

Université Mohamed Khider – Biskra  
Faculté des Sciences et de la technologie  
Département : Chimie Industrielle



جامعة محمد خيضر بسكرة  
كلية العلوم و التكنولوجيا  
قسم: الكيمياء الصناعية

Mémoire présentée en vue de l'obtention  
du diplôme de Master en : Génie des Procédés

Option : Génie Chimique

**Titre:**

**Modélisation et simulation des  
nanoparticules**

Présentée par :

GUERFI Nasrine

**Devant le jury composé de :**

**Président :** LAIADI Djemoui

**Encadreur :** HASSEINE Abdelmalek

**Examineur :** MERZOUGUI Abdelkarim

**Promotion Juin 2017**

Je dédie ce travail à mes parents  
A mes sœurs, mon frère et sa famille  
A tous mes amis

# *Remerciements*

Avant tout, je dois remercier Dieu le tout puissant qui m'a donné la force pour mener à terme ce travail.

Je tiens à remercier très sincèrement le Professeur HASSEINE Abdelmalek, mon encadreur. Ce fut un grand plaisir de travailler avec lui, durant la préparation du Master. Personnellement, je lui serai éternellement reconnaissante du soutien qu'il m'a porté. Malgré son agenda surchargé, ses occupations scientifiques et administratives, il a toujours su être là quand j'en avais besoin. Merci encore Professeur HASSEINE Abdelmalek.

Je tiens aussi à remercier Mr LAIADI Djemoui, pour m'avoir fait un grand honneur en acceptant de présider le jury.

Je remercie aussi Mr MERZOUGUI Abdelkarim pour m'avoir fait honneur et plaisir en acceptant d'examiner ce travail.

Je ne saurais oublier les doctorants OTHMANI Khaled, HACHANI Soufiane et toutes les personnes qui plus ou moins directement, ont contribué aussi bien à la réussite de ce travail.

Et enfin, je remercie ma mère et mon père qui m'a tout donné, mon frère et sa femme mes sœurs.

## Liste des figures

<b>Fig</b>	<b>Titre</b>	<b>Page</b>
1.1	Particules nano-structurées d'Alumine	6
1.2	Illustration du processus de coagulation de 2 particules sphériques	6
2.1	Représentation schématique du processus de différentes particules	15
3.1	Les 6 premiers moments pour un noyau constant pour MQM, MIV, analytique	36
3.2	Les 6 premiers moments pour un noyau somme pour MQM, MIV, analytique	37
3.3	Les 6 premiers moments pour un noyau produit pour MQM, MIV, analytique	38

## Liste des tableaux

<b>tableau</b>	<b>Titre</b>	<b>Page</b>
1.1	Exemples d'applications basées sur les nanotechnologies	10

## Nomenclatures

Notion de base	
B	Condition de naissance (apparition)
D	Condition de mort (disparition)
$D_{diss}$	Taux de dissolution
G	La vitesse de croissance des particules
L	La taille des particules
$l_i$	Les abscisses
$M_k$	Le moment d'ordre k
$n(X,t)$	Fonction de densité en nombre
$n(l,t)$	Densité en nombre basée sur la longueur
$n(v,t)$	Densité volumique du bilan de population
$n_e, n_s$	Densité en nombre de particules entrant et sortant
$N_i(t)$	le nombre de particules appartenant a la classe i
$Q_{nuc}^+$	Vitesse de nucléation des particules
$Q_{diss}^-$	Vitesse de dissolution des particules
$Q_{agg}^\pm$	Naissance (apparition)des particules pendant le processus d'agrégation
$Q_{rup}^\pm$	Mort (disparition)des particules pendant la rupture
$Q_e, Q_s$	Flux d'entrée et de sortie
v	Volume de particule
$V_e, V_s$	Débit volumétrique d'entrèe et de sortie
$w_i$	Les poids
Lettres grecques	
$\beta$	Frèquence d'agrègation
$\omega$	Noyau d'agglomèration
$\delta$	Fonction Dirac
$\Gamma$	Frèquence de rupture des particules entre deux volume v et $v + dv$
Abrèviation	
DBP	Discrètisation de l'èquation du bilan de population
DTP	Distribution de taille de particules
EBP	Equation du bilan de population
MBP	Modèles de bilan de population
MDA	Mèthode de dècomposition d'Adomian
MDC	Mèthode des classes
MIV	Mèthode d'itèration variationnelle
MMC	Mèthode de Monte Carlo
MQM	Mèthode de quadrature des moments
MSM	Mèthode standart des moments
ODE	Equation diffèrentielles ordinaires

# Table des matières

<b>INTRODUCTION GÉNÉRALE</b>	<b>2</b>
<b>1 Généralités sur les nanoparticules</b>	<b>4</b>
1.1 Introduction . . . . .	5
1.2 Définitions . . . . .	5
1.3 Propriétés des Nanoparticules . . . . .	8
1.4 Applications des nanoparticules . . . . .	9
1.5 Enjeux environnementaux et sanitaires . . . . .	11
<b>2 Bilan de Population</b>	<b>12</b>
2.1 Introduction . . . . .	13
2.2 Equation du bilan de population . . . . .	13
2.2.1 Equation du bilan de population pour la croissance et la nucléation	15
2.2.2 Equation du bilan de population pour la dissolution . . . . .	16
2.2.3 Equation du bilan de population pour l'agrégation . . . . .	17
2.2.4 Equation du bilan de population pour la rupture . . . . .	19
2.3 Fonction des moments . . . . .	20
2.4 Méthodes numériques pour résoudre l'équation de bilan de population . . .	20
2.4.1 La méthode des classes (MDC) . . . . .	20
2.4.2 Méthode de pivot fixe . . . . .	22
2.4.3 Méthode de Monte Carlo (MMC) . . . . .	24
2.4.4 Méthode standard des moments (MSM) . . . . .	25
2.4.5 Méthode de quadrature des moments (MQM) . . . . .	26
2.5 Méthodes semi-analytiques . . . . .	28
2.5.1 Méthode de décomposition d'Adomian (MDA) . . . . .	28
2.5.2 La méthode d'itération variationnelle (MIV) . . . . .	29

<b>3 Résultats et discussion</b>	<b>31</b>
3.1 Introduction . . . . .	32
3.2 Application de la méthode numérique MQM . . . . .	32
3.3 Application de la méthode semi-analytique MIV . . . . .	32
3.3.1 Noyau constant . . . . .	32
3.3.2 Noyau somme . . . . .	33
3.3.3 Noyau produit . . . . .	34
3.4 Solution analytique . . . . .	35
3.4.1 Noyau constant . . . . .	35
3.4.2 Noyau somme . . . . .	35
3.4.3 Noyau produit . . . . .	35
3.5 Comparaison entre MQM, MIV et solutions analytiques . . . . .	36
3.5.1 noyau constant . . . . .	36
3.5.2 noyau somme . . . . .	37
3.5.3 noyau produit . . . . .	37
 <b>CONCLUSION GÉNÉRALE</b>	 <b>40</b>
 <b>Références</b>	 <b>42</b>



# INTRODUCTION GÉNÉRALE

# Introduction Générale

La fin du XXème et le début de XXIème siècles ont vu l'apparition d'un nouveau genre de matériaux : les nanoparticules, c'est-à-dire des particules de dimensions inférieures à 100 nm.

Malgré leurs compositions et leurs tailles très diverses, elles sont toutes regroupées sous le terme générique de « nanoparticule ». Cette catégorisation en fonction de la taille n'est pas courante, elle prend cependant tout son sens lorsque l'on considère l'importance de la taille sur l'ensemble des propriétés (électroniques, magnétiques, catalytiques, mécaniques ou encore biologiques) que présentent les nanoparticules [1].

Dans de nombreuses applications, la taille d'une particule est considérée comme la seule propriété de la particule concernée. Cette propriété peut être déterminée sous des formes diverses telles qu'une longueur typique, le volume ou la masse de la particule. La taille de la particule peut être le diamètre dans le cas d'une sphère, la longueur pour un cube, la surface ou le volume pour les particules les plus complexes [2]. Les propriétés des particules peuvent être modifiées dans un système en raison de plusieurs mécanismes. Cependant, les mécanismes les plus communs sont l'agrégation, la rupture, la croissance et la nucléation.

Le procédé d'agrégation de particules est important dans de nombreux procédés de fabrication de poudre (production de pigments de dioxyde de titane, de noir de carbone, de fibres optiques, de silicium et de poudres céramiques), d'équipement de nettoyage de gaz, d'émissions industrielles et de transport de particules par convoyeur. En outre, la formation de grappes de particules due à l'agrégation a un effet profond sur la stabilité des dispersions, la qualité des produits séchés et l'efficacité de la conversion d'énergie [3].

L'équation du bilan de population (EBP) est maintenant utilisée avec succès pour modéliser le comportement complexe des systèmes particuliers dans divers domaines de l'ingénierie tels que la physique de l'atmosphère, précipitation, cristallisation, production pharmaceutique, formation d'aérosol, chimie colloïdale, biologie...[4].

L'objectif de ce travail est de résoudre l'équation dynamique du bilan de population numériquement en utilisant la méthode de quadrature des moments (MQM), semi-analytiquement en utilisant la méthode d'itération variationnelle (MIV) et de comparer les résultats obtenus avec les solutions analytiques existantes à la littérature de phénomène d'agrégation des nanoparticules.

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 constitué d'une généralité sur les nanoparticules donnant des définitions, propriétés, applications des nanoparticules et leur impact sur l'environnement.

Le deuxième chapitre est consacré à des rappels bibliographiques sur le bilan de population en donnant l'équation générale du bilan de population incluant la nucléation, la croissance, la dissolution, la rupture et l'agrégation. Enfin nous introduisons l'application de la méthode des moments, numériques et semi-analytiques.

Le troisième chapitre présente les résultats et discussion.

Enfin, une conclusion générale résume tous les résultats importants obtenus dans ce travail.

# Chapitre 1

## Généralités sur les nanoparticules

## 1.1 Introduction

Une nanoparticule est également définie comme ayant « un diamètre suffisamment petit pour que les propriétés physiques et chimiques diffèrent de façon mesurable de celles des matériaux en vrac ».

Ce chapitre est constitué d'une généralité sur les nanoparticules donnant des définitions, propriétés, applications des nanoparticules et leur impact sur l'environnement.

## 1.2 Définitions

### — nanoparticules

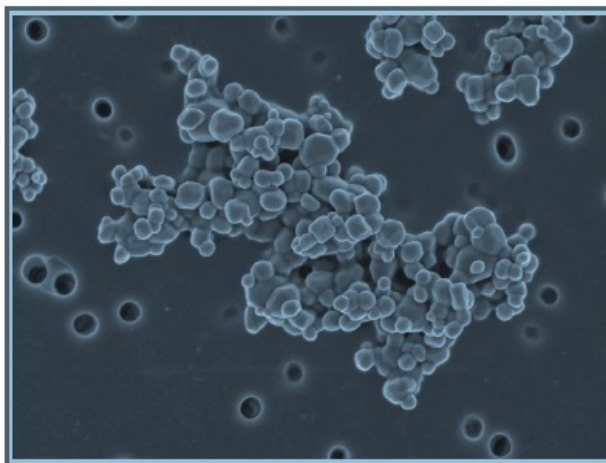
Une nanoparticule est un assemblage de quelques centaines à quelques milliers d'atomes, formant un objet de taille nanométrique (1 à 100 nm). Là encore, la définition n'est pas arrêtée. La plupart des nanoparticules sont des agrégats de petites molécules ou d'atomes[5].

