

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 en LMD en

Chimie Industrielle

Option: Génie des Procédés et Environnement

**RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DU BILAN DE
POPULATION
POUR LES SYSTÈMES CONTINUS ET
DISCONTINUS**

Présentée par :

Barhoum Zineb

Soutenue publiquement le 25 /05/ 2016

Devant le jury composé de :

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

Je dédie cette thèse à mes parents

A mes sœurs et mes frères

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 long et dur travail ;
- En premier lieu je tiens à remercier vivement mon directeur de thèse Monsieur **HASSEINE Abdelmalek** Professeur à l'Université de Biskra pour : sa disponibilité, ses conseils avisés et pour la confiance qu'il m'a accordés tout au long de ma formation. Il a guidé mes pas dans la recherche depuis la Licence, le Master et maintenant le Doctorat, il m'a fait profiter de son expérience et de sa rigueur, ce fut un grand plaisir de travailler avec lui. Qu'il trouve ici l'expression de ma plus profonde gratitude et de mon admiration pour ses qualités scientifiques, Merci encore Monsieur **HASSEINE Abdelmalek**.
- Je tiens aussi à remercier Monsieur **DEBABECHE Mahmoud** professeur à l'université de Biskra pour m'avoir fait un grand honneur et plaisir en acceptant de présider le jury.
- Je remercie aussi Messieurs **KORICHI Mourad** Maître de conférence à l'Université de Ouargla et **MADANI Hakim** Maître de conférence à l'Université de Batna, **MERZOUGUI Abdelkrim** Maître de conférence à l'Université de Biskra, **NEDJAR Zohir** Maître de conférence à l'Université de Biskra, pour m'avoir fait honneur et plaisir en acceptant d'examiner ce travail ;
- Je ne saurais oublier toutes les autres personnes qui, plus ou moins directement, ont contribué aussi bien à la réussite de ce travail.

Résumé

La rupture dans les procédés discontinus et continus a atteint un grand intérêt en génie chimique et granulation à partir du point de vue des perspectives du processus et de la qualité du produit. Le processus de rupture d'un granulé humide dans un mélangeur à cisaillement élevé influencera et pourra contrôler la distribution finale des tailles des granulés.

Dans ce travail, nous avons développé des solutions analytiques de la rupture des particules à l'aide de l'équation de bilan de population dans les systèmes d'écoulement continu et discontinu.

Pour obtenir des solutions explicites, nous approximations les mécanismes de rupture de particules avec des formes fonctionnelles hypothétiques pour des fréquences de rupture. Ce nouveau cadre de travail pour résoudre les équations de bilan de population pour les systèmes d'écoulement continu et discontinu proposé dans ce travail utilise la méthode de décomposition d'Adomian (ADM) et la méthode d'itération variationnelle (VIM).

Ces méthodes semi-analytiques surmontent les difficultés cruciales de discrétisation numérique et de stabilité qui caractérisent souvent les solutions précédentes des équations de bilan de population. Les résultats obtenus montrent dans tous les cas que les distributions de taille de particule prédit convergent exactement sous une forme continue vers les solutions analytiques en utilisant les deux méthodes.

Mots clés: Équation de bilan de population, Rupture, méthode de décomposition d'Adomian, méthode d'itération variationnelle.

Abstract

The breakage in batch and continuous systems has attained high interest in chemical engineering and granulation from a process and from a product quality perspective. The wet granule breakage process in a high shear mixer will influence and may control the final granule size distribution.

In this work, we developed analytical solutions of the particle breakage using the population balance equation (PBEs) in batch and continuous flow systems. To allow explicit solutions, we approximate particle breakage mechanisms with assumed functional forms for breakage frequencies. This new framework for solving (PBEs) for batch and continuous flow systems proposed in this work uses the Adomian decomposition method (ADM) and the variational iteration method (VIM).

These semi-analytical methods overcome the crucial difficulties of numerical discretization and stability that often characterize previous solutions in of the PBEs. The results obtained in all cases show that the predicted particle size distributions converge exactly in a continuous form to that of the analytical solutions using the two methods.

Key words : *Population balance equation, Breakage, Adomian decomposition method, Variational iteration method.*

الملخص

الكسر في النظامين المستمرة و الغير مستمر حقق فوائد عظيمة في الهندسة الكيميائية و عملية التحبيب و ذلك من خلال جودة المنتج. إن عملية الكسر الحبيبات الرطبة في خلاط الكسر لديها تأثير كبير في السيطرة على الحجم و التوزيع النهائي للحبيبات.

في هذه الأطروحة وضعنا الحلول التحليلية لكسر الجسيمات باستخدام معادلة التوازن السكاني (PBEs) في النظامين من التدفق المستمر و التدفق الغير مستمر. و قربنا آليات كسر الجسيمات مع أشكال الوظيفية المفترضة للترددات الكسر لإعطاء حلول واضحة. في هذا الإطار الجديد لحل معادلة التوازن السكاني (PBEs) في النظامين من التدفق المستمر و التدفق الغير مستمر المقترحين ولقد استخدمنا طريقتين رياضيتين تحليلين طريقة ادوميون (MDA) وطريقة التكرار التغييري (MIV). هذان الأسلوبان الشبه التحليليان مكننا من التغلب على الصعوبات الحاسمة للتفرد العددي والاستقرار الذي غالبا ما يميز الحلول السابقة لمعادلة التوازن السكاني.

النتائج المتحصل عليها في جميع الحالات تبين أن التنبؤ بتوزيع حجم الجسيمات يتمشى بالضبط و بشكل مستمر مع الحلول التحليلية باستخدام كلتا الطريقتين.

الكلمات المفتاحية: معادلة التوازن السكاني، الكسر ، ادوميون، التكرار التغييري.

Table des matières

Introduction générale	1
I Introduction	1
II Objectif de ce travail	4
III Plan de Thèse	5
1 Rappels Bibliographiques : Bilan de population	6
1.1 Introduction	7
1.2 Agrégation	8
1.3 Rupture	9
1.4 Nucléation	10
1.5 Croissance	10
1.6 Équation du bilan de population	11
1.6.1 Transformation de l'équation de bilan de population en fonction de la longueur	12
1.6.2 Équation du bilan de population pour la croissance et la nucléation	19
1.6.3 Équation du bilan de population pour la dissolution	20
1.6.4 Équation du bilan de population pour l'agrégation	21
1.6.5 Équation du bilan de population pour la rupture	22

1.7	Fonction des moments	23
1.8	Conclusion	24
2	Méthodes de résolution de l'équation du bilan de population	26
2.1	Introduction	26
2.2	Méthodes numériques	27
2.2.1	Méthodes de Monte Carlo	27
2.2.2	Méthodes des classes	29
2.2.2.1	Méthode du pivot fixe	29
2.2.2.2	Méthode de la moyenne de la cellule	31
2.2.2.3	Méthode de Galerkin	37
2.2.3	Méthodes des moments	40
2.2.3.1	Méthode de quadrature de moments	41
2.2.3.2	Méthode de quadrature fixe de moments	46
2.2.3.3	Méthode de quadrature directe des moments	50
2.2.3.4	Équivalence entre MQDMO et MQMO	57
2.3	Méthodes semi-analytiques	58
2.3.1	Méthode de décomposition d'Adomian	58
2.3.2	La méthode d'itération variationnelle	61
2.3.3	Méthode de perturbation homotopique	62
2.4	Conclusion	65
3	Résultats et discussion	68
3.1	Introduction	68
3.2	Rupture des particules dans les systèmes discontinus	69
3.2.1	Cas 1. Fonction de rupture parabolique et $n(\mathbf{v}, 0) = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{b})$	69
3.2.1.1	Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)	70
3.2.1.2	Méthode d'itération variationnelle de He	71
3.2.2	Cas 2. Rupture binaire parabolique avec $n(v, 0) = e^{-v}$	73

3.3	Rupture des particules dans les systèmes à écoulement continu	75
3.3.1	Cas 1. Rupture avec distribution de particules filles uniforme et $\Gamma(v') = v$	75
3.3.1.1	Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)	76
3.3.1.2	Méthode d'itération variationnelle de He (MIV)	77
3.3.2	Cas 2. Rupture avec une distribution des particules fille uniforme et $\Gamma(v') = v^2$	79
3.3.2.1	Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)	79
3.3.2.2	Méthode d'itération variationnelle de He (MIV)	80
3.4	Conclusion	82
	Conclusion générale	83
	Bibliographie	85
A	Les Fonctions mathématique	100
A.1	Fonction de Dirac	100
A.2	Fonction de heavisideTheta	100
A.3	Fonction de Gamma	101
A.4	Fonction de Unit Step	101
B	La méthode de quadrature des moments	102
B.1	Transformation de coordonnées internes multiples	102
B.2	Méthode de quadrature directe des moments pour EBP bivariables	104
B.3	Méthode de quadrature directe des moments pour EBP multivariée	113
C	Notations	114
D	Article : Analytical solutions of the particle breakage equation by the Adomian decomposition and the variational iteration methods	117

