag{II.6}$$

Le bilan de population s'écrit en supposant n et G sont uniformes sur tout le volume V :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n(t) dV) = -V \frac{\partial [nG](t)}{\partial v} + (Q_e n_e(v, t) - Q_s n_s(v, t)) + V \rho(v, t) \tag{II.7}$$

Cette équation n'est valable que pour des classes de particules de taille supérieure à la taille des nuclei. Il faut y rajouter une équation de bilan particulière aux nuclei (condition aux limites) [161].

$$\begin{aligned}
 \left(\int_V B(z, t) dt dV \right) &= Q_e n_e(v_c, t) dv dt - Q_s n_s(v_c, t) dv dt \\
 &+ \int_V n(v_c + dv - dv_2, z, t) \cdot \\
 &G(v_c + dv - dv_2, z, t) dt dV + \int_V \rho(v, t) dv dV dt
 \end{aligned} \tag{II.8}$$

Soit

$$\begin{aligned} \left(\int_V B(z,t) dt dV \right) &= Q_e n_e(v_c,t) dv dt - Q_s n_s(v_c,t) dv dt \\ &+ \int_V [nG](v_c + dv - dv_2, z, t) dt dV \\ &+ \int_V \rho(v,t) dv dV dt \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

En négligeant les termes du 1^{ier} ordre, on a :

$$\left(\int_V B(z,t) dt dV \right) = \int_V [nG](v_c + dv - dv_2, z, t) dt dV \quad (\text{II.10})$$

II.2.4. Ecriture générale du bilan de population

Une écriture plus générale est souvent adoptée valable sur toutes les classes [161] :

$$\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} (n(v,t)V) = B \delta(v - v_c) - \frac{\partial [nG](v,t)}{\partial v} + \frac{(Q_e n_e(v,t) - Q_s n_s(v,t))}{V} + (R_{AG}^{net} - R_{BR}^{net}) \quad (\text{II.11})$$

où δ est la fonction Dirac.

Ses propriétés sont :

si $v \neq v_c$ alors $\delta(v - v_c) = 0$

$$\text{et } \int_0^{\infty} \delta(v - v_c) dv = 1$$

Dans le cas d'un réacteur ouvert à l'état stationnaire, on obtient :

$$0 = B \delta(v - v_c) - \frac{\partial [nG]}{\partial v} + \frac{(Q_e n_e(v) - Q_s n_s(v))}{V} + \rho(v) \quad (\text{II.12})$$

Le volume du réacteur et les débits volumiques Q_e et Q_s sont constants. La suspension est parfaitement homogène dans le réacteur, les distributions des particules dans le réacteur et dans le courant de soutirage sont donc identiques $n_s = n(v)$.

L'équation s'écrit dans ce cas-là comme suit:

$$0 = B \delta(v - v_c) - \frac{\partial [nG]}{\partial v} + \frac{(Q_e n_e(v) - Q_s n_s(v))}{V} + \rho(v) \quad (\text{II.13})$$

Où $a = \frac{V}{Q_s}$ est le temps de séjour dans le réacteur. Si on prend le cas où il y a pas de

nucléation, et remplaçant n_e par n^{feed} l'équation devient :

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} + \frac{\partial [Gn(v)]}{\partial v} = \rho(v) \quad (\text{II.14})$$

C'est l'équation de bilan de population à l'état stationnaire (EBP) pour un système continu de particule dans un réacteur parfaitement agité.

Nous pouvons simplement s'écrire l'équation (II.14) en fonction de diamètre à l'aide de la relation suivante :

$$\int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} n(v) \partial v = \int_{d_{i-1/2}}^{d_{i+1/2}} n(d) \partial d \quad (\text{II.15})$$

L'équation (II.14) devient :

$$\frac{(n(d) - n^{feed}(d))}{a} + \frac{1}{A_p} \frac{\partial [Gn(d)]}{\partial d} = \rho(d) \quad (\text{II.16})$$

II.3. Modélisation des colonnes d'extraction liquide liquide

La modélisation des colonnes d'extraction liquide liquide demande toujours une amélioration. La simulation des colonnes d'extraction liquide-liquide est une tâche difficile en raison du caractère discret de la phase dispersée. Cela est dû à la rupture et la coalescence des gouttes, qui sont couplées au transfert de matière des solutés entre les deux phases existantes. La modélisation de tels phénomènes de transfert est extrêmement importante et complexe, elle est résolue en utilisant une équation de bilan de population. La population des gouttes est modélisée par une fonction de concentration en nombre, qui tient en compte la taille des gouttes et les concentrations de solutés. La compréhension du comportement dynamique des colonnes d'extraction liquide-liquide peut être utilisée dans la conception de la stratégie de contrôle des processus ou dans les procédures de démarrage et d'arrêt [162-165]. Les tentatives de modélisation de ce comportement dynamique ne sont pas bien établies en raison de la nature discrète de la phase dispersée. Ceci est dû à la nature complexe des interactions macroscopiques dans la phase dispersée ainsi qu'au transfert de masse en interphase qui se produit dans un champ d'écoulement turbulent. Ces interactions macroscopiques telles que la rupture des gouttes et la coalescence couplée au transfert de masse interphasique résultent à une population de gouttes distribuée. Cette population est distribuée non seulement dans le domaine spatial de l'équipement de contact, mais également répartie aléatoirement en fonction

de l'état des gouttes (propriétés) telles que la taille, la concentration et l'âge. Plusieurs tentatives ont été faites pour proposer le modèle mathématique approprié pour modéliser les colonnes d'extraction liquide-liquide [166]. Kumar et Hartland [167] ont proposé un modèle empirique pour prédire l'hydrodynamique dans une colonne pulsée à plateaux perforés. Blass et Zimmerman [166] ont développé un modèle pour le comportement transitoire d'une colonne pulsée à plateaux perforés, en tient en compte le reflux et supposant un maintien (rétention) constant. Hufnagl et al [162] ont évalué un modèle différentiel dans une colonne Kühni. Bart et Stevens [168] ont modélisé une colonne a garnissage, ils sont utilisés un modèle de contact différentiel sans mélange axial. Ces modèles sont trop simples pour décrire l'hydrodynamique réelle, où l'une des phases liquides est normalement dispersée sous forme de gouttes dans la deuxième phase continue [169]. Weinstein et al [163] ont évalué le modèle différentiel pour une colonne de Kühni. Casamatta et Vogelpohl [170] ont développé un modèle dynamique amélioré tenant compte l'influence de la distribution de la taille des gouttes. Garg et Pratt [171] ont développé un modèle de bilan de population pour une colonne pulsée à plateaux perforés prenant en compte des valeurs déterminées expérimentalement pour la rupture et la coalescence des gouttes. Casamatta et Vogelpohl [170] ont proposé un modèle de bilan de population pour lequel une bonne revue est trouvée dans [172]. Al Khani et al [34] ont appliqué ce modèle pour des simulations dynamiques en régime stationnaire d'une colonne pulsée à plateaux perforés. Récemment, de nombreux travaux ont été réalisés sur la modélisation par bilan de population pour les colonnes d'extraction [45,172-177].

II.3.1.Présentation du système

II.3.1.1. Schéma de la colonne

On considère une colonne qui correspond au schéma présenté ci-dessous (**figure II.5**). Celle-ci peut être divisée en trois parties bien distinctes : la partie active où les phases sont mises en contact, et les deux zones de décantation, en haut et en bas de la colonne, où les phases se séparent. Le niveau de l'interface au niveau du décanteur supérieur est maintenu constant par ajustement du débit de soutirage Q^s . Ce type de fonctionnement est couramment réalisé dans de nombreuses colonnes de laboratoires et industrielles [178]. La phase légère est la phase dispersée. On admet que le débit de la phase légère Q_l à la sortie de l'installation ne contient aucune trace de phase lourde, par contre, le débit de soutirage en pied peut contenir une fraction entraînée de phase légère.

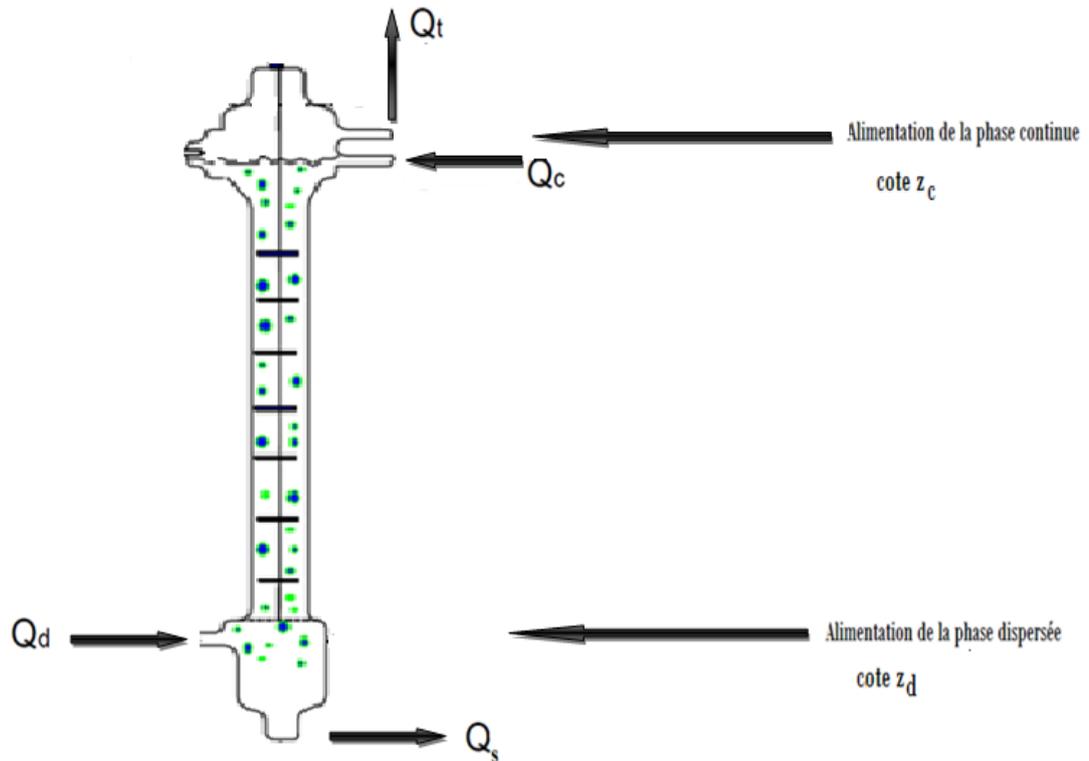


Figure II.5. Schéma général d'une colonne d'extraction liquide-liquide à contre-courant

La modélisation de la colonne est faite en décrivant son fonctionnement entre les z_d et z_c .

II.3.1.2. Développement du modèle continu

On décrit la population des particules (gouttes) de la phase légère par une loi de distribution en volume. On appelle $n(v, z, t)$ la densité de probabilité qu'un point quelconque au niveau z de la colonne appartienne à une particule de volume v . $n(v, z, t) \delta v$ est aussi la fraction volumique des particules de la classe v .

Si on considère l'ensemble des volumes de particules, l'intégrale $\int_0^{\infty} n(v, z, t) \delta v$ représente la probabilité qu'un point quelconque au niveau z de la colonne appartienne à la phase dispersée, c'est également la fraction volumique $\phi(z, t)$ occupé par la phase dispersée à la cote z dans la colonne au temps t que l'on appelle rétention de la phase dispersée :

$$\phi(z, t) = \int_0^{\infty} v n(v, z, t) \delta v \quad (\text{II.17})$$

D'un point de vue pratique la densité de probabilité $n(v, z, t)$ devient quasiment nulle à partir d'un certain volume que nous appelons v_{\max} .

Les intégrales sur l'ensemble des tailles de particules seront donc prises dans l'intervalle $\{0, v_{\max}\}$ soit :

$$\phi(z, t) = \int_0^{v_{\max}} v n(v, z, t) \delta v . \quad (\text{II.18})$$

v_{\max} représente le volume maximal de particules observé dans la colonne.

Le développement du modèle est basé sur les équations qui résultent d'un bilan volumique autour d'un volume élémentaire dans le corps de la colonne et qui font intervenir quatre contributions : les entrées, les sorties, le terme de production et enfin le terme d'accumulation.

II.3.1.2a. Bilan sur la phase dispersée

On effectue un bilan sur la phase dispersée dans la partie située au-dessus d'une section droit de niveau z . Le bilan fait intervenir différents termes, comme montré par la figure suivante :

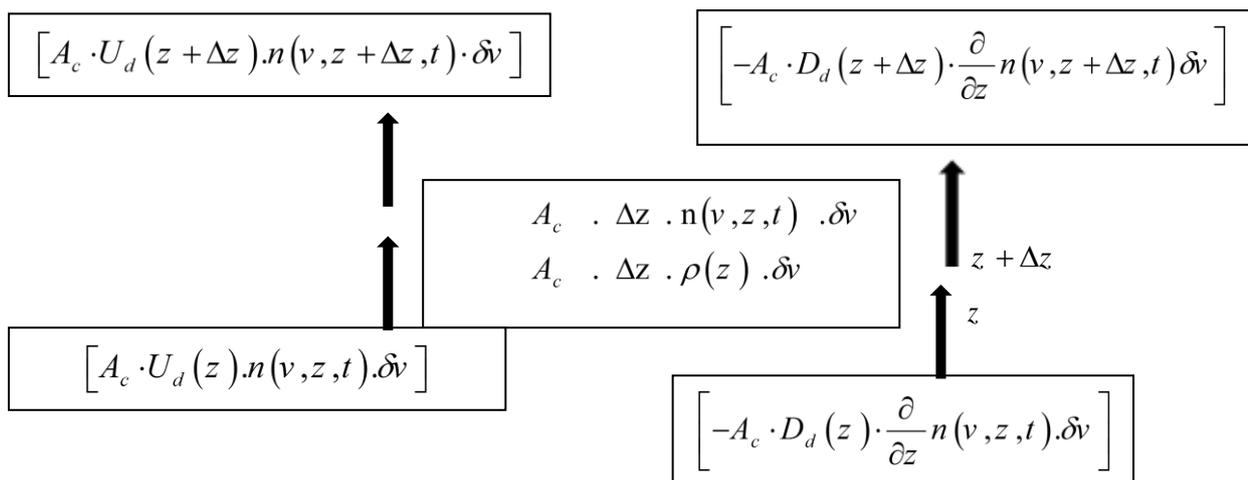


Figure II.6. Bilan sur un volume de référence $A \cdot \Delta z$ pour la phase dispersée.

Il est supposé dans ce qui suit une phase dispersée ascendante (phase légère). Ainsi pour un volume défini entre $z + \Delta z$ et z les différents termes intervenant dans le bilan sont comme suit:

- Entrée (E):

$$\left[A_c \cdot U_d(z) \cdot n(v, z, t) \cdot \delta v \right] - \left[A_c \cdot U_d(z + \Delta z) \cdot n(v, z + \Delta z, t) \cdot \delta v \right]$$

- Sortie (S):

$$\left[-A_c \cdot D_d(z) \cdot \frac{\partial}{\partial z} n(v, z, t) \cdot \delta v \right] - \left[-A_c \cdot D_d(z + \Delta z) \cdot \frac{\partial}{\partial z} n(v, z + \Delta z, t) \cdot \delta v \right]$$

- Production (G):

$$A_c \cdot \Delta z \cdot \rho(z) \cdot \delta v$$

- Accumulation (A):

$$A_c \cdot \Delta z \cdot n(v, z, t) \cdot \delta v$$

En écrivant que, $E - S + G = A$.

$$\begin{aligned} A_c \Delta z \cdot n(v, z, t + \Delta t) \cdot \delta v &= A_c \cdot \Delta z \cdot n(v, z, t) \cdot \delta v \\ &+ A_c \left[U_d(z) \cdot n(v, z, t) \cdot -U_d(z + \Delta z) \cdot n(v, z + \Delta z, t) \right] \delta v \Delta t \\ &+ A_c \left[D_d(z) \cdot \frac{\partial}{\partial z} n(v, z, t) \cdot \delta v - D_d(z + \Delta z) \cdot \frac{\partial}{\partial z} n(v, z + \Delta z, t) \cdot \delta v \right] \delta v \Delta t \\ &+ A_c \cdot \Delta z \cdot \rho(z) \cdot \delta v \end{aligned}$$

(II.19)

Et par passage à la limite $\Delta z \rightarrow 0$, et $\Delta t \rightarrow 0$ le bilan volumique sur la phase dispersée pour des particules de taille δv conduit donc à l'équation suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(U_d n)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d \frac{\partial n}{\partial z} \right) + \frac{Q_d}{A_c} \left(\frac{n^{feed}}{v_f} \right) \delta(z - z_d) + \rho(v, z, t) \quad (II.20)$$

n^{feed} est la distribution de l'alimentation de la phase dispersée.

Les termes transitoire et convectif compensent le terme de rétro mélange (Back mixing) caractérisé par le coefficient de dispersion D_d . L'alimentation en phase dispersée

étant alors une source ponctuelle décrite par la fonction delta (δ) de Dirac. Les processus de rupture et de coalescence des particules sont pris en considération dans le terme ρ , qui est donné par :

$$\begin{aligned} \rho(v, z, t) = & \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v-u, u) n(v-u, z, t) n(u, z, t) du - n(v, z, t) \int_v^{+\infty} \omega(v, u) n(u, z, t) du \\ & + \int_v^{+\infty} \beta(v/u) \Gamma(u) n(u, z, t) du - \Gamma(v) n(v, z, t) \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

La première intégrale explique le gain et la perte dus à la rupture de particule mère selon la distribution de particules filles. La deuxième intégrale traduit la même chose en incluant le paramètre de taux de coalescence ω .

Notez que la fonction $\beta(v/u)$ représente la distribution des particules filles qui sont données qu'une particule mère de volume v est cassée, elle est supposée indépendante du temps, mais il peut être une fonction d'entrée d'énergie et du système physique.

II.3.1.2b. Les conditions aux limites et initiales

Les équations différentielles établies ci-dessus permettent une description physique du contacteur. A ces équations différentielles sont associées des conditions aux limites qui sont définies pour quatre zones particulières de la colonne (**figure II.5**) : les deux étages d'alimentations (pour phase dispersée), l'étage de pied et l'étage de tête et qui sont exprimées comme suit:

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \frac{\partial}{\partial z} (U_d n) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d \frac{\partial}{\partial z} n \right) + \rho \quad (\text{II.22})$$

Avec le terme source $S = S_F + S_B + S_c$

Pour tout $t > 0$ et $v \in (0, v_{\max})$

- Condition en pied de la colonne (cote 0):

$$z = 0 \quad U_d^+ n - D_d \frac{\partial n}{\partial z} = 0 \quad \text{avec} \quad U_d^+ = \max(U_d, 0) \quad (\text{II.23a})$$

- Condition en tête de la colonne (cote H) :

$$z = H \quad D_d \frac{\partial n}{\partial z} = 0 \quad (\text{II.23b})$$

- La condition initiale:

$$A t = 0 \quad n(v, z, 0) = n(v, z) \text{ pour } z \in [0, H], v \in [0, v_{\max}] \quad (\text{II.23c})$$

Dans ce cas nous considérons au départ que la colonne ne contient que la phase continue d'où $n^0(v, z) = 0$

- Condition à l'alimentation de la phase dispersée :

$$S_F(v, z) = \frac{Q_d}{A_c} n^{feed}(v) \delta(z - z_d) \quad \text{avec} \quad \int_0^{v_{\max}} n^{feed}(v) \delta v = 1 \quad (\text{II.23d})$$

De plus à la formulation initialement adoptée dans [178], ces équations sont écrites en terme de bilan volumique, complété par un terme d'alimentation en solvant qui est représenté comme une source ponctuelle décrite par la fonction delta (δ) de Dirac. L'alimentation de la phase dispersée se fait avec une distribution en taille qui simule l'existence d'un distributeur.

Les phénomènes de rupture et de coalescence des particules sont pris en compte dans le terme $\rho(v, z, t)$ appelé terme de génération ou de production d'aire d'échange.

L'établissement des équations du modèle mathématique détaillé nécessite une discrétisation spatiale du contacteur diphasique, par rapport aux volumes des particules et la côte z .

II.3.2. L'équation de bilan de population

L'équation de bilan de population décrivant l'hydrodynamique d'une phase dispersée dans un système d'écoulement continu, à l'absence d'autres phénomènes de transport tels que le transfert de masse (pas de flux convectif le long de la coordonnée interne des particules) pourrait s'écrire

$$\frac{\partial n(v, r, t)}{\partial t} + \nabla \cdot F = \nabla \cdot (D_d \nabla n) + \rho(v, z, t) \quad (\text{II.24})$$

Où v est le volume de particules, $r = [x, y, z]$ est un vecteur de coordonnées externes et temporelles spécifiant la variation de n . $n(v, r, t) \delta v = N(r, t) f(v) \delta v$ est la concentration en nombre moyenne associée aux particules ayant un volume entre $v \pm \delta v$ à l'instant t , et la position dans l'espace r , et sa concentration en nombre total correspondant est $N(r, t)$, tandis que $f(v)$ est la densité en nombre moyenne. La première partie du deuxième terme du

côté gauche représente le transport des particules dans l'espace par convection à travers une surface d'un volume donné avec une vitesse $U_d = [U_{d,x}, U_{d,y}, U_{d,z}]$ et le flux $F = U_d n$. La deuxième partie de ce terme est le transport de particules par diffusion caractérisé par le mouvement aléatoire des particules individuelles, contrairement au transport par convection c'est par les tourbillons turbulentes. Le coefficient D_d apparaissant dans ce terme est le coefficient de diffusion de Fick. Le dernier terme sur le côté droit est le nombre net de particules produit par rupture ou coalescence par unité de temps et volume unitaire qu'il est donné ultérieurement.