Les nanoparticules sont des objets relativement fréquents. Il existe en effet différentes sources de production des nanoparticules : les sources naturelles (incendies, éruptions volcaniques ...), les sources accidentelles (feux de bois, gaz d'échappement de véhicules, freinage,...) et les sources industrielles (nanoparticules manufacturées intentionnellement par l'homme) [1].

L'ensemble des nanoparticules peut se décrire en fonction de différents paramètres[6] :

- Leur source : naturelle ou anthropique
- Leurs dimensions et formes : objets à 1, 2 ou 3 dimensions nanométriques
  1. 1 dimension : films ou couches minces
  2. 2 dimensions : nanotubes, nanofilaments
  3. 3 dimensions : fullerènes, nanoparticules sphériques ou autres formes géométriques à 3D,

Leur composition chimique : particules carbonées, organiques, sulfates, nitrates, métalliques, céramiques, polymères. . .

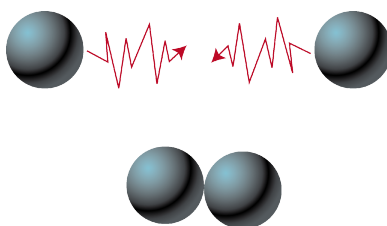


**Figure 1.1** : Particules nano-structurées d’Alumine vues au Microscope Electronique à Transmission, grandissement x 250 000 [7]

### — Coagulation

La coagulation est un terme générique pour désigner les processus d’agglomération, d’agrégation, de fusion, ou encore de coalescence. Il existe des nuances entre ces différentes notions : par exemple, l’agglomération implique la formation de liaisons cristallines entre les particules et la coalescence s’applique davantage aux gouttes qu’aux particules solides. Néanmoins, il s’agit toujours d’un processus de regroupement et d’adhésion de plusieurs entités suite à leur rencontre.

On décrit habituellement la cinétique de la coagulation par l’intermédiaire de la probabilité de rencontre de 2 particules, appelées « noyau de coagulation ». Le regroupement de ces particules entraîne une diminution de la concentration en nombre et une augmentation du diamètre moyen des entités, tout en conservant le volume de matière. Cependant, toute collision entre 2 particules ne mène pas forcément à la coagulation. En effet, il faut définir une efficacité de coagulation qui correspond à la probabilité que 2 particules qui entrent en collision adhèrent pour ne former qu’une seule entité appelée « agrégat » [8].



**Figure I.2** : Illustration du processus de coagulation de 2 particules sphériques

— **phénomène d'agrégation**

De nombreux termes sont employés pour nommer le contact entre deux particules et il peut être intéressant en premier lieu d'identifier les différents mécanismes d'agrégation auxquels cela fait référence et d'ainsi clarifier la terminologie utilisée.

Le terme « agrégation » est utilisé dans ce manuscrit au sens large pour caractériser l'union de particules en suspension pour en former de plus grosses. Il est préféré, par certains, au terme d' « agglomération » qui peut être plus spécifiquement employé dans le cadre de procédés de technologie des poudres comme la granulation par exemple. De plus, dans la littérature on retrouve aussi une confusion dans l'emploi des termes « coagulation » et « floculation » qui sont souvent utilisés comme synonymes sans reconnaître les différences entre ces deux mécanismes de l'agrégation.

Deux distinctions peuvent être faites :

1. En terme de taille de l'agrégat : le terme « coagulation » est utilisé pour l'addition de n'importe quel agent permettant l'agrégation des particules colloïdales alors que celui de « floculation » est réservé pour le procédé d'agitation douce qui entraîne des collisions entre ces petits agrégats pour former rapidement des floes.
2. En termes de mécanisme d'agrégation : La coagulation est le procédé d'agrégation au cours duquel les particules primaires s'agrègent par addition d'un poly-électrolyte réduisant le potentiel répulsif de la double couche ionique de la surface des particules colloïdales. La floculation est le procédé d'agrégation caractérisée par l'action d'un agent liant (souvent un polymère de haut poids moléculaire qui crée des ponts entre les particules primaires) [9].

Les particules ultra-fines ont une forte tendance à s'agglomérer et forment des agrégats de dimensions parfois micrométriques qui peuvent agir vis à vis des cellules comme une microparticule unique de structure poreuse si les forces d'attraction entre particules sont fortes.

Cette propriété de former des agrégats va dans le sens de la sécurité : en effet une fois agglomérées, les nanoparticules se dispersent moins dans l'atmosphère.

D'autre part les agglomérats se comportent dans l'air comme des particules uniques de taille équivalentes et se déposent donc moins dans les voies pulmonaires

des personnes exposées que les nanoparticules isolées [10].

### 1.3 Propriétés des Nanoparticules

Les nanoparticules, jonction entre l'échelle atomique et le matériau, ont des particularités structurales très spécifiques. En effet, contrairement aux matériaux classiques, les nanoparticules voient leurs propriétés changer en fonction de leur taille. Elles sont soumises à la fois aux phénomènes de la physique classique et à ceux de la physique quantique lorsqu'elles sont de très petites tailles. Les principales propriétés des nanoparticules sont : optiques, électriques, catalytiques, thermiques, magnétiques, mécaniques ou encore biologiques.

Nous allons présenter quelques unes de ces propriétés afin d'expliquer l'intérêt que présentent les nanoparticules mais aussi l'origine des interrogations sur leur éventuelle toxicité. Les propriétés optiques des nanoparticules sont connues depuis le 9ème siècle en Mésopotamie. Les artisans utilisaient en effet des nanoparticules pour donner un aspect brillant à leur poterie. Cette technique, conservée au Moyen Age puis à la Renaissance, était basée sur l'utilisation de sels métalliques (notamment de cuivre et d'argent) qui, mélangés à de l'argile puis placés dans une atmosphère réductrice, migraient à la surface de la poterie pour finalement être réduites dans leur état fondamental métallique et former des nanoparticules de cuivre et d'argent à l'origine de l'effet brillant (lustre). Par la suite, les premières suspensions de nanoparticules étudiées scientifiquement sont attribuées à Faraday (1847). Il établit le lien entre les couleurs (doré, bleu, noir ou encore rouge vif) de solutions de particules d'or (appelées « sols » d'or) et leur taille. Cette propriété était depuis longtemps exploitée pour donner leurs couleurs vives aux vitraux. Certaines nanoparticules d'oxydes métalliques ont également la particularité d'absorber dans les UV. Les nanoparticules de ZnO (Oxyde de zinc) et TiO<sub>2</sub> (Dioxyde de titane) sont notamment utilisées dans les produits cosmétiques (crèmes solaires) car ils représentent une bonne protection contre les UV tout en ayant l'avantage d'être transparents (car les nanoparticules ont des dimensions inférieures aux longueurs d'onde de la lumière visible 400-700 nm). L'exposition aux nanoparticules est donc déjà bien réelle.

Les nanoparticules possèdent également des propriétés électriques particulières. L'ajout de nanotubes de carbone à des matrices composites augmente par exemple très significativement la conductivité du matériau. Ces propriétés, dues à la proximité de leurs



niveaux d'énergie occupés et vacants (confinement quantique), font d'elles des candidates idéales pour la catalyse. C'est par exemple le cas pour les nanoparticules de  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$  et  $\text{CeO}_2$  (Dioxyde de cerium) ; elles sont incorporées à des surfaces pour leur donner des qualités « autonettoyantes ». Des industries très variées les emploient à ces fins aussi bien dans le bâtiment que le textile. Les nanoparticules de  $\text{CeO}_2$  peuvent par ailleurs changer facilement de degré d'oxydation et constituer ainsi des pièges à oxygène et radicaux libres.

Les propriétés mécaniques des nanoparticules sont également impressionnantes. Elles s'étendent de la superplasticité (ex : matériau constitué de cuivre nanocristallin, à des résistances décuplées (ex : renforcement de matrices par des nanotubes de carbone. En effet, la dureté de nanotubes de carbones multi-parois peut atteindre celle du diamant.

La petite taille des nanoparticules permet d'interagir de façon particulière avec les systèmes biologiques (protéines, membranes, cellules). L'utilisation des nanoparticules à des fins thérapeutiques a été envisagée il y a déjà une vingtaine d'années et continue de susciter des recherches actives dans ce domaine notamment dans la libération contrôlée de médicaments ou l'amélioration des techniques d'imagerie médicale. Cependant, une utilisation courante des nanoparticules pour des applications de diagnostic, d'imagerie, voire curatives ne sera envisageable qu'une fois que l'innocuité des nanoparticules aura été vérifiée par des tests de toxicité menés en amont [1].

## 1.4 Applications des nanoparticules

Les nano-objets possèdent souvent des propriétés nouvelles et inattendues par rapport aux objets macroscopiques constitués des mêmes matériaux. C'est pour cette raison qu'ils sont utilisés dans de nombreux domaines, notamment en agroalimentaire, aéronautique, cosmétique, pharmacie, informatique et énergie. Le **tableau 1.1** donne un aperçu de la diversité des applications qui mettent en œuvre des nano-objets en fonction de la propriété fondamentale que l'on cherche à améliorer [8].

propriétés	Applications
Optique	Enduits anti réflexion. Surfaces à indice de réfraction déterminé.
Magnétique	Supports de stockage de densité accrue. Particules nano magnétiques pour générer des détails améliorés et contrastés en image MRI.
Thermique	Augmenter le transfert thermique des capteurs solaires aux réservoirs de stockage. Améliorer l'efficacité des réfrigérants dans les transformateurs.
Mécanique	Resistance améliorée à l'usure. Nouvelles propriétés anticorrosives. Nouveaux matériaux de structure, composites, plus solides et plus légers.
Electronique	Haute performance et plus petits composants, comme les condensateurs pour les petits appareils tels que les téléphones portables. Affichages meilleur marché, plus larges, plus lumineux et plus efficaces.
Energie	Energie haute densité et batterie à durée de vie plus longue. Applications de stockage d'hydrogène en utilisant des nano clusters de métal. Energie renouvelable, piles solaires à ultra haut rendement. Catalyseurs pour améliorer l'efficacité des moteurs à combustion pour les rendre plus efficaces donc plus économes.
Biomédicale	Pansements argentés antibactériens. Sondes de détection de maladies (Quantum Dots). Systèmes programmés de diffusion de médicaments. Nourritures et boissons « interactives » qui changent de couleur, de saveur ou de nutriments selon le goût d'un repas ou la santé.
Environnementale	Nettoyer le sol d'une contamination ou pollution. Polymères biodégradables. Traitement des émissions industrielles. Filtration des eaux plus efficace et plus facilement applicable.
Cosmétique	Protection solaires inorganiques efficaces.

**Tableau 1.1** : Exemples d'applications basées sur les nanotechnologies

## 1.5 Enjeux environnementaux et sanitaires

De part leur utilisation et leur présence croissante dans l'atmosphère, les nanoparticules représentent un risque pour l'environnement et la santé publique, risque d'autant plus important qu'elles sont aussi un enjeu économique.