Table des figures

.1	Colonnes à bulles	3
.2	Lit fluidisé	3
.3	Combustion de pulvérisation	3
.4	Transport de particules dans l’atmosphère	3
.5	Hélicoptère brownout	3
.6	Eruptions volcaniques	3
1.1	Granulation en lit fluidisé [1]	8
1.2	Représentation schématique du processus de différentes particules [2]	13
2.1	L’intervalle de la taille discrétisé	32
2.2	Le volume moyen des particules nouveau nés [3].	34
2.3	L’allocation des particules en x_i de toutes les cellules possibles [3].	36
3.1	L’effet de la troncature de la solution en utilisant $n = 1 - 5$ itérations (n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) et la solution exacte (SE en ligne continue de l’équa- tion (3.8) de la fonction de densité en nombre pour la rupture de particules.	72
3.2	L’erreur relative entre la solution approchée (SA) et la solution exacte(SE).	72

3.3	La densité en nombre des particules avec une distribution parabolique de particules filles pour trois valeurs de $h = 0, 1, 2$ et comparaisons avec les solutions analytiques [4] pour $\Gamma(v') = v^2$	74
3.4	La densité en nombre des particules avec une distribution parabolique de particules filles pour trois valeurs de $h = 0, 1, 2$ et comparaisons avec les solutions analytiques [4] pour $\Gamma(v') = v$	74
3.5	Effet de la troncature de la série sur la solution en utilisant la série pour $n = 1 - 6$ itérations $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6)$ et comparaison à la solution exacte donnée par l'équation (3.32) (<i>SE</i> ligne continue) pour une fonction de distribution parabolique des particules filles dans un système d'écoulement continu.	78
3.6	L'erreur relative entre la solution approchée (<i>SA</i>) et la solution exacte(<i>SE</i>).	78
3.7	l'effet de la troncature de la série sur la solution en utilisant la série pour $n = 1 - 6$ itérations $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6)$ et comparaison à la solution exacte donnée par l'équation (3.42) (<i>SE</i> ligne continue) pour une fonction de distribution paraboliques des particules filles dans un système continu.	81
3.8	L'erreur relative entre la solution approchée (<i>SA</i>) et la solution exacte(<i>SE</i>).	81

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Sommaire

I	Introduction	1
II	Objectif de ce travail	4
III	Plan de Thèse	5

I Introduction

Les systèmes dispersés, comme les émulsions, les mousses de suspensions ou de poudres, sont généralement trouvés dans plusieurs branches d'industrie, allant des produits chimiques pour cosmétiques, pharmaceutiques, alimentaires et des matériaux innovants comme le métal, et des mousses céramiques. Les systèmes dispersés typiques (processus de formation de particules) comprennent la cristallisation, la combustion, la granulation, la précipitation, la polymérisation, et d'autres techniques d'assemblage des particules. La distribution de taille de particule et les micro-comportements d'une phase dispersée, par exemple la rupture des gouttelettes ou des bulles et la coalescence, peuvent modifier considérablement les caractéristiques d'écoulement.

L'écoulement dans des systèmes dispersés se posent dans de nombreux types d'équipements industriels utilisés en génie chimique. Cela comprend, par exemple, les colonnes

à bulles (Figure .1), les lits fluidisés (Figure .2), les réacteurs flammes, et l'équipement pour l'extraction liquide-liquide. La compréhension et la prédiction des écoulements dans des systèmes dispersés sont essentiels dans la conception efficace, l'optimisation et la mise à l'échelle en place de tels systèmes industriels. Ils sont également fréquents dans d'autres régions, comme la combustion de pulvérisation (Figure .3), le transport de particules dans l'atmosphère (Figure .4), l'hélicoptère brownout (Figure .5), et les éruptions volcaniques (Figure .6). Un caractère commun des écoulements dans des systèmes dispersés importants est qu'il est possible d'identifier une phase continue et une phase dispersée. Dans le contexte des écoulements des systèmes dispersés, ce dernier signifie que l'un ou plusieurs des phases est composée d'entités discrètes clairement identifiables comme particules solides, des gouttes ou des bulles et les propriétés des entités en phase dispersée peut varier pour chaque entité, par exemple, particules peuvent avoir différentes tailles, densités, compositions.

Par conséquent, les prévisions précises des phases dispersées sont importantes pour comprendre le comportement global du système physique concerné. Un modèle à deux norme des fluides n'est pas en mesure de fournir des informations sur la distribution de taille de particule (DTP) sur la micro-échelle, donc, de meilleurs modèles mathématiques sont nécessaires pour décrire ces phénomènes à la large gamme d'échelles spatiales et temporelles. Un modèle mathématique précise aidera à comprendre, optimiser et contrôler le comportement des mécanismes impliqués. En outre, les récents progrès en puissance des ordinateurs ont offert des possibilités de l'utilisation de méthodes numériques modernes pour l'analyse les particules dans systèmes dispersés complexes.

L'analyse d'un système de particules cherche à synthétiser le comportement de la population de particules et de son environnement par le comportement des particules individuelles dans leur environnement local. Il y est décrit par la densité d'une variable extensive approprié, généralement le nombre de particules, mais parfois (avec plus de raison) par d'autres variables telles que la masse ou le volume des particules. Les équations de transport habituel exprimant la lois de conservation pour les systèmes matériels



FIGURE .1: Colonnes à bulles



FIGURE .2: Lit fluidisé



FIGURE .3: Combustion de pulvérisation



FIGURE .4: Transport de particules dans l'atmosphère



FIGURE .5: Hélicoptère brownout



FIGURE .6: Eruptions volcaniques

appliquée au comportement des particules simples [5].

L'équation du bilan de population est utilisée dans un certain nombre des domaines de l'ingénierie tels que la granulation [6–9], la cristallisation [10, 11], le lit fluidisé [12, 13], les réacteurs [14, 15], le broyage [16], la polymérisation [17–19], la génie chimique [20, 21], l'émulsification [22], la floculation [23], l'aérosol [24], la biologie [25] et le contrôle de processus [26].

II Objectif de ce travail

L'objectif de ce travail est de résoudre certaines formes de l'équation intégral-différentielle partielle utilisant deux nouvelles techniques : la méthode de décomposition Adomian et la méthode d'itération variationnelle. 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.

La solution, lorsqu'elle existe par ces méthodes, se trouve sous la forme d'une série qui converge rapidement de telle sorte que les coordonnées spatiales et temporelles ne sont pas discrétisées. Bien sûr, certains problèmes restent ouverts. Par exemple, la convergence pratique de la série de décomposition d'Adomian peut être assurée même si les hypothèses de méthodes connues ne sont pas satisfaites. Cela signifie qu'il existe encore des possibilités pour des études plus théoriques de convergence pour des situations plus générales. Par ailleurs, ce n'est pas toujours facile de tenir compte des conditions aux limites pour des domaines complexes.

III Plan de Thèse

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 manuscrit est constitué de trois chapitres :

- Le premier chapitre est constitué d'une revue bibliographique donnant une présentation générale sur : des définitions de l'agrégation, la rupture, la croissance et la nucléation. Puis nous présentons l'équation du bilan de population dans la section, pour la croissance, l'agrégation et la rupture. Enfin nous définissons les fonctions des moments.
- Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des méthodes numériques de résolution de l'équation de bilan de population telles que : les méthodes de Monte Carlo, les méthodes des classes et les méthodes des moments et quelques méthodes semi-analytiques telles que : la méthode de décomposition d'Adomian, la méthode d'itération variationnelle, et la méthode de perturbation homotopique.
- Le troisième chapitre présente l'application des deux méthodes semi-analytique, la méthode de décomposition d'Adomian, et la méthode d'itération variationnelle pour résoudre l'équation du bilan de population pour la rupture dans les systèmes d'écoulement discontinu et continu.
- La conclusion générale récapitule tous les résultats auxquels cette étude a aboutis ainsi que les perspectives qui peuvent être envisagées pour développer ce travail.

Rappels Bibliographiques : Bilan de population

Sommaire

1.1 Introduction	7
1.2 Agrégation	8
1.3 Rupture	9
1.4 Nucléation	10
1.5 Croissance	10
1.6 Équation du bilan de population	11
1.7 Fonction des moments	23
1.8 Conclusion	24

1.1 Introduction

Le bilan de population est bien connu dans diverses branches de l'ingénierie, y compris la granulation, la cristallisation, le broyage, le processus de précipitation, la polymérisation, l'aérosol et l'émulsion. Ces processus sont caractérisés par la présence d'une phase continue et une phase dispersée constituée de particules solides, gouttelettes ou bulles, avec une distribution de propriétés. 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 que 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 [1](voir Figure 1.1). 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 (voir Figure 1.1). Une brève description des mécanismes d'agrégation et de rupture est donnée ci-dessous.