II.3.3. L'équation de bilan de population pour une CELL différentielle

L'équation de bilan de population pour une colonne d'extraction liquide liquide à contre-courant sans transfert de masse pourrait être simplement déduite de l'équation (II.24):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d \frac{\partial n}{\partial z} \right) + \frac{Q_d}{A_c} \left(\frac{n^{feed}}{v_f} \right) \delta(z - z_d) + \rho(v, z, t) \quad (\text{II.25})$$

où $n(v, r, t) \partial v = N(z, t) f(v) \partial v$ est la concentration en nombre moyenne des particules ayant un volume entre $v \pm \delta v$ à l'instant t et la hauteur de colonne z , et $N(z, t)$ est la concentration en nombre totale. Le flux convectif de ces particules le long de la colonne d'une section transversale constante A_c est représenté par $A_c F \partial v = A_c U_d n \partial v$, Où U_d est la vitesse relative de la phase dispersée des parois de colonne et sera dérivée plus tard. Le premier terme sur le côté droit de l'équation (II.25) représente la dispersion axiale de la phase dispersée par flux non idéal dans lequel un mouvement aléatoire du fluide au niveau microscopique est superposé au flux principal [179]. Ceci est supposé suivre la loi de Fick avec un coefficient de diffusion D_d , et se distingue de l'effet de mélange en avant dû de la distribution de vitesse des particules, qui est prise en compte par le terme convectif [180]. Le deuxième terme sur le côté gauche représente un taux de concentration de particules entrant en tant que flux de débit volumétrique Q_d au niveau z_d de la colonne. La direction positive du flux coïncide avec le flux de la phase dispersé de z_d au sommet de la colonne. Notez que la distribution de l'alimentation est représentée mathématiquement par une source ponctuelle par l'utilisation de la fonction delta Dirac [181].

Il convient de noter que l'équation (II.25) est différente des modèles d'EBP précédents qui sont écrits directement en fonction de volume plutôt que de concentration [33,181], puisque les EBP discrètes internes en fonction de toutes quantité souhaitée sont dérivée toujours d'EBP en concentration. En outre, l'équation (II.25) est écrite en fonction de volume de particules ou de diamètre en tant que coordonnée interne, pour éliminer les expressions complexes résultantes de la transformation de coordonnées internes. Cependant, nous projetons simplement les EBP discrètes sur la coordonnée du diamètre des particules en utilisant l'identité:

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2} n(v, z, t) \partial v = \int_{i-1/2}^{i+1/2} n(d, z, t) \partial d \quad (\text{II.26})$$

Pour une bonne compréhension, il n'y a pas de solution analytique à l'EBP générale donné par l'équation (II.25). Cependant, Campos et Lage (2003) ont essayé de la résoudre pour la rupture des particules et la croissance, en utilisant la méthode de génération successive de Liou et al. (1997) en négligeant le terme de diffusion et en supposant U_d constant.

Malheureusement, ils ont été incapables d'obtenir une solution analytique dans la version fermée, et par conséquent leur solution semi-analytique nécessite une programmation sophistiquée plus poussée comme ils l'ont souligné. Dans cette section, nous présentons une méthodologie efficace pour résoudre l'EBP avec une vitesse de phase dispersée uniforme dans une phase continue stagnante, un flux de diffusion négligeable et une condition initiale nulle. Donc, simplifions l'équation (II.25) en fonction de ces hypothèses pour obtenir [45] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + U_d \frac{\partial n}{\partial x} = \rho(n, v) \quad (\text{II.27})$$

Où $x = z - z_d$, $U_d = \frac{Q_d}{A_c}$ et la condition aux limites est donnée par :

$$n(v, 0, t) = \frac{Q_d}{A_c} n^{feed} \quad \text{à } x=0 \quad (\text{II.28})$$

En raison de la nature convective de l'équation (II.27) avec une vitesse de particules uniforme, il est bien connu que la réponse de la phase dispersée ne peut se produire que lorsque le temps de séjour local $\frac{x}{U_d}$ est dépassé. Donc, On peut définir le temps relatif η comme :

$$\eta(t, x) = t - \frac{x}{U_d}$$

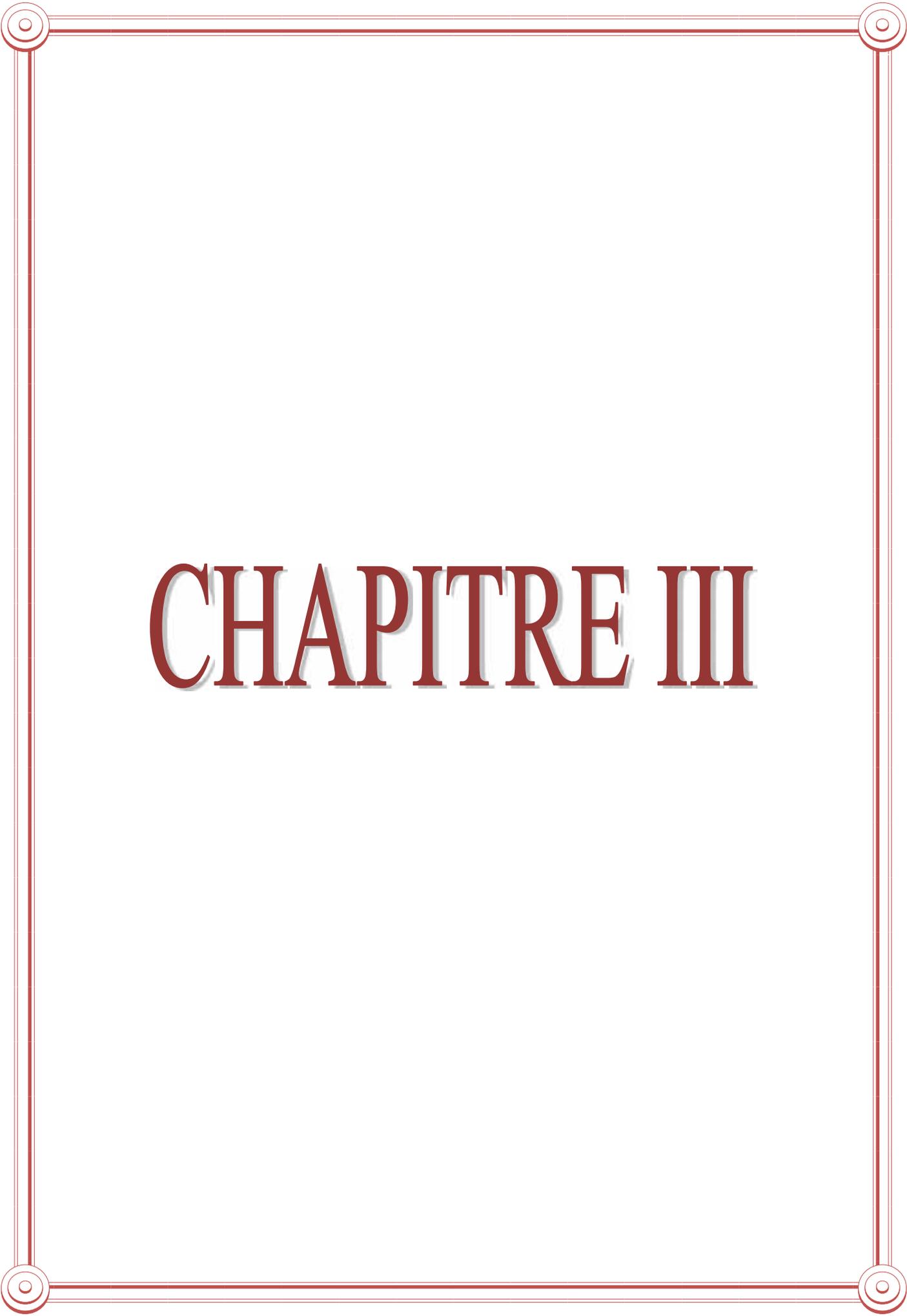
Introduisant la variable nécessaire en utilisant la transformation suivante de la règle de chaîne, l'équation (II.25) pourrait être réduit à :

$$U_d \frac{\partial n(v, \eta, x)}{\partial x} = \rho(n(v, \eta, x), v) \quad (\text{II.29})$$

Avec la condition aux limites suivantes

$$n(v, 0, \eta) = \frac{Q_d}{A_c} n^{feed} \quad \text{a } x=0 \text{ et } \eta > 0 \quad (\text{II.30})$$

C'est donc cette importante analogie entre l'équation (II.29) et l'EBP, qui rend notre approche très générale et efficace pour obtenir une solution analytique chaque fois qu'il est possible de résoudre l'EBP [45].



CHAPITRE III

CHAPITRE III

RESULTATS ET DISCUSSIONS

III.1. Introduction

En général, l'équation du bilan de population (EBP) est l'évolution dynamique de la distribution d'une ou plusieurs propriétés. C'est pour des raisons de lucidité mathématique, nous définissons l'état de particules dans l'espace continu, qui se propage dans les coordonnées internes et externes [75]. Par coordonnées internes cela signifie les variables qui décrivent les quantités associées à la goutte, tandis que le terme coordonnées externes sert à désigner la position des gouttes dans la masse. La population de gouttes est considérée d'être suffisamment grande pour que les fluctuations aléatoires du comportement des gouttes puissent être calculées en moyenne [182, 183,44].

Dans ce chapitre, nous allons représenter l'application de deux nouvelles techniques semi-analytiques : la méthode de perturbation homotopique et la méthode d'itération variationnelle pour résoudre les équations de bilan de population. Dans la première section (III.2) nous allons appliquer les méthodes d'He aux équations de bilan de population à l'état stationnaire dans des systèmes à flux continu, et dans la section (III.3) nous allons appliquer la méthode d'itération variationnelle (MIV) aux équations de bilan de population pour les processus d'agrégation et de rupture dans les colonnes d'extraction liquide liquide.

III.2. Fonction des moments de distribution

Il est convenable de définir les moments de la distribution de taille de gouttes en raison de leurs importances physique. Le i ème moment du volume est défini comme :

$$m_i = \int_0^{\infty} v^i n(v) dv. \quad (\text{III.1})$$

Chaque moment décrit séparément les caractéristiques des modèles du bilan de population. Il y a un terme statistique utilisé dans la théorie des probabilités qui définit la probabilité alternativement distribuée. Par conséquent, les six premiers moments sont exprimés :

- Le moment d'ordre zéro représente la population totale des gouttes.
- Le premier moment représente la longueur totale des gouttes.

- Le deuxième moment représente l'aire totale de la surface de gouttes.
- Le troisième moment représente le volume total des gouttes.
- Les moments d'ordre quatre et cinq n'ont pas de sens physique par rapport aux gouttes.

III.3.Applications des méthodes d'He à l'équation de bilan de population à l'état stationnaire dans des systèmes à flux continu

L'équation de bilan de population à l'état stationnaire (EBP) pour un réacteur parfaitement agité représente le taux net de nombre des gouttes qui sont formées par la rupture, l'agrégation, la croissance et pourraient être écrites comme suit [15]:

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} + \frac{\partial [Gn(v)]}{\partial v} = \dots(v). \quad (III.2)$$

Où $n(v)$ est la fonction de densité en nombre, et $n^{feed}(v)$ la fonction de la distribution de densité d'alimentation. Le premier terme sur le côté gauche est le flux net, le deuxième terme est le flux convectif le long de la coordonnée interne de goutte avec une vitesse de croissance G . Le terme à droite est le taux net de production de gouttes par agrégation et rupture, qui est donné par [14,184]

$$\dots(v) = -\Gamma(v) n(v) - \int_0^{\infty} \check{S}(v,u) n(v) n(u) du + \int_v^{\infty} S(v/u) \Gamma(u) n(u) du + \frac{1}{2} \int_0^v \check{S}(v-u,u) n(v) n(v-u) du. \quad (III.3)$$

Où $\Gamma(v)$ et $\check{S}(v,u)$ sont respectivement les fréquences de la rupture et l'agrégation, et $S(v/u)dv$ est la fonction de rupture pour la formation de gouttes dans la gamme de taille $v + dv$ d'une goutte de taille u . Les deux premiers termes du côté droit représentent la perte de gouttes en raison de la rupture et l'agrégation suivie par deux termes qui représentent la formation de particule en raison de la rupture et l'agrégation.

La méthode d'itération variationnelle est maintenant largement utilisée par beaucoup de chercheurs pour étudier des problèmes linéaires et non-linéaires, elle est basée sur le multiplicateur de Lagrange. La méthode de perturbation homotopique a été utilisée par beaucoup d'auteurs pour manipuler une large variété d'applications scientifiques et d'ingénierie pour résoudre des équations fonctionnelles diverses, et elle a les mérites de sa

simplicité d'exécution. Dans ces méthodes, on considère la solution comme la somme d'une série infinie, qui converge rapidement aux solutions exactes.

Récemment, ces des techniques semi analytique ont été appliqués pour résolvant les équations de bilan de population [82,185-187]. L'objectif de cette partie est de résoudre les certains formes de la susdite équation et prolonger les techniques MPH et MIV pour tirer les résultats analytiques et numériques.

Dans toutes les cas suivants, nous appliquerons la méthode d'itération variationnelle et la méthode de perturbation homotopique pour résoudre l'équation de bilan de population à l'état stationnaire, et présentons les résultats analytiques et numériques pour vérifier l'efficacité de ces deux méthodes.

III.3.1. L'agrégation pure avec $\check{S}(v, u) = \check{S}_0 = 1$

L'équation de bilan de population pour l'agrégation pure est obtenue en égalant la fonction de rupture, le taux spécifique de rupture et la fonction de croissance à zéro ($S(v/u) = 0, \Gamma(v) = 0$), avec la fréquence de l'agrégation $\check{S}(v, u) = \check{S}_0 = 1$:

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} = \frac{1}{2} \int_0^v n(v-u) n(v) du - \int_0^\infty n(u) n(v) du. \quad (III.4)$$

III.3.1.1. Méthode de perturbation homotopique

Pour résoudre l'équation (III.4) par la MPH, nous construisons l'homotopy suivante :

$$hp = (1-p)(n(v) - n_0(v)) + p \left(n(v) - n^{feed}(v) - \frac{a}{2} \int_0^v n(v-u) n(v) du + a \int_0^\infty n(u) n(v) du \right). \quad (III.5)$$

Avec la distribution initiale est assumée comme suit :

$$n_0 = n^{feed}(v) = e^{-v}. \quad (III.6)$$

Maintenant en supposant que la solution d'équation (III.4) sous la forme:

$$n(v) = p^0 n_0(v) + p^1 n_1(v) + p^2 n_2(v) + p^3 n_3(v) + p^4 n_4(v) \dots \quad (III.7)$$

Substitution l'équation (III.7) dans l'équation (III.5) et avec l'égalisation des coefficients de p avec la même puissance, on arrive à

$$n_1(v) = \left(\frac{a}{2} \int_0^v n_0(u) n_0(-u+v) du - a \int_0^\infty n_0(u) n_0(v) du \right), \quad (III.8)$$

$$n_2(v) = \left(\frac{a}{2} \int_0^v n_0(-u+v) n_1(u) du + \frac{a}{2} \int_0^v n_0(u) n_1(-u+v) du - a \int_0^\infty n_0(u) n_1(v) du \right), \quad (III.9)$$

$$n_3(v) = \frac{a}{2} \int_0^v n_1(u) n_1(-u+v) du + \frac{a}{2} \int_0^v n_2(u) n_0(-u+v) du + \frac{a}{2} \int_0^v n_2(-u+v) n_0(u) du$$

$$- a \int_0^\infty n_1(u) n_1(v) du - a \int_0^\infty n_0(v) n_2(u) du - a \int_0^\infty n_0(u) n_2(v) du \quad (\text{III.10})$$

Les solutions correspondantes pour le susdit système d'équations sont les solutions des séries que l'on donne comme suit :

$$n_1(v) = -ae^{-v} + \frac{1}{2}ae^{-v}v, \quad (\text{III.11})$$

$$n_2(v) = \frac{3}{2}a^2e^{-v} - \frac{3}{2}a^2e^{-v}v + \frac{1}{4}a^2e^{-v}v^2, \quad (\text{III.12})$$

$$n_3(v) = -\frac{5}{2}a^3e^{-v} + \frac{15}{4}a^3e^{-v}v - \frac{5}{4}a^3e^{-v}v^2 + \frac{5}{48}a^3e^{-v}v^3. \quad (\text{III.13})$$

III.3.1.2..La méthode d'itération variationnelle

Nous appliquons la méthode itérative variationnelle à l'équation (III.4) où sa formule itérative est:

$$n_{n+1}(v) = n_n(v) - \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^v \left(n_n(\langle) - n^{feed}(\langle) - \frac{a}{2} \int_0^\langle \mathfrak{S}_0 n_m(\langle - u) n_m(u) du + a \int_0^\infty \mathfrak{S}_0 n_m(u) n_m(\langle) du \right) d\langle \right] \quad (\text{III.14})$$

Par substitution de l'équation (III.6) dans l'équation (III.14), nous aurons les résultats suivants :

$$n_1(v) = e^{-v} - ae^{-v}v + \frac{1}{2}ae^{-v}v^2 \quad (\text{III.15})$$

$$n_2(v) = e^{-v} - ae^{-v} + \frac{3}{2}a^2e^{-v} - \frac{1}{2}a^3e^{-v} + \left(\frac{1}{2}ae^{-v} - \frac{3}{2}a^2e^{-v} + \frac{3}{4}a^3e^{-v} \right)v$$

$$+ \left(\frac{1}{4}a^2e^{-v} - \frac{1}{4}a^3e^{-v} \right)v^2 + \frac{1}{48}a^3e^{-v}v^3 \quad (\text{III.16})$$

$$n_3(v) = e^{-v} - ae^{-v} + \frac{3}{2}a^2e^{-v} - \frac{5}{2}a^3e^{-v} + \frac{15}{8}a^4e^{-v} - \frac{9}{8}a^5e^{-v} + \frac{7}{16}a^6e^{-v} - \frac{1}{16}a^7e^{-v} +$$

$$\left(\frac{1}{2}ae^{-v} - \frac{3}{2}a^2e^{-v} + \frac{15}{4}a^3e^{-v} - \frac{15}{4}a^4e^{-v} + \frac{45}{16}a^5e^{-v} - \frac{21}{16}a^6e^{-v} + \frac{7}{32}a^7e^{-v} \right)v +$$

$$\left(\frac{1}{4}a^2e^{-v} - \frac{5}{4}a^3e^{-v} + \frac{15}{8}a^4e^{-v} - \frac{15}{8}a^5e^{-v} + \frac{35}{32}a^6e^{-v} - \frac{7}{32}a^7e^{-v} \right)v^2 + \quad (\text{III.17})$$

$$\left(\frac{5}{48}a^3e^{-v} - \frac{5}{16}a^4e^{-v} + \frac{15}{32}a^5e^{-v} - \frac{35}{96}a^6e^{-v} + \frac{35}{384}a^7e^{-v} \right)v^3 + \dots$$

Le terme général pour les deux méthodes est:

$$n_m(v) = \frac{2^{-1+m} e^{-v} \left(\frac{av}{1+2a} \right)^{-1+m} Pochhammer \left[\frac{1}{2}, -1+m \right]}{\sqrt{1+2a} \Gamma[m] \Gamma[1+m]} \quad (\text{III.18})$$

Selon $u = \lim_{p \rightarrow 1} n = n_0 + n_1 + n_2 + \dots$, la solution exacte est donnée par:

$$n(v) = \frac{e^{\frac{(1+a)v}{1+2a}} \left(I_0 \left[\frac{-av}{1+2a} \right] + I_1 \left[\frac{-av}{1+2a} \right] \right)}{\sqrt{1+2a}} \quad (\text{III.19})$$

Où I_0 et I_1 sont les fonctions de Bessel modifiées de la première espèce d'ordre zéro et un. Cette solution analytique est la même obtenue dans [188] par l'utilisation de la méthode de transformation de Laplace.

Les expressions analytiques pour les moment d'ordre zéro, un et deux de la solution (m_0, m_1 et m_2) ont été dérivées par [48] qui sont :

$$m_0 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2m_0^{in}a}}{a} \quad (\text{III.20})$$

$$m_1 = m_1^{in} \quad (\text{III.21})$$

$$m_2 = m_1^2 a + m_2^{in} \quad (\text{III.22})$$

Les expressions ci-dessus ont été utilisées pour évaluer les moments de chacune des simulations effectuées. Ces valeurs sont présentées dans le **tableau III.1**, ainsi que l'index d'agrégation qui a été défini par [188] :

$$I_{agg} = 1 - \frac{m_0}{m_0^{in}}. \quad (\text{III.23})$$

m_0^{in} est le moment d'ordre zéro de l'alimentation.

Cet indice peut atteindre des valeurs entre zéro (sans agrégation) et un (agrégation complète).