### — Enjeux environnementaux

Les nanoparticules sont susceptibles de polluer tous les milieux (air, eau, et sols) du fait de leur petite taille. Elles pénètrent aussi facilement les organismes fongiques, animaux, végétaux et microbiens. En s'accumulant, elles peuvent perturber l'équilibre des écosystèmes et le fonctionnement de ces organismes. De façon plus accidentelle, certaines nanoparticules, en contact avec l'air, peuvent constituer un mélange explosif dans des conditions atmosphériques particulières.

Cependant, les nanoparticules n'ont pas que des effets négatifs sur l'environnement, elles sont en particulier déjà utilisées pour dépolluer les sols.

### — Enjeux sanitaires

Si la modification de l'environnement peut à plus ou moins long terme avoir des conséquences sur la santé publique, les nanoparticules présentent avant tout un risque sanitaire direct du fait de leur capacité à traverser les nombreuses barrières biologiques du corps humain.

Une part importante des nanoparticules inhalées atteint directement les alvéoles pulmonaires, d'où elles peuvent passer dans le sang et les cellules. Elles sont susceptibles d'atteindre également le système nerveux (barrière hémato-encéphalique) et digestif.

Diverses études ont mis en évidence des effets pulmonaires à court terme : asthme et réponses inflammatoires pulmonaires ; mais d'autres effets à plus long terme sont à l'étude, comme les cancers et problèmes cardio-vasculaires [11].

## Chapitre 2

# Bilan de Population

## 2.1 Introduction

Les modèles de bilan de population (MBP) sont couramment utilisés pour modéliser une grande variété des produits chimiques, alimentaires et pharmaceutiques. L'équation du bilan de population (EBP) est analogue aux équations de masse et d'équilibre énergétique, mais fournit plus d'informations pour étudier et analyser le problème.

Le deuxième chapitre est consacré à des rappels bibliographiques sur le bilan de population en donnant l'équation générale du bilan de population incluant la nucléation, la croissance, la dissolution, la rupture et l'agrégation. Enfin nous définissons l'application de la méthode des moments, numériques et semi-analytiques.

## 2.2 Equation du bilan de population

La population des particules est supposée être suffisamment grande pour que les variations aléatoires dans le comportement des particules puissent être moyennées. En général, l'EBP est une équation partielle intégral-différentielle non linéaire et peut être représentée comme :

$$\left(\frac{\partial f(X, t)}{\partial t}\right) = -\nabla \cdot (V f)(t, v) + B(X, t) - D(X, t) \quad (2.1)$$

Où  $f$  : décrit une fonction de distribution multidimensionnelle.

$V = dX/dt$  représente la vitesse.

$X$  : le vecteur d'état de particules est donné par  $X = (X_e, X_i)$ .

Avec  $X_e$  représente le vecteur des coordonnées externes et  $X_i$  le vecteur de coordonnées internes.

Les termes  $B$  et  $D$  du côté droit représentent respectivement les conditions de naissance (l'apparition) et de mort (la disparition), comme des particules de nucléation, de rupture et d'agrégation.

Mathématiquement, la population des particules est décrite par une fonction de densité en nombre  $n(X, t)$  en fonction du temps  $t$  et le vecteur d'état de particules  $X$ .

Les composantes de vitesse en relation avec les coordonnées externes sont les composantes de la vitesse conventionnelle, tandis que ceux correspondant aux coordonnées internes désignent le taux de changement de taille, du volume, de teneur en humidité...etc [12].

Ainsi, l'équation (2.1) du bilan de population peut être intégrée sur tous les points de l'espace et l'EBP résultant décrit la dynamique de la fonction de distribution de taille  $n : = n(l, t) \geq 0$ , des particules de taille  $l > 0$  à Temps  $t \geq 0$ . Une équation générale de la population basée sur la longueur (EBP) est donnée comme [13, 14, 15] :

$$\frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = Q_e(l, t) - Q_s(l, t) - \frac{\partial [G(l, t) n(l, t)]}{\partial l} + Q_{nuc}^+(l, t) + Q_{diss}^-(l, t) + Q_{agg}^\pm(l, t) + Q_{rupt}^\pm(l, t)$$

$$(l, t) \in \mathbb{R}_+^2 \tag{2.2}$$

$$\mathbb{R}_+ = (0, +\infty)$$

$G, Q_{nuc}^+, Q_{diss}^-$  : les vitesses de croissance, de nucléation et de dissolution des particules respectivement.

$Q_{agg}^\pm$  et  $Q_{rupt}^\pm$  : représentent la naissance (l'apparition) et la mort (la disparition) des particules pendant les processus d'agrégation et de rupture respectivement.

$Q_e$  et  $Q_s$  = les flux d'entrée et de sorties du système respectivement, ils sont définis comme :

$$Q_e(l, t) = \frac{\dot{V}_e}{V} n_e(l, t), \quad Q_s(l, t) = \frac{\dot{V}_s}{V} n_s(l, t) \tag{2.3}$$

Avec  $\dot{V}_e$  et  $\dot{V}_s$  : représentent les débits volumétrique d'entrée et de sortie à partir d'un système volumétrique  $V$ , et  $n_e(l, t)$  et  $n_s(l, t)$  sont les densités en nombre de particules entrant et sortant. Voir la **Figure 2.1**.

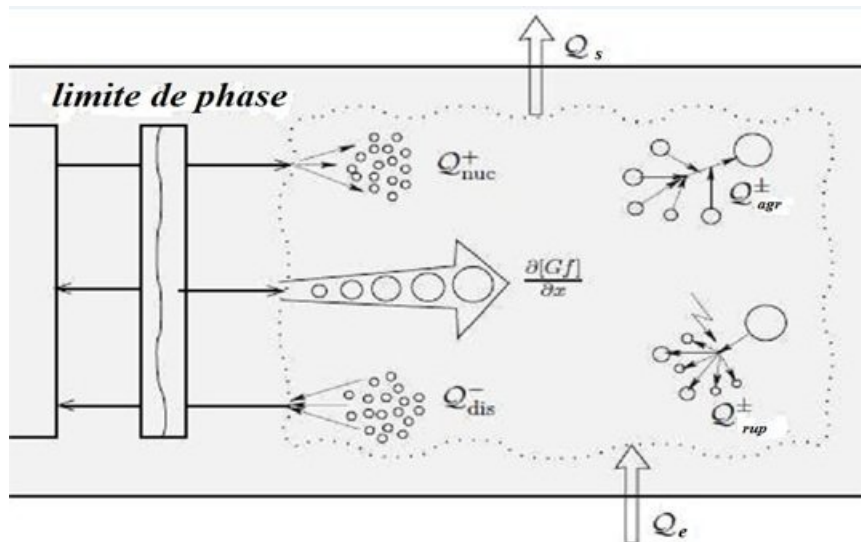


Figure 2.1 : Représentation schématique du processus de différentes particules [16]

## 2.2.1 Equation du bilan de population pour la croissance et la nucléation

### 1. Définition de la croissance et la nucléation :

Pendant le processus de croissance, les particules existantes du système dispersé se développent en consommant la matière du soluté de la solution. Par conséquent, le nombre total de particules reste identique mais le volume augmente continuellement. Au niveau microscopique, la vitesse de croissance des particules est imprévisible mais est prévisible au niveau macroscopique. Généralement, le taux de croissance est un phénomène complexe qui n'est pas complètement compris quand on traite du taux de croissance des particules dépendant de la taille. En particulier, il est difficile de mesurer le taux de croissance dépendant de la taille au cours des expériences.

La nucléation peut être divisée en deux catégories, telles que les nucléations primaires et secondaires. La nucléation primaire est subdivisée en deux catégories : les nucléations homogènes et hétérogènes. La nucléation homogène se produit dans la phase liquide sans particules. Une grande quantité de petites particules peut être produite avec ce type de nucléation. Il est communément observé dans le salage, la précipitation et la cristallisation. Le deuxième type de nucléation primaire est la nucléation hétérogène qui se produit pour plusieurs raisons, par exemple les tubes ne sont pas nettoyés à cause de n'importe quel processus de particule antérieur ou tout pore dans le tube a une certaine poussière à l'intérieur, etc. La nucléation secondaire est l'hétérogène Nucléation induite par des particules existantes, par exemple due à

l'ensemencement d'un cristalliseur discontinu [17].

Le processus de nucléation introduit de nouvelles particules (noyaux) dans le système en mélangeant deux ou plusieurs matières non particulières, figure 2.1. En raison de ce processus, la population de particules augmente dans le système. Le terme de nucléation est défini comme :

$$Q_{nuc}^+(l, t) = n_{nuc}(l, t) B_0(t) \quad (2.4)$$

$n_{nuc}(l, t)$  : désigne la fonction de densité numérique des noyaux.

$B_0(t)$  : La nucléation.

### 2. Equation du bilan de population pour la croissance et la nucléation en fonction du volume :

L'équation de bilan de la population pour la croissance et la nucléation est donnée comme dans [16] :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[Gn(v, t)]}{\partial v} + Q_{nuc}^+(v, t) \quad (2.5)$$

$G$  : La vitesse de la croissance des particules.

$n(v, t)$  : La densité volumique du bilan de population.

$Q_{nuc}^+(v, t)$  : La vitesse de nucléation des particules.

### 3. Equation du bilan de population pour la croissance et la nucléation en fonction de la longueur :

$$\frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[Gn(l, t)]}{\partial l} + \frac{Q_{nuc}^+}{3l^2}(l, t) \quad (2.6)$$

$n(l, t)$  : La fonction de densité en nombre basée sur la longueur.

## 2.2.2 Equation du bilan de population pour la dissolution

### 1. Définition de la dissolution :

Les particules (par exemple les cristaux) ne sont pas stables au-dessous d'une certaine taille, habituellement appelée taille critique. Les petites particules dont le taux de croissance est négatif deviendront plus petites que la taille critique et disparaîtront donc de la population. (Voir la figure 2.1) [16].



La dissolution des nanoparticules et le relargage d'ions toxiques est un paramètre souvent invoqué dans les études d'impacts des (éco) toxicologiques des nanomatériaux. Or à l'échelle nanométrique, les particules inorganiques ( $< 20-30$  nm) ont un rapport surface/volume élevé et un excès d'énergie en surface qui peut leur conférer une réactivité en solution très spécifique. Elles ont donc un comportement en solution (*ex* : dissolution, adsorption, agrégation) qui ne peut être prédit ou étudié comme celui de microparticules [18].

**2. Equation du bilan de population pour la dissolution en fonction du volume :**

$$Q_{diss}^-(v, t) = D_{diss}n(v, t) \quad (2.7)$$

$n(v, t)$  : La densité volumique du bilan de population.

$D_{diss}$  : Le taux de dissolution.

**3. Equation du bilan de population pour la dissolution en fonction de la longueur :**

$$Q_{diss}^-(l, t) = D_{diss}n(l, t) \quad (2.8)$$

$n(l, t)$  : La fonction de densité en nombre basée sur la longueur.

Où  $D_{diss}$  représente le taux de dissolution. Si les particules sont supposées disparaître immédiatement lorsqu'ils atteignent la taille critique et la vitesse de dissolution doit être infinie.