Dans ce chapitre nous allons introduire tout d'abord, les bases théoriques nécessaires à la compréhension des notions fondamentales dans l'équation du bilan de population à savoir l'agrégation dans la section 1.2, la rupture dans la section 1.3, dans la nucléation section 1.4, et dans la section 1.5 la croissance, puis on va commencer de présenter l'équation du bilan de population dans la section 1.6, et enfin nous allons définir la fonction des moments dans la section 1.7.

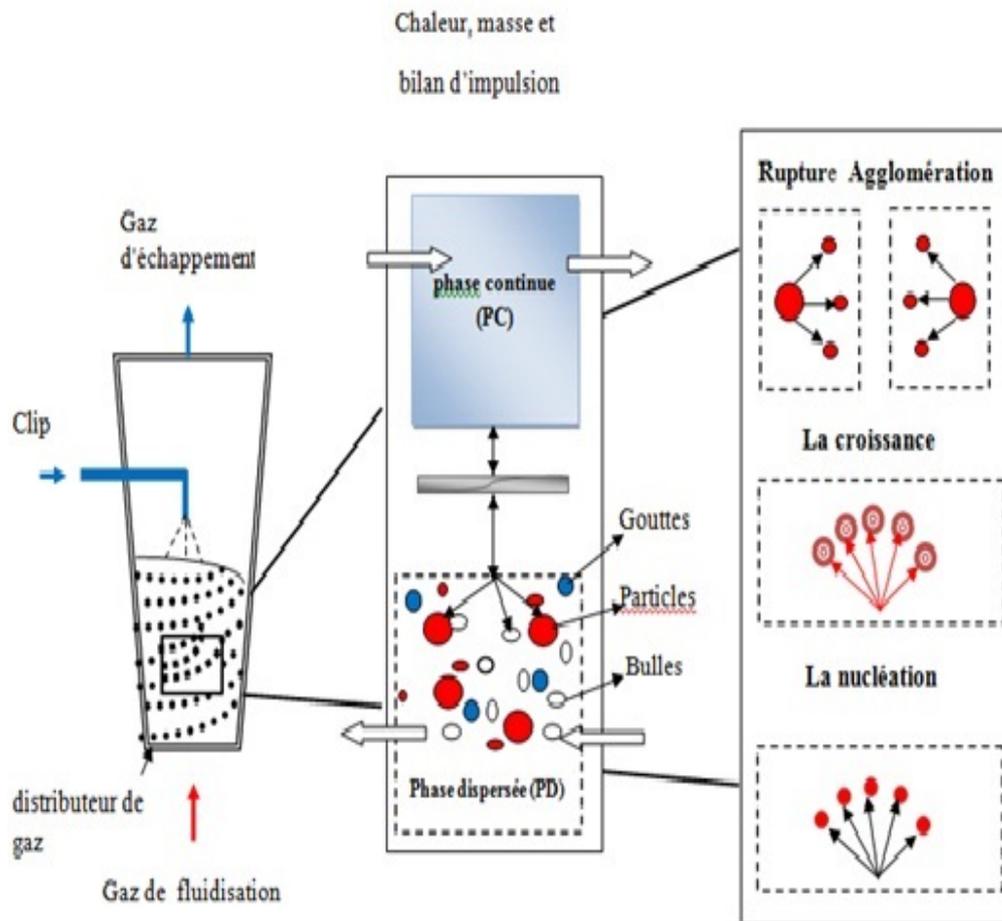


FIGURE 1.1: Granulation en lit fluidisé [1]

1.2 Agrégation

Agrégation ou agglomération est un processus où deux ou plusieurs particules se combinent pour former une grosse particule. Le nombre total de particules réduit dans un processus d'agrégation en masse reste conservée. Ce processus est plus fréquent dans les industries réduire la transformation de poudre. 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 [1,3]. Une représentation schématique de l'agrégation est donné dans la figure 1.1.

Agglomération dans le lit fluidisé a lieu, si, après le séchage des ponts liquides, des ponts solides se présentent. Ceci est accompli par l'addition délibérée d'un agent liant soluble. Le liquide lie les particules ensemble par une combinaison de forces capillaires et visqueux jusqu'à ce que plus de liaisons permanentes sont formées par séchage ou frittage subséquent. Il y a un grand nombre de modèles théoriques disponibles dans la littérature permettant de prédire si oui ou non deux particules en collision colleront ensemble. Ces modèles impliquent un large éventail de différentes hypothèses sur les propriétés mécaniques des particules et les caractéristiques du système [1,3].

L'agrégation de gouttelettes de liquide est appelée coagulation. Alors que dans l'agglomération des particules solides des particules d'origine restent intacts, dans la coagulation des gouttelettes d'origine deviennent une partie indiscernables des gouttelettes nouvellement formées [1,3,27].

1.3 Rupture

Dans un processus de rupture, les particules se brisent en deux ou plusieurs fragments. La rupture a un effet significatif sur le nombre de particules. Le nombre total de particules dans un procédé de rupture augmente alors que la masse totale reste constante.

Pour une description détaillée du processus de rupture, les lecteurs sont appelés à consulter Iveson et coll [28]. La rupture de granulés humides peut contrôler la distribution de taille du granulé finale, en particulier dans des granulateurs à cisaillement élevé. Dans certaines circonstances, la rupture peut être utilisée pour limiter la taille maximale des granulés ou pour aider à distribuer un liant visqueux. D'autre part, l'attrition des granulés secs conduit à la génération [1].

1.4 Nucléation

Le processus de nucléation introduit de nouvelles particules (noyaux) dans le système en mélangeant deux ou plus de matière non particulaire 1.1 Grâce à ce procédé, la population de particules dans le système augmente. La nucléation peut être divisée en deux catégories, telles que nucléations primaires et secondaires, et que la nucléation primaire est subdivisée en deux catégories de nucléations à savoir : homogènes et hétérogènes. La nucléation homogène se produit dans la phase liquide dépourvue de particules. Une grande quantité de petites particules peuvent être produites par ce type de nucléation. Il est communément observé dans le relargage, 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 tout processus de particules précédentes ou tout pore dans le tube qui a un peu de poussière à l'intérieur, etc. La nucléation secondaire est une nucléation hétérogène induite par des particules existantes [3, 29].

1.5 Croissance

Les particules se développent quand une matière non particulaire ajoutée à la surface d'une particule. La croissance n'a aucun effet sur le nombre de particules mais le volume total des particules augmente. La taille d'une particule augmente de façon continue dans ce processus. Une représentation graphique de la croissance est prévue dans la figure 1.1.

Dans un lit fluidisé, un liquide (suspension, en solution ou masse fondue) est pulvérisé sur les particules solides par une buse d'injection sous la forme de gouttes. Une partie des gouttes est déposées sur les particules et est distribuée par propagation. Le transfert de chaleur et de masse à forte intensité, en raison du courant du gaz environnant, se traduit par une augmentation rapide de la dureté du film fluide par séchage, si le produit de départ est une solution ou une masse en fusion, ou par refroidissement, si la pulvérisation

sur produit est fondue .

Le solvant évapore à chaud, le gaz de fluidisation insaturé, et les particules solides restantes grossir par pulvérisation multiple, l'étalement et le durcissement, voir par exemple Heinrich et coll [30]. Ce phénomène est appelée la croissance [1, 3].

1.6 Équation du bilan de population

La population de particules est supposée être suffisamment grande pour que les variations aléatoires dans le comportement des particules pourraient être moyennées [5]. En général, l'EBP est une équation partielle intégró-différentielle non linéaire et peut être représentée comme :

$$\frac{\partial f(X, t)}{\partial t} = - \nabla \cdot (Vf)(t, v) + B(X, t) - D(X, t). \quad (1.1)$$

Où f : décrit une fonction de distribution multidimensionnelle.

$V = dX/dt$ représente la vitesse.

X : le vecteur d'état de particules est donnée 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 de particules est décrite par une fonction de densité en nombre $n(X, t)$ en fonction du temps t et en 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 [2].

En raison des mécanismes mentionnés ci-dessus (agrégation, rupture, croissance, et

nucléation) les particules modifient leurs propriétés, donc le modèle mathématique qui est nommé le bilan de population est nécessaire pour décrire la variation de la distribution de propriété de la particule.

Le bilan de population est l'évolution dynamique de la distribution d'une ou plusieurs propriétés.

Puisque on traite principalement avec les problèmes de l'agrégation ou de la rupture, il est commode de considérer le volume comme une mesure de la taille. D'autre part comme la croissance pure est un processus linéaire, la mesure de longueur ou bien du diamètre est plus préférable. Jusqu'à preuve du contraire, nous avons supposé que la densité des particules solides est constante, alors la masse d'une particule peut être remplacé par le volume de la particule [2].