Tableau III.1. Les moments analytiques de distribution de densité et les indices d'agrégation

| Les cas | a | m_0 | m_1 | m_2 | I_{agg} |
|---------|-----------------|-------------------------|-------|------------|-----------|
| Cas1 | 4×10^3 | $22,112 \times 10^{-2}$ | 1 | 4002 | 0,9778 |
| Cas2 | 4×10^5 | $22,335 \times 10^{-3}$ | 1 | 400.002 | 0,9977 |
| Cas3 | 4×10^7 | $22,358 \times 10^{-4}$ | 1 | 40.000.002 | 0,9997 |

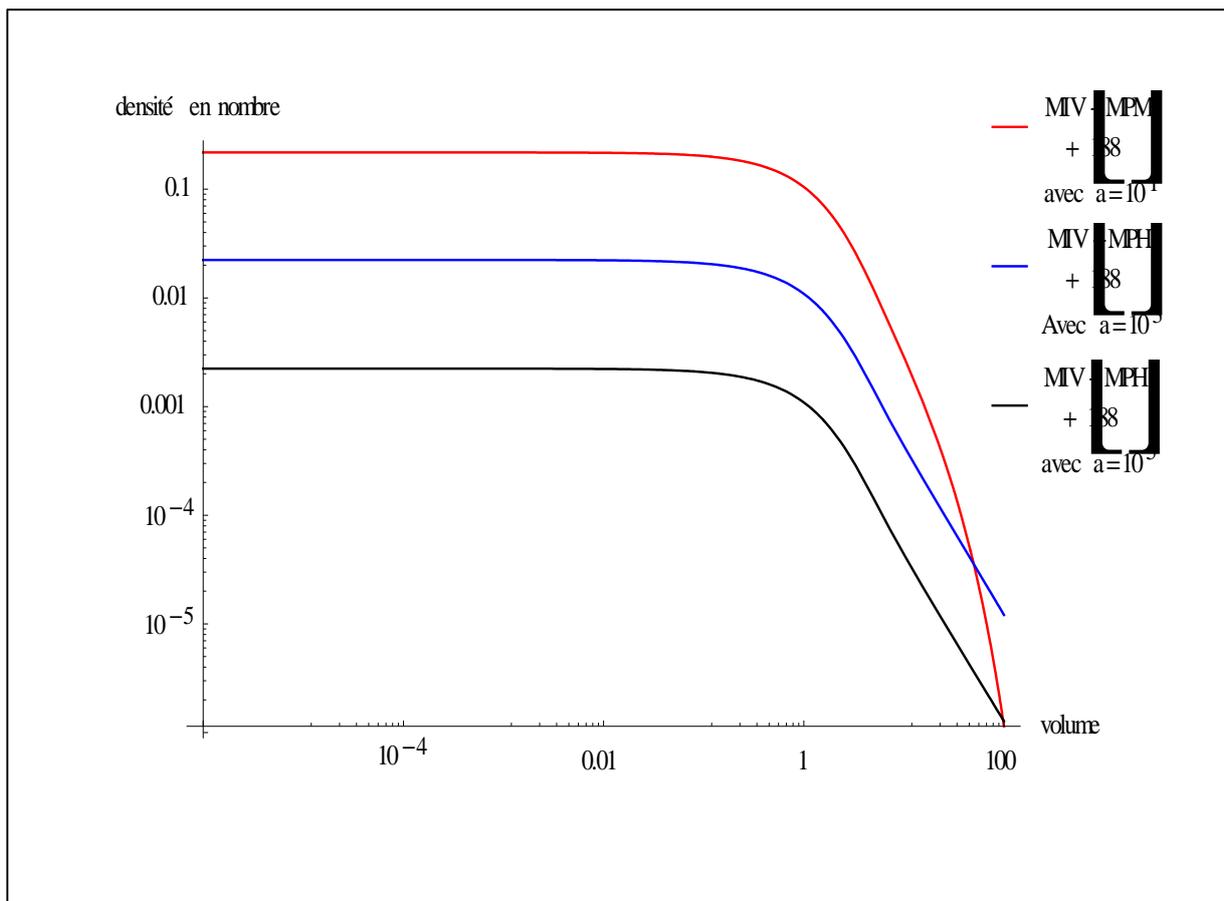


Figure III.1. Comparaison entre la MIV et la MPH et la solution analytique [188] pour l'agrégation des gouttes dans un écoulement homogène avec une distribution uniforme de gouttes et une fréquence constante d'agrégation.

Dans la **figure III.1** les solutions analytiques pour la fonction de densité en nombre $n(v)$ sont prévues à l'état stationnaire à partir de l'équation (III.19), et en utilisant la MPH et la MIV qui sont comparés pour trois valeurs différentes de temps de séjour moyen ($a = 10, 10^3, 10^5$). Il est clair que les résultats analytiques sont identiques à celles obtenues par la MPH et la MIV. Un comportement semblable a été observé par [188] pour le cas d'agrégation pure, avec une fonction de densité d'alimentation exponentielle.

III.3.2. La rupture pure avec $\Gamma(v) = v$ et $S(v/u) = \frac{2}{u}$

Pour obtenir l'équation de bilan de population pour la rupture pure, on met le noyau d'agrégation et la fonction de croissance à zéro. Dans cette section nous considérons le problème à l'état stationnaire du système continu avec la fréquence de rupture linéaire

$\Gamma(v) = v$ et une distribution de gouttes uniforme $S(v/u) = \frac{2}{u}$ où l'équation (III.1) est réduite à:

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} = -v n(v) + 2 \int_v^{\infty} n(u) du. \quad (III.24)$$

La distribution initiale utiliser est exponentielle $n_0 = e^{-v}$.

III.3.2.1. Méthode de perturbation homotopique

Pour résoudre l'équation (III.24) par la MPH, nous pouvons construire l'homotopy suivante :

$$hp = (1-p)(n(v) - n_0(v)) + p \left(n(v) - n^{feed}(v) - 2a \int_v^{\infty} n(u) du + av n(v) \right). \quad (III.25)$$

Substitution l'équation(III.7) dans l'équation(III.25) et le réarrangement basé sur les puissances de p-termes, on trouve

$$n_1(v) = -avn_0(v) + a \int_v^{\infty} 2n_0(v) dv, \quad (III.26)$$

$$n_2(v) = -avn_1(v) + a \int_v^{\infty} 2n_1(v) dv, \quad (III.27)$$

$$n_3(v) = -avn_2(v) + a \int_v^{\infty} 2n_2(v) dv, \quad (III.28)$$

Les solutions correspondantes pour ce système d'équations sont

$$n_1(v) = 2ae^{-v} - ae^{-v}v, \quad (\text{III.29})$$

$$n_2(v) = 2a^2e^{-v} - 4a^2e^{-v}v + a^2e^{-v}v^2, \quad (\text{III.30})$$

$$n_3(v) = -6a^3e^{-v}v + 6a^3e^{-v}v^2 - a^3e^{-v}v^3. \quad (\text{III.31})$$

III.3.2.2. Méthode d'itération variationnelle

Nous appliquons la méthode d'itération variationnelle à l'équation(III.24) où sa formule itérative est :

$$n_{n+1}(v) = n_m(v) - \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^v \left(n_m(\langle) - n^{feed}(\langle) - 2a \int_{\langle}^{\infty} n_m(u) du + a \langle n_m(\langle) \right) d\langle \right]. \quad (\text{III.32})$$

Nous substituant l'équation(III.6) dans l'équation (III.32), nous avons les résultats suivants:

$$n_1(v) = e^{-v} + 2ae^{-v} - ae^{-v}v \quad (\text{III.33})$$

$$n_2(v) = e^{-v} + 2ae^{-v} + 2a^2e^{-v} - ae^{-v}v - 4a^2e^{-v}v + a^2e^{-v}v^2 \quad (\text{III.34})$$

$$n_3(v) = e^{-v} + 2ae^{-v} + 2a^2e^{-v} - ae^{-v}v - 4a^2e^{-v}v - 6a^3e^{-v}v + a^2e^{-v}v^2 + 6a^3e^{-v}v^2 - a^3e^{-v}v^3 \quad (\text{III.35})$$

Finalement, nous calculons le terme général de la solution des séries données par les deux méthodes MPH et MIV comme suit :

$$n_m(v) = -\frac{e^{-v}(-av)^m(2-3m+m^2+2v-2mv+v^2)}{av^3}. \quad (\text{III.36})$$

Alors

$$n(v) = \frac{e^{-v}(1+2a(1+v)+a^2(2+2v+v^2))}{(1+av)^3}. \quad (\text{III.37})$$

Une expression analytique pour le moment d'ordre zéro peut être dérivée en intégrant l'EBP pour la rupture pure sur le domaine de volume $v \in (0, \infty)$ [48].

$$m_1 = 1+a. \quad (\text{III.38})$$

On suppose que le volume total des gouttes soit conservé pour les systèmes de rupture pure, par conséquent le premier moment de la distribution sera le même que celui du flux de produit [48].

$$m_1 = m_1^{in}. \quad (\text{III.39})$$

Une expression analytique du moment d'ordre deux ne peut être dérivée que du troisième moment (qui ne peut être dérivée que du quatrième moment, etc.). Par conséquent les valeurs semi-analytiques du moment d'ordre deux ont été obtenues par l'intégration numérique de la fonction $v^2 n(v)$ où $n(v)$ est la solution de l'EBP pour la rupture (III.24).

Un indice de rupture I_{break} peut être défini par analogie avec l'indice d'agrégation [48].

$$I_{break} = 1 - \frac{m_{0,in}}{m_0}. \quad (\text{III.40})$$

L'évaluation analytique et semi-analytique des moments de la solution et les indices de rupture sont affichées dans le **tableau III.2**.

Tableau III. 2. Les moments analytiques de distribution de densité et les indices de rupture.

| Les cas | a | m_0 | m_1 | m_2 | I_{break} |
|---------|-----------------|--------|-------|-------------|-------------|
| Cas1 | 2 | 3 | 1 | 0.000932679 | 0.666667 |
| Cas2 | 2×10^3 | 2001 | 1 | 0.00172682 | 0.9995 |
| Cas3 | 2×10^5 | 200001 | 1 | 0.0070277 | 0.999995 |

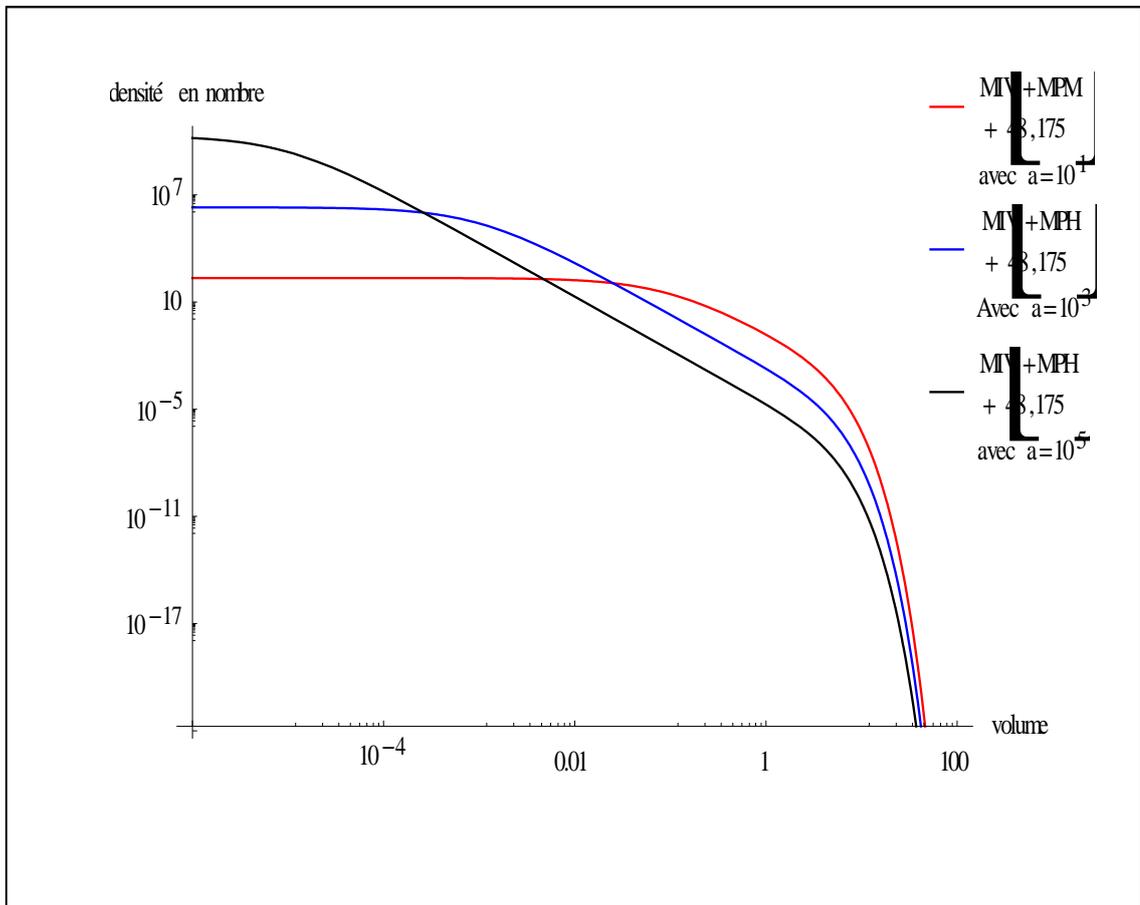


Figure III.2. Comparaison entre MIV et MPH et la solution analytique [48, 175] pour la rupture des gouttes dans un écoulement homogène avec une distribution uniforme de gouttes et un taux de rupture linéaire.

Dans la **figure III.2** les distributions à l'état stationnaire calculée par MPH et MIV sont comparées avec les solutions analytiques correspondante données par [48, 175], pour des valeurs différentes du temps de séjour moyen ($a=10,10^3,10^5$). Il est évident qu'il ya un excellent accord entre les trois solutions analytiques.

III.3.3. Croissance pure avec $G = 1$.

L'équation de bilan de population pour la croissance pure a été obtenu en égalant la fréquence d'agrégation, la fonction de rupture et le taux spécifique de rupture à zéro, avec seulement le taux de croissance constant :

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} + \frac{\partial [Gn(v)]}{\partial v} = 0 \quad (III.41)$$

Avec la distribution initiale

$$n_0(v) = -\frac{e^{-v}}{a} \quad (III.42)$$

III.3.3.1.Méthode de perturbation homotopique

Pour résoudre l'équation (III.41) par la MPH, nous pouvons construire l'homotopy suivante :

$$hp = (1-p)(n(v) - n_0(v)) + p \left(\frac{n(v) - n^{feed}(v)}{a} + \frac{\partial [Gn(v)]}{\partial v} \right) \quad (III.43)$$

Substitution l'équation (III.7) dans l'équation (III.43) et avec l'égalisation des coefficients des puissances p , donne l'ensemble d'équations suivantes :

$$n_1(v) = -\int_0^v \frac{n_0(v)dv}{a} = \frac{1}{a^2} - \frac{e^{-v}}{a^2} \quad (III.44)$$

$$n_2(v) = -\int_0^v \frac{n_1(v)dv}{a} = \frac{1}{a^3} - \frac{e^{-v}}{a^3} - \frac{v}{a^3} \quad (III.45)$$

$$n_3(v) = -\int_0^v \frac{n_2(v)dv}{a} = \frac{1}{a^4} - \frac{e^{-v}}{a^4} - \frac{v}{a^4} + \frac{v^2}{2a^4} \quad (III.46)$$

III.3.3.2.Méthode d'itération variationnelle

Maintenant nous appliquons la méthode d'itération variationnelle à l'equation (III.41) et sa formule itérative est:

$$n_{n+1}(v) = n_n(v) - \int_0^v \left(\frac{n(\langle) - n^{feed}(\langle)}{a} + \frac{\partial [Gn(\langle)]}{\partial \langle} \right) d\langle \quad (III.47)$$

En substituant l'équation (III.42) dans l'équation (III.47), on obtient les résultats suivants :

$$n_1(v) = e^{-v} \left(\frac{-1}{a^2} - \frac{1}{a} \right) + \frac{1}{a^2} \quad (III.48)$$

$$n_2(v) = e^{-v} \left(\frac{-1}{a^3} - \frac{1}{a^2} - \frac{1}{a} \right) + \frac{1}{a^3} + \frac{1}{a^2} - \frac{v}{a^3} \quad (III.49)$$

$$n_3(v) = e^{-v} \left(\frac{-1}{a^4} - \frac{1}{a^3} - \frac{1}{a^2} - \frac{1}{a} \right) + \frac{1}{a^4} + \frac{1}{a^3} + \frac{1}{a^2} + \left(\frac{-1}{a^4} - \frac{1}{a^3} \right) v + \frac{v^2}{2a^4} \quad (III.50)$$

En conséquence, on donne le terme général de séries des deux méthodes MPH et MIV comme suit :

$$n_m(v) = - \frac{a \left(\frac{-v}{a} \right)^m}{(-1+a)v Pochhammer[1, -1+m]} - e^{-v} \left(\frac{1}{a} \right)^{m+1} \quad (III.51)$$

$$n(v) = \sum_{m=0}^{\infty} - \frac{a \left(\frac{-v}{a} \right)^m}{(-1+a)v Pochhammer[1, -1+m]} - e^{-v} \left(\frac{1}{a} \right)^{m+1} \quad (III.52)$$

Avec la solution exacte comme :

$$n(v) = \frac{e^{-v} \left(-1 + e^{\frac{v(-1+a)}{a}} \right)}{-1+a} \quad (III.53)$$

Les expressions analytiques pour les moments d'ordre zéro, un et deux peuvent être obtenues en multipliant l'EBP pour la croissance par v^i (où i est l'index approprié) et l'intégration sur le domaine du volume $v \in (0, \infty)$ [48].

$$m_0 = 1 \quad (III.54)$$

$$m_1 = 1+a \quad (III.55)$$

$$m_2 = 2(1+a+a^2) \quad (III.56)$$

Tableau III.3. Les moments analytiques de distribution de la densité pour la croissance.

| Les cas | a | m_0 | m_1 | m_2 |
|-------------|--------------------|-------|-------|---------|
| Cas1 | 2×10^{-1} | 1 | 1.2 | 2.48 |
| Cas2 | 2×10^1 | 1 | 21 | 842 |
| Cas3 | 2×10^3 | 1 | 2001 | 8004002 |

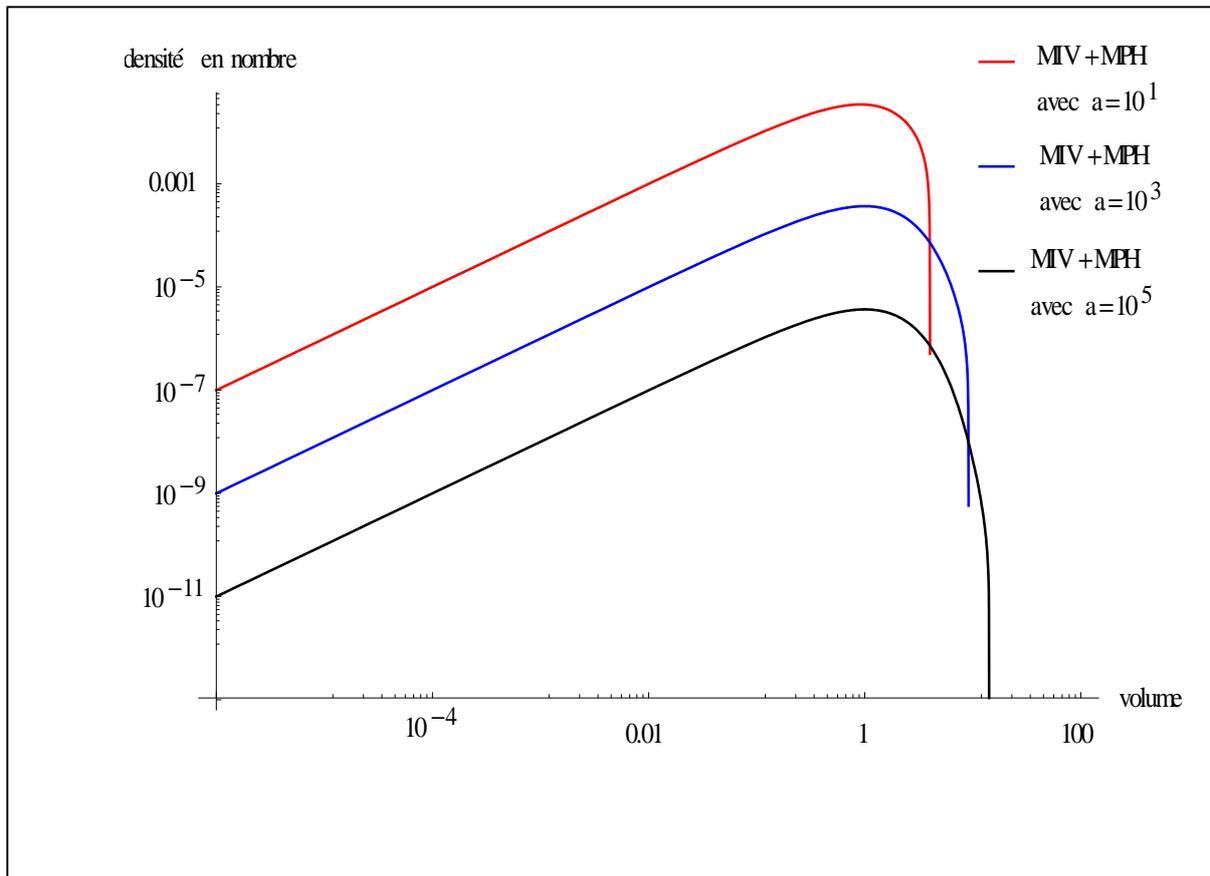


Figure III.3. Comparaison entre la MIV et la MPH pour la croissance des particules dans un écoulement homogène.

Dans la **figure III.3** une comparaison est faite entre les solutions exactes issues de l'équation (III.53) obtenues par MPH et MIV pour le cas où le taux de croissance est constant ($G = 1$), et pour des valeurs différentes du temps de séjour moyen ($a = 10, 10^3, 10^5$). Il est clair que les résultats analytiques sont identiques à ceux obtenue par la MPH et la MIV.