### 2.2.3 Equation du bilan de population pour l'agrégation

**1. Définition de l'agrégation :**

La fusion de deux particules ou plus pour former une autre plus grande est appelée agrégation ou agglomération. Ce procédé réduit le nombre de particules, mais le volume total reste constant (figure 2.1). Elle se déroule dans une variété de procédés qui incluent la cristallisation, les lits fluidisés, la formation de gouttelettes de pluie et la production de poudres sèches. Agglomération de petites particules de la formation de poussières et donc améliore leurs propriétés de manipulation. Un autre avantage

de la poudre agglomérée est une vitesse de dissolution plus élevée en réduisant la formation de grumeaux ou de flottation de la poudre [19,20].

Le bilan de population pour l'agrégation par lots de suspensions particulières est refondu sous une forme qui peut être résolue simplement et avec précision. L'équation transformée est déduite par l'introduction d'un seul paramètre supplémentaire, qui est une constante pour tous les cas [21].

## 2. Equation du bilan de population pour l'agrégation en fonction du volume

Le phénomène d'agrégation apparaît dans un large éventail d'applications, La variation temporelle de la densité en nombre de particules dans un système physique spatialement homogène est décrite par l'équation du bilan de population comme suit :

$$Q_{agr}^{\pm}(v, t) = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v - v_1, v_1) n(v, t) n(v - v_1, t) dv_1 - n(v, t) \int_0^{\infty} \beta(v, v_1) n(v_1, t) dv_1 \quad (2.9)$$

$$t \geq 0$$

$\frac{1}{2} \int_0^v \beta(v - v_1, v_1) n(v, t) n(v - v_1, t) dv_1 - n(v, t)$  : représente la naissance des particules de dimension  $v$  en conséquence de la coagulation des particules de dimensions  $(v - v_1)$  et  $v_1$

$\int_0^{\infty} \beta(v, v_1) n(v_1, t) dv_1$  : décrit la fusion des particules de taille  $v$  avec d'autres particules, est appelé le terme de disparition.

$\beta$  : la fréquence d'agrégation entre deux particules de volumes  $v$  et  $v_1$  produit une particule de taille  $v + v_1$ , représentant des propriétés du milieu physique.

La nature du processus est régie par la coagulation kernel (du noyau).

## 3. Equation du bilan de population pour l'agrégation en fonction de la longueur :

$$Q_{agr}^{\pm}(l, t) = \frac{l}{2} \int_0^l \frac{\beta((l^3 - l_1^3)^{\frac{1}{3}}, l_1) n((l^3 - l_1^3)^{\frac{1}{3}}, t) n(l_1, t)}{(l^3 - l_1^3)^{\frac{2}{3}}} dl_1 - n(l, t) \int_0^{\infty} \beta(l, l_1) n(l_1, t) dl_1 \quad (2.10)$$

Il y a deux termes intégraux dans l'équation ci-dessus, la première intégrale est le terme de la naissance (l'apparition) et le second représente le terme de mort (la disparition). Lorsque deux particules de tailles différentes collent ensemble, une nouvelle grande particule est formée, appelée la naissance. En raison de la fusion de deux particules une particule est perdue, appelée particule morte. La taille de la nouvelle particule est en plus désignée par  $(l+l_1)$  [17].

## 2.2.4 Equation du bilan de population pour la rupture

### 1. Définition de la rupture :

En cas de rupture, les grosses particules se divisent en deux ou plusieurs morceaux. Il en résulte une augmentation rapide de la population de particules (figure 2.1). Il a une large gamme d'applications dans la cristallisation, la granulation et les sciences de l'environnement. Pour une description détaillée du processus de rupture, les lecteurs sont appelés à consulter Iveson et coll [22].

La rupture de granulés humides peut contrôler la distribution de taille du granulé finale, en particulier dans des granulateurs à cisaillement élevé.

### 2. Equation du bilan de population pour la rupture en fonction du volume :

La forme générale de l'équation de bilan de la population pour la rupture est donnée par [23] :

$$Q_{rup}^{\pm}(v, t) = \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^{\infty} b\left(\frac{v}{v_1}\right) a(v_1) n(v_1, t) dv_1 - a(v) n(v, t) \quad (2.11)$$

$a(v)$  : Le noyau de sélection, également appelée fréquence de rupture de la particule, qui montre la probabilité de sélectionner une particule qui se casse en deux fragments.

$b\left(\frac{v}{v_1}\right)$  : Le noyau de rupture. Il est évident que la population totale de particules augmente dans le processus de rupture tandis que le volume total des particules reste constant tout au long du cours d'action.

### 3. Equation du bilan de population pour la rupture en fonction de la longueur :

$$Q_{rup}^{\pm}(l, t) = \frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = \int_l^{\infty} b\left(\frac{l}{l_1}\right) a(l_1) n(l_1, t) dl_1 \quad (2.12)$$

## 2.3 Fonction des moments

Le moment d'une fonction de densité en nombre est défini comme suit :

$$M_k(t) = \int_0^{\infty} v^k n(v, t) dv \quad (2.13)$$

Où  $M_k(t)$  est le moment  $k^{\text{ème}}$ . 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 :

1. Le moment d'ordre zéro représente la population totale des particules.
2. Le premier moment représente la longueur totale des particules.
3. Le deuxième moment représente l'aire totale de la surface de particules.
4. Le troisième moment représente le volume total des particules.
5. Les moments d'ordre quatre et cinq n'ont pas de sens physique par rapport aux particules [17].

## 2.4 Méthodes numériques pour résoudre l'équation de bilan de population

1. Méthode des classes (MDC)
2. Méthode de pivot fixe
3. Méthode de Monte Carlo (MMC)
4. Méthode standard des moments (MSM)
5. Méthode de quadrature des moments (MQM)

### 2.4.1 La méthode des classes (MDC)

La discrétisation de l'équation de bilan de population (DBP) ou méthode des classes est l'une des méthodes les plus utilisées en génie de la précipitation et de la cristallisation, car elle permet de simuler la distribution de taille des particules dans son ensemble.

Cette méthode consiste à représenter la distribution de taille de particules (DTP) en nombre. Cette méthode donne la DTP directement, néanmoins son utilisation est

conditionnée à connaître a priori la gamme de taille des particules et il est possible qu'un nombre important de classes soit nécessaire. Des bons résultats sont obtenus pour un nombre minimal de 20 à 30 classes, jusqu'à plus de 100 classes pour les cas les plus complexes. Pour inclure l'équation de bilan de population dans la simulation, l'équation est écrite en fonction de la fraction volumique de la taille des particules,  $\alpha_i$  de la  $i^{\text{ème}}$  fraction, dont le volume se trouve entre  $v_i$  et  $v_{i+1}$  :

$$\alpha_i = N_i v_i \quad i = 0, 1, \dots \quad (2.14)$$

Où  $N_i(t)$  est le nombre de particules appartenant à la classe  $i$  par  $\text{m}^3$  de fluide, soit par définition :

$$N_i(t) = \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv \quad (2.15)$$

$v_i$  est le volume qu'occupent les particules de taille  $L_i$  [24].

L'équation de bilan de population pour chacune des M classes considérées, s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = & + \frac{1}{2} \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^\infty \omega(v - v_1, v_1) n(v, t) n(v - v_1, t) dv_1 \} - \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv \\ & \int_0^\infty \omega(v, v_1) n(v_1, t) dv_1 + \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^\infty \beta(v, v_1) \Gamma(v_1, t) n(v_1, t) dv_1 - \\ & \Gamma(v) n(v, t) \end{aligned} \quad (2.16)$$

La résolution du système de M équation ainsi obtenu est cependant rendu impossible, à ce stade, par la méconnaissance de la densité en nombre  $n(v, t)$ , du membre de droite. Le système d'équations n'est donc pas fermé, sous cette forme, et la réécriture du membre de droite en fonction des  $N_i$  est nécessaire.

Deux approches classiques sont possibles :

1. La méthode M-I, qui consiste à appliquer le théorème de la moyenne au noyau d'agglomération  $\omega$ .
2. La méthode M-II, qui consiste à appliquer ce même théorème à la densité en nombre [25].

### 2.4.2 Méthode de pivot fixe

La discrétisation discuté ci-dessus a l'inconvénient qu'elle peut seulement être appliquée sur une grille spécifique. Kumar et Ramkrishna [26] ont développé la technique du pivot fixe. Cette technique ne conserve pas seulement le nombre et la masse des particules, mais elle peut également être généralisée pour le maintien de deux propriétés souhaitées de la population.

Cette technique sépare toute la gamme de taille dans des petites cellules. La taille d'une cellule peut être choisie aléatoirement. La gamme de taille contenue entre deux tailles est appelé  $v_{i-1/2}$  et  $v_{i+1/2}$ , le  $i^{\text{ème}}$  cellule. La population de particules dans cette gamme de taille est représentée par un  $v_i$  taille, appelé point de la grille (grid), de telle sorte que  $v_{i-1/2} < v_i < v_{i+1/2}$ . Une nouvelle particule de taille  $v$  dans la gamme de taille  $[v_i, v_{i+1}]$ , formée soit en raison de la rupture ou l'agrégation, peut être représenté par les fractions des populations  $a_1(v, v_i)$  et  $a_2(v, v_{i+1})$  respectivement. Pour la cohérence avec les deux propriétés générales  $f_1(v)$  et  $f_2(v)$ , ces fractions doivent valider les équations suivantes [27] :

$$a_1(v, v_i) f_1(v_i) + a_2(v, v_{i+1}) f_1(v_{i+1}) = f_1(v) \quad (2.17)$$

$$a_1(v, v_i) f_2(v_i) + a_2(v, v_{i+1}) f_2(v_{i+1}) = f_2(v) \quad (2.18)$$

En outre, ces équations peuvent être généralisées pour la cohérence avec plus de deux propriétés en assignant la taille de particule  $v$  à plus de deux points de grille. La population au  $v_i$  volume représentatif obtient une particule fractionnaire pour chaque particule qui est née dans la classe de taille  $[v_i, v_{i+1}]$  ou  $[v_{i-1}, v_i]$ .

Equation du bilan de population :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v, v_1) n(v, t) n(v_1, t) dv_1 - n(v, t) \int_0^\infty \beta(v, v_1) n(v_1, t) dv_1 \quad (2.19)$$

Intégration de l'équation (2.6) sur une cellule  $i$  donne :

$$\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} \int_0^\infty \beta\left(\frac{v}{v_1}\right) \Gamma(v_1) n(v_1, t) dv_1 dv - \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} \Gamma(v) n(v, t) dv \quad (2.20)$$

Kumar et Ramkrishna [26, 28] ont considéré que les particules avec des concentrations en nombres  $N_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, I$  restent dans tailles  $v_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, I$  respectivement.