1.6.1 Transformation de l'équation de bilan de population en fonction de la longueur

Dans cette étude, nous avons étudié les modèles du bilan de population basés sur le volume au lieu des modèles de bilan de la population en fonction de longueur. Dans des nombreuses applications telle que la cristallisation, la longueur des particules (taille) a une signification importante dans l'analyse du moment au lieu de volume.

L'équation dynamique du bilan de la population (EBP) en fonction du volume $n := n(v, t) \geq 0$ et le volume de particules $v > 0$ au temps $t \geq 0$. En générale l'EBP unidimensionnelle pour un système bien mélangé est donnée [20, 31–33] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \underbrace{Q_e(v, t)}_{\text{le flux d'entrée}} - \underbrace{Q_s(v, t)}_{\text{le flux de sortie}} - \underbrace{\frac{\partial[Gn(v, t)]}{\partial v}}_{\text{la croissance}} + \underbrace{Q_{nuc}^+(v, t)}_{\text{la nucléation}} \\ & - \underbrace{Q_{diss}^-(v, t)}_{\text{la dissolution}} + \underbrace{Q_{agr}^\pm(v, t)}_{\text{l'agrégation}} + \underbrace{Q_{rup}^\pm(v, t)}_{\text{la rupture}}, \text{ Avec } \in \mathbb{R}_+^2 \end{aligned} \quad (1.2)$$

Où

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

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

v et t : le volume et le temps respectivement.

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

Q_{agr}^\pm et Q_{rup}^\pm : représenter 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 :

$$\underbrace{Q_e(v, t)}_{\text{l'entrée}} = \frac{\dot{v}_e}{v} n_e(v, t), \quad \underbrace{Q_s(v, t)}_{\text{la sortie}} = \frac{\dot{v}_s}{v} n_s(v, t), \quad (1.3)$$

Avec \dot{v}_e et \dot{v}_s :représenter les débits volumétrique d'entrée et de sortie à partir un système volumétrique v , et $n_e(v, t)$ et $n_s(v, t)$ sont les densités en nombre de particules entrant et sortant voir la figure1.2.

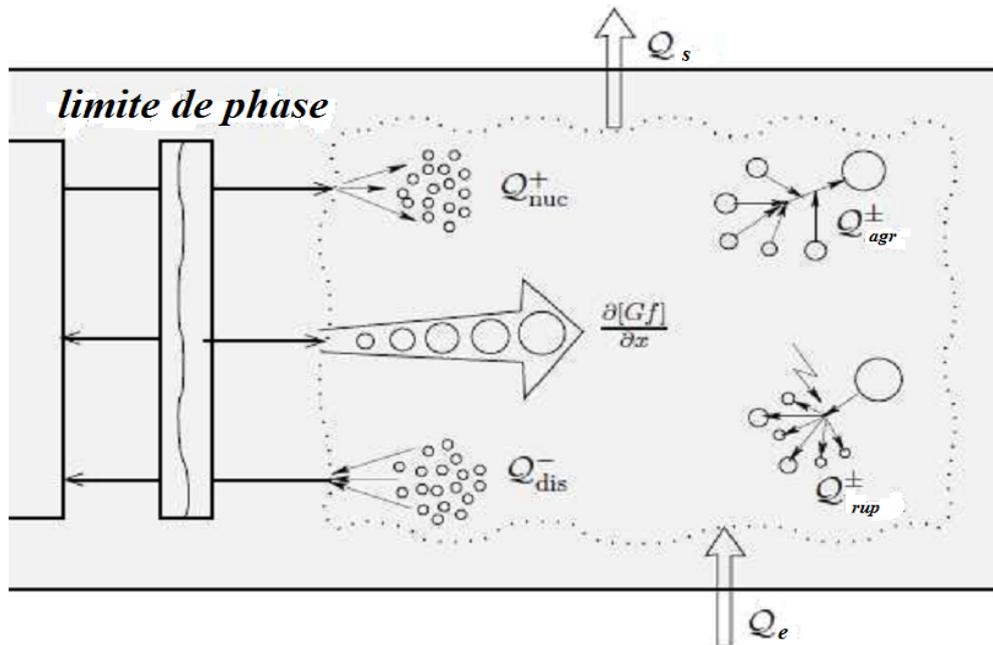


FIGURE 1.2: Représentation schématique du processus de différentes particules [2]

Généralement, le processus discontinue (batch) n'a aucune d'entrée ou de sortie de particules donc, $\mathcal{Q}_e(v, t) = \mathcal{Q}_s(v, t) = 0$.

Par conséquent, il est nécessaire de convertir l'équation du bilan de population en volume par rapport à équation du bilan de population en fonction de la longueur.

Le volume d'une particule en terme de longueur peut être décrit comme $v = l^3$, avec l représente la longueur des particules. Donc, la fonction de densité en nombre de taille de particule basée sur le volume est donné par $n(v, t) = n(l^3, t)$. En prenant le différentiel sur les deux côtés, on obtient :

$$n(v, t)dv = n(l^3, t)dl^3 = 3l^2n(l^3, t)dl = n(l, t)dl. \quad (1.4)$$

Où $n(l, t)$ est la fonction de densité en nombre basée sur la longueur. L'équation du bilan de population basé sur le volume peut être transformé à une équation du bilan de population basée sur la longueur par une transformation simple. Pour cela, chaque terme de l'équation (1.2) est réécrit en terme de longueur de la particule.

La transformation les équations des processus de l'agrégation et de rupture en fonction du volume à des équations en fonction de la longueur est donnée par [29].

- **L'agrégation** : si nous considérons d'abord le terme d'agrégation de l'équation (1.1) et l et l' soient les longueurs des deux particules tel que $v = l^3$ et $v' = l'^3$, puis nous avons la relation pour l'agrégation kernel comme :

$$\beta(v, v') = \beta(l^3, l'^3) = \tilde{\beta}(l, l'). \quad (1.5)$$

Avec $\tilde{\beta}(l, l')$: le taux de rupture en longueur.

Les termes d'apparition et de disparition peut être écrit comme :

$$Q_{agr}^{\pm}(v, t) = Q_{agr}^{\pm}(l^3, t) = \frac{1}{3l^2} \tilde{Q}_{agr}^{\pm}(l, t),$$

Avec (1.6)

$$\tilde{Q}_{agr}^{\pm}(l, t) = \tilde{B}_{agr} - \tilde{D}_{agr}.$$

Tel que :

$$\tilde{B}_{agr}(l, t) = 3l^2 B_{agr}(l^3, t),$$

Et (1.7)

$$\tilde{D}_{agr}(l, t) = 3l^2 D_{agr}(l^3, t).$$

Maintenant, nous transformons le taux d'apparition et le taux de disparition en volume au langueur comme suit :

$$B_{agr}(v, t) = B_{agr}(l^3, t) = \frac{1}{2} \int_0^l \omega((l^3 - l'^3), l'^3) n(l^3 - l'^3, t) n(l'^3, t) dl'^3,$$

Donc (1.8)

$$B_{agr}(l^3, t) = \frac{1}{2} \int_0^l \tilde{\omega}((l^3 - l'^3)^{1/3}, l') \frac{n((l^3 - l'^3)^{1/3}, t)}{(l^3 - l'^3)^{2/3}} n(l', t) dl'.$$

Ainsi, le taux d'apparition en fonction de la longueur du processus d'agrégation peut être réécrit en utilisant l'équation (1.7) comme suit :

$$\tilde{B}_{agr}(l, t) = \frac{l^2}{2} \int_0^l \tilde{\omega}((l^3 - l'^3)^{1/3}, l') \frac{n((l^3 - l'^3)^{1/3}, t)}{(l^3 - l'^3)^{2/3}} n(l', t) dl'. \quad (1.9)$$

De façon similaire pour les taux de disparition, la transformation de l'équation du bilan de population pour l'agrégation en fonction de la longueur est donnée par :

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{agr}(l, t) &= n(v, t) \int_0^{\infty} \omega(v, v') n(v', t) dv' \\ &= \frac{n(l, t)}{3l^2} \int_0^{\infty} \tilde{\omega}(l, l') n(l', t) dl'. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Et donc selon l'équation (1.6) le taux de disparition pour l'agrégation en fonction de la longueur est donné par :

$$\widetilde{D}_{agr}(l, t) = n(l, t) \int_0^\infty \widetilde{\omega}(l, l') n(l', t) dl'. \quad (1.11)$$

Où le terme d'agrégation est transformé à une équation en fonction de la longueur, qui est donnée par :

$$\begin{aligned} \widetilde{Q}_{agr}^\pm(l, t) &= \frac{l^2}{2} \int_0^l \widetilde{\omega}((l^3 - l'^3)^{1/3}, l') \frac{n((l^3 - l'^3)^{1/3}, t)}{(l^3 - l'^3)^{2/3}} n(l', t) dl' \\ &\quad - n(l, t) \int_0^\infty \widetilde{\omega}(l, l') n(l', t) dl'. \end{aligned} \quad (1.12)$$