III.3.4. La rupture et l'agrégation simultanée

Dans ce cas, la solution analytique pour le système de flux continu à l'état stationnaire n'est pas disponible dans la littérature. Ce cas représente une combinaison de taux de rupture linéaire $\Gamma(v) = v$, une distribution uniforme de particule binaire $S(v/u) = \frac{2}{u}$, un noyau d'agrégation constant, et une distribution d'alimentation exponentielle. Avec l'utilisation de ces fonctions l'équation (III.1) peut être simplifiée dans l'EBP comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} = & -\Gamma(v) n(v) - \int_0^\infty \check{S}(v, u) n(v) n(u) du + \int_v^\infty S(v/u) \Gamma(u) n(u) du + \\ & + \frac{1}{2} \int_0^v \check{S}(v-u, u) n(v) n(v-u) du \end{aligned} \quad (III.57)$$

L'application de la méthode de perturbation homotopique à l'équation (III.57) résulte la formule suivante :

$$hp = (1-p)(n(v) - n_0(v)) + p \left(\begin{aligned} & n(v) - n^{feed}(v) - 2a \int_v^\infty n(u) du + av n(v) \\ & - \frac{a}{2} \int_0^v n(v-u) n(v) du + a \int_0^\infty n(u) n(v) du \end{aligned} \right) \quad (III.58)$$

Et substitution l'équation (III.7) dans l'équation (III.58) et rassemblement des termes de la même puissance p nous obtenons :

$$n_1(v) = - \left(\begin{aligned} & - \int_v^\infty (2n_0(u)) du + \int_0^\infty (n_0(u) n_0(v)) du \\ & - \int_0^v \left(\frac{1}{2} n_0(u) n_0(-u+v) \right) du + vn_0(v) \end{aligned} \right) \quad (III.59)$$

$$n_2(v) = - \left(\begin{aligned} & - \int_v^\infty (2n_1(u)) du + \int_0^\infty (n_0(v) n_1(u) + vn_0(u) n_1(v)) du \\ & - \int_0^v \left(\frac{1}{2} n_0(-u+v) n_1(u) + \frac{1}{2} n_0(u) n_1(-u+v) \right) du + vn_1(v) \end{aligned} \right) \quad (III.60)$$

$$n_3(v) = - \left(\int_v^\infty (2n_2(u)) du + \int_0^\infty (n_1(u)n_1(v) + n_0(v)n_2(u) + n_0(u)n_2(v)) du \right. \\ \left. - \int_0^v \left(\frac{1}{2} n_1(u)n_1(-u+v) + \frac{1}{2} n_0(-u+v)n_2(u) + \frac{1}{2} n_0(u)n_2(-u+v) \right) du + vn_2(v) \right) \quad (\text{III.61})$$

La solution de ce système d'équations donne

$$n_1(v) = e^{-v} - \frac{e^{-v}v}{2} \quad (\text{III.62})$$

$$n_2(v) = -\frac{e^{-v}}{2} - \frac{e^{-v}v}{2} + \frac{1}{4}e^{-v}v^2 \quad (\text{III.63})$$

$$n_3(v) = -\frac{e^{-v}}{2} + \frac{5e^{-v}v}{4} + \frac{1}{4}e^{-v}v^2 - \frac{7}{48}e^{-v}v^3 \quad (\text{III.64})$$

De même, le reste des composants de la formulation de l'équation (III.58) de MPH peut être obtenu.

Notez que les premiers trois termes d'approximation pour la solution d'équation (III.57) sont tirés en mettant $p=1$ dans l'équation (III.7).

La solution en forme de série est donnée par

$$n(v) = \frac{21e^{-v}}{8} + \frac{e^{-v}v}{4} - e^{-v}v^2 - \frac{1}{3}e^{-v}v^3 + \frac{19}{192}e^{-v}v^4 \dots \quad (\text{III.65})$$

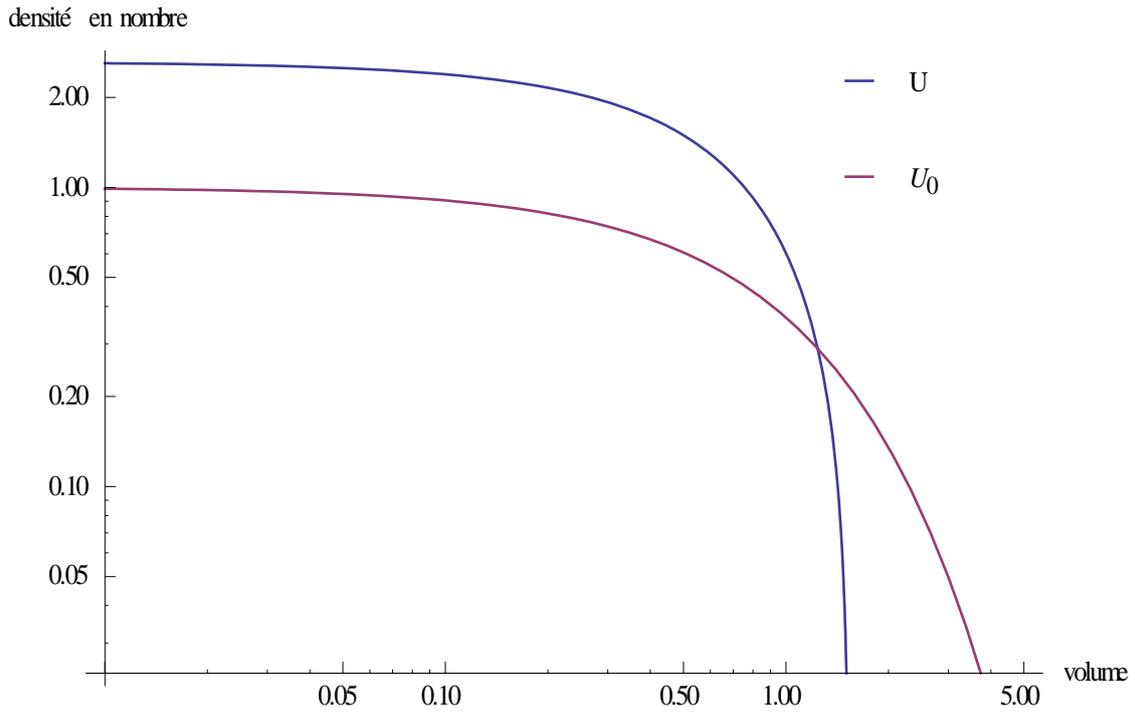


Figure III.4. La solution approximative pour l'agrégation et la rupture agissant simultanément dans un réacteur à flux continu avec une distribution de l'alimentation sous forme exponentielle.

La **figure III.4** montre la solution approximative obtenue par La MPH pour le cas de l'agrégation et la rupture agissant simultanément dans un système à flux continu.

III.4. Application de la méthode d'itération variationnelle (MIV) aux équations de bilan de population pour les processus d'agrégation, de croissance et de rupture dans une colonne d'extraction liquide liquide

L'équation de bilan de population (EBP) pour une colonne d'extraction liquide liquide (CELL) à contre-courant sans transfert de masse est donnée par :

$$\frac{\partial n(v, z, t)}{\partial t} + U_d \frac{\partial n(v, z, t)}{\partial z} = \dots(v, z, t) \quad (\text{III.66})$$

Où $n(v, z, t)$ est la densité en nombre des gouttes ayant un volume entre $v \pm uv$ à l'instant t et hauteur de colonne z , U_d est la vitesse relative de la phase dispersée, le terme \dots représente les processus de rupture et de coalescence des gouttes est donné par :

$$\begin{aligned} \dots(v, z, t) = & \frac{1}{2} \int_0^v \check{S}(v-u, u) n(v-u, z, t) n(u, z, t) du - n(v, z, t) \int_v^{+\infty} \check{S}(v, u) n(u, z, t) du \\ & + \int_v^{+\infty} S(v/u) \Gamma(u) n(u, z, t) du - \Gamma(v) n(v, z, t) \end{aligned} \quad (\text{III.67})$$

Où $\Gamma(v)$ et $\check{S}(v, u)$ sont respectivement les fréquences de la rupture et l'agrégation, et $S(v/u)dv$ est le nombre de gouttes filles ayant un volume dans la gamme de taille v à $v + dv$ former lors de la rupture de la goutte de volume u . Les deux premiers termes du côté droit représentent respectivement le gain et la perte de gouttes en raison de l'agrégation, suivie par deux termes qui représentent respectivement le gain et la perte de gouttes en raison de la rupture.

III.4.1. Rupture de gouttes dans la CELL avec la vitesse de la phase dispersée est uniforme

L'équation de bilan de population pour la rupture des gouttes dans une colonne d'extraction liquide liquide est:

$$\frac{\partial n(v, z, t)}{\partial t} + U_d \frac{\partial n(v, z, t)}{\partial z} = \int_v^{+\infty} S(v/u) \Gamma(u) n(u, z, t) du - \Gamma(v) n(v, z, t) \quad (\text{III.68})$$

Une solution analytique d'EBP donnée par l'équation (III.68) est possible en présence d'un terme de rupture de particules, si la vitesse de la phase dispersée est considérée comme

uniforme. Dans ce cas, nous considérons les hypothèses suivantes :

$$U_d = Q_d / A_c, \Gamma(v) = K_b' U_d v, S(v/u) = 2/u, K_b' = 1.$$

Dans ce cas, le volume total et les profils de concentration en nombre des gouttes au niveau de l'alimentation qui se déplace le long de la colonne avec une vitesse $U_d = Q_d / A_c$.

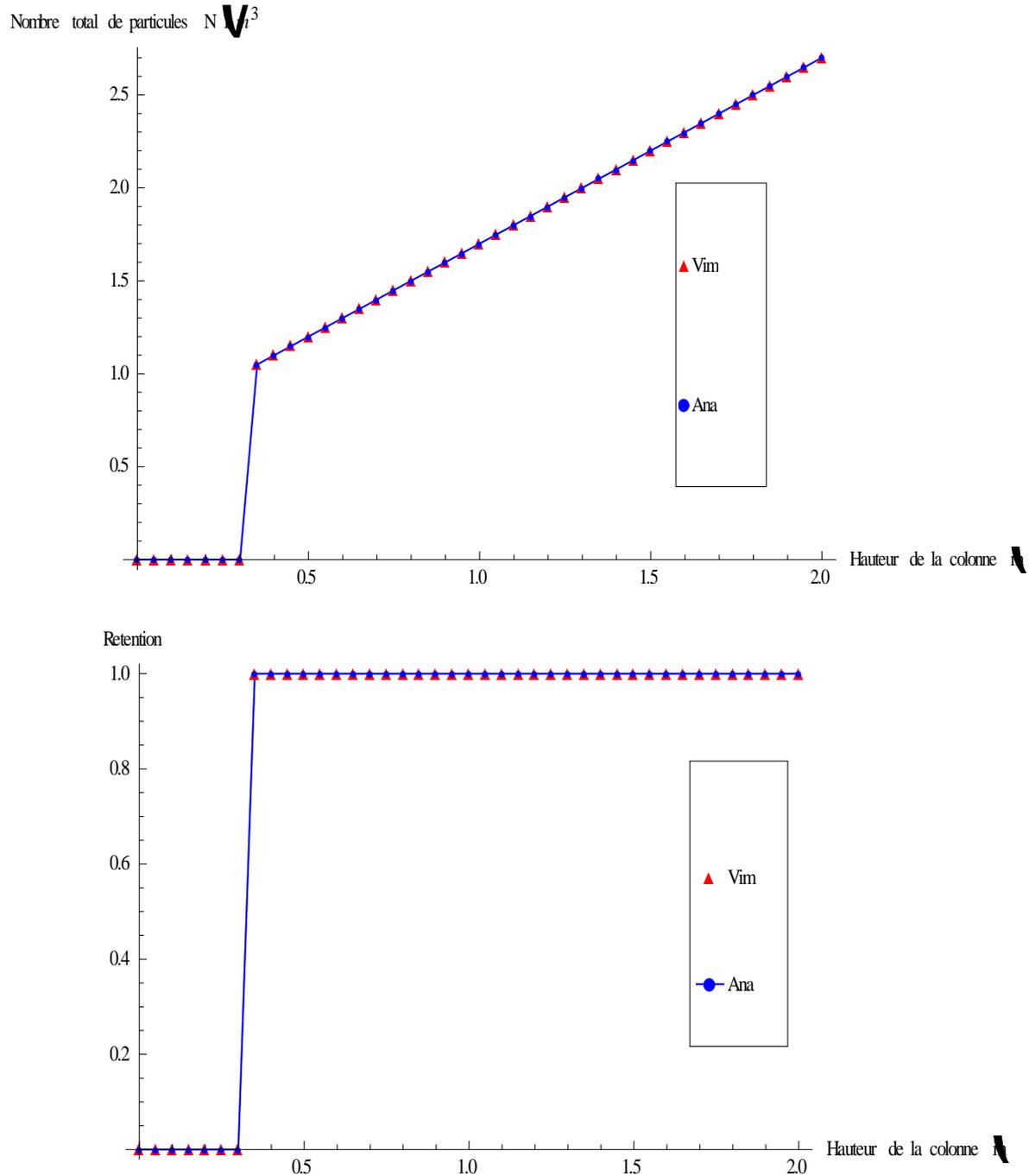


Figure III.5. Comparaison entre les solutions MIV et analytiques [82] pour la rupture des gouttes.

La **figure III.5** représente respectivement les concentrations en nombre et le volume total prévu (la rétention), en utilisant la MIV avec la solution analytique donnée par [82]. Il semble que la rupture des gouttes et la distribution de la vitesse non uniforme qui sont responsables du profil de concentration en nombre non uniforme. La concentration en nombre total augmente linéairement le long de la hauteur de la colonne.

Il est évident qu'il existe un bon accord entre les solutions obtenues par la MIV et les solutions analytiques disponibles.

III.4.2. Agrégation de gouttes dans la CELL avec la vitesse de la phase dispersée est uniforme

L'EBP pour l'agrégation des gouttes dans une colonne d'extraction liquide liquide est donnée par :

$$\frac{\partial n(v, z, t)}{\partial t} + U_d \frac{\partial n(v, z, t)}{\partial z} = \frac{1}{2} \int_0^v \check{S}(v-u, u) n(v-u, z, t) n(u, z, t) du - n(v, z, t) \int_v^{+\infty} \check{S}(v, u) n(u, z, t) du \quad (\text{III.69})$$

Ce cas est consacré à tester la présence de l'agrégation des gouttes en tant que terme source dans l'EBP. Toutes les hypothèses imposées à l'EBP dans le premier cas sont applicables ici, sauf que le terme de rupture est égal à zéro, la fréquence d'agrégation est $\check{S}(v, u) = K_c U_d$, où $K_c = 1$. La solution analytique est donnée par [186].

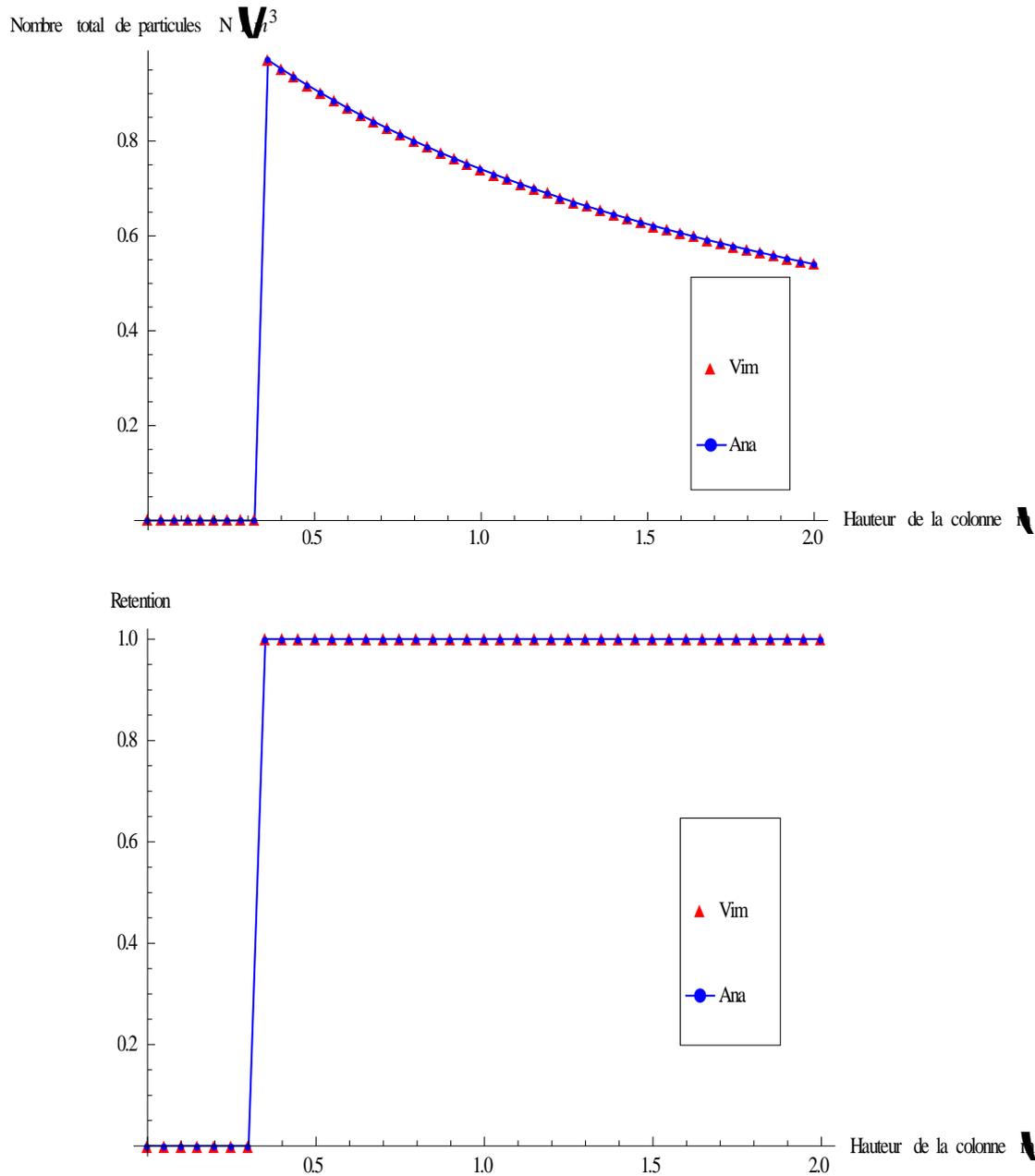


Figure III.6. Comparaison entre les solutions MIV et analytique [186] pour l'agrégation des gouttes.

La **figure III.6** représente respectivement les concentrations en nombre et le volume total prévu (la rétention) en utilisant la MIV avec la solution analytique donnée par [186]. Comme dans le 1^{er} cas, puisque la distribution de la vitesse de phase dispersée est uniforme, ces deux profils se déplacent le long de la colonne au niveau de l'alimentation ayant une vitesse de $U_d = Q_d / A_c$.

Le profil de concentration en nombre est proportionnel à l'inverse de z , puisque l'agrégation des gouttes s'accompagne d'une réduction du nombre de gouttes.

Il est évident qu'il existe un bon accord entre les solutions obtenues par la MIV et la solution analytique disponible.

III.4.3. Agrégation et rupture de gouttes dans la CELL

L'EBP pour la coalescence et la rupture des gouttes est donnée par:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, z, t)}{\partial t} + U_d \frac{\partial n(v, z, t)}{\partial z} = & \frac{1}{2} \int_0^v \tilde{S}(v-u, u) n(v-u, z, t) n(u, z, t) du \\ & - n(v, z, t) \int_v^{+\infty} \tilde{S}(v, u) n(u, z, t) du \\ & + \int_v^{+\infty} S(v/u) \Gamma(u) n(u, z, t) du - \Gamma(v) n(v, z, t) \end{aligned} \quad (\text{III.70})$$

Dans ce cas, nous considérons les hypothèses suivantes :

$\tilde{S}(v, u) = U_d K_c$, où $K_c = 1$, $\Gamma(v) = K_b' v$, $S(v/u) = 2/u$, $K_b' = 1$, $U_d = Q_d/A_c$, avec la condition initiale $n(v, 0, t) = e^{-v}$.

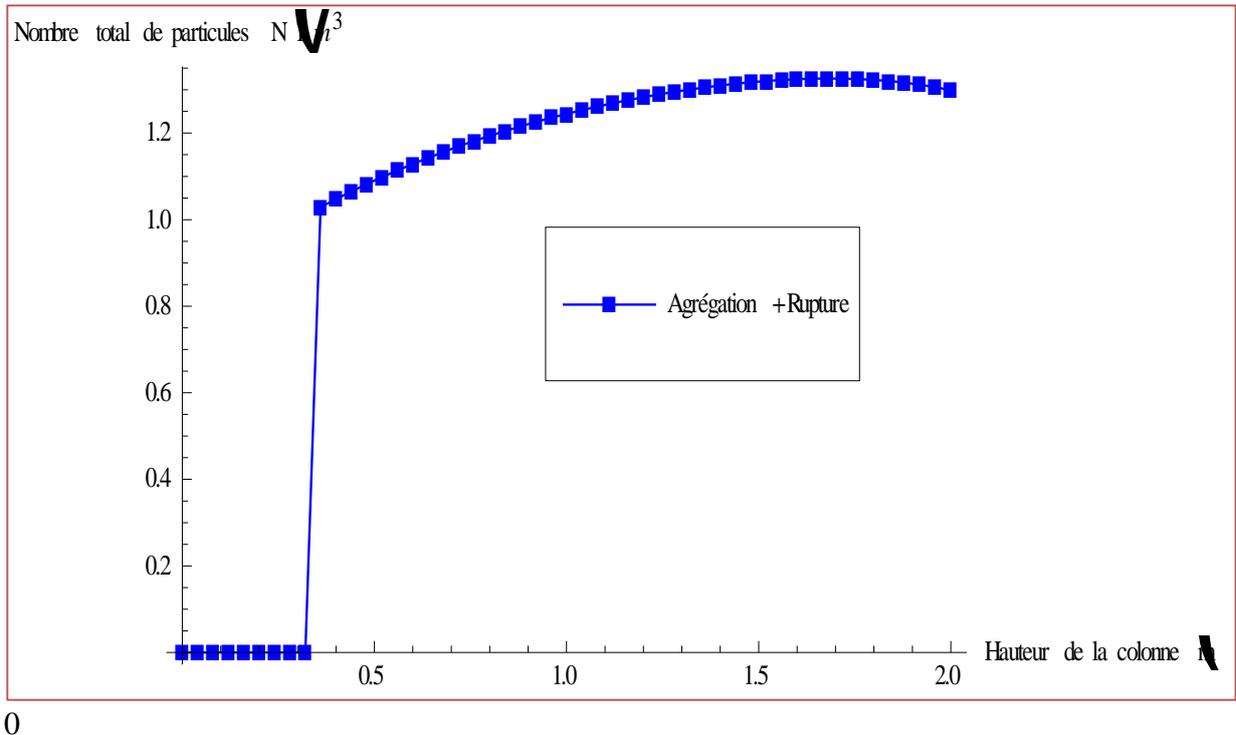


Figure III.7. Convergence de la concentration en nombre utilisant la MIV pour l'agrégation et la rupture des gouttes.

Pour ce cas aucune solution analytique n'est disponible. La **figureIII.7** représente la convergence de la MIV pour la prédiction des concentrations en nombres. Il est clair que les résultats convergent vers la solution, puisque elle produit presque la même allure que les figures précédentes.