Mathématiquement la fonction densité de nombre  $n(v, t)$  peut être représentée en termes de distribution de delta de Dirac comme suit :

$$n(v, t) = \sum_{i=1}^I N_i \delta(v - v_i) \quad (2.21)$$

La dernière série d'équations discrétisées pour la conservation exacte du nombre et la masse dans ce cas elle prend la forme suivante :

$$\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = \sum_{k=i}^I \eta_{i,k} S_k N_k(t) - S_i N_i(t) = B_i - D_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots, I \quad (2.22)$$

Et  $S_k$ ,  $S_{(x_k)}$  et la fonction  $\eta$  sont décrits par :

$$\eta_{i,k} = \int_{v_i}^{v_{i+1}} a_1(v, v_i) b(v, v_k) dv + \int_{v_{i-1}}^{v_i} a_2(v, v_i) b(v, v_k) dv \quad (2.23)$$

Où

$$a_1(v, v_i) = \frac{v_{i+1} - v}{v_{i+1} - v_i}, \quad a_2(v, v_i) = \frac{v - v_{i+1}}{v_i - v_{i+1}} \quad (2.24)$$

On notera que les propriétés locales de conservation suivantes sont vérifiées :

$$a_1(v, v_i) + a_2(v, v_{i+1}) = 1 \quad (2.25)$$

$$v_i a_1(v, v_i) + v_{i+1} a_2(v, v_{i+1}) = v \quad (2.26)$$

Le concept fondamental de la technique du pivot fixe peut être résumé comme suit :

Supposons une nouvelle particule d'une taille qui ne soit pas un représentant d'une cellule qui semble due à la rupture des particules les plus grosses.

La particule doit être divisée de manière que le nombre et la masse sont conservés. Dans ce processus de diffusion numérique est bien sûr possible en raison de la cession de particules aux représentants à qu'ils n'appartiennent pas vraiment. Cependant, des résultats tout à fait satisfaisants peuvent être obtenus par cette technique. Aussi, il sera montré plus tard que la technique du pivot fixe prédit les résultats. Étant donné que dans la rupture des particules en particules plus petites, la technique du pivot fixe surestime la densité en nombre de particules les plus petites.

### 2.4.3 Méthode de Monte Carlo (MMC)

La méthode de Monte Carlo est l'une des méthodes les plus utilisées pour modéliser la distribution de taille de particules. Le but de cette méthode est de suivre l'évolution de l'ensemble des particules discrétisées en réalisées en réalisant aléatoirement la sélection d'évènements probables. Dans la méthode courante de Monte Carlo, il faut d'abord choisir l'intervalle de temps et un élément de volume [24].

Cette technique est généralement appliquée pour analyser les systèmes physiques où l'expérimentation directe est impossible ou bien les problèmes mathématiques qui ne peuvent être résolus par des moyens directs.

Les méthodes stochastiques (Monte-Carlo) sont très efficaces pour résoudre des équations multidimensionnelles du bilan de population, car d'autres techniques de calcul numérique sont très difficiles à l'égard de leur application dans de tel cas. Ces méthodes sont des méthodes probabilistes qui utilisent un échantillon d'une population de particules et suivent l'évolution de cet échantillon sous l'action de rupture ou coalescence avec des probabilités proportionnelles à l'intensité de ces phénomènes [29, 30].

La méthode de Monte Carlo simule directement l'évolution dynamique d'un échantillon fini de la population des particules. L'avantage de ces méthodes est dans leur simplicité et plus important encore, dans leur stochastique et dans leur nature discrète qui s'adapte naturellement à la nucléation, et l'agglomération [28, 29].

Et aussi cette méthode est la non nécessité de recourir à une discrétisation qui est par ailleurs évolutive en fonction de l'état du système [26, 30].

Cette méthode offre également l'avantage d'être très précis et est parfois utilisée comme méthode de référence, qui sert en quelque sorte de comparaison avec d'autres méthodes [34].

Ainsi, Marchisio et coll [35] ont utilisé la méthode de Monte-Carlo, pour compléter les solutions analytiques obtenues sur des cas de tests simples, pour discuter la validité de la méthode des moments qu'ils ont développée. Le principal inconvénient de ces méthodes probabilistes est leur durée de calcul exorbitante [29].

L'avantage principal de la méthode de Monte-Carlo est qu'elle permet de modéliser l'évolution de la population de particules lorsqu'elle suit le processus entier de nucléation-croissance-agrégation-rupture.

D'ailleurs, sa nature discrète s'adapte naturellement aux processus de croissance ce



qui implique des événements discrets. Elle permet de plus de réduire l'erreur commise lors de chaque simulation.

Cette méthode est la plus adaptée lorsque l'on choisit de traiter l'agrégation par l'approche fractale car elle rend compte du caractère aléatoire du phénomène et prend ainsi mieux en considération la géométrie des agrégats que traduit la dimension fractale.

#### 2.4.4 Méthode standard des moments (MSM)

Une solution couramment utilisée pour gagner le temps de calcul consiste à travailler non pas sur la densité en nombre, mais sur les moments de la distribution. Cette méthode est connue dans la littérature sous le nom de Méthode Des Moments (MDM).

La méthode standard des moments a été proposée par Randolph et Larson (1971). Elle consiste à transformer l'équation de bilan de population en un ensemble d'équation de transport des moments de la distribution. Le moment d'ordre  $k$  est défini par rapport à la coordonnée interne (La taille de particule  $l$ ) à partir de l'équation :

$$M_k = \int_0^\infty n(l) l^k dl \quad k = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (2.27)$$

À partir des moments, des paramètres qui décrivent les propriétés du bilan de population sont obtenus. Ces propriétés sont le nombre, la longueur, l'air et le volume total des particules par unité de volume.

Cette méthode est utilisée pour réduire la complexité du problème et la résolution est relativement simple pour des moments de faible ordre [24].

Le principe de la méthode est, par l'intermédiaire de l'outil mathématique que sont les moments, d'accéder directement à la distribution en taille des particules (car le moment d'ordre 0 est égal au nombre total de particules comme le montre la relation (2.27) et d'intégrer la coordonnée interne de taille à l'extérieur de l'équation.

Il est nécessaire de modifier la coordonnée interne du bilan de population en procédant au changement de variable  $v \sim l^3$  qui mène à [8] :

$$\frac{dn(l)}{dt} = \frac{l^2}{2} \int_0^l \beta((l^3 - l_1^3)^{\frac{1}{3}}, l_1) \frac{n(l^3 - l_1^3)^{1/3}}{(l^3 - l_1^3)^{2/3}} n(l_1) dl_1 - n(l) \int_0^\infty \beta(l, l_1) dl_1 \quad (2.28)$$

Ces méthodes ont été vite remplacées par des méthodes calculant les moments par des approximations quadratiques. En effet, les premières sont pénalisées par leur incapacité

d'intégrer tous les noyaux de rupture et de coalescence à cause de problèmes de fermeture des équations de transport des moments, notamment ceux qui dépendent de la variable interne [27]. Le développement des méthodes approximant les moments de la distribution par quadrature permet de contourner ce problème. Ces méthodes nombreuses peuvent être classées essentiellement en fonction de la manière dont les moments sont approximés.

Ainsi, on peut trouver la méthode de quadrature de moments (MQMO), introduite par Marchisio et coll [36], qui approxime les moments de la distribution par les biais de poids et d'abscisses. Ces derniers, déterminés par un problème inverse sur les premiers moments, permettent ensuite de construire par l'approximation quadratique l'ensemble des moments.

### 2.4.5 Méthode de quadrature des moments (MQM)

Plus récemment des méthodes plus performantes, ne nécessitant aucune hypothèse quant à la distribution, ont été développées. Ces méthodes basées sur une interpolation entre les différents moments de la distribution, fournissent des résultats beaucoup plus satisfaisants que les méthodes citées précédemment. De telles techniques ont notamment été utilisées par Frenklach et Harris et Diemer et Olson [37].

Mc Graw [38] a également proposé une technique de fermeture générale, basée sur une méthode de quadrature gaussienne, fournissant de très bons résultats. Cette méthode, aujourd'hui largement répandue, est appelée Méthode De Quadrature des Moments. Parmi les différentes approches qui permettent de suivre l'évolution d'un ensemble de particules par coagulation, la plus utilisée est basée sur une équation du bilan de population qui s'écrit sous la forme intégrale equation (2.28).

Le moment d'ordre  $k$  est maintenant tel que :

$$M_k = \sum_{i=0}^{N_q-1} w_i l_i^k \quad (2.29)$$

Grâce à l'approximation des moments par la formule de quadrature (2.29), il est possible de réécrire l'équation de coagulation en fonction des poids et des abscisses :

$$\frac{dM_k}{dt} = \sum_{i=0}^{N_q-1} \sum_{j=0}^{N_q-1} \beta(l_i, l_j) \left( \frac{1}{2} (l_i^3 - l_j^3)^{\frac{k}{3}} - l_i^k \right) w_i w_j \quad (2.30)$$

La difficulté est maintenant de résoudre le système d'équations (2.30) composé de  $2N_q$  équations. Il faut en effet obtenir les poids  $w_i$  et les abscisses  $l_i$  de la quadrature à partir

des moments  $M_k$ . McGraw (1997) [38] surmonte ce problème grâce à l'algorithme Produit-Différence (PD), initialement développé par Gordon (1968) pour une application à la détente à haute température en mécanique statistique. Il s'agit d'une méthode séquentielle qui va permettre de trouver les poids et les abscisses à partir des moments à l'instant donné, puis de résoudre le système (2.30) pour obtenir les moments à l'instant suivant et ainsi de suite. La première étape de l'algorithme consiste à remplir la matrice carrée  $P$ , de taille  $2N_q + 1$ , dont les éléments sont construits de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 P_{i,1} &= \delta_{i,1} \\
 P_{i,2} &= (-1)^{i-1} M_{i-1}, \quad 1 \leq i \leq 2N_q \\
 P_{i,j} &= P_{1,j-1} P_{i+1,j-2} - P_{1,j-2} P_{i+1,j-1}, \\
 &1 \leq i \leq 2N_q + 2 - j, \quad 3 \leq j \leq 2N_{q+1}
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Puis les coefficients  $\alpha_i$  sont obtenus par :

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= 0 \\
 \alpha_i &= \frac{P_{1,i+1}}{P_{1,i} P_{1,i-1}}, \quad 2 \leq i \leq 2N_q
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Une matrice tri-diagonale  $T$  est ensuite construite, dont les composants diagonaux sont notés  $a_i$  et les composants sous-diagonaux sont notés  $b_i$ , de sorte que :

$$\begin{aligned}
 a_i &= \alpha_{2i-1} + \alpha_{2i}, \quad 1 \leq i \leq N_q \\
 b_i &= -\sqrt{\alpha_{2i} \alpha_{2i+1}}, \quad 1 \leq i \leq N_q - 1
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Par exemple,  $N_q = 2$  conduit à une matrice carrée  $P$  de taille 5, nécessitant ainsi la connaissance des 4 premiers moments. La matrice  $P$  s'écrit dans ce cas :

$$P = \begin{bmatrix} 1 & M_0 & M_1 & M_2 - M_1^2 & M_1 M_3 - M_1^2 \\ 0 & -M_1 & -M_2 & M_1 M_2 - M_3 & 0 \\ 0 & M_2 & M_3 & 0 & 0 \\ 0 & -M_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.34}$$

Et la matrice tri-diagonale  $T$  de taille 2 est donnée par :

$$T = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ b_2 & a_2 \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

Les abscisses  $l_i$  sont les valeurs propres de la matrice  $T$  et les poids  $w_i$  sont obtenus en calculant le carré du premier élément de chaque vecteur propre [8].