- **La rupture :** pour transformer le terme de rupture, Il est facile de définir la relation entre la rupture en fonction du volume et la rupture en fonction de la longueur tel que :

$$\Gamma(v) = \Gamma(l^3) = \widetilde{\Gamma}(l). \quad (1.13)$$

Le terme de rupture peut être défini similairement au terme d'agrégation c'est à dire :

$$\mathcal{Q}_{rup}^\pm(l, t) = \widetilde{B}_{rup}(l, t) - \widetilde{D}_{rup}(l, t). \quad (1.14)$$

Où \widetilde{B}_{rup} et \widetilde{D}_{rup} sont définis comme :

$$\begin{aligned} \widetilde{B}_{rup}(l, t) &= 3l^2 \widetilde{B}_{rup}(l^3, t), \\ \text{Et} \\ \widetilde{D}_{rup}(l, t) &= 3l^2 \widetilde{D}_{rup}(l^3, t). \end{aligned} \quad (1.15)$$

La fonction de distribution de la taille de particule fille dans le processus de

rupture en fonction de la longueur est donné par :

$$\tilde{\beta}(l, l') = 3l^2 \beta(l^3, l'^3). \quad (1.16)$$

L'équation ci-dessus est donnée après la transformation du taux d'apparition pour le processus de rupture comme suit :

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{rup}(v, t) &= B_{rup}(l^3, t), \\ &= \int_l^\infty \beta(l^3, l'^3, t) \Gamma(l'^3) n(l'^3, t) dl'^3, \\ &= \int_l^\infty \frac{\tilde{\beta}(l, l', t)}{3l^2} \tilde{\Gamma}(l') \frac{n(l', t)}{3l^2} (3l^2) dl', \\ &= \frac{1}{3l^2} \int_l^\infty \tilde{\beta}(l, l', t) \tilde{\Gamma}(l') n(l', t) dl'. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Alors que le taux de disparition est donné par :

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{rup}(v, t) &= D_{rup}(l^3, t), \\ &= \Gamma(l^3) n(l^3, t), \\ &= \tilde{\Gamma}(l) \frac{n(l, t)}{3l^2}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Ainsi, en utilisant l'équation (1.14) et l'équation (1.18), nous obtenons :

$$\mathcal{Q}_{rup}^\pm(l, t) = \int_l^\infty \tilde{\beta}(l, l', t) \tilde{\Gamma}(l') n(l', t) dl' - \tilde{\Gamma}(l) n(l, t). \quad (1.19)$$

- **La croissance** : le terme de croissance dans l'équation du bilan de population de l'équation (1.2) peut facilement être transformée en fonction de la longueur comme suit :

$$\frac{\partial[G(v, t)n(v, t)]}{\partial v} = \frac{\partial[\tilde{G}(l, t)n(l, t)]}{\partial l}. \quad (1.20)$$

Où

$$G(v, t) = 3l^2 \tilde{G}(l, t).$$

• **La nucléation :**

De même façon, le terme de nucléation peut être écrit comme :

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{nuc}^+(v, t) &= \mathcal{Q}_{nuc}^+(l^3, t) \\ &= n_{nuc}(l^3, t) B_{nuc}(t), \\ &= \frac{1}{3l^2} n_{nuc}(l, t) B_{nuc}(t). \end{aligned}$$

Cela implique que :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{Q}}_{nuc}^+(l, t) &= 3l^2 \mathcal{Q}_{nuc}^+(v, t), \\ &= n(l, t) B_{nuc}(t). \end{aligned} \tag{1.21}$$

Ainsi, l'équation du bilan de la population, sans le flux d'entrée, et le flux de sortie et le terme de la dissolution est donnée par :

1. **En fonction du volume :**

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial [Gn(v, t)]}{\partial v}}_{\text{La croissance}} &= \underbrace{\mathcal{Q}_{nuc}}_{\text{la nucléation}} \\ &+ \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^v \omega(v-v', v') n(v, t) n(v-v', t) dv'}_{\text{l'apparition de l'agrégation}} \\ &- \underbrace{n(v, t) \int_0^\infty \omega(v, v') n(v', t) dv'}_{\text{la disparition de l'agrégation}} \\ &+ \underbrace{\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv'}_{\text{l'apparition de la repture}} \\ &- \underbrace{\Gamma(v) n(v, t)}_{\text{la disparition de la rupture}}, \text{ Avec } \in \mathbb{R}_+^2 \end{aligned} \tag{1.22}$$

$\Gamma(v)$: le nombre de particules dans la gamme de taille de v à $v + dv$ disparaissant par unité de temps dans la rupture.

$\omega(v, v')$: la fréquence d'agrégation entre deux particules de volumes v et v' .

$\beta(v/v')dv$: le nombre fractionnaire de particules formées dans la gamme de taille de v à $v + dv$ formé lors de la rupture de la particule du volume v' .

2. En fonction de la longueur :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial n(l, t)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial [Gn(l, t)]}{\partial l}}_{\text{La croissance}} &= + \underbrace{\frac{l^2}{2} \int_0^l \frac{\omega((l^3 - v'^3)^{1/3}, l') n(l', t) n((l^3 - l'^3)^{1/3}, t) dl'}{(l^3 - l'^3)^{2/3}}}_{\text{l'apparition de l'agrégation}} \\
 &- \underbrace{n(l, t) \int_0^\infty \omega(l, l') n(l', t) dl'}_{\text{la disparition de l'agrégation}} + \underbrace{\int_l^\infty \beta(l/l') \Gamma(l') n(l', t) dl'}_{\text{l'apparition de la rupture}} \\
 &- \underbrace{\Gamma(l) n(l, t)}_{\text{la disparition de la rupture}} + \underbrace{Q_{nuc}}_{\text{la nucléation}} .
 \end{aligned}
 \tag{1.23}$$

1.6.2 Équation du bilan de population pour la croissance et la nucléation

La taille d'une particule augmente de façon continue dans ce processus. La croissance est un processus largement utilisé dans la cristallisation, la granulation, la condensation, l'évaporation, la déposition et la sublimation. Les particules se développent quand une matière moléculaire s'ajoute à la surface d'une particule. Pendant le processus de croissance du nombre total de particules qui reste le même mais le volume total (masse) de particules augmente.

La nucléation est un procédé de formation de nouvelles particules à partir d'une solution sursaturée donnée. Pendant ce processus, la population de petites particules augmente. Les noyaux sont généralement considérés comme les plus petites particules possibles dans le système. Dans les applications pratiques, telles que la cristallisation, la nucléation se déroule à la taille minimale de particules en raison de problèmes de mesure

de la taille des particules. En outre, dans cette gamme de taille, il est impossible de distinguer entre les noyaux de tailles différentes en raison de l'insuffisance des résolutions des appareils de mesure. L'équation de bilan de la population pour la croissance et la nucléation est donnée comme dans [2] :

1. En fonction du volume

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[Gn(v, t)]}{\partial v} + Q_{nuc}^+(v, t). \quad (1.24)$$

2. En fonction de la longueur

$$\frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[Gn(l, t)]}{\partial l} + \frac{Q_{nuc}^+}{3l^2}(l, t). \quad (1.25)$$

1.6.3 Équation du bilan de population pour la dissolution

Les particules (par exemple des cristaux) ne sont pas stables au-dessous d'un certain volume, habituellement appelé volume critique (ou taille). Les petites particules avec un taux de croissance négatif vont enfin devenir plus petite que le volume critique et donc, vont disparaître de la population (voir la figure 1.2) [2].

1. En fonction du volume :

$$Q_{diss}^-(v, t) = D_{diss}n(v, t). \quad (1.26)$$

2. En fonction de la longueur :

$$Q_{diss}^-(l, t) = D_{diss}n(l, t). \quad (1.27)$$

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.

1.6.4 Équation du bilan de population pour l'agrégation

Le phénomène d'agrégation apparaît dans un large éventail d'applications, par exemple, en physique (agrégation des particules colloïdales), la météorologie (fusion des gouttes dans les nuages atmosphériques, le transport des aérosols, minéraux), la chimie (réaction des polymères, la formation de suie, les industries pharmaceutiques, engrais). 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 qui est développée par Hulburt et coll [20] comme suit :

1. En fonction du volume :

$$Q_{agr}^{\pm}(v, t) = \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v-v', v') n(v, t) n(v-v', t) dv' - n(v, t) \int_0^{\infty} \omega(v, v') n(v', t) dv' \quad (1.28)$$

Où $t \geq 0$. Le premier terme représente la naissance des particules de dimension v en conséquence de la coagulation des particules de dimensions $(v - v')$ et v' .

Le second terme décrit la fusion des particules de taille v avec d'autres particules. Le second terme est appelé le terme de disparition. La nature du processus est régie par la coagulation kernel (du noyau) et ω la fréquence d'agrégation entre deux particules de volumes v et v' produit une particule de taille $v + v'$, représentant des propriétés du milieu physique. Il est positif et satisfait à la condition de symétrie $\omega(v - v', v') = \omega(v', v - v')$ [34].