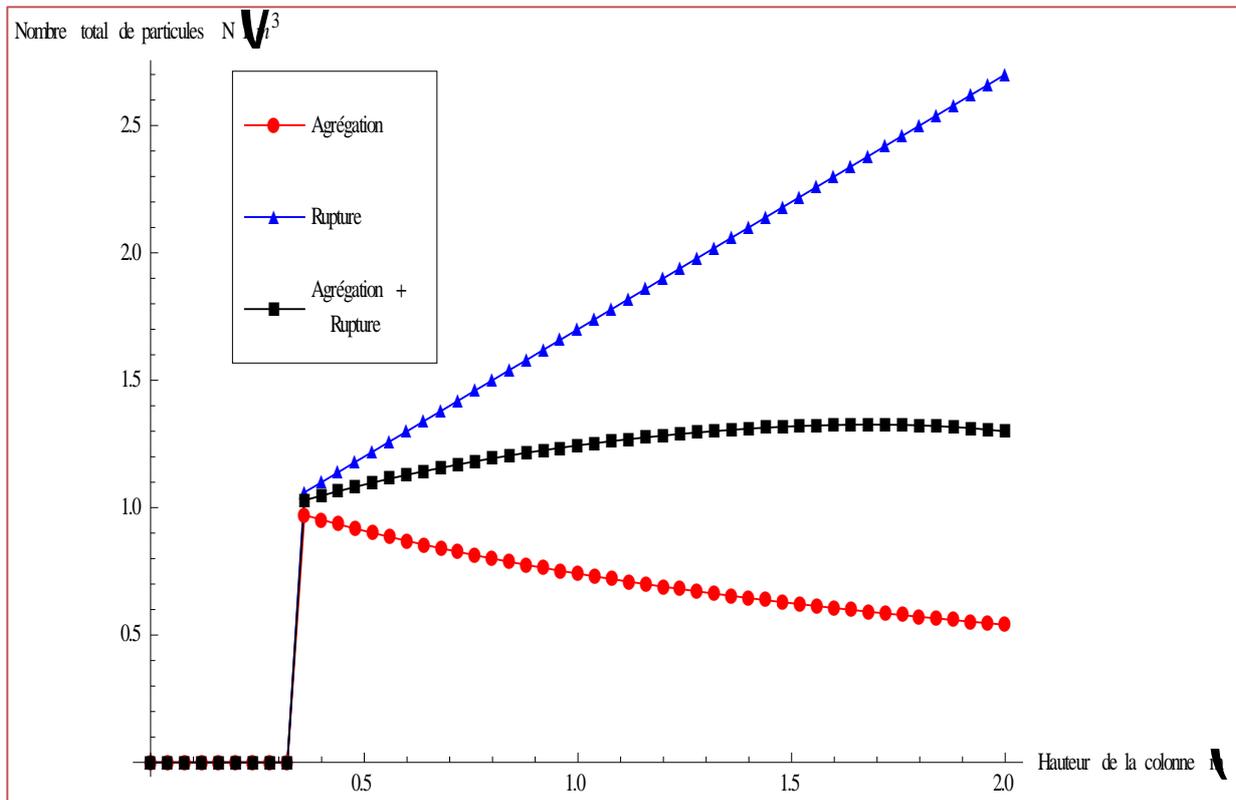
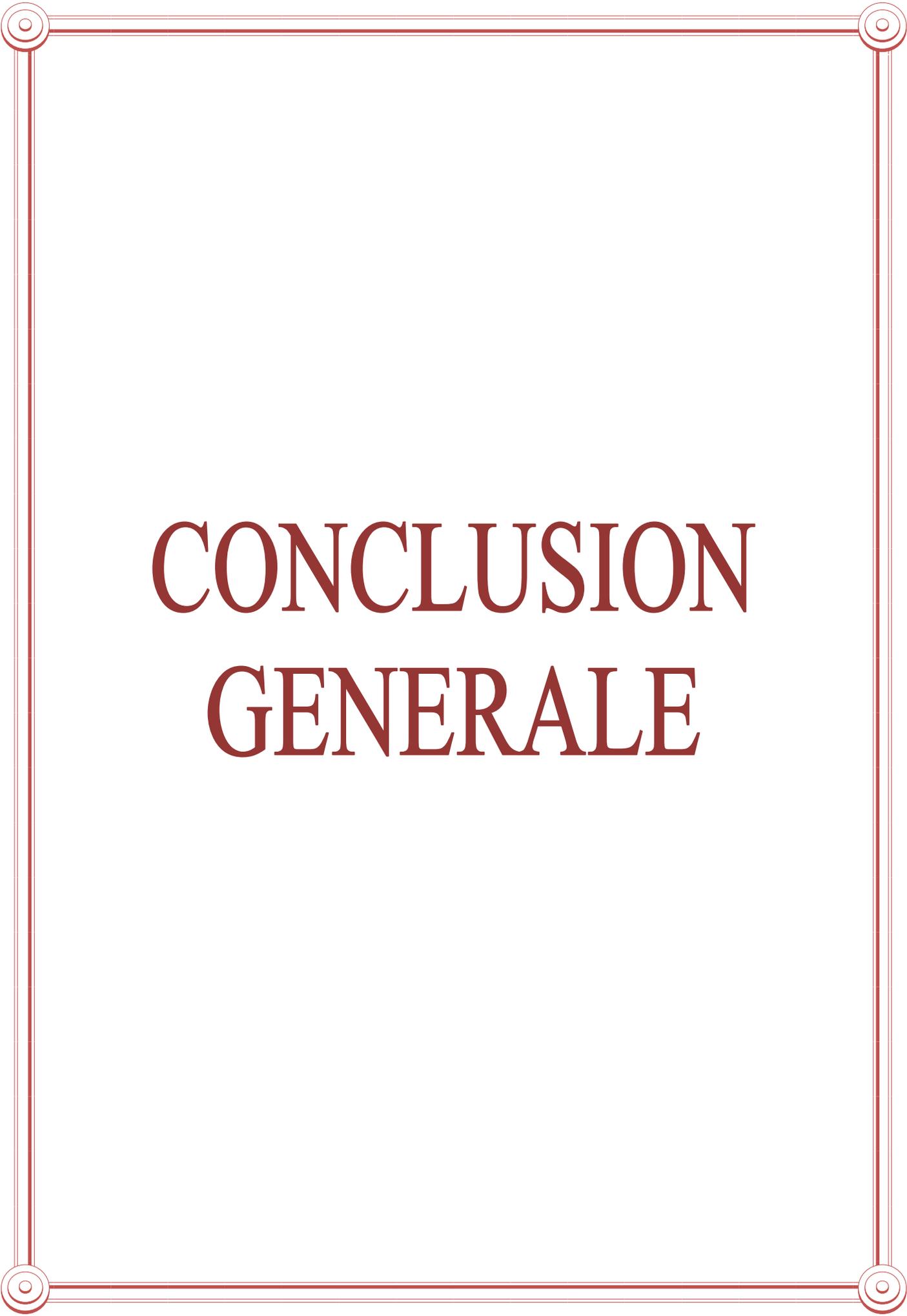


Figure III.8. Comparaison entre les trois cas (rupture, agrégation, agrégation+ rupture).

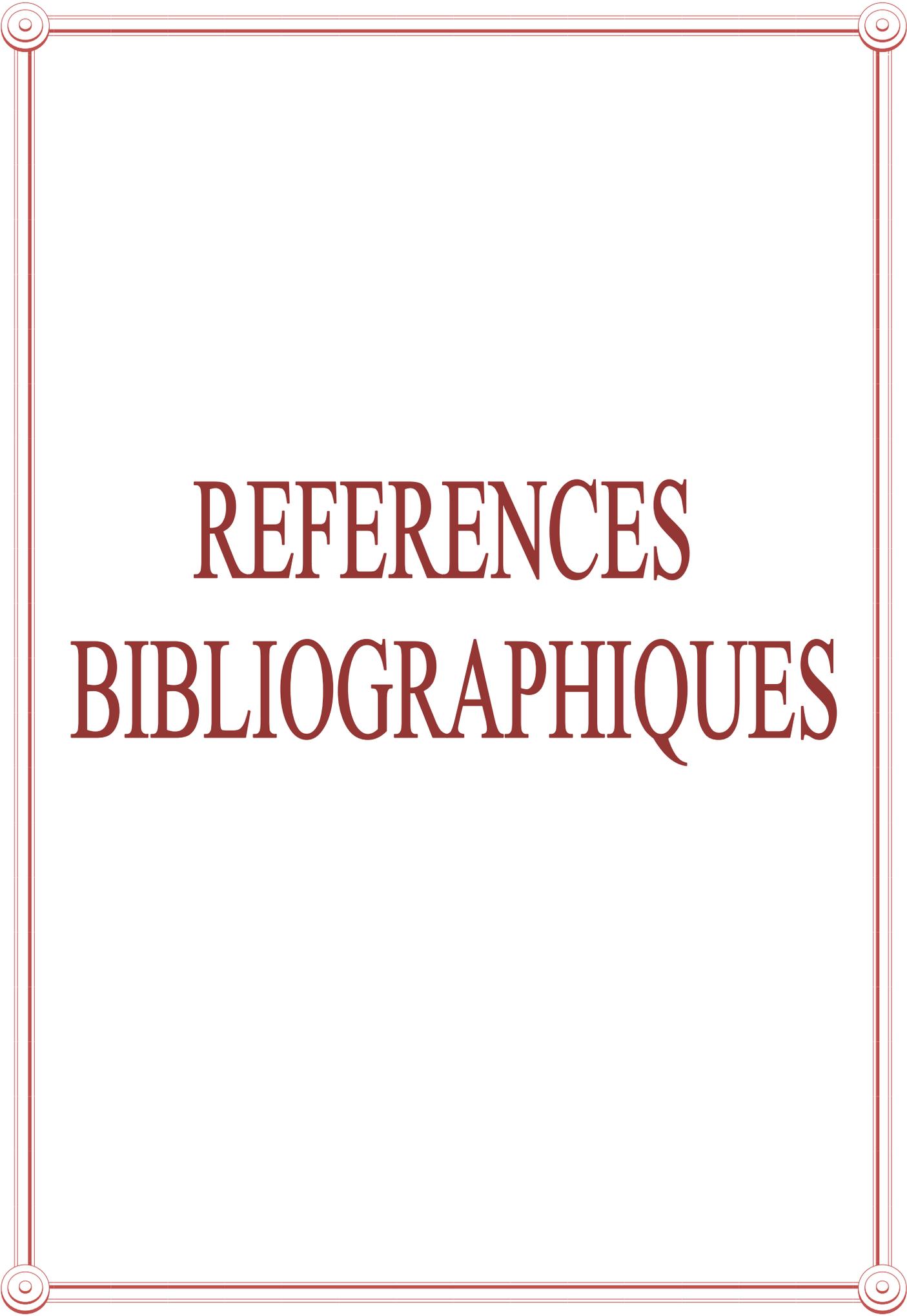
La **figureIII.8** représente une comparaison entre les différents mécanismes d'interaction des gouttes. Pour la rupture des gouttes le profil de concentration en nombre varie fortement le long de la hauteur de la colonne. En effet, à mesure que les gouttes montent dans la colonne, les gouttes se séparent, et par conséquent leur vitesse de montée est réduite, ce qui entraîne une augmentation des volumes et des concentrations totales. La situation inverse lorsque seule l'agrégation des gouttes est active. Puisque, en réalité, la rupture des gouttes et l'agrégation sont actives, nous nous attendons que les profils de concentrations en nombre se situent dans les limites des deux cas précédents.



CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, les méthodes de perturbation homotopique et d'itération variationnelle sont appliquées avec succès pour résoudre l'équation de bilan de population, dans les systèmes d'écoulement continu. Les deux méthodes sont des outils mathématiques très puissants, et fournissent une technique analytique efficace, pour obtenir des solutions exactes aux équations de bilan de population. On conclut que ces méthodes proposées produisent des solutions analytiques identiques. La méthode de perturbation homotopique peut être introduite pour surmonter les limitations et les difficultés existant dans d'autres méthodes approximatives telles que l'MDA, ou la construction de fonctionnels de correction utilisant les multiplicateurs généraux de Lagrange dans la VIM. En outre ces méthodes peuvent être appliquées aux problèmes qui se posent dans différents domaines de la science et de l'ingénierie, en particulier ceux des procédés pour les particules à flux continu.



REFERENCES

BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUE

- [1] H. W. Brandt, K.-H. Reissinger and J. Schröter, *Chem. Eng. Tech.* 1978, 50, 345.
- [2] T. C. Lo, M. H. I. Baird and C. Hanson, Eds., *Handbook of Solvent Extraction*. J. Wiley & Sons, New York 1983.
- [3] J. C. Godfrey and M. J. Slater, Eds., *Liquid-Liquid Extraction Equipment*. J. Wiley & Sons, Chichester 1994.
- [4] A. Robins and R. W. Cusack, *Liquid-Liquid Extraction Operations and Equipment*. Perry's Chemical Engineers' Handbook. R. H. Perry and D. W. Green, Eds. New York, McGraw Hill 1997, 15/1.
- [5] C.Y. Ma, X.Z. Wang, K.J. Roberts, Multi-dimensional population balance modeling of the growth of rod-like L-glutamic acid crystals using growth rates estimated from in-process imaging, *Adv. Powder Technol.* 18 (2007) 707–723.
- [6] R. Gunawan, I. Fusman, R.D. Braatz, High resolution algorithms for multidimensional population balance equations, *AIChE J.* 50 2738–2749 (2004).
- [7] Z. Ning, Distinct element simulation of impact breakage of lactose agglomerates. Modeling of coating in a jet-fluidized bed, *Adv. Powder Technol.* 18 (2007) 311–327.
- [8] K.P. Hapgood, M.X.L. Tan, D.W.Y. Chow, A method to predict nuclei size distributions for use in models of wet granulation, *Adv. Powder Technol.* 20(2009) 293–297.

- [9] M.L. Eggersdorfer, S.E. Pratsinis, Agglomerates and aggregates of nanoparticles made in the gas phase, *Adv. Powder Technol.* 25 (2014) 71–90.
- [10] A. Chaudhury, A. Kapadia, A.V. Prakash, D. Barrasso, R. Ramachandran, An extended cell-average technique for a multi-dimensional population balance of granulation describing aggregation and breakage, *Adv. Powder Technol.* 24(2013) 962–971.
- [11] Y. Yao, Yi-Jun He, Z.H. Luo, L. Shi, 3D CFD-PBM modeling of the gas–solid flow field in a polydisperse polymerization FBR: The effect of drag model, *Adv. Powder Technol.* (2014).
- [12] R.M. Ziff, E.D. McGrady, The kinetics of cluster fragmentation and depolymerisation, *J. Phys. A: Math. Gen.* 18 (1985) 3027–3037. [13] P.J. Blatz, A.V. Tobolsky, Note on the kinetics of system manifesting simultaneous polymerization depolymerization phenomena, *J. Phys. Chem.* 49 (1945) 77.
- [14] H. Hulburt, S. Katz, Some problems in particle technology, a statistical mechanical formulation, *Chem. Eng. Sci.* 19 (1964) 555–574.
- [15] A.D. Randolph, M.A. Larson, *Theory of Particulate Processes*, second ed., Academic Press, New York, 1988.
- [16] M.Z. Jacobson, Analysis of aerosol interactions with numerical techniques for solving coagulation, nucleation, condensation, dissolution, and reversible chemistry among multiple size distributions, *J. Geophys. Res.* 107 (D19)(2002) 4366, <http://dx.doi.org/10.1029/2001JD002044>.
- [17] F. Sreenc, Cytometric data as the basis for rigorous models of cell population dynamics, *J. Biotechnol.* 71 (1999) 233–238.

- [18] Jitendra Kumar. Numerical approximations of population balance equations in particulate systems. PhD thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsbibliothek, 2006.
- [19] A. Gerstlaur. Herleitung und Reduktion populations dynamischer Modelle am Beispiel der Flüssig-Flüssig-Extraction. Phd thesis, University of Stuttgart, Germany, 1999.
- [20] S.M. Iveson, J.D. Litster, K. Hapgood, and B.J. Ennis. Nucleation growth and breakage phenomena in agitated wet granulation processes: A review. *Powder Technology*, 117:3{39, 2001.
- [21] S. Heinrich, M. Peglow, M. Ihlow, M. Henneberg, and L. Morl. Analysis of the start-up process in continuous fluidized bed spray granulation by population balance modelling. *Chemical Engineering Science*, 22:73{92, 1995.
- [22] M. Peglow. Beitrag zur Modellbildung von eigenschaftsverteiltern dispersen Systemen am Beispiel der Wirbelschicht-Sprühagglomeration. Phd thesis, Otto-von-Guericke-University Magdeburg, Germany, 2005.
- [23] K. J. Valentas, A. R. Amundson, (1966). Breakage and coalescence in dispersed phase systems. *Ind. Engng. Chem. Fundam.*, **5**, 533-542.
- [24] S. Motz, A. Mitrovic, E.-D. Gilles, (2002). Comparison of numerical methods for the simulation of dispersed phase systems. *Chem. Engng. Sci.*, **57**, 4329-4344.
- [25] F. Puel, G. Fevotte, J. P. Klein, (2003). Simulation and analysis of industrial crystallization processes through multidimensional population balance equations. Part 1: a resolution algorithm based on the method of classes. *Chem. Engng. Sci.*, **58**, 3715-3727.

- [26] F. B. Campos, P. L. C. Lage, (2003). A numerical method for solving the transient multidimensional population balance equation using Euler-Lagrange formulation. *Chem. Engng. Sci.*, **58**, 2725-2744.
- [27] G. Modes, H.-J. Bart, D. Rodrigue-Perancho, D. Broder, 1999. Simulation of the fluid dynamics of solvent extraction columns from single droplet parameters. *Chemical Engineering and Technology* 22, 231–236.
- [28] A. Gerstlauer, (1999): Herleitung und Reduktion populations dynamischer Modelle am Beispiel der Flüssig-Flüssig-Extraktion. *Fortschritt-Berichte VDI Reihe, 3*, 612.
- [29] S. Mohanty, (2000). Modeling of liquid-liquid extraction column: A review. *Rev. Chem. Engng.*, **16**, 199- 248.
- [30] S. D. Al Khani, C. Gourdon, G. Casamatta, (1988). Simulation of hydrodynamics and mass transfer of disks and rings pulsed column. *Ind. Engng. Chem. Res.*, **27**, 329-333.
- [31] C. Tsouris, V. I. Kirou, L. L. Tavlarides, (1994). Drop size distribution and hold up profiles in a multistage extraction column. *AIChE J.*, **40**, 407-418.
- [32] V. Alopaeus, J. Koskinen, K. I. Keskinen, & Majander, J. (2002). Simulation of the population balances for liquid-liquid systems in a nonideal stirred tank: Part 2- parameter fitting and the use of multiblock model for dense dispersions. *Chem. Engng. Sci.*, **57**, 1815-1825.
- [33] G. Casamatta, A. Vogelpohl, (1985). Modelling of fluid dynamics and mass transfer in extraction columns. *Ger. Chem. Engng.*, **8**, 96-103.
- [34] S. D. Al Khani, C. Gourdon, G. Casamatta, (1989). Dynamic and steady-state simulation of hydrodynamics and mass transfer in liquid-liquid extraction column. *Chem. Engng. Sci.*, **44**, 1295- 1305.

- [35] M. Cabassud, C. Gourdon, G. Casamatta, (1990). Single drop break-up in a Kühni column. *Chem. Engng. J.*, **44**, 27-41.
- [36] V. Cauwenberg, J. Degreve, M. J. Slater, (1997). The interaction of solute transfer, contaminants and drop break-up in rotating disc contactors: Part I. Correlation of drop breakage probabilities. *Can. J. Chem. Engng.*, **75**, 1046-1055.
- [37] S. E. Kentish, G. W. Stevens, H. R. C. Pratt, (1998). Estimation of coalescence and breakage rate constants within a Kühni column. *Ind. Engng. Chem. Res.*, **37**, 1099-1106.
- [38] D. Colella, D. Vinci, R. Bagatin, M. Masi, (1999). A study on coalescence and breakage mechanisms in three different bubble columns. *Chem. Engng. Sci.*, **54**, 4767-4777.
- [39] G. Modes, (2000): Grundsatzliche Studie zur Populationsdynamik einer Extraktions kolonne auf Basis von Einzeltropfenuntersuchungen, Dissertation, Shaker Verlag.
- [40] C. A. Biggs, P. A. Lant, (2002). Modelling activated sludge flocculation using population balances. *Powder Tech.*, **14**, 201-211.
- [41] H.-J. Bart, (2003). Reactive extraction in stirred columns: A review. *Chem. Engng. Tech.*, **26**, 723-731.
- [42] C. Desnoyer, O. Masbernat, C. Gourdon, (2003). Experimental study of drop size distribution at high phase ratio in liquid-liquid dispersions. *Chem. Engng. Sci.*, **58**, 1353-1363.
- [43] S. Schmidt, M. Simon, H.-J. Bart, (2003). Tropfenpopulationsmodellierung- Einfluss von Stoffsystem und technischen Geometrien. *Chemie Ingenieur Technik*, **75**, 62-67.

- [44] D. Ramkrishna, 2000. Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering. Academic Press, San Diego.
- [45] M.M. Attarakih, H.-J. Bart, N.M. Faqir, 2004a. Numerical solution of the spatially distributed population balance equation describing the hydrodynamics of interacting liquid–liquid dispersions. *Chemical Engineering Science* 59, 2567–2592.
- [46] M. Kostoglou, A.J. Karabelas, 2002. An assessment of low-order methods for solving the breakage equation. *Powder Technology* 127, 116–127.
- [47] R.A. Hamilton, J.S. Curits, D. Ramkrishna, 2003. Beyond lognormal distributions: Hermite spectra for solving population balances. *A.I.Ch.E. Journal* 49, 2328–2343.
- [48] M. Nicmanis, M.J. Hounslow, 1998. Finite-element methods for steady state population balance equations. *A.I.Ch.E. Journal* 44, 2258–2272.
- [49] S. Kumar, D. Ramkrishna, 1996a. On the solution of population balance equations by discretization-I. A fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science* 51, 1311–1332.
- [50] R.B. Diemer, J.H. Olsen, 2002. A moment methodology for coagulation and breakage problems: Part 3 — generalized daughter distributions. *Chemical Engineering Science* 57, 4187–4198.
- [51] R. McGraw, 1997. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology* 27, 255–265.
- [52] R.G. Gordon, 1968. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics* 9, 655–663.