## 2.5 Méthodes semi-analytiques

### 2.5.1 Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)

Ces quelque dernières années, la méthode de décomposition d'Adomian (M, D, A) a été appliquée à des classes très larges de problèmes dans de nombreux domaines, comme les mathématiques, la physique la biologie, etc. . .

Cette méthode permet de résoudre les équations fonctionnelles de différents types et vient s'ajouter aux autres méthodes existantes. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de résoudre par un schéma direct le problème considéré, la solution est obtenue sous forme de séries rapidement convergentes. Beau coup d'auteurs ont donné un grand intérêt à l'application de la méthode de décomposition à la résolution de problèmes aussi bien déterministes que stochastiques [39].

La méthode décompositionnelle d'Adomian permet de résoudre des problèmes fonctionnels de différents types : algébriques, différentielles, intégrales, intégral-différentielles, aux dérivées partielles (EDP) . . .etc. La méthode s'adapte aussi bien aux problèmes linéaires qu'aux problèmes non linéaires.

Pour mieux illustrer le principe de la méthode décompositionnelle, considérons l'équation suivante [40] :

$$F u(t) = g(t) \quad (2.36)$$

Où  $F$  : représente un opérateur différentiel ordinaire ou partiel non-linéaire comprenant des termes linéaires et non-linéaires. Le terme linéaire est généralement décomposé en  $(L+R)$ , où  $L$  est facilement inversible et  $R$  représente le résidu de l'opérateur linéaire. Dans ces conditions, l'équation précédente peut s'écrire sous la forme :

$$Lu + Nu + Ru = g \quad (2.37)$$

Avec :

$Nu$  : indique le terme non-linéaire.

La résolution de l'équation (2.37) pour  $Lu$  sachant que  $L$  est inversible, conduit à :

$$L^{-1}Lu + L^{-1}Ru + L^{-1}Nu = L^{-1}g \quad (2.38)$$

$L^{-1}$  : constitue une intégrale d'ordre  $n$  (double ou triple.....).

La solution de l'équation (2.38), se traduit par :

$$u = A + Bt + Ct^2 \dots \dots Dt^{n-1} + L^{-1}g + L^{-1}Ru + L^{-1}Nu \quad (2.39)$$

Où les constantes (A, B.....D) d'intégration sont estimées à partir des conditions aux limites et initiales.

La méthode d'Adomian suppose que la solution  $u$  peut être donnée par la série suivante :

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} u_n \quad (2.40)$$

Le terme non-linéaire peut s'écrire également :

$$Nu = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \quad (2.41)$$

$A_n$  : appelés polynômes d'Adomian, sont calculés par la formule suivante :

$$A_n = \frac{1}{n!} \left[ \frac{d^n}{d\lambda^n} \left[ N \left( \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right] \right]_{\lambda=0} \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (2.42)$$

Les composantes de la solution d'après Adomian se calculent finalement par la formule suivante :

$$u_{n+1} = L^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} A_n \quad (2.43)$$

### 2.5.2 La méthode d'itération variationnelle (MIV)

Méthode d'itération variationnelle d'abord a été proposé par le mathématicien chinois He. Cette méthode donne la solution en forme d'approximations successives rapidement convergentes vers la solution exacte si celle-ci existe.

Pour illustrer les idées de base de cette méthode, on considère l'équation différentielle non-linéaire suivante [41] :

$$Lu + Nu = g(t) \tag{2.44}$$

Où  $L$  est un opérateur linéaire,  $N$  un opérateur non-linéaire,  $g(t)$  une fonction réelle.

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

$$u_{n+1}(t) = u_n(t) + \int_0^t \lambda (Lu_n(\tau) + N\bar{u}_n(\tau) - g(\tau)) d\tau \tag{2.45}$$

Où  $\lambda$  est un multiplicateur de Lagrange qui peut être identifié de manière optimale par la théorie variationnelle, et  $\bar{u}_n$  une variation restreinte qui signifie  $\delta\bar{u}_n = 0$ . Par ce procédé, il est nécessaire d'abord de déterminer le multiplicateur de Lagrange qui sera identifié de façon optimale. Les approximations successives  $\bar{u}_{n+1}$ ,  $n \geq 0$ , de la solution  $u$  seront facilement obtenues à l'aide du multiplicateur de Lagrange identifié. Par conséquent, la solution est donnée par :

$$u = \lim_{n \rightarrow \infty} u_n \tag{2.46}$$

# Chapitre 3

## Résultats et discussion

## 3.1 Introduction

Dans ce chapitre on procède à une étude comparative entre les résultats obtenue par MQM, MIV et les solutions analytiques existants dans la littérature.

## 3.2 Application de la méthode numérique MQM

Le système d'équations différentielles (2.30) résultant de l'application de la méthode de quadrature des moments à l'équation (2.28) pour  $k$  variant de 0 à 5 peut être résolu on utilisant le solveur ODE 45 ou ODE 15S.

Dans ce qui suit, on présente l'algorithme pour l'application de la méthode numérique explicite proposée. Cette méthode utilise les valeurs des variables dépendantes à l'étape de temps précédente pour calculer les valeurs à l'étape prochaine.

1. On utilise initialement la densité en nombre initial  $n_0(l, 0)$  pour calculer les moments initiaux requis.
2. Ensuite, on utilise l'équation (2.30) pour calculer les valeurs discrètes du  $M_k(t)$  au niveau des points discrets de calcul du temps donné.
3. On rapproche les termes intégraux dans l'équation (2.30), on utilise la règle de la quadrature.
4. Les abscisses  $l_i$  sont les valeurs propres de la matrice  $T$ .
5. Ensuite, on détermine les poids  $w_i$  qui sont obtenus en calculant le carré du premier élément de chaque vecteur propre.
6. Enfin, on utilise les abscisses, les poids et l'*ODE* solveur standard (intégré dans le Matlab) pour obtenir les moments nécessaires dans l'équation (2.30) pour toute la durée de la simulation.

## 3.3 Application de la méthode semi-analytique MIV

### 3.3.1 Noyau constant

Dans ce cas, le noyau d'agrégation est défini comme étant constant,  $\beta(l, l_1) = \beta_0 = 1$  [44].



L'application de la méthode d'itération variationnelle à l'équation (2.28) donne :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{i+1}(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = & u_i(l, t) - \int_0^t \left( \frac{du_i(l, t)}{dt} - \frac{l^2}{2} \int_0^l \frac{\beta((l^3 - l_1^3)^{\frac{1}{3}}, l_1) u_i(l^3 - l_1^3)^{\frac{1}{3}} u_i(l_1, t)}{(l^3 - l_1^3)^{\frac{2}{3}}} dl_1 \right. \\ & \left. + u_i(l, t) \int_0^\infty \beta(l, l_1) u_i(l_1, t) dl_1 \right) dt \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{u}_0(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = 3l^2 \exp(-l^3) \quad (3.2)$$

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = 3l^2 \exp(-l^3) - (3 \exp(-l^3) l^2 - \frac{3}{2} \exp(-l^3) l^5) t \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_2(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = & 3l^2 \exp(-l^3) - (3 \exp(-l^3) l^2 - \frac{3}{2} \exp(-l^3) l^5) t + \frac{9}{4} \exp(-l^3) l^2 t^2 - \frac{9}{4} \\ & \exp(-l^3) l^5 t^2 + \frac{3}{8} \exp(-l^3) l^8 t^2 - \frac{1}{2} \exp(-l^3) l^2 t^3 + \frac{3}{4} \exp(-l^3) l^5 t^3 - \frac{1}{4} \\ & \exp(-l^3) l^8 t^3 + \frac{1}{48} \exp(-l^3) l^{11} t^3 \end{aligned} \quad (3.4)$$

De la même façon, on peut calculer :  $u_3(l, t)$ ,  $u_4(l, t)$ ,  $\dots$ ,  $u_m(l, t)$

Par conséquent les moments sont :

$$\mathbf{M}_k = \int_0^\infty l^k u_m(l, t) dl \quad (3.5)$$

Avec k variant de 0 à 5

### 3.3.2 Noyau somme

Ensuite, nous utilisons le noyau somme de la forme  $\beta(l, l_1) = \beta_0(l^3 + l_1^3)$ , ou  $\beta_0 = 0.01$ .

L'application de la méthode VIM donne :

$$\mathbf{u}_0(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = 3l^2 \exp(-l^3) \quad (3.6)$$

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = 3l^2 \exp(-l^3) - (-0.015 \exp(-l^3) l^8 + 3 \exp(-l^3) l^2 (0.01 + 0.01 l^3)) t \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_2(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = & 3l^2 \exp(-l^3) - 3.46945 \times 10^{-18} \exp(-l^3) l^8 t - (-0.015 \exp(-l^3) l^8 + 3 \exp \\
 & (-l^3) l^2 (0.01 + 0.01 l^3)) t + 0.00015 \exp(-l^3) l^2 t^2 + 0.00045 \exp(-l^3) l^5 t^2 - 0.000075 \\
 & \exp(-l^3) l^8 t^2 - 0.00015 \exp(-l^3) l^{11} t^2 + 0.000025 \exp(-l^3) l^{14} t^2 + 6.66134 \times 10^{-22} \\
 & \exp(-l^3) l^2 t^3 - 1 \times 10^{-6} \exp(-l^3) l^5 t^3 - 5 \times 10^{-7} \exp(-l^3) l^8 t^3 + 1 \times 10^{-6} \exp(-l^3) \\
 & l^{11} t^3 - 8.3333 \times 10^{-8} \exp(-l^3) l^{14} t^3 - 4.16667 \times 10^{-8} \exp(-l^3) l^{17} t^3 + 4.16667 \times 10^{-9} \\
 & \exp(-l^3) l^{20} t^3
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

De la même façon, on peut calculer :  $u_3(l, t)$ ,  $u_4(l, t)$ ,  $\dots$ ,  $u_m(l, t)$

Donc les moments sont obtenus comme on a vue dans le cas d'équation (3.5).

### 3.3.3 Noyau produit

Le noyau d'agrégation du produit est donné par  $\beta(l, l_1) = \beta_0 l^3 l_1^3$ , où  $\beta_0 = 0.01$ .

L'application de la méthode MIV donne :

$$\mathbf{u}_0(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = 3l^2 \exp(-l^3) \tag{3.9}$$

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = 3l^2 \exp(-l^3) - (0.03 \exp(-l^3) l^5 - 0.0025 \exp(-l^3) l^{11}) t \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_2(\mathbf{l}, \mathbf{t}) = & 0. + 3l^2 \exp(-l^3) - 1.30104 \times 10^{-18} \exp(-l^3) l^{11} t - (0.03 \exp(-l^3) l^5 - 0.0025 \\
 & \exp(-l^3) l^{11}) t - 8.13152 \times 10^{-20} \exp(-l^3) l^5 t^2 + 0.00015 \exp(-l^3) l^8 t^2 - 0.000025 \\
 & \exp(-l^3) l^{14} t^2 + 4.16667 \times 10^{-7} \exp(-l^3) l^{20} t^2 + 5.42101 \times 10^{-22} \exp(-l^3) l^8 t^3 - \\
 & 4.5175 \times 10^{-23} \exp(-l^3) l^{14} t^3 + 1.66667 \times 10^{-8} \exp(-l^3) l^{17} t^3 - 7.93651 \times 10^{-10} \\
 & \exp(-l^3) l^{23} t^3 + 5.51146 \times 10^{-12} \exp(-l^3) l^{29} t^3
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

De la même façon, on peut calculer :  $u_3(l, t)$ ,  $u_4(l, t)$ ,  $\dots$ ,  $u_m(l, t)$

Donc les moments sont obtenus comme on a vue dans le cas d'équation (3.5).