2. En fonction de la longueur :

$$Q_{agr}^{\pm}(l, t) = \frac{l^2}{2} \int_0^l \frac{\omega((l^3 - l'^3)^{1/3}, l') n((l^3 - l'^3)^{1/3}, t) n(l', t)}{(l^3 - l'^3)^{2/3}} dl' - n(l, t) \int_0^{\infty} \omega(l, l') n(l', t) dl'. \quad (1.29)$$

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 $(l + l')$.

Les solutions analytiques de les EBPs précédentes peuvent être trouvées seulement dans certains cas simples et donc nous avons besoin de techniques numériques pour les résoudre. Cependant que les solutions analytiques connues sont très utiles pour évaluer la précision des schémas numériques.

1.6.5 Équation du bilan de population pour la rupture

Le bilan de population pour la rupture est largement connu à fort cisaillement de la granulation humide, la cristallisation, la science de l'atmosphère et de nombreux autres problèmes d'ingénierie de particules liées. La forme générale de l'équation de bilan de la population pour la rupture est donnée par [35] :

1. En fonction du volume :

$$Q_{rup}^{\pm}(v, t) = \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^{\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n(v', t) dv' - \Gamma(v)n(v, t). \quad (1.30)$$

$\Gamma(v)$ et $\beta(v/v')$: comme présentés précédemment.

Dans la littérature, il est courant d'écrire l'équation ci-dessus du bilan de population en cas de rupture binaire, comme Ziff et coll [18] sont été écrits :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = 2 \int_v^{\infty} F(v, v' - v)n(v', t) dv' - n(v, t) \int_0^v F(v', v - v') dv'. \quad (1.31)$$

Les relations entre $\beta(v/v')$, $\Gamma(v)$ et $F(v, v' - v)$ peuvent être trouvées à partir

des équations(1.30) et (1.31) :

$$\Gamma(v) = \int_0^v F(v', v - v') dv'. \quad (1.32)$$

Et

$$\beta(v/v') = 2 \frac{F(v, v' - v)}{\Gamma(v')}. \quad (1.33)$$

2. En fonction de la longueur :

$$\mathcal{Q}_{rup}^{\pm}(l, t) = \frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = \int_l^{\infty} \beta(l, l', t) \Gamma(l') n(l', t) dl'. \quad (1.34)$$

L'équation (1.30) du bilan de population pour la rupture peut être résolue analytiquement pour des formes très simples des fonctions de la rupture [18, 35, 36].

Cela conduit certainement à une discussion sur les méthodes numériques pour résoudre l'EBP. Les méthodes numériques se répartissent en plusieurs catégories : les méthodes stochastiques, [37, 38] les méthodes d'éléments finis [39], les méthodes sectionnelles(de classe) [40, 41], et les méthodes des moments [42, 43].

1.7 Fonction des moments

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

$$M_j(t) = \int_0^{\infty} v^j n(v, t) dv. \quad (1.35)$$

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

- Le moment d'ordre zéro représente la population totale des particules.

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

1.8 Conclusion

Cet rappel bibliographique nous permet de mieux comprendre le bilan de population comme une brève description et les mécanismes de modification des propriétés des particules les plus communs tel que :

- L'agrégation dans la section 1.2 qui prend place quand deux ou plusieurs particules se rencontrent et adhèrent de manière définitive. Ainsi, les processus d'agrégation revêtent une grande importance dans de nombreuses disciplines scientifiques et ont maintes applications dans des domaines tels que la pollution de l'air, la purification de l'eau, la production de produits pharmaceutiques, la fabrication de céramiques.
- La rupture dans la section 1.3, elle est le contraire de l'agrégation à savoir, les particules se brisent en deux ou plusieurs fragments. Et aussi, le processus de la rupture est très important dans un divers secteurs industriel et scientifique comme la fragmentation des germes dans la biologie et dans polymérisation ...
- La nucléation dans la section 1.5, est le mécanisme de naissance des particules, et elle définit les manières dont les particules ou bien les molécules du soluté forment des germes par la formation d'assemblages moléculaires qui peuvent croître lorsqu'ils dépassent une taille spécifique se qu'on appelle la taille critique. Et elle est très connue dans la cristallisation.

- Naturellement après la nucléation des particules on va voir la croissance des ces particules, alors la croissance est le mécanisme par lequel les particules croissent, elle représente le transport des particules du processus de nucléation vers des particules plus grandes.

Nous avons introduit l'équation du bilan de population dans différents domaine d'ingénierie dans la section 1.6. Et on a donné la transformation de l'équation du bilan de population en fonction du volume et en fonction de la longueur. Cette équation nous offre plus de détails pour savoir ses différentes formules. Ainsi que dans tels domaine d'ingénieries nous avons besoins de connaitre la distribution des particules en fonction de la longueur ou bien du diamètre c'est mieux que à celle du volume comme la cristallisation par exemple.

Dans la section 1.7 nous avons présenté la fonction des moments et aussi on a connu la signification physique de chaque ordre de ces moments.

Méthodes de résolution de l'équation du bilan de population

Sommaire

2.1	Introduction	26
2.2	Méthodes numériques	27
2.3	Méthodes semi-analytiques	58
2.4	Conclusion	65

2.1 Introduction

L'équation du bilan de population peut être résolue analytiquement pour certaines formes très simples des fonctions de rupture. 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.

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 appliquée pour obtenir des solutions formelles ou bien la solution exacte.

Dans ce chapitre on étudie quelques méthodes appliquée pour résoudre l'EBP. Dans la section 2.2, nous allons diviser ces méthodes en trois grandes familles, premièrement on va introduire les méthodes de Monte Carlo ou bien se qu'on appelle aussi les méthodes stochastiques, deuxièmement nous allons présenter les méthodes des classes qui aussi se découpent en trois méthodes principales : la méthode du pivot fixe, la méthode de la moyenne de la cellule, et la méthode de Galerkin. Troisièmement les méthodes des moments, où on distingue : la méthode de quadrature des moments, la méthode de quadrature fixe de moments, et la méthode de quadrature directe des moments. Dans la section 2.3, les méthodes semi-analytiques seront introduites telles que la méthode d'Adomian, la méthode d'itération variationnelle et la méthode de perturbation homotopique.

2.2 Méthodes numériques

2.2.1 Méthodes de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo est une technique de simulation numérique pour résoudre les problèmes au moyen d'un échantillonnage aléatoire. 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 difficile 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 [44, 45].

Misha [38] a étudié la méthode de Monte Carlo et la trouve conceptuellement plus simple et efficace vis à vis le calcul par rapport aux autres méthodes numériques disponibles pour la résolution des équations du bilan de population. Elle permet d'étudier le comportement de l'équation du bilan de population de rupture dans sa forme la plus complète pour lequel aucune solution analytique existe et dont les solutions numériques respectives sont fastidieuses.

Hao et coll [46] ont trouvés que cette méthode est capable de maintenir un constant nombre de particules de simulation par le suivi du temps de la procédure approprié. Les méthodes de Monte Carlo, qui décrivent directement l'évolution dynamique des variables internes (c'est à dire, la taille et la zone de surface) de chaque particule de simulation (il représente un certain nombre des particules réelles ayant une forme semblable à la simulation), appartiennent à la variante de l'algorithme de simulation directe ou simulation directe traditionnelle (méthode de Monte Carlo).

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 [47, 48].

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 [44, 49]. 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 méthode [3].

Ainsi, Marchisio et coll [50] 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 [44].