- [53] D.L. Marchisio, J.T. Piktorna, R.D. Fox, R.D. Vigil, A.A. Baressi, 2003a. Quadrature method of moments for population-balance equations. *A.I.Ch.E. Journal* 49, 1266–1276.
- [54] D.L. Marchisio, R.D. R.O. Vigil, Fox, 2003b. Quadrature method of moments for aggregating-breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science* 258, 322–334.
- [55] R. McGraw, D.L. Wright, 2003. Chemically resolved aerosol dynamics for internal mixtures by the quadrature of moments. *Journal of Aerosol Science* 34, 189–209.
- [56] V.N. Piskunov, A.I. Golubev, 2002. The generalized approximation method for modeling coagulation kinetics—part 1: justification and implementation of method. *Journal of Aerosol Science* 33, 51–63.
- [57] D.L. Wright , R. McGraw, D.E. Rosner, 2001. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering of particle populations. *Journal of Colloid and Interface Science* 236, 242–251.
- [58] D.E. Rosner, J.J. Pyk nen, 2002. Bivariate moment simulation of coagulating and sintering nanoparticles in flames. *A.I.Ch.E. Journal* 48, 476–491.
- [59] V.N. Piskunov, A.I. Golubev, 2002. The generalized approximation method for modeling coagulation kinetics—part 1: justification and implementation of method. *Journal of Aerosol Science* 33, 51–63.
- [60] H. Tsang and J.M. Hippe. Asymptotic behavior of aerosol growth in the free molecule regime. *Aerosol Science and Technology*, 8:265{278, 1988.

- [61] Z. Meng, D. Dabdub, and J.H. Seinfeld. Size-resolved and chemically resolved model of atmospheric aerosol dynamics. *Journal of Geophysical Research*, 103(D3):3419{3435, 1998.
- [62] F.M. Gelbard and J.H. Seinfeld. Coagulation and growth of a multicomponent aerosol. *Journal of Colloid and Interface Science*, 63(3):472{479, 1978.
- [63] F.M. Gelbard and J.H. Seinfeld. Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems. *Journal of Computational Physics*, 28:357{375, 1978.
- [64] F.M. Gelbard and J.H. Seinfeld. Simulation of multicomponent aerosol dynamics. *Journal of Colloid and Interface Science*, 78(2):485{501, 1980.
- [65] A.A. Lushnikov. Evolution of coagulating systems iii. coagulating mixtures. *Journal of Colloid and Interface Science*, 54(1):94{101, 1976.
- [66] C. Pilinis. Derivation and numerical solution of the species mass distribution equation for multicomponent particulate systems. *Atmospheric Environment*, 24A (7):1923{1928, 1990.
- [67] J.H. Seinfeld and S.N. Pandis. *Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change.* John Wiley & Sons, Inc., 1997.
- [68] F.S. Binkowski and U. Shankar. The regional particulate matter model: model description and preliminary results. *Journal of Geophysical research*, 100:26,191{26,209, 1995.
- [69] M.Z. Jacobson. Numerical techniques to solve condensational and dissolutional growth equations when growth is coupled to reversible reactions. *Aerosol Science and Technology*, 27:491{498, 1997.
- [70] Y.P. Kim and J.H. Seinfeld. Simulation of multicomponent aerosol condensation by the moving sectional method. *Journal of Colloid and Interface Science*, 135(1):185{199, 1990.

- [71] F.W. Lurmann, A.S. Wexler, S.N. Pandis, S. Musara, N. Kumar, and J.H. Seinfeld. Modeling urban and regional aerosols - ii. Application to California's south coast air basin. *Atmospheric Environment*, 31:2695{2715, 1997.
- [72] S. Dhaniyala and A. Wexler. Numerical schemes to model condensation and evaporation of aerosols. *Atmospheric Environment*, 30:919{928, 1996.
- [73] K. Nguyen and D. Dabdub. Semi-Lagrangian Flux Scheme for the Solution of the Aerosol Condensation/Evaporation Equation. *Aerosol Science and Technology*, in press, 2002.
- [74] Y. Zhang, J.H. Seinfeld, M.Z. Jacobson, and F.S. Binkowski. Simulation of aerosol dynamics: a comparative review of algorithms used in air quality models. *Aerosol Science and Technology*, 31:487{514, 1999.
- [75] D. Ramkrishna, (1985). The status of population balances. *Rev. Chem. Eng.*, 5, 49-95.
- [76] M. Goodson, M. Kraft, (2003): Stochastic simulation of coalescence and breakage processes: a practical study. Preprint No. 9, pp. 1-30. Cambridge center for computational chemical engineering, Cambridge.
- [77] A. W. Mahoney, D. Ramkrishna, (2002). Efficient solution of population balances equations with discontinuities by finite elements. *Chem. Engng. Sci.*, **57**, 1107-1119.
- [78] M. Wulkow, A. Gerstlauer, U. Nieken, (2001). Modeling and simulation of crystallization process using parsival. *Chem. Engng. Sci.*, **56**, 2575-2588.
- [79] G. Adomian, *Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method*, Kluwer, Dordrecht, 1994.
- [80] G. Adomian, *Nonlinear stochastic system Theory and Physics*, Kluwer, Dordrecht, 1994.

- [81] Y. Cherruault, *Modeles et Methods Mathematiques pour les Science du Vivant*, Prosses universitaires de France, 1998.
- [82] A Hasseine, A Bellagoun, and H-J Bart. Analytical solution of the droplet breakup equation by the adomian decomposition method. *Applied Mathematics and Computation*, 218(5) :2249–2258, 2011.
- [83] L Blanco-Cocom and E Ávila-Vales. The use of the adomian decomposition method for a sirc influenza model. *Advances in Differential Equations and Control Processes*, 5(2) :115–127, 2010.
- [84] Abdul-Majid Wazwaz. A comparison between adomian decomposition method and taylor series method in the series solutions. *Applied Mathematics and Computation*, 97(1) :37–44, 1998.
- [85] George Adomian. *Nonlinear stochastic systems theory and application to physics*, volume 46. Springer Science & Business Media, 1989.
- [86] G Adomian. A review of the decomposition method and some recent results for nonlinear equations. *Mathematical and Computer Modelling*, 13(7) :17–43, 1990.
- [87] Yves Cherruault. Convergence of adomian’s method. *Kybernetes*, 18(2) :31–38, 1989.
- [88] Y Cherruault, G Saccomandi, and B Some. New results for convergence of adomian’s method applied to integral equations. *Mathematical and Computer Modelling*, 16(2) :85–93, 1992.
- [89] K Abbaoui and Y Cherruault. Convergence of adomian’s method applied to differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 28(5) :103–109, 1994.

- [90] J.H. He, A new approach to nonlinear partial differential equations, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2 (4) (1997) 230–235.
- [91] J.H. He, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2 (4) (1997) 235–236.
- [92] J.H. He, Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 167 (1–2) (1998) 57–68.
- [93] J.H. He, Approximate solution of nonlinear differential equations with convolution product nonlinearities, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 167 (1– 2) (1998) 69–73.
- [94] J.H. He, Variational iteration method a kind of non-linear analytical technique; some examples, *Internat. J. Non-Linear Mech.* 34 (1999) 699–708.
- [95] M. Inokuti et al. General use of the Lagrange multiplier in nonlinear mathematical physics, in: S. Nemat-Nassed, ed., *Variational method in the Mechanics of Solids* (Pergamon Press, 1978) 156-162.
- [96] Shimin Guo and Liqun Mei. The fractional variational iteration method using he's polynomials. *Physics Letters A*, 375(3) :309–313, 2011.
- [97] DD Ganji, M Nourollahi, and E Mohseni. Application of he's methods to nonlinear chemistry problems. *Computers & Mathematics with Applications*, 54(7) :1122– 1132, 2007.
- [98] Ahmet Yıldırım. Variational iteration method for modified camassa–holm and degasperis–procesi equations. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 26(2) :266–272, 2010.

- [99] Ghader Rezazadeh, Hadi Madineei, and Rasool Shabani. Study of parametric oscillation of an electrostatically actuated microbeam using variational iteration method. *Applied Mathematical Modelling*, 36(1) :430–443, 2012.
- [100] D Altıntan and Ö Uğur. Solution of initial and boundary value problems by the variational iteration method. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 259 :790–797, 2014.
- [101] H. Wang, H. M. Fu, H. F. Zhang, et al., A practical thermodynamic method to calculate the best glass-forming composition for bulk metallic glasses, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 8 (2) (2007) 171-178.
- [102] L. Xu, J. H. He, Y. Liu, Electrospun nanoporous spheres with Chinese drug, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 8 (2) (2007) 199-202.
- [103] F. Z. Sun, M. Gao, S .H. Lei, et al., The fractal dimension of the fractal model of dropwise condensation and its experimental study, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 8 (2) (2007) 211-222.
- [104] T. L. Bo, L. Xie, X. J. Zheng, Numerical approach to wind ripple in desert, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 8 (2) (2007) 223-228.
- [105] S. Q. Wang, J. H. He, Variational iteration method for solving integro-differential equations, *Phys. Lett. A* 367 (2007) 188-191.
- [106] J, Saberi-Nadjafi, M. Tamamgar, The variational iteration method: A highly promising method for solving the system of integro-differential equations, *Comput. Math. Appl.*, (Article in press).
- [107] J. H. He, Variational iteration method for autonomous ordinary differential systems, *Appl. Math. Comput.* 118 (2-3) (2000) 115-123.
- [108] J. H. He, Variational principle for some nonlinear partial differential equations with variable coefficients, *Chaos, Solitons & Fractals* 19 (2004) 847-851.

- [109] M. A. Abdou, A.A. Soliman, New applications of variational iteration method, *Physica D* 211 (1-2) (2005) 1-8.
- [110] M. A. Abdou, A.A. Soliman, Variational iteration method for solving Burger's and coupled Burger's equations, *J. Comput. Appl. Math.* 181 (2005) 245-251.
- [111] S. Momani, S. Abuasad, Application of He's variational iteration method to Helmholtz equation, *Chaos, Solitons & Fractals* 27 (2006) 1119-1123.
- [112] Z. M. Odibat, S. Momani, Application of variational iteration method to nonlinear differential equations of fractional order, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 7 (2006) 27-36.
- [113] J. H. He, Some asymptotic methods for strongly nonlinear equations, *Int. J. Modern Phys. B* 20 (10) (2006) 1141-1199.
- [114] E. M. Abulwafa, M.A. Abdou, A.A. Mahmoud, The solution of nonlinear coagulation problem with mass loss, *Chaos Solitons & Fractals* 26 (2006) 313-330.
- [115] N. Bildik, A. Konuralp, The use of variational iteration method, differential transform method and Adomian decomposition method for solving different types of nonlinear partial differential equations, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 7 (1) (2006) 65-70.
- [116] M. Dehghan, M. Tatari, Identifying an unknown function in a parabolic equation with overspecified data via He's variational iteration method, *Chaos, Solitons and Fractals*, Volume 36, (2008), 157-166.
- [117] M. Dehghan, F. Shakeri, Application of He's variational iteration method for solving the Cauchy reaction-diffusion problem, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 214, (2008), 435-446.

- [118] M. Dehghan, F. Shakeri, Numerical solution of a biological population model using He's variational iteration method, *Computers and Mathematics with Applications*, 54 (2007) 1197-1209.
- [119] M. Dehghan, F. Shakeri, Approximate solution of a differential equation arising in astrophysics using the variational iteration method, *New Astronomy*, 13 (2008) 53-59.
- [120] M. Inokviti, H. Sekine, T. Mura, General use of the Lagrange multiplier in nonlinear mathematical physics, in: S. Nemat-Nasser (Ed.), *Variational Method in the Mechanics of Solids*, Pergamon Press, Oxford, 1978.
- [121] J.H. He, *Generalized Variational Principles in Fluids*, Science and Culture Publishing House of China, 2003 (in Chinese).
- [122] J.H. He, *Non-perturbative methods for strongly nonlinear problems*, Dissertation, de-Verlag in GmbH, Berlin, 2006.
- [123] J. H. He, (1999): Homotopy perturbation techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 178, pp. 257–262.
- [124] J. H. He, (2003): Homotopy perturbation method: a new nonlinear analytical technique. *Applied Mathematics and Computation* 135, pp. 73–79.
- [125] J. H. He, (2000a): A review on some new recently developed nonlinear analytical techniques. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation* 1(1), pp. 51–70.
- [126] J. H. He, (2000b): A coupling of homotopy technique and perturbation technique for nonlinear problems. *International Journal of Nonlinear Mechanics* 35(1) (2000), pp. 37–43.
- [127] S. Abbasbandy, (2007): Application of He's homotopy perturbation method to functional integral equations. *Chaos Solitons Fractals* 31, pp. 1243–1247.

- [128] D. D. Ganji, A. Sadighi, (2006): Application of He's homotopy perturbation method to nonlinear coupled system of reaction-diffusion equations. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation* 7, pp. 411–418.
- [129] M. Rafei, and D. D. Ganji, (2006): Explicit solutions of Helmholtz equation and fifth-order KdV equation using homotopy perturbation method. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation* 7, pp. 321–328.
- [130] M. Rafei, D. D. Ganji, D. Daniali, (2007): Solution of epidemic model by homotopy perturbation method. *Applied Mathematics and Computation* 187, pp. 1056–1062.
- [131] T. Ozis, A. Yildirim, (2007a): A comparative study of He's homotopy perturbation method for determining frequency-amplitude relation of a nonlinear oscillators with discontinuity. *International Journal of Nonlinear Science and Numerical Simulation* 8 (2), pp. 243–248.
- [132] T. Ozis, and A. Yildirim, (2007b): Travelling wave solution of KdV equation using He' homotopy perturbation method. *International Journal of Nonlinear Science and Numerical Simulation* 8, pp. 239–242.
- [133] S. Momani, Z. Odibat, (2007): Homotopy perturbation method for nonlinear partial differential equations of fractional order. *Physics Letters A* 365, pp. 345–350.
- [134] Z. Odibat, S. Momani, (2008): Modified homotopy perturbation method: Application to Riccati differential equation. *Chaos Solitons Fractals* 36, pp. 167–174.

- [135] A. M. Siddique, R. Mahmood, Q. K. Ghori, (2006): homotopy perturbation method for thin film flow of a fourth grade fluid down an inclined plane. *Physics Letters A* 352 (4–5), pp. 404–410.4
- [136] M. Ghasemi, M. Tavassoli, E. Babolian, (2007): Numerical solutions of the nonlinear Voltera-Fredholm integral equations by using homotopy perturbation method. *Applied Mathematics and Computation* 188, pp. 446–449. Jiang 2011).
- [137] Z. Chen, and W. Jiang, (2011): Piecewise homotopy perturbation method for solving linear and nonlinear weakly singular VIE of second order. *Applied Mathematics and Computation* 217 (19), pp. 7790–7798.
- [138] M. Mehrabinezhad, J. Saberi-Nadjafi, (2010): Application of He's homotopy perturbation method to linear programming problem, *International Journal of Computer Mathematics* 88 (2), pp. 341–347.
- [139] A. Shanmugarajan, S. Alwarappan, S. Somasundaram, R. Lakshmanan, (2011): Analytic solution of amperometric enzymatic reaction based on homotopy perturbation method. *Electrochimica Acta* 56 (9), pp. 3345–3352.
- [140] S. Pamuk, N. Pamuk, (2010): He's homotopy perturbation method for continuous population model for single and interacting species. *Computers and Mathematics with Applications* 59 (2), pp. 612–621.
- [141] S. Gupta, J. Singh, D. Kumar, (2013): Applications of homotopy perturbation transform method for solving time-dependent functional differential equations. *International Journal of Nonlinear Science* 16(1), pp. 37–49.
- [142] J. Singh, D. Kumar, A. Kilicman, (2013): Homotopy perturbation method for fractional gas dynamics equation using sumudu transform. *Abstract and Applied Analysis* 2013, Article ID 934060, 8 pages.

- [143] J. Singh, D. Kumar, (2013): An application of homotopy perturbation transform method to fractional heat and wave-like equations. *Journal of Fractional Calculus and Applications* 4(2), pp. 290–302.
- [144] A. Belendez, C. Pascual, T. Belendez, and A. Hernandez, (2009a): Solution for an antisymmetric quadratic nonlinear oscillator by a modified He's homotopy perturbation method. *Nonlinear Analysis RWA* 10 (1), pp. 416–427.
- [145] A. Belendez, C. Pascual, M. Ortuno, T. Belendez, S. Gallego, (2009b): Application of modified He's homotopy perturbation method to obtain higher order approximations to a nonlinear oscillator with discontinuities. *Nonlinear Analysis RWA* 10 (2), pp. 601–610.
- [146] Hossein Jafari, M Zabihi, and M Saïdy. Application of homotopy perturbation method for solving gas dynamics equation. *Appl. Math. Sci*, 2(48) :2393–2396, 2008.
- [147] A Ranjbar Noiey, N Haghparast, MMiansari, and DD Ganji. Application of homotopy perturbation method to the mhd pipe flow of a fourth grade fluid. In *Journal of Physics : Conference Series*, volume 96, page 012079. IOP Publishing, 2008.
- [148] Lin Jin. Homotopy perturbation method for solving partial differential equations with variable coefficients. *International Journal of Contemporary Mathematical Sciences*, 3(28) :1395–1407, 2008.
- [149] Ji-Huan He. Application of homotopy perturbation method to nonlinear wave equations. *Chaos, Solitons & Fractals*, 26(3) :695–700, 2005.
- [150] Turgut Öziş and Ahmet Yıldırım. Traveling wave solution of korteweg-de vries equation using he's homotopy perturbation method. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 8(2) :239–242, 2007.

- [151] Ji-Huan He. Recent development of the homotopy perturbation method. *Topological Methods in Nonlinear Analysis*, 31(2) :205–209, 2008.
- [152] A. Hasseine, « modélisation des colonnes d'extraction liquide-liquide a base de la résolution du bilan de population. Incorporation des phénomènes de rupture et de coalescence des gouttes», Thèse de Docteur ès Sciences Université Mentouri Constantine, Algérie, 2007.
- [153] T. Miyauchi, T. Vermeulen, «Longitudinal dispersion in two-phase continuous-flow operations», *Ind.Eng.Chem.Fund.* Vol.2; pp.113, (1963).
- [154] Jinghai Li et Mooson Kwauk, Exploring complex systems in chemical engineering – the multi-scale methodology. *Chemical Engineering Science*, 58:521–535, 2003.
- [155] P. Chen, J. Sanyal et M.P. Dudukovic: Numerical simulation of bubble columns flows: effect of different break-up and coalescence closures. *Chemical Engineering Science*, 60: 1085–1101, 2005.
- [156] R.D. Vas Bhat, J.A.M. Kuipers et G.F. Versteeg: Mass transfer with complex chemical reactions in gas-liquid systems: two-step reversible reactions with unit stoichiometric and kinetics orders. *Chemical Engineering Journal*, 76:127–152, 2000.
- [157] A.H.G. Cents, D.W.F. Brilman et G.F. Versteeg: CO₂ absorption in carbonate/bicarbonate solutions: The danckwerts-criterion revisited. *Chemical Engineering Science*, 60:5830–5835, 2005.
- [158] B. Haut et T. Cartage, Mathematical modelling of gas-liquid mass transfer rate in bubble columns operated in the heterogeneous regime. *Chemical Engineering Science*, 60:5937–5944, 2005.

- [159] H. Luo et H.F. Svendsen: Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. *A.I.Ch.E. Journal*, 42:1225–1233, 1996.
- [160] S. Rohani, A. Jutan: New Numerical Method for Solving the Dynamic Population Balance Equations. *AIChE Journal*, 51: 3000–3006, 2005.
- [161] <http://nte.mines-albi.fr/CristalGemme/co/CristalGemme.html>. Dernier Accès: 16/10/2017.
- [162] H. Hufnagl, M. McIntyre and E. Blaß, 1991, Dynamic behaviour and simulation of a liquid–liquid extraction column, *Chem. Eng. Technol.*, 14, 301-306.
- [163] O. Weinstein, R. Semiat and D. Lewin, 1998, Modelling, simulation and control of liquid–liquid extraction columns. *Chem. Eng. Sci.*, 53, 2, 325–339.
- [164] F.S. Mjalli, 2005, Neural network model-based predictive control of liquid–liquid extraction contactors, *Chem. Eng. Sci.*, 60, 239–253.
- [165] T. Xiaojin, L. Guangsheng and W. Jiading, 2005, An improved dynamic combined model for evaluating the mass transfer performances in extraction columns, *Chem. Eng. Sci.*, 60, 4409–4421.
- [166] E. Blass and H. Zimmerman, 1982, Mathematische Simulation und experimentelle Bestimmung des instationären Verhaltens einer flüssigkeitspulsierten Siebbodenkolonne zur Flüssig-Flüssig-Extraktion, *Verfahrenstechnik*, 16, 9, 652-690.