### 3.4 Solution analytique

Dans le cas d'agrégation, la population de particules,  $M_0(t)$ , diminue mais le volume total de particules,  $M_3(t)$ , reste constant tout au long du temps de traitement. Les cas de test suivants sont sélectionnés pour décrire les phénomènes d'agrégation. Ces problèmes choisis proviennent de [42, 43].

Au début, à :

$t = 0$ , la distribution exponentielle des tailles de particules est :

$$n(l, 0) = \frac{3N_0}{V_0} l^2 \exp\left(-\frac{l^3}{V_0}\right) \quad (3.12)$$

Les noyaux d'agrégation suivants sont étudiés,  $N_0 = 1m^{-3}$ ,  $V_0 = 1m^3$ .

#### 3.4.1 Noyau constant

La solution analytique pour un noyau constant est :

$$M_k(t) = M_k(0) \left(\frac{2}{2 + N_0\beta_0 t}\right)^{1-\frac{k}{3}} \quad (3.13)$$

#### 3.4.2 Noyau somme

La solution du bilan de population écrit en moments prend la forme suivante [45] :

$$n(l, t) = \frac{3V_0(1-\eta)}{l\sqrt{\eta}} \exp\left(-\frac{(1+\eta)l^3}{V_0}\right) I_1\left(\frac{2l^3\sqrt{\eta}}{V_0}\right) \quad (3.14)$$

Où  $\eta = 1 - \exp(-V_0\tau)$ ,  $\tau = \beta_0 V_0 N_0 t$

$I_1$  est la fonction modifiée de Bessel du premier type et d'ordre 1.

#### 3.4.3 Noyau produit

La solution du bilan de population écrit en moment prend la forme suivante [45] :

$$n(l, t) = \frac{3N_0 l^2}{V_0} \exp\left(-\frac{l^3(1+\tau)}{V_0}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\tau^k \left(\frac{l^3}{V_0}\right)^{3k}}{(k+1)! \Gamma(2k+2)}\right) \quad (3.15)$$

Où  $\tau = N_0\beta_0 V_0^2 t$

$\Gamma$  est la fonction gamma.

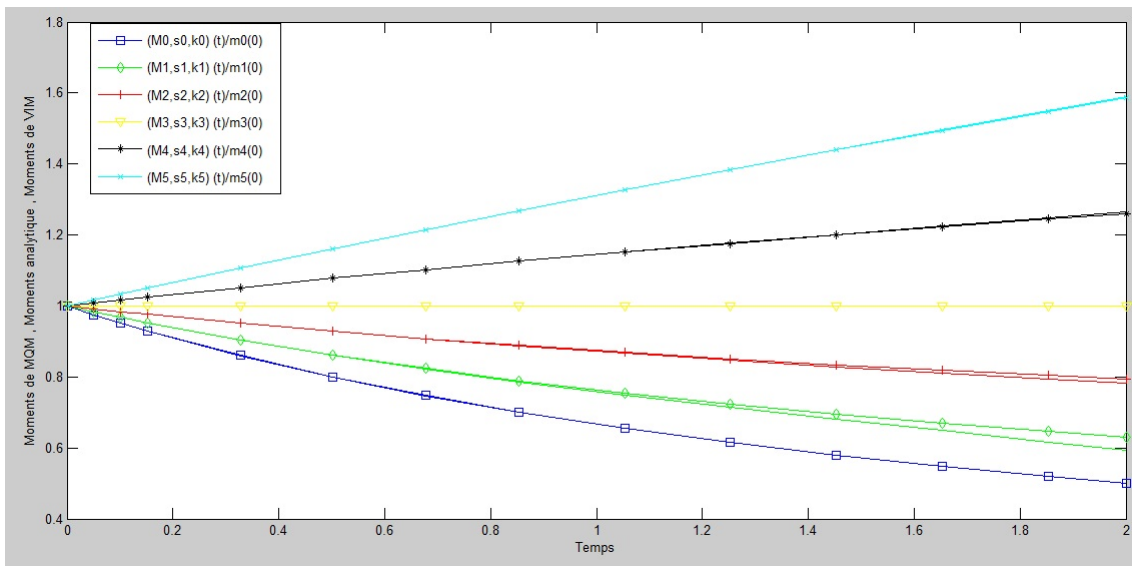
## 3.5 Comparaison entre MQM, MIV et solutions analytiques

Les résultats numériques de la méthode de quadrature sont validé par rapport aux solutions analytiques et aux solutions de la méthode d'itération variationnelle (MIV).

Trois cas ont été retenus, pour lesquels on compare toujours les moments calculés numériquement par rapport à la solution analytique et solution de MIV du bilan de population. Le noyau « constant », qui donne accès à une solution analytique très simple, le noyau « somme », qui permet de tester la sensibilité d'une méthode à la dépendance en diamètre, puis le noyau « produit ».

### 3.5.1 noyau constant

Les 6 premiers moments analytiques donnés par la formule (3.13) sont tracés avec les 6 premiers moments obtenues par MQM et MIV sur la **Figure 3.1**

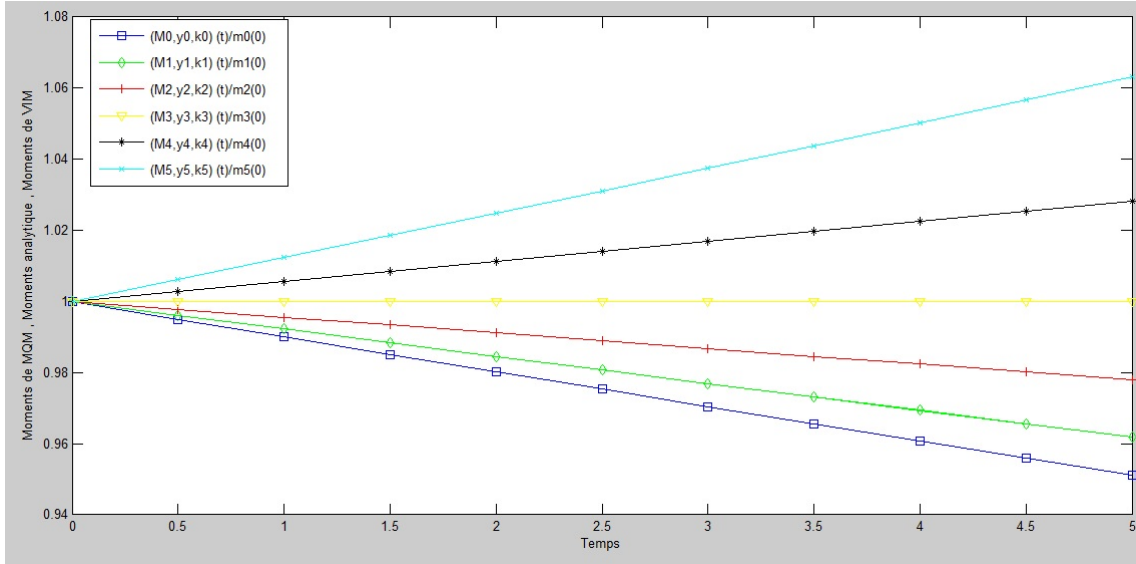


**Figure 3.1** : les 6 premiers moments pour un noyau constant pour MQM, MIV, analytique

Les méthodes fournissent des résultats confondus. Les moments ont également été normalisés par leur valeur initiale. On observe la décroissance de la population totale  $M_0$  et la surface  $M_2$ . Le volume total de particules  $M_3$  est invariable, comme attendu.

### 3.5.2 noyau somme

Les 6 premiers moments analytiques donnés par la formule (3.14) sont tracés avec les 6 premiers moments obtenues par MQM et MIV sur la **Figure 3.2**.

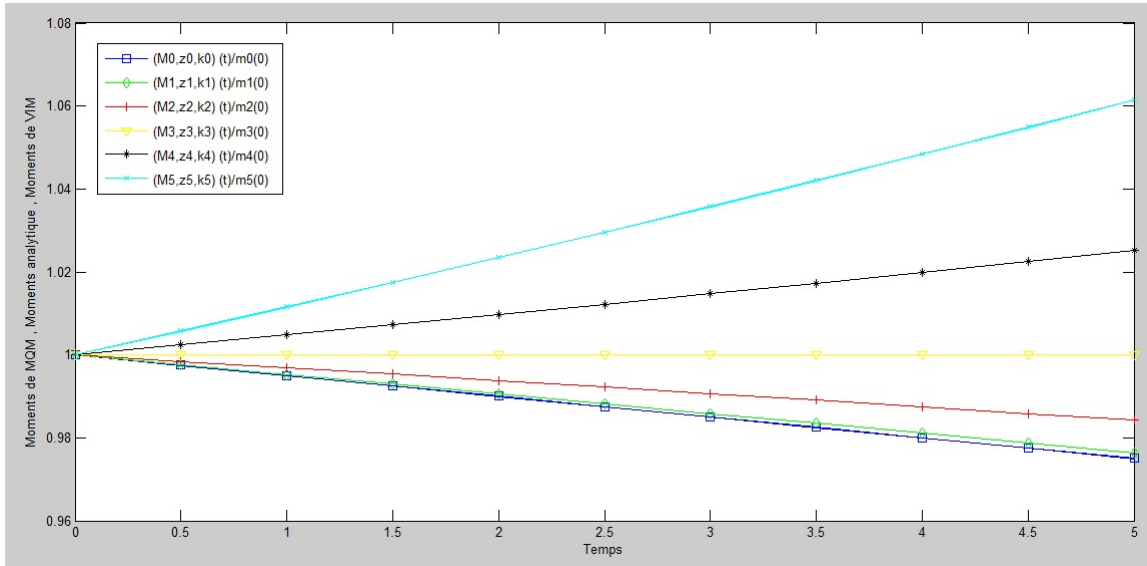


**Figure 3.2** : les 6 premiers moments pour un noyau somme pour MQM, MIV, analytique

Tous les paramètres sont identiques au cas du noyau somme. Les 6 premiers moments normalisés par leur valeur initiale  $M_k(0)$  sont représentés en fonction du temps. On observe que le moment d'ordre 3 correspondant au volume total de particules est bien constant et que la population totale des particules, le moment d'ordre 0, décroît rapidement en fonction du temps.

### 3.5.3 noyau produit

Les 6 premiers moments analytiques donnés par la formule (3.15) sont tracés avec les 6 premiers moments obtenues par MQM et MIV sur la **Figure 3.3**.



**Figure 3.3** : les 6 premiers moments pour un noyau produit pour MQM, MIV, analytique

Les moments sont normalisés par leur valeur initiale  $M_k(0)$  sont représentés en fonction du temps. On observe que le moment d'ordre 0 ( $M_0$ ) et le moment d'ordre 1 ( $M_1$ ) sont presque identiques et décroît rapidement en fonction du temps, Ce qui signifie que la population totale des particules et la longueur totale des particules sont presque égaux. Et On observe que le moment d'ordre 3 correspondant au volume total des particules est constant.