2.2.2 Méthodes des classes

Les méthodes des classes se basent sur une discrétisation de la population des particules en un nombre déterminé de classes. L'évolution de la population est calculée par l'action des phénomènes de rupture et de coalescence sur l'ensemble de ces classes jusqu'à atteindre un équilibre. Les méthodes des classes sont nombreuses et peuvent se différencier suivant la manière dont la population est discrétisée. On cite quelques exemples, comme suit :

2.2.2.1 Méthode du pivot fixe

Kumar et Ramkrishna [40] 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 [3] :

$$a_1(v, v_i)f_1(v_i) + a_2(v, v_{i+1})f_1(v_{i+1}) = f_1(v). \quad (2.1)$$

$$a_1(v, v_i)f_2(v_i) + a_2(v, v_{i+1})f_2(v_{i+1}) = f_2(v). \quad (2.2)$$

En plus, ces équations peuvent être généralisées pour la compatibilité avec plus de deux propriétés en assignant la taille des particules v à plus de deux points de la grille. La population au v_i volume représentatif obtient une particule fractionnaire pour chaque par-

ticule qui est née dans la gamme de taille $[v_i, v_{i+1}]$ ou $[v_{i-1}, v_i]$. Intégration de l'équation (1.4) (chapitre.1) sur une cellule i donne :

$$\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} \int_0^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' dv - \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} \Gamma(v) n(v, t) dv. \quad (2.3)$$

Kumar et Ramkrishna [40, 41] 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 :

$$n(v, t) = \sum_{i=1}^I N_i \delta(v - v_i). \quad (2.4)$$

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

$$\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = \sum_{k=i}^I \eta_{i,k} S_k N_k(t) - S_i N_i(t) = B_i - D_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots, I. \quad (2.5)$$

Et S_k , $S(x_k)$ et la fonction η sont décrits par :

$$\eta_{i,k} = \int_{v_i}^{v_{i+1}} a_1(v, v_i) b(v, v_k) dv + \int_{v_{i-1}}^{v_i} a_2(v, v_i) b(v, v_k) dv. \quad (2.6)$$

Où

$$a_1(v, v_i) = \frac{v_{i+1} - v}{v_{i+1} - v_i}, \quad a_2(v, v_i) = \frac{v - v_{i-1}}{v_i - v_{i-1}}. \quad (2.7)$$

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

$$a_1(v, v_i) + a_2(v, v_{i+1}) = 1, \quad (2.8)$$

Et

$$v_i a_1(v, v_i) + v_{i+1} a_2(v, v_{i+1}) = v. \quad (2.9)$$

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.

Attarakih et coll [51] ont trouvés que la technique du pivot fixe se concentre sur la population de gouttelettes dans une gamme de taille donnée à un seul point (appelé le pivot) grâce à l'utilisation de la fonction de Dirac. L'idée sous-jacente à cette approche est que, lorsqu'une gouttelette est formée soit par la rupture ou la coalescence sur une grille discrète de son volume caractéristique qui en résulte ne coïncide avec aucun des volumes représentatifs à l'exception de la grille linéaire (par rapport au volume de la gouttelette). La discrétisation classique approche les volumes de gouttelettes résultant assignées au pivot le plus proche et par conséquent, il a pu être montré que seulement une propriété intégrale peut être conservé au moins deux propriétés intégrantes du volume de gouttelettes résultant est interpolé linéairement entre deux pivots adjacents de sorte que les propriétés des deux intégrales sont conservées. La technique du pivot fixe est jugée très puissante non seulement pour prédire les distributions uni-modales.

2.2.2.2 Méthode de la moyenne de la cellule

Nous présentons d'abord l'idée générale de la technique de la moyenne de la cellule [3,40] :

- L'intervalle de taille entière est divisé en un nombre fini I de petites cellules.

- Les limites inférieure et supérieure de la $i^{\text{ème}}$ cellule sont désignées par $x_{i-1/2}$ et $x_{i+1/2}$, respectivement.
- Toutes les particules appartenant à une cellule sont identifiées par un représentant de la taille de la cellule, également appelé point de la grille. La taille représentative d'une cellule peut être choisie à une position quelconque entre les limites inférieure et supérieure de la cellule.

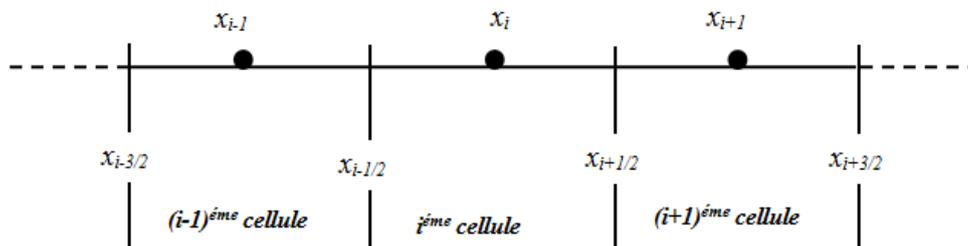


FIGURE 2.1: L'intervalle de la taille discrétisé

Kumar et coll [41] ont défini le centre de la cellule est la moyenne arithmétique des limites de la cellule. Le volume moyen de la particule moyenne ou la moyenne géométrique pourrait être un autre alternative de choix pour le représentant. Un intervalle de la taille discrétisée typiquement est illustré dans la figure 2.1.

La $i^{\text{ème}}$ cellule est représentée par $x_i = (x_{i-1/2} + x_{i+1/2})/2$. La largeur de la $i^{\text{ème}}$ cellule est désignée par $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$. La taille d'une cellule peut être fixée arbitrairement en fonction du procédé d'application. Dans la plupart des applications, cependant, les réseaux de type géométriques sont préférés.

On peut transformer l'équation du bilan de la population générale en un ensemble d'équations différentielles I qui peut être résolu en utilisant n'importe quel solveur ODE standard (équation différentielle ordinaire). En notant le nombre total dans la cellule $i^{\text{ème}}$

par N_i , alors nous avons un ensemble d'équations de la forme suivante :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \underbrace{B_i}_{\text{L'apparition des particules}} - \underbrace{D_i}_{\text{La disparition des particules}}, i = 1, 2, \dots, I. \quad (2.10)$$

La première étape consiste à calculer des particules de la naissance (l'apparition) et de décès (disparition) dans chaque cellule. Examen de tous les événements possibles qui conduisent à la formation de nouvelles particules dans une cellule permet le terme de la naissance. De même tous événements possibles qui conduisent à la disparition d'une particule dans une cellule qui donnent le taux de particules mortes. Les nouvelles particules dans la cellule peuvent apparaître soit en des positions discrètes ou ils peuvent être distribués en continu conformément à la fonction de distribution.

Par exemple, dans une agrégation binaire des particules de processus apparaissent en points discrets dans la cellule alors que dans le processus de rupture, ils sont souvent distribué partout selon une fonction continue de la rupture. En raison de grilles non-uniformes, il est alors possible que la taille des particule nouveaux née dans une cellule ne correspond pas exactement avec le représentant la taille de cette cellule. Les particules nouveau nées dont les tailles ne correspondent pas à l'une des les tailles représentatives provoquent une incohérence de moments dans la formulation. Par conséquent, l'objectif est de remédier à l'incompatibilité d'une manière efficace. Supposons que nous substituons simplement la naissance et de décès totale de particules, par exemple, dans l'équation (2.10). Ensuite, la prédiction de zéro instant par la formulation sera prédit correctement, mais la formulation deviendra incompatible en ce qui concerne le premier moment [3].

Laissez-nous démontrer les concepts ordinaires de la technique de la moyenne de la cellule par l'exemple suivant que montre la figure 2.2.

Naissances de particules $B_i^1, B_i^2, \dots, B_i^{I_i}$ lieu à des positions $y_i^1, y_i^2, \dots, y_i^{I_i}$ respectivement en raison de certains processus de particules comme l'agrégation, la rupture, etc. dans la cellule i .

Ici nous avons considéré le cas purement discrète mais des mesures analogues peuvent être effectuées pour en continu l'apparition des particules dans la cellule. Premièrement, nous calculons la naissance totale de particules dans la $i^{\text{ème}}$ cellule.

$$B_i = \sum_{j=1}^{I=i} B_i^j. \quad (2.11)$$

Puisque nous savons que les positions des particules nouveau nés à l'intérieur de la cellule, il est facile de calculer le volume moyen des particules nouveau nés \bar{v}_i , qui est donné par la formule suivante :

$$\bar{v}_i = \frac{\sum_{j=1}^{I=i} y_i^j B_i^j}{B_i}. \quad (2.12)$$

Maintenant, nous pouvons supposer que les particules B_i sont appartiennent $\bar{v}_i \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$.

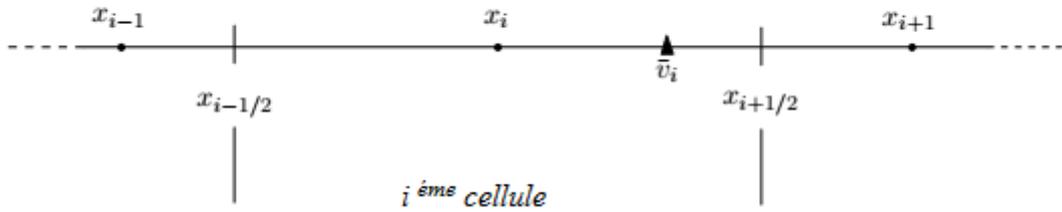


FIGURE 2.2: Le volume moyen des particules nouveau nés [3].