- [167] A. Kumar, S. Hartland, 1995, A unified correlation for the prediction of dispersed-phase hold-up in liquid-liquid extraction columns, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 34, 3925–3932.
- [168] L. Steiner, H. Bertschmann and S. Hartland, 1995, A Model for Simulation of Hydrodynamics and Mass-Transfer in Extraction Columns Filled with a Regular Packing, *Chem. Eng. Res. Des.*, 73, 5, 542-550.
- [169] H.-J. Bart and G. Stevens, 2004, Reactive Solvent Extraction, In: *Ion Exchange and Solvent Extraction*, Eds. Kertes M., Sengupta A.K., 17, 37-82, Marcel Dekker, New York.
- [170] G. Casamatta and A. Vogelpohl, 1985, Modelling of fluid dynamics and mass transfer in extraction columns, *Ger. Chem. Eng.*, 8, 96-103.
- [171] M.O. Garg and H.R.C. Pratt, 1984, Measurement and modelling of droplet coalescence and breakage in a pulsed-plate extraction column, *AIChE J.*, 30, 3, 432–441.
- [172] Gourdon C., Casamatta G. and Muratet G., 1994, in: J.C. Godfrey and M.J. Slater (Eds.), *Liquid-Liquid Extraction Equipment*, Wiley, Chichester, 137-226.
- [173] Attarakih M.M., Bart H.-J., Steinmetz T., Dietzena M. and Faqir N.M., 2008, LLECMOD: A Bivariate Population Balance Simulation Tool for Liquid- Liquid Extraction Columns. *Open Chem. Eng. J.*, 2, 10-34.
- [174] Kronberger T., Ortner A., Zulehner W. and Bart H.-J., 1995, Numerical Simulation of Extraction Columns Using a Drop Population Model, *Comput. Chem. Eng.*, 19, 639-644.

- [175] M.M. Attarakih, H.-J. Bart, and N.M. Faqir, 2004b, Solution of the droplet breakage equation for interacting liquid-liquid dispersions: a conservative discretization approach, *Chem. Eng. Sci.*, 59, 2547-2565.
- [176] Attarakih M.M., Bart H.-J., and Faqir N.M., 2006a, Numerical Solution of the Bivariate Population Balanced Equation for the Interacting Hydrodynamics and Mass Transfer in Liquid-Liquid Extraction Columns, *Chem. Eng. Sci.*, 61, 113-123.
- [177] M.M. Attarakih, H.-J. Bart, and N.M. Faqir, 2006b, A Hybrid Scheme for the Solution of the Bivariate Spatially Distributed Population Balanced Equation, *Chem. Eng. Tech.*, 29, 435-441.
- [178] G. Casamatta, « Comportement de la population de gouttes dans une colonne d'extraction : Transport, rupture, coalescence et transfert de matière », Thèse de Docteur ès Sciences, INP Toulouse, (1981).
- [179] F.G. Zhu, X.D. Ni, Y.C. Zhou, S.C. Yu, Y.F. Su, 1984. A modified rotating disc contactor with wire meshes coalescers. In: Akell, R.,
- [180] S.H. Zhang, S.C. Yu, Y.C. Zhou, Y.F. Su, 1985. A model for liquid-liquid extraction column performance—The influence of drop size distribution on extraction efficiency. *Canadian Journal of Chemical Engineering* 63, 212–226.
- [181] T. Kronberger, A. Ortner, W. Zulehner, H.-J. Bart, 1994. Numerical determination of drop size distribution in extraction columns. In: Fasano, A. (Ed.), *Seventh European Conference on Mathematics in Industry*. B.G. Teubner, Stuttgart, pp. 247–254.
- [182] H. S. Mickley, T. S. Sherwood, C. E. Reed, (1990). *Applied Mathematics in Chemical Engineering*. New Delhi: McGraw-Hill Pub. Co.

- [183] J. S. Milton, J. C. Arnold, (1990). Introduction to probability and statistics. Second Edition, New York: McGraw-Hill Pub. Co.
- [184] C. L. Prasher, Crushing and Grinding Process Handbook, Wiley, New York (1987).
- [185] A. Hasseine, Z. Barhoum, M. Attarakih, H.-J. Bart, Analytical solutions of the particle breakage equation by the Adomian decomposition and the variational iteration methods. *Advanced Powder Technology* 26 (2015) 105–112.
- [186] A. Hasseine, H.J. Bart, Adomian decomposition method solution of population balance equations for aggregation, nucleation, growth and breakup processes. *Appl. Math. Modelling*, 39(2015) 1975–1984.
- [187] A. Hasseine, S. Senouci, M. Attarakih and H.-J. Bart, Application of two analytical approaches for the solution of the population balance equations: Particle breakage process. *Chemical Engineering & Technology*. Accepted Article.
- [188] M.J. Hounslow (1990) A discretized population balance for continuous systems at steady state. *American Institute Chemical Engineering Journal*, 36(1), 106 -116.
- [189] D. J. Smit, M. J. Hounslow, and W. R. Paterson, “Aggregation and Gelation 1: Analytical Solutions for CST and Batch Operation,” *Chem. Eng. Sci.*, 49(7), 1025 (1993).

ANNEXE
Article Application of He's methods
to the steady state population balance
equation in continuous flow systems

Applications of He's methods to the steady-state population balance equation in continuous flow systems

Abdelmaek Hasseine^{1✉}, Imane Bechka¹, Menwer Attarakih^{2,3}, Hans-Jöerg Bart³

¹ Laboratory LAR-GHYDE, University of Biskra, Algeria

² Faculty of Eng. & Tech., Chem. Eng. Dept. The University of Jordan 11942-Amman, Jordan

³ Chair of Separation Science and Technology, Center for Mathematical Modeling, Kaiserslautern University, P.O. Box 3049, D-67653 Kaiserslautern, Germany

Received 17/05/2017

Revised 02/10/2017

Accepted 16/10/2017

Published online: 22/11/2017

Keywords

Breakage equation

Growth equation

Aggregation equation

Homotopy perturbation method

Variational iteration method

Abstract: The population balance equation has numerous applications in physical and engineering sciences, where one of the phases is discrete in nature. Such applications include crystallization, bubble column reactors, bioreactors, microbial cell populations, aerosols, powders, polymers and more. This contribution presents a comprehensive investigation of the semi-analytical solutions of the population balance equation (PBE) for continuous flow particulate processes. The general PBE was analytically solved using homotopy perturbation method (HPM) and variational iteration method (VIM) for particulate processes where breakage, growth, aggregation, and simultaneous breakage and aggregation take place. These semi-analytical methods overcome the crucial difficulties of numerical discretization and stability that often characterize previous solutions of the PBEs. It was found that the series solutions converged exactly to available analytical steady-state solutions of the PBE using these two methods.

© 2017 The authors. Published by the Faculty of Sciences & Technology, University of Biskra. This is an open access article under the CC BY license.

1. Introduction

The population balance equation (PBE) is used to model the particulate processes in various engineering fields such as crystallization (Ma et al. 2007; Gunawan et al. 2004), granulation (Ning 1997; Hapgood et al. 2009; Eggersdorfer and Pratsinis 2014; Chaudhury et al. 2013), polymerization (Yao et al. 2014; Ziff and McGrady 1985; Blatz and Tobolsky 1945), chemical engineering (Hulburt and Katz 1964; Randolph and Larson 1988), aerosol (Jacobson 2002), and biological (Srienc 1999). These processes are characterized by the presence of a continuous phase and a dispersed phase composed of particles with a distribution of properties. This makes studying (PBE) systems an active area of research.

In Ramkrishna 1985; Kostoglou and Karabelas 1994; Kumar and Ramkrishna 1996a,b; Kumar and Ramkrishna 1997; Attarakih 2013 and Santos et al. 2013 a series of papers on the available numerical methods were discussed up to the mid-eighties to find efficient and stable numerical methods for solving the population balance equation, such as the fixed- and moving pivot methods, Dual Quadrature Method of Generalized Moments (DuQMoGeM), and Cumulative Quadrature Method of Moments (CQMOM). In recent years, some powerful and simple methods have been proposed and applied successfully in mathematical, physical and engineering problems to approximate various types of partial differential equations or integral equations, for

example, the Adomian decomposition method (Adomian 1994; Adomian and Rach 1986; Wazwaz 2009), the homotopy perturbation method (He 1999a, 2000, 2004, 2005a,b) and the variational iteration method (He 1997, 1998a-b, 1999b, 2006). Furthermore, until now there are no semi-analytical techniques for steady state population balance equations have been presented in the literature. The main advantage of the techniques are the most transparent methods of solution of (PBEs) because they provide immediate and visible symbolic terms of both analytical and numerical solutions to linear as well as nonlinear integro-differential equations without linearization or discretization. The variational iteration method is now widely used by many researchers to study linear and nonlinear problems and it is based on Lagrange multiplier. The homotopy perturbation method has been used by many authors to handle a wide variety of scientific and engineering applications to solve various functional equations and it has the merits of simplicity and easy execution. In these methods, the solution is considered as the sum of an infinite series, which converges rapidly to accurate solutions. In spite of its rapid successive approximations of the exact solution, the Adomian decomposition method suffers from the complicated computational work needed for the derivation of Adomian polynomials for nonlinear terms. The steady state population balance equation (PBE) for a continuous well-mixed particulate system represents the net rate of number of particles that are

✉ Corresponding author. E-mail address: hasseine@yahoo.fr

Nomenclature

| | |
|----------|--|
| a | mean residence time, [s] |
| $n_m(v)$ | solution components, [L ⁻⁶] |
| $n(v)dv$ | number of particles of size range v to $v+dv$, [L ⁻³] |
| v, u | particle volume, [L ³] |

Abbreviations

| | |
|----------|---|
| CQMOM | cumulative quadrature method of moments |
| DuQMoGeM | dual quadrature method of generalized moments |
| HPM | homotopy perturbation method |
| PBE | population balance equation |
| VIM | variational iteration method |

Greek letters

| | |
|-------------------------|---|
| $\beta(v/u)dv$ | fractional number of particles formed in the size range v to $v+dv$ for medupon breakup of particle of volume u , [-] |
| $\Gamma(v)$ | number of particles in the size range v to $v+dv$ disappearing per unit time by breakup, [T ⁻¹] |
| $\omega(v, u)$ | aggregation frequency between two particles of volumes v and u , [L ³ T ⁻¹] |
| <i>Pochhammer</i> [a,n] | $\Gamma(a+n)/\Gamma(a)$ |

formed by breakage, aggregation, growth and could be written as a follows (Randolph and Larson 1988):

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} + \frac{\partial[G(v)n(v)]}{\partial v} = \varphi(v) \quad (1)$$

Where $n(v)$ is the density distribution of product stream and $n^{feed}(v)$ the density distribution of feed stream, the second term is the convective flux along the particle internal coordinate with a growth velocity $G(v)$.

The term on the right hand side is the net rate of particle generation by aggregation and breakage which is given by (Hulburt and Katz 1964; Prasher 1987):

$$\varphi(v) = \left(\begin{array}{l} -\Gamma(v) n(v) - \int_0^\infty \omega(v, u) n(v) n(u) du \\ + \int_v^\infty \beta(v/u) \Gamma(u) n(u) du \\ + \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v-u, u) n(v) n(v-u) du \end{array} \right) \quad (2)$$

where $\Gamma(v)$ and $\omega(v, u)$ are the breakage and aggregation frequencies, respectively, and $\beta(v/u) dv$ is the breakage function for the formation of particles in the size range $v + dv$ from a particle of size u . The first two terms on the right hand side represent particle loss due to breakup and aggregation followed by two terms which represent particle formation due to breakup and aggregation.

Recently, these semi analytical techniques have been applied for solving (PBEs) for batch and continuous flow particulate dynamic processes (Hasseine et al. 2011; 2015a,b; Hasseine and Bart 2015). The objective of this paper is to solve certain forms of the above equation and extend the VIM and HPM techniques to derive the exact solutions of the steady state PBEs incorporating breakage, aggregation, growth, and simultaneous breakage and aggregation.

The rest of this paper is organized as follows. In Sections 2 and 3, we give an analysis of the variational iteration and homotopy perturbation methods. The analytical and numerical results for the steady state equations using the variational iteration and

homotopy perturbation methods are presented in Section 4. Finally, we give our conclusions in Section 5.

2. The variational iteration method

To introduce the basic ideas of the variational iteration method (VIM), we consider the following differential equation:

$$Lu + Nu = g(t) \quad (3)$$

Where L is a linear operator, N a nonlinear operator and $g(t)$ a source term. According to the VIM, we can write down a correction functional as follows:

$$U_{n+1}(t) = U_n(t) + \int_0^t \lambda (LU_n(\xi) + N\tilde{U}_n(\xi) - g(\xi)) d\xi \quad (4)$$

Where λ is a general Lagrangian multiplier which can be identified optimally via the variational theory and \tilde{U}_n is a restricted variation which means $\delta\tilde{U}_n = 0$ (He. 1998a,b). Consequently, the solution is given by $u = \lim_{n \rightarrow \infty} U_n$.

In the case of the steady state integral equations as given by Eq.(1), and since the Lagrange multiplier λ plays an essential role in applying the VIM method, we should differentiate both sides of this equation to obtain an equivalent integro-differential equation and consequently applying this method in a similar manner as discussed above.

3. He's Homotopy perturbation method

To explain this method, let us consider the following function:

$$A(u) + f(r) = 0, r \in \Omega \quad (5)$$

with boundary conditions

$$B(u, \frac{\partial u}{\partial n}) = 0, r \in \partial\Omega \quad (6)$$

where A is a general differential operator, B a boundary operator, $f(r)$ is a known analytical function and $\partial\Omega$ is the boundary of the domain Ω . Eq. (5) can be rewritten as

$$L(u) + N(u) - f(r) = 0 \quad (7)$$

According to the HPM, we construct a homotopy as follows

$$H(v; p) = L(v) - L(u_0) + pL(u_0) + p(N(v) - f(r)) = 0$$

or

$$H(v; p) = (1 - p)[L(v) - L(u_0)] + p[A(v) - f(r)] = 0$$

Where $r \in \Omega$ and $p \in [0,1]$ is an embedding parameter, u_0 is an initial approximation which satisfies the boundary conditions. Obviously, from Eq. (8), we have

$$H(v,0) = L(v) - L(u_0) = 0$$

$$H(v,1) = A(v) - f(r) = 0$$

The changing process of p from zero to unity is just that of $v(r,p)$ from u_0 to $u(r)$. In topology, this called deformation, $L(v)-L(u_0)$ and $L(v)-N(v)-f(r)$ are homotopic. The basic assumption is that the solution of Eq.(8) can be expressed as a power series in p :

$$v = v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots$$

The approximate solution of Eq. (5), therefore, can be readily obtained:

$$u = \lim_{p \rightarrow 1} v = v_0 + v_1 + v_2 + \dots$$

4. Illustrative Examples

In all the following case studies, we will apply the variational iteration method and the homotopy perturbation method to solve the steady state population balance equation, and present the analytical and numerical results to verify the effectiveness of both methods.

4.1. Aggregation only with $\omega=\omega_0=1$

Consider the steady state problem in the continuous system as given by Eq.(1) with $\omega=\omega_0=1$:

$$\frac{[n(v) - n^{feed}(v)]}{a} = \frac{1}{2} \int_0^v n(v-u) n(v) du - \int_0^\infty n(u)n(v) du$$

4.1.1. Homotopy perturbation method

To solve the Eq. (13) by the HPM, we can construct the following homotopy:

$$hp = (1 - p)[n(v) - n_0(v)] + p \left[n(v) - n^{feed}(v) - \frac{a}{2} \int_0^v n(v-u)n(v)du + a \int_0^\infty n(u)n(v)du \right]$$

with the initial distribution is assumed as follows:

$$n_0 = n^{feed}(v) = e^{-v}$$

Substituting Eq. (11) into Eq. (14) and equating the coefficients of p with the same power, one gets

$$n_1(v) = \frac{a}{2} \int_0^v n_0(u)n_0(-u+v)du - a \int_0^\infty n_0(u)n_0(v)du$$

$$n_2(v) = \frac{a}{2} \int_0^v n_0(-u+v)n_1(u)du + \frac{a}{2} \int_0^v n_0(u)n_1(-u+v)du - a \int_0^\infty n_0(v)n_1(u)du - a \int_0^\infty n_0(u)n_1(v)du$$

$$n_3(v) = \frac{a}{2} \int_0^v n_1(u)n_1(-u+v)du + \frac{a}{2} \int_0^v n_2(u)n_0(-u+v)du + \frac{a}{2} \int_0^v n_2(-u+v)n_0(u)du - a \int_0^\infty n_1(u)n_1(v)du - a \int_0^\infty n_0(v)n_2(u)du - a \int_0^\infty n_0(u)n_2(v)du$$

The corresponding solutions for the above system of equations are the series solution which is given as:

$$n_1(v) = -ae^{-v} + \frac{1}{2}ae^{-v}v$$

$$n_2(v) = \frac{3}{2}a^2e^{-v} - \frac{3}{2}a^2e^{-v}v + \frac{1}{4}a^2e^{-v}v^2$$

$$n_3(v) = -\frac{5}{2}a^3e^{-v} + \frac{15}{4}a^3e^{-v}v - \frac{5}{4}a^3e^{-v}v^2 + \frac{5}{48}a^3e^{-v}v^3$$

4.1.2. Variational iteration method

We apply variational iteration method to Eq. (13) where its iteration formula reads

$$n_{n+1}(v) = n_n(v) - \frac{\partial}{\partial v} \int_0^v \left(n_m(\xi) - n^{feed}(\xi) - \frac{a}{2} \int_0^\xi \omega_0 n_m(\xi-u)n_m(u)du + a \int_0^\infty \omega_0 n_m(u)n_m(\xi)du \right) d\xi$$

Substituting Eq. (15a) into Eq. (17), we have the following results

$$n_1(v) = e^{-v} - ae^{-v} + \frac{1}{2}ae^{-v}v$$

$$n_2(v) = \left(e^{-v} - ae^{-v} + \frac{3}{2}a^2e^{-v} - \frac{1}{2}a^3e^{-v} + \left(\frac{1}{2}ae^{-v} - \frac{3}{2}a^2e^{-v} + \frac{3}{4}a^3e^{-v} \right)v + \left(\frac{1}{4}a^2e^{-v} - \frac{1}{4}a^3e^{-v} \right)v^2 + \frac{1}{48}a^3e^{-v}v^3 \right)$$

$$n_3(v) = \left(e^{-v} - ae^{-v} + \frac{3}{2}a^2e^{-v} - \frac{5}{2}a^3e^{-v} + \frac{15}{8}a^4e^{-v} - \frac{9}{8}a^5e^{-v} + \frac{7}{16}a^6e^{-v} - \frac{1}{16}a^7e^{-v} + \left(\frac{1}{2}ae^{-v} - \frac{3}{2}a^2e^{-v} + \frac{15}{4}a^3e^{-v} - \frac{15}{4}a^4e^{-v} + \frac{45}{16}a^5e^{-v} - \frac{21}{16}a^6e^{-v} + \frac{7}{32}a^7e^{-v} \right)v + \left(\frac{1}{4}a^2e^{-v} - \frac{5}{4}a^3e^{-v} + \frac{15}{8}a^4e^{-v} - \frac{15}{8}a^5e^{-v} + \frac{35}{32}a^6e^{-v} - \frac{7}{32}a^7e^{-v} \right)v^2 + \left(\frac{5}{48}a^3e^{-v} - \frac{5}{16}a^4e^{-v} + \frac{15}{32}a^5e^{-v} - \frac{35}{96}a^6e^{-v} + \frac{35}{384}a^7e^{-v} \right)v^3 + \dots \right)$$

The general term for the two methods is:

$$n_m(v) = \frac{2^{-1+m} e^{-v} \left(\frac{av}{1+2a}\right)^{-1+m} \text{Pochhammer}\left[\frac{1}{2}, -1+m\right]}{\sqrt{1+2a} \Gamma[m] \Gamma[1+m]} \quad (19)$$

According to $u = \lim_{p \rightarrow 1} n = n_0 + n_1 + n_2 + \dots$, the exact solution is given by:

$$n(v) = \frac{e^{-\frac{(1+a)v}{1+2a}} \left(I_0 \left[\frac{-av}{1+2a} \right] + I_1 \left[\frac{-av}{1+2a} \right] \right)}{\sqrt{1+2a}} \quad (20)$$

where $I_0(v)$ and $I_1(v)$ are modified Bessel Functions of the first kind of zero and first orders.

The above analytical solution is the same as that derived by (Hounslow 1990) using the Laplace transform methods.

In Fig. 1, the analytical solutions for the number density function $n(v)$ predicted at steady state from Eq. (20) and using both VIM and HPM are compared for three different values of residence time (i.e., $a=10, 10^3$ and 10^5). It is clear that the analytical results are in excellent agreement with each other. A similar behavior has been observed by (Hounslow 1990) for the case of pure aggregation from a feed exponential density function.

4.2. Breakage with $\Gamma(v)=v$ and $\beta(v/u)=2/u$

In this section we consider the steady state problem in the continuous system with linear breakage frequency $\Gamma(v)=v$ and a uniform daughter particle distribution $\beta(v/u)=2/u$ where Eq.(1) is reduced to:

$$\frac{(n(v) - n^{feed}(v))}{a} = -v n(v) + 2 \int_v^\infty n(u) du \quad (21)$$

as in the aggregation problem, the exponential initial distribution was used.