La représentation des figures nous donne une meilleure visualisation des résultats et nous pouvons ainsi constater que les solutions sont presque identiques, il y a quelques erreurs sont négligeable puisque ils sont très convergent.

# CONCLUSION GÉNÉRALE

---

## Conclusion Générale



# Références

---

## Références

## **Conclusion Générale :**

Les méthodes de quadrature des moments MQM et d'itération variationnelle MIV ont été appliquées avec succès à la résolution d'équation du bilan de population pour le phénomène d'agrégation des nanoparticules.

Pour assurer une meilleure précision du schéma, un nombre de quadrature de troisième ordre, utilisant les six premiers moments. A chaque pas de temps, au moins six moments sont nécessaires pour construire les résultats. Aussi quatre itérations étaient suffisantes pour avoir un résultat satisfaisant pour la méthode d'itération variationnelle.

La comparaison entre MQM, MIV et les solutions analytiques existantes dans la littérature a donné des résultats acceptables.

Enfin, on conclut que les deux méthodes utilisées sont robustes et efficaces et ont une capacité remarquable à résoudre l'équation de bilan de population.

## Références

- [1] Ophélie ZEYONS, Etudes des interactions physicochimiques et biologiques entre des nanoparticules manufacturées et des bactéries de l'environnement, Thèse de doctorat de l'université Paris VI - Pierre et Marie Curie, 2008.
- [2] J Kumar, G Warnecke, M Peglow, and S Heinrich. Comparison of numerical methods for solving population balance equations incorporating aggregation and breakage. *Powder Technology*, 189(2) :218–229, 2009.
- [3] Nandkishor K. Nere, Doraiswami Ramkrishna, Solution of population balance equation with pure aggregation in a fullydeveloped turbulent pipe flow, School of Chemical Engineering, Purdue University, West Lafayette, IN-47907, USA, Received 1 June 2004; accepted 1 December 2004, Available online 22 June 2005.
- [4] D. Ramkrishna, The status of population balances, *Rev. Chem. Eng.* 3 49-95 1985.
- [5] DJEGHBOUB WIDED, Nanoparticules d'or et d'argent déposées sur oxyde de cérium synthétisées sous irradiation, pour obtenir le diplôme de magister en physique, option rayonnement et applications 2010, Université Mentouri Constantine.
- [6] Camille CARLES, Nanotechnologies et Nanoparticules Leurs effets sur la santé, Staff du 16 mars 2011
- [7] INRS ND 2277 (2007). Production et utilisation industrielle des particules nanostructurées, *Editions INRS*.
- [8] Romain GUICHARD, Dynamique d'un Aérosol de Nanoparticules – Modélisation de la Coagulation et du Transport d'Agrégats, thèse de doctorat en Mécanique et Energétique 2013, Université de Lorraine.
- [9] Mallorie TOURBIN, caractérisation et comportement de suspensions concentrées de nanoparticules sous écoulement : application aux processus d'agrégation et de rupture, docteur de l'institut national polytechnique de toulouse, 2006

- [10] <http://www.atousante.com/risques-professionnels/nanoparticules-particules-ultra-fines/particularite-nanoparticules/definition-proprietes-nanoparticules/>
- [11] Marion DEVILLIERS, Modélisation et simulation numérique de la dynamique des nanoparticules appliquée aux atmosphères libres et confinées, pour l'obtention du titre de Docteur de l'université Paris-Est, 2013
- [12] G.K. Reynolds, J.S. Fu, Y.S. Cheong, M.J. Hounslow, A.D. Salman, Breakage in granulation: a review, *Chem. Eng. Sci.* 60 (2005) 3969–3992.
- [13] Hounslow, M. J., (1990). A discretized population balance for continuous systems at steadystate. *AIChE J.* 36, 106-116.
- [14] K.J. Valentas, A.R. Amundson, Breakage and coalescence in dispersed phase systems, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 5 (1966) 533–542.
- [15] Y.P. Gokhale, R. Kumar, J. Kumar, W. Hintz, G. Warnecke, J. Tomas, Disintegration process of surface stabilized sol–gel tio<sub>2</sub> nanoparticles by population balances, *Chem. Eng. Sci.* 64 (2009) 5302–5307.
- [16] Shamsul Qamar. Modeling and simulation of population balances for particulate processes. PhD thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsbibliothek, 2008.
- [17] Safyan Mukhtar, Numerical solutions of population balance models in dispersed systems, COMSATS Institute of Information Technology Islamabad – Pakistan, Fall, 2011
- [18] Auffan, M.; (conférencière); Denoyel, R.; Beurroies, I.; Rose, J.; Masion, A.; Bottero, J.-Y. Comportement des nanomatériaux dans l'environnement: effet de la taille, forme, réactivité de surface sur la dissolution. Journées Scientifiques C'Nano PACA 2012, Juin 2012, Porquerolles.

- [19] A.A. Adetayo, J.D. Litster, S.E. Pratsinis, B.J. Ennis, Population balance modelling of drum granulation of materials with wide size distribution, *Powder Technol.* 82 (1995) 37–49.
- [20] J.D. Litster, Scaleup of wet granulation processes: science not art, *Powder Technol.* 130 (2003) 35–40.
- [21] M.J. Hounslow, R.L. Ryall, V.R. Marshall, « A discretized population balance for nucleation, growth and aggregation (1988) ». *AIChE* 34, p. 1821.
- [22] J.D. Lister, D.J. Smit, M.J. Hounslow, Adjustable discretized population balance for growth and aggregation, *AIChE J.* 41 (1995) 591–603.
- [23] Adomian, A review of the decomposition method in applied mathematics, *J. Math. Anal. Appl.* 135 (1988) 501–544.
- [24] Letica FERNANDEZ MOGUEL Ingeniero Químico Industrial. Modélisation par CFD De la précipitation du carbonate de baryum en réacteur à lit fluidisé. Ecole Doctorale : Sciences et ingénierie des ressources, procédés, produits et environnement 2009.
- [25] Senouci.S, simulation numérique de la population des gouttes pour les systèmes discontinus et continus, doctorat en sciences en chimie industrielle 2016, Université Mohamed Khider – Biskra
- [26] Sanjeev Kumar and D Ramakrishna. On the solution of population balance equations by discretization—i. a fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science*, 51(8) :1311–1332, 1996.
- [27] Shamsul Qamar. Modeling and simulation of population balances for particulate processes. PhD thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsbibliothek 2008.
- [28] Sanjeev Kumar and D Ramakrishna. On the solution of population balance equations by discretization—ii. a moving pivot technique. *Chemical Engineering Science*, 51(8) :1333–1342, 1996.

- [29] Abdenour Amokrane. Étude et modélisation du comportement de la phase dispersée dans une colonne pulsée : application à un procédé de précipitation oxalique. PhD thesis, Université Claude Bernard-Lyon I, 2014.
- [30] Kangtaek Lee and Themis Matsoukas. Simultaneous coagulation and break-up using constant-n monte carlo. *Powder Technology*, 110(1) :82–89, 2000.
- [31] Daniel E Rosner and Suyuan Yu. Mc simulation of aerosol aggregation and simultaneous spheroidization. *AIChE journal*, 47(3) :545–561, 2001.
- [32] Neal Morgan, Clive Wells, Markus Kraft, and Wolfgang Wagner. Modelling nanoparticle dynamics : coagulation, sintering, particle inception and surface growth. *Combustion Theory and Modelling*, 9(3) :449–461, 2005.
- [33] Matthew Smith and Themis Matsoukas. Constant-number monte carlo simulation of population balances. *Chemical Engineering Science*, 53(9) :1777–1786, 1998.
- [34] Jitendra Kumar. Numerical approximations of population balance equations in particulate systems. PhD thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsbibliothek, 2006.
- [35] Daniele L Marchisio, Jesse T Pikturna, Rodney O Fox, R Dennis Vigil, and Antonello A Barresi. Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(5) :1266–1276, 2003.
- [36] Daniele L Marchisio, R Dennis Vigil, and Rodney O Fox. Implementation of the quadrature method of moments in cfd codes for aggregation–breakage problems. *Chemical Engineering Science*, 58(15) :3337–3351, 2003.
- [37] R.B Diemer, J.H. Oston. A moment methodology for coagulation and breakage problem: part 2- moment models and distribution reconstruction, *Chemical engineering science* 57 (12): 2211, 2002.

- [38] Mc.Graw, Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments, aerosol science and technology 27, 1997.
- [39] Abdelaziz SABA, Méthode de décomposition et contrôlabilité d'un système non linéaire, Magistère en Mathématiques Option : Mathématiques appliquées, Université Mentouri Constantine.
- [40] B. LEMOUEDDA, M. R. SARI, M. KEZZAR, Approximation Analytique de l'effet d'un Champ Magnétique Externe sur l'Écoulement de Jeffery-Hamel, Département de Génie Mécanique, Université 20 Aout 1955 de Skikda BP 26, 21000 Algérie
- [41] Djelloul ZIANE, Méthode combinée des perturbations HPM et VIM pour la résolution des equations différentielle ordinaires et EDP d'ordre fractionnaire, thèse de doctorat 2016, spécialité : EDP-Analyse Numérique, Université d'ORAN 1, AHMED BEN BELLA
- [42] Su, J., Gu, Z., Li, Y., Feng, S., Xu, X.Y., (2007). Solution of population balance equation using quadrature method of moments with an adjustable factor. *Chem. Eng. Sci.* 62, 5897-5911.
- [43] Su, J., Gu, Z., Li, Y., Feng, S., Xu, X.Y., (2008). An adaptive direct quadrature method of moment for population balance equations. *AIChE J.* 54, 2872-2887.
- [44] Marchisio, D.L., Piktorna, J.T., Fox, R.O., Vigil, R.D., Barresi, A.A., (2003). Quadrature method of moments for population balance equations. *AIChE J.* 49, 1266-1276.
- [45] Scott, W.T, (1968). Analytic studies of cloud droplet coalescence I. *J. Atmos. Sci.* 25,54- 65.



## **Résumé:**

Ce travail présente une technique de discrétisation pour l'équation dynamique du bilan de population pour le phénomène d'agrégation des nanoparticules basée sur la méthode de quadrature des moments (MQM) et une méthode semi-analytique nommée méthode d'itération variationnelle (MIV).

Les résultats obtenus par ces deux méthodes sont acceptables par comparaison aux solutions exactes.

Les tests montrent que les deux méthodes utilisées sont robustes et efficaces et ont une capacité remarquable à résoudre l'équation dynamique de bilan de population.

**Mots clé:** bilan de population, agrégation, méthode de quadrature des moments, méthode d'itération variationnelle.

## **Abstract**

This work presents a discretization technique for the dynamic equation of the population balance for the nanoparticles aggregation phenomenon based on the quadrature method of moments (QMM) and a semi-analytical method called variational iteration method (VIM).

The results obtained by these two methods are acceptable in comparison with the exact solutions.

The tests show that the two methods used are robust and effective and have a remarkable ability to solve the dynamic population balance equation.

**Key words:** population balance, aggregation, quadrature method of moments, variational iteration method.