Considérant que le volume moyen $\bar{v}_i > x_i$ comme le montre la figure 2.2, l'affectation de particules doit être effectuée par les équations suivantes :

$$a_1(\bar{v}_i, x_i) + a_2(\bar{v}_i, x_{i+1}) = B_i, \quad (2.13)$$

Et

$$x_i a_1(\bar{v}_i, x_i) + x_{i+1} a_2(\bar{v}_i, x_{i+1}) = B_i \bar{v}_i. \quad (2.14)$$

Où $a_1(\bar{v}_i, x_i)$ et $a_2(\bar{v}_i, x_{i+1})$ sont les fractions de la naissance B_i être affectés au x_i et x_{i+1} respectivement. La résolution des équations ci-dessus, nous donne :

$$a_1(\bar{v}_i, x_i) = B_i \frac{\bar{v}_i - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}. \quad (2.15)$$

Et

$$a_2(\bar{v}_i, x_{i+1}) = B_i \frac{\bar{v}_i - x_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (2.16)$$

Par simplifications et pour définir la fonction λ comme :

$$\lambda_i^\pm(x) = \frac{x - x_{i\pm 1}}{x_i - x_{i\pm 1}}. \quad (2.17)$$

Les fractions peuvent être exprimées en termes de λ telles que :

$$a_1(\bar{v}_i, x_i) = B_i \lambda_i^+(\bar{v}_i), \quad (2.18)$$

Et

$$a_2(\bar{v}_i, x_{i+1}) = B_i \lambda_{i+1}^-(\bar{v}_i), \quad (2.19)$$

Il y a quatre fractions possibles de naissance qui peuvent ajouter une contribution de naissance au nœud x_i : Deux cellules voisines et deux de la $i^{\text{ème}}$ cellule. Toutes les contributions de naissance possibles ont été montrée dans la figure 2.3. L'ensemble de toutes les contributions de naissance, la durée de naissance pour la moyenne de la cellule technique est donné par :

$$\begin{aligned} B_i = & B_{i-1} \lambda_i^-(v_{i-1}^-) \varphi(v_{i-1}^- - x_{i-1}) + B_i \lambda_i^-(\bar{v}_i) \varphi(x_i - \bar{v}_i) \\ & + B_i \lambda_i^+(\bar{v}_i) \varphi(\bar{v}_i - x_i) + B_{i+1} \lambda_{i+1}^+(v_{i+1}^-) \varphi(x_{i+1} - v_{i+1}^-). \end{aligned} \quad (2.20)$$

$\varphi(x)$: la fonction de Heaviside définie dans l'annexe A.

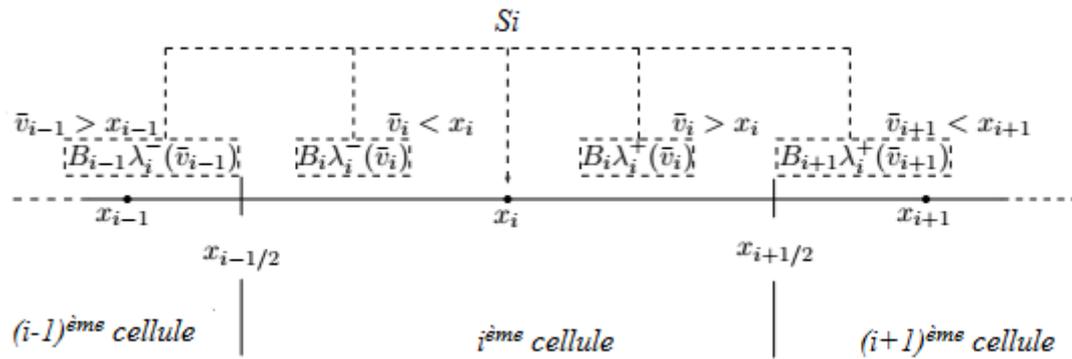


FIGURE 2.3: L'allocation des particules en x_i de toutes les cellules possibles [3].

Donc, nous résumons la technique de la moyenne de la cellule, il convient de mentionner ici que la fonction de la densité en nombre $n(x, t)$ avec $x = v$ peut être représenté, de façon similaire à la technique de pivot fixe, en terme de distributions de delta de Dirac. Cela est dû au fait que toutes les particules dans une cellule sont supposées être concentrées à la taille de la cellule représentative. Cette représentation de la densité en nombre est utile à calculer les taux de natalité et de mortalité discrets dans une cellule.

On résume maintenant les principales étapes de la technique de moyenne des cellules décrites ci-dessus en tant que :

1. Calcul du taux d'apparition et de disparition :

Les taux d'apparition et de disparition discrets peuvent être obtenus en remplaçant une représentation Dirac-delta de la densité dans la forme continue du nombre total d'apparition et de disparition dans une cellule. De ce fait les calculs de B_i et D_i sont effectués dans la première étape.

2. Calcul des moyennes de volume :

La deuxième étape consiste à calculer le volume moyen des particules dans chaque cellule \bar{v}_i . Ceci est une étape centrale de la technique de la moyenne de la cellule et peut être facilement obtenue après l'étape 1.

3. Modification de naissance :

La modification de naissance, point crucial pour les méthodes sectionnelles, se fait selon l'équation (2.19). Ce d'apparition B_i , la moyenne de la cellule modifiée est conforme aux deux premières moments. Notez qu'il n'y a pas besoin de modifier le terme de disparition car les particules sont juste enlevées des points de la grille et donc la formulation reste compatible avec tous moments en raison de la disparition discrète. En conséquence, le terme de mort (disparition) dans la formulation moyenne de cellule i est D_i .

4. Solution de l'ensemble d'équations différentielles :

En substituant les valeurs de B_i et D_i dans l'équation (2.9), on obtient un ensemble de l'équation différentielle ordinaire. Il sera alors résolu par un solveur supérieur *ODE* qui donne solution approprié de ces équations.

2.2.2.3 Méthode de Galerkin

La méthode de Galerkin ou (approche de collocation) conduit à un système des équations différentielles linéaire ordinaires couplées, qui peut être résolu par une méthode à choisi.

Pour illustrer l'approche générale, A.Sandu et coll [52] considèrent les discrétisations sur les espaces de polynômes par morceaux, ainsi une approche d'approximation spectrale, qui peut être également ignorée dans le cadre proposé. Des exemples numériques montrent que une bonne précision est obtenue avec un nombre relativement restreint de points de grille.

Nous résumons la méthode de l'approche collocation par les étapes suivantes :

1. La discrétisation de la distribution de taille de particule :

La distribution en nombre continu est donnée par une approximation de dimension finie soit $(\phi_i)_{1 \leq i \leq s}$ un ensemble de fonctions de base continues.

Où

$$n(v, t) = \sum_{i=1}^s n_i(t) \phi_i(v). \quad (2.21)$$

s : le nombre de bins.

$\phi_i(v)$: la fonction de base et $\phi_i(v) = \delta(v - V_i)$ fonction de *Dirac**¹.

Pour obtenir une forme discrète de l'équation de la rupture, on insère l'équation (2.21) dans l'équation (1.30) :

$$\sum_{i=1}^s n_i'(t) \phi_i(v) = \sum_{m=1}^s n_m(t) \int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') \phi_m(v') dv' - \Gamma(v) \sum_{i=1}^s n_i(t) \phi_i(v). \quad (2.22)$$

2. La Fonction test :

L'équation résultante est multipliée par la fonction de test $\xi_j(v)$ ($j = 1, \dots, s$) et intégrée à partir de $v = 0$ à ∞ , pour obtenir un système d'équations différentielles ordinaires.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^s n_i'(t) \int_0^{\infty} \phi_i(v) \xi_j(v) dv &= \sum_{m=1}^s n_m(t) \int_0^{\infty} \left(\int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') \phi_m(v') dv' \right) \times \\ &\quad \xi_j(v) dv - \sum_{i=1}^s n_i(t) \int_0^{\infty} \Gamma(v) \phi_i(v) \xi_j(v) dv. \end{aligned} \quad (2.23)$$

$n_i'(t)$: par rapport au temps de $n_i(t)$. Nous construisons les matrices avec coefficients suivants :

$$\begin{aligned} A &= \left[\int_0^{\infty} \phi_i(v) \xi_j(v) dv \right]_{1 \leq k, j \leq s}, \\ B^j &= \left[\int_0^{\infty} \left(\int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') \phi_m(v') dv' \right) \xi_j(v) dv \right]_{m \leq s}, \\ C^j &= \left[\int_0^{\infty} \Gamma(v) \phi_k(v) \xi_j(v) dv \right]_{1 \leq k, m \leq s}, \quad 1 \leq j \leq s. \end{aligned} \quad (2.24)$$

1. * rappeler que $\delta(v) = 0$ pour $x \neq 0$, $\delta(0) = \infty$, et $\int_{V_i-\epsilon}^{V_i+\epsilon} f(x) \delta(x - V_i) dx = f(V_i)$ [52].

Si $n(t)$ est le vecteur des concentrations en nombre l'équation (2.22) devient :

$$An'(t) = \begin{bmatrix} n^T(t)(B^1 - C^1)n(t) \\ \vdots \\ n^T(t)(B^s - C^s)n(t) \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

On peut considérer que B et C comme des tenseurs :

$$An'(t) = [(B - C) n(t)] n(t). \quad (2.26)$$

3. L'approche de Galerkin :

Dans l'approche de Galerkin $\phi_i(v) = \