4.2.1. Homotopy perturbation method

In order to solve the Eq. (28) by HPM, we can construct the following homotopy:

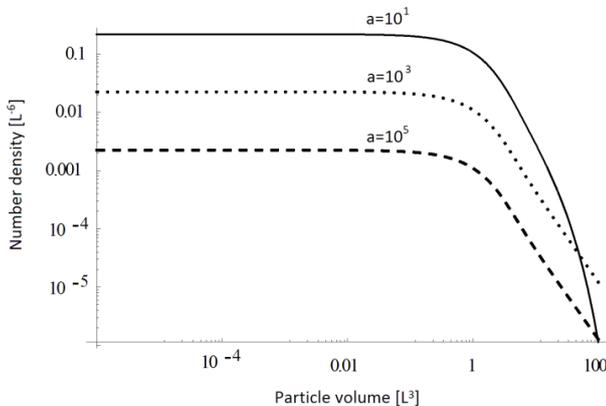


Fig. 1. Comparison between the VIM and HPM and the analytical solution (Hounslow 1990) for particle aggregation in a homogeneous flow vessel with uniform daughter particle distribution and linear breakage rate. The analytical solution is exactly identical to those obtained by VIM and HPM.

$$hp = (1-p)(n(v) - n_0(v)) + p \left(\begin{array}{l} n(v) - n^{feed}(v) - 2a \int_v^\infty n(u) du \\ + av n(v) \end{array} \right) \quad (22)$$

Substituting Eq. (11), into Eq. (22) and rearranging based on powers of p -terms, one gets

$$n_1(v) = -avn_0(v) + a \int_v^\infty 2n_0(v) dv \quad (23a)$$

$$n_2(v) = -avn_1(v) + a \int_v^\infty 2n_1(v) dv \quad (23b)$$

$$n_3(v) = -avn_2(v) + a \int_v^\infty 2n_2(v) dv \quad (23c)$$

the corresponding solutions for the above system of equations are the series solution which is given as

$$n_1(v) = 2ae^{-v} - ae^{-v}v \quad (24a)$$

$$n_2(v) = 2a^2e^{-v} - 4a^2e^{-v}v + a^2e^{-v}v^2 \quad (24b)$$

$$n_3(v) = -6a^3e^{-v}v + 6a^3e^{-v}v^2 - a^3e^{-v}v^3 \quad (24c)$$

4.2.2. Variational iteration method

We apply variational iteration method to Eq. (28) where its iteration formula reads

$$n_{n+1}(v) = n_n(v) - \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^v \left(\begin{array}{l} n_m(\xi) - n^{feed}(\xi) \\ -2a \int_\xi^\infty n_m(u) du + a\xi n_m(\xi) \end{array} \right) d\xi \right] \quad (25)$$

substituting Eq. (15a) into Eq. (25), we have the following results:

$$n_1(v) = e^{-v} + 2ae^{-v} - ae^{-v}v \quad (26a)$$

$$n_2(v) = e^{-v} + 2ae^{-v} + 2a^2e^{-v} - ae^{-v}v - 4a^2e^{-v}v + a^2e^{-v}v^2 \quad (26b)$$

$$n_3(v) = e^{-v} + 2ae^{-v} + 2a^2e^{-v} - ae^{-v}v - 4a^2e^{-v}v - 6a^3e^{-v}v + a^2e^{-v}v^2 + 6a^3e^{-v}v^2 - a^3e^{-v}v^3 \quad (26c)$$

Finally, we calculate the general term from the series solution given by the two methods (A) and (B) as follows:

$$n_m(v) = -\frac{e^{-v}(-av)^m(2-3m+m^2+2v-2mv+v^2)}{av^3} \quad (27)$$

so

$$n(v) = \frac{e^{-v}(1+2a(1+v)+a^2(2+2v+v^2))}{(1+av)^3} \quad (28)$$

The above analytical solution is the same as that given by (Nicmanis and Hounslow 1998; Attarakih et al. 2004).

In Figure 2, the steady-state distributions calculated by the VIM and HPM are compared with the corresponding analytical given by (Nicmanis and Hounslow1998; Attarakih et al. 2004) for different values of the mean residence time (i.e. $a=10, 10^3$ and 10^5). It is obvious that there is an excellent agreement between the three analytical solutions.

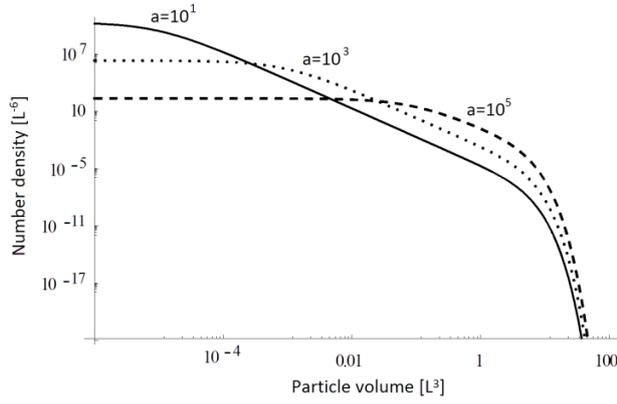


Fig. 2. Comparison between the VIM and HPM and the analytical solution (Nicmanis and Hounslow 1998; Attarakih et al. 2004) for particle breakage in a homogeneous flow vessel with uniform daughter particle distribution and linear breakage rate. The analytical solution is exactly identical to those obtained by VIM and HPM.

4.3. Growth only with G=1

We consider the initial value problem in the continuous flow system as with only particle growth involving constant growth rate $G=1$ which can be obtained from Eq.(1):

$$\frac{n(v) - n^{feed}(v)}{a} + \frac{\partial[Gn(v)]}{\partial v} = 0 \tag{29}$$

4.3.1. Homotopy perturbation method

In order to solve the Eq. (42) by the HPM, we can construct the following homotopy:

$$hp = (1 - p)(n(v) - n_0(v)) + p\left(\frac{n(v) - n^{feed}(v)}{a} + \frac{\partial[Gn(v)]}{\partial v}\right) \tag{30}$$

With initial distribution

$$n_0(v) = -e^{-v} / a \tag{31a}$$

Substituting Eq. (11) in Eq. (30) and equating the coefficients of like powers of p , gives the following set of equations:

$$n_1(v) = -\int_0^v \frac{n_0(v)dv}{a} = \frac{1}{a^2} - \frac{e^{-v}}{a^2} \tag{31b}$$

$$n_2(v) = -\int_0^v \frac{n_1(v)dv}{a} = \frac{1}{a^3} - \frac{e^{-v}}{a^3} - \frac{v}{a^3} \tag{31c}$$

$$n_3(v) = -\int_0^v \frac{n_2(v)dv}{a} = \frac{1}{a^4} - \frac{e^{-v}}{a^4} - \frac{v}{a^4} + \frac{v^2}{2a^4} \tag{31d}$$

4.3.2. Variational iteration method

Now we apply the variational iteration method to Eq. (42) with the following iteration formula:

$$n_{n+1}(v) = n_n(v) - \int_0^v \left(\frac{n(\xi) - n^{feed}(\xi)}{a} + \frac{\partial[Gn(\xi)]}{\partial \xi} \right) d\xi \tag{32}$$

By substituting Eq. (31a) into Eq. (32), one gets the following results:

$$n_1(v) = e^{-v} \left(\frac{-1}{a^2} - \frac{1}{a} \right) + \frac{1}{a^2} \tag{33a}$$

$$n_2(v) = e^{-v} \left(\frac{-1}{a^3} - \frac{1}{a^2} - \frac{1}{a} \right) + \frac{1}{a^3} + \frac{1}{a^2} - \frac{v}{a^3} \tag{33b}$$

$$n_3(v) = e^{-v} \left(\frac{-1}{a^4} - \frac{1}{a^3} - \frac{1}{a^2} - \frac{1}{a} \right) + \frac{1}{a^4} + \frac{1}{a^3} + \frac{1}{a^2} + \left(\frac{-1}{a^4} - \frac{1}{a^3} \right)v + \frac{v^2}{2a^4} \tag{33c}$$

Accordingly, the general series term of the two methods (A) and (B) is given as follows:

$$n_m(v) = -\frac{a(-v/a)^m}{(-1+a)v Pochhammer[1, -1+m]} - e^{-v} \left(\frac{1}{a} \right)^{m+1} \tag{34}$$

Then the closed form of the solution can be written as

$$n(v) = \sum_{m=0}^{\infty} -\frac{a(-v/a)^m}{(-1+a)v Pochhammer[1, -1+m]} - e^{-v} \left(\frac{1}{a} \right)^{m+1} \tag{35}$$

with the exact solution as:

$$n(v) = e^{-v} \left(-1 + e^{\frac{v(-1+a)}{a}} \right) / (-1+a) \tag{36}$$

In Figure 3, a comparison is made between the exact solutions of Eq. (29) obtained by both VIM and HPM for the case of constant growth rate ($G = 1$) for different values of the mean residence time (i.e., $a=10, 10^3$ and 10^5). The solutions are in good agreement with each other.

4.4. Simultaneous breakage and aggregation

In this case, the analytical solution for steady state continuous flow system is not available in the open published literature. This case represents a combination of linear breakage rate $\Gamma(v)=v$, a uniform binary daughter particle distribution $\beta(v/u)=2/u$ constant aggregation kernel $\omega(v,u)=1$ and an exponential feed distribution. Using these functions Eq.(1) can be simplified into the following continuous PBE:

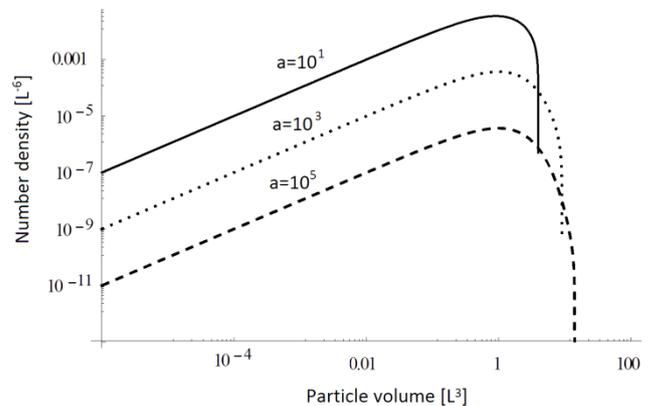


Fig. 3. Comparison between the VIM and HPM for particle growth in a homogeneous flow vessel.

$$\frac{n(v) - n^{feed}(v)}{a} = \begin{pmatrix} -\Gamma(v) n(v) - \int_0^\infty \omega(v, u) n(v) n(u) du \\ + \int_v^\infty \beta(v/u) \Gamma(u) n(u) du \\ + \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v-u, u) n(v) n(v-u) du \end{pmatrix} \quad (37)$$

The application of the homotopy perturbation method to Eq. (37) results in the following formula:

$$hp = (1-p)(n(v) - n_0(v)) + p \begin{pmatrix} n(v) - n^{feed}(v) - 2a \int_v^\infty n(u) du \\ + av n(v) - \frac{a}{2} \int_0^v n(v-u) n(v) du \\ + a \int_0^\infty n(u) n(v) du \end{pmatrix} \quad (38)$$

Now by assuming that the solution of Eq. (55) is in the form:

$$n(v) = p^0 n_0(v) + p^1 n_1(v) + p^2 n_2(v) + p^3 n_3(v) + p^4 n_4(v) \quad (39)$$

and substituting (57) into (56) and collecting terms of the same power of p one finds:

$$n_1(v) = - \begin{pmatrix} - \int_v^\infty 2n_0(u) du + \int_0^\infty n_0(u) n_0(v) du \\ - \int_0^v \frac{1}{2} n_0(u) n_0(-u+v) du + vn_0(v) \end{pmatrix} \quad (40a)$$

$$n_2(v) = - \begin{pmatrix} - \int_v^\infty 2n_1(u) du + \int_0^\infty (n_0(u) n_0(v) + nn_0(u) n_1(v)) du \\ - \int_0^v \left(\frac{1}{2} n_0(-u+v) n_1(u) + \frac{1}{2} n_0(u) n_1(-u+v) \right) du \\ + vn_1(v) \end{pmatrix} \quad (40b)$$

$$n_3(v) = - \begin{pmatrix} - \int_v^\infty 2n_2(u) du \\ + \int_0^\infty (n_1(u) n_1(v) + n_0(v) n_2(u) + n_0(u) n_2(v)) du \\ - \int_0^v \left(\frac{1}{2} n_1(u) n_1(-u+v) + \frac{1}{2} n_0(-u+v) n_2(u) \right) du \\ + \frac{1}{2} n_0(u) n_2(-u+v) \\ + vn_2(v) \end{pmatrix} \quad (40c)$$

$$n_4(v) = - \begin{pmatrix} - \int_v^\infty 2n_3(u) du \int_0^\infty \left(P^3 y_1(v) y_2(u) + P^3 y_1(u) y_2(v) \right) du \\ + P^3 y_0(v) y_3(u) + P^3 y_0(u) y_3(v) \\ - \int_0^v \left(\frac{1}{2} n_1(-u+v) n_2(u) + \frac{1}{2} n_1(u) n_2(-u+v) \right) du \\ + \frac{1}{2} n_0(-u+v) n_3(u) + \frac{1}{2} n_0(u) n_3(-u+v) \\ + vn_3(v) \end{pmatrix} \quad (40d)$$

The solution of the above equations yields:

$$n_0(v) = e^{-v} \quad (41a)$$

$$n_1(v) = e^{-v} - \frac{e^{-v} v}{2} \quad (41b)$$

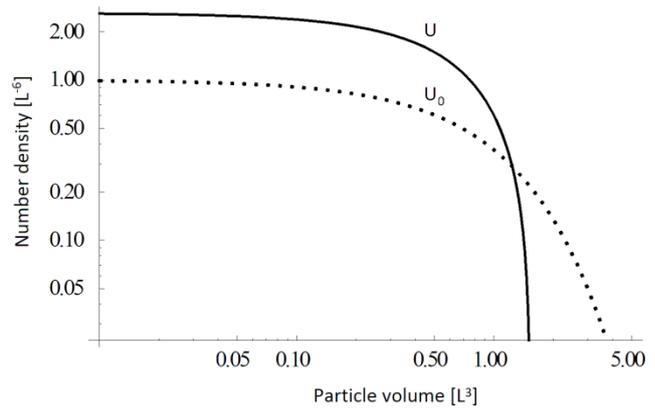


Fig.4. The approximate solution for simultaneous aggregation and breakage in continuous flow vessel with exponential feed distribution.

$$n_2(v) = -\frac{e^{-v}}{2} - \frac{e^{-v} v}{2} + \frac{1}{4} e^{-v} v^2 \quad (41c)$$

$$n_3(v) = -\frac{e^{-v}}{2} + \frac{5e^{-v} v}{4} + \frac{1}{4} e^{-v} v^2 - \frac{7}{48} e^{-v} v^3 \quad (41d)$$

$$n_4(v) = \frac{13e^{-v}}{8} - \frac{3}{2} e^{-v} v^2 - \frac{3}{16} e^{-v} v^3 + \frac{19}{192} e^{-v} v^4 \quad (41e)$$

Similarly, the rest of components of the HPM formulation Eq. (38) can be obtained.

Note that the first four-term approximation to the solution of Eq. (37) are derived by setting p=1 in Eq. (39).

The solution in a series form is given by

$$n(v) = \frac{21e^{-v}}{8} + \frac{e^{-v} v}{4} - e^{-v} v^2 - \frac{1}{3} e^{-v} v^3 + \frac{19}{192} e^{-v} v^4 \quad (42)$$

Fig. 4 shows the approximate solution obtained by the HPM for the case of simultaneous aggregation and breakage in a continuous flow system.

5. Conclusions

In this work, the homotopy perturbation and variational iteration methods are successfully applied for solving the population balance equation in continuous flow systems at steady state with particle aggregation, breakage, growth, and simultaneous aggregation and breakage. The two methods are very powerful mathematical tools and provide an efficient analytical technique to obtain some exact solutions of the steady state population balance equations with given breakage, aggregation and growth functions. It is concluded that these proposed methods produced identical analytical solutions with varying degree of difficulties depending on the particle interaction functions. The homotopy perturbation method can be introduced to overcome the limitations and difficulties existing in other approximate methods such as the ADM or construction of correction functionals using general Lagrange's multipliers in the VIM. Also, these methods can be applied to problems arising in different fields of science and engineering specially those of continuous flow particulate processes.

Acknowledgements

The authors wish to thank the DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft) and DAAD (Deutscher Akademischer Austauschdienst) for supporting this work.

References

- Adomian, G. (1994) Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method, Kluwer Academic, Dordrecht.
- Adomian, G., R. Rach (1986) On linear and nonlinear integro-differential equations, *Journal of mathematical analysis and applications* 113(1): 199-201.
- Attarakih, M. (2013) Integral formulation of the population balance equation: Application to particulate systems with particle growth. *Computers & Chemical Engineering* 48: 1-13.
- Attarakih, M., H.J. Bart, N.M. Faqir (2004) Solution of the droplet breakage equation for interacting liquid-liquid dispersions a conservative discretization approach. *Chemical Engineering Science* 59(12): 2547-2565.
- Blatz, P.J., A.V. Tobolsky (1945) Note on the kinetics of system manifesting simultaneous polymerization depolymerization phenomena, *Journal of physical chemistry* 49(2) 77-80.
- Chaudhury, A., A. Kapadia, A.V. Prakash, D. Barrasso, R. Ramachandran (2013) An extended cell-average technique for a multi-dimensional population balance of granulation describing aggregation and breakage, *Advanced Powder Technology* 24(6): 962-971.
- Eggersdorfer, M.L., S.E. Pratsinis (2014) Agglomerates and aggregates of nanoparticles made in the gas phase, *Advanced Powder Technology* 25(1): 71-90.
- Gunawan, R., I. Fusman, R.D. Braatz (2004) High resolution algorithms for multidimensional population balance equations, *American Institute of Chemical Engineers Journal* 50(11): 2738-2749.
- Hapgood, K.P., M.X.L. Tan, D.W.Y. Chow (2009) A method to predict nuclei size distributions for use in models of wet granulation, *Advanced Powder Technology* 20(4): 293-297.
- Hasseine, A., A. Bellagoun, H.J. Bart (2011) Analytical solution of the droplet breakup equation by the Adomian decomposition method, *Applied Mathematics and Computation* 218(5): 2249-2258.
- Hasseine, A., H.J. Bart (2015) Adomian decomposition method solution of population balance equations for aggregation, nucleation, growth and breakup processes. *Applied Mathematical Modelling* 39(7): 1975-1984.
- Hasseine, A., S. Senouci, M. Attarakih and H.-J. Bart (2015a) Two Analytical Approaches for Solution of Population Balance Equations: Particle Breakage Process, *Chemical Engineering & Technology* 38(9): 1574-1584
- Hasseine, A., Z. Barhoum, M. Attarakih, H.-J. Bart (2015b) Analytical solutions of the particle breakage equation by the Adomian decomposition and the variational iteration methods. *Advanced Powder Technology* 26(1): 105-112.
- He, J.H. (1997) A new approach to nonlinear partial differential equations, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 2(4): 230-235.
- He, J.H. (1998a) Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Comput. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 167(1-2): 57-68.
- He, J.H. (1998b) Approximate solution of nonlinear differential equations with convolution product nonlinearities, *Computer methods in applied mechanics and engineering* 167(1-2): 69-73.
- He, J.H. (1999a) Homotopy perturbation technique, *Computer methods in applied mechanics and engineering* 178(3): 257-262.
- He, J.H. (1999b) Variational iteration method-a kind of non-linear analytical technique: some examples, *International journal of non-linear mechanics* 34(4): 699-708.
- He, J.H. (2000) A coupling method of homotopy technique and perturbation technique for nonlinear problems *International journal of non-linear mechanics* 35(1) 37-43.
- He, J.H. (2004) The homotopy perturbation method for nonlinear oscillators with discontinuities, *Applied Mathematics and Computation* 151(1): 287-292.
- He, J.H. (2005a) Homotopy perturbation method for bifurcation of nonlinear problems, *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation* 6(2): 207-208.
- He, J.H. (2005b) Periodic solutions and bifurcations of delay-differential equations, *Physics Letters A* 347(4): 228-230.
- He, J.H. (2006) Non-perturbative methods for strongly nonlinear problems, *Dissertation.de-Verlag im Internet GmbH, Berlin*.
- Hounslow, M.J. (1990) A discretized population balance for continuous systems at steady state, *American Institute Chemical Engineering Journal* 36 (1): 106 -116.
- Hulburt, H., S. Katz (1964) Some problems in particle technology, a statistical-mechanical formulation, *Chemical Engineering Science* 19(8): 555-574.
- Jacobson, M.Z (2002) Analysis of aerosol interactions with numerical techniques for solving coagulation, nucleation, condensation, dissolution, and reversible chemistry among multiple size distributions, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 107, no. D19. DOI: 10.1029/2001JD002044.
- Kostoglou, M., A. J. Karabelas (1994) Evaluation of zero order methods for simulating particle coagulation *Journal of colloid and interface science* 163(2): 420-431.
- Kumar, S., D. Ramkrishna (1996a) On the solution of population balance equations by discretization - I. A fixed pivot technique, *Chemical Engineering Science* 51(8): 1311-1332.
- Kumar, S., D. Ramkrishna (1996b) On the solution of population balance equations by discretization - II. A moving pivot technique, *Chemical Engineering Science* 51 (8): 1333-1342.
- Kumar, S., D. Ramkrishna (1997) On the Solution of Population Balance Equations by Discretization - III. Nucleation, Growth and Aggregation of Particles, *Chemical Engineering Science* 52 (24): 4659-4679.
- Ma, C.Y., X.Z. Wang, K.J. Roberts (2007) Multi-dimensional population balance modeling of the growth of rod-like L-glutamic acid crystals using growth rates estimated from in-process imaging, *Advanced Powder Technology* 18(6): 707-723.

- Nicmanis, M., M. J. Hounslow (1998) Finite-element methods for steady state population balance equations. *American Institute Chemical Engineering Journal* 44 (10): 2258-2272.
- Ning, Z., R. Boerefijn, M. Ghadiri, C. Thornton (1997) Distinct element simulation of impact breakage of lactose agglomerates, *Advanced Powder Technology* 8(1): 15-37.
- Prasher, C. L. (1987) *Crushing and Grinding Process Handbook*, Wiley, New York.
- Ramkrishna, D. (1985) The status of population balance, *Reviews in Chemical Engineering* 3(1): 49-95
- Randolph, A.D., M.A. Larson (1988) *Theory of Particulate Processes*, Second ed., Academic Press, New York.
- Santos, F. P., Senocak, I., Favero, J. L. & P. L. C. Lage (2013) Solution of the population balance equation using parallel adaptive cubature on GPUS, *Computers & Chemical Engineering* 55: 61-70.
- Srienc, F. (1999) Cytometric data as the basis for rigorous models of cell population dynamics, *Journal of biotechnology* 71(1): 233-238.
- Wazwaz, A.M. (2009) *Partial Differential Equations and Solitary Waves Theory*, Higher Education Press, Beijing, and Springer, Berlin.
- Yao, Y., Yi-Jun He, Z.H. Luo, L. Shi (2014) 3D CFD-PBM modeling of the gas-solid flowfield in a polydisperse polymerization FBR: The effect of drag model, *Advanced Powder Technology* 25(5): 1474-1482.
- Ziff, R.M., E.D. McGrady (1985) The kinetics of cluster fragmentation and depolymerisation, *Journal of Physics A: Mathematical and General* 18(15) 3027-3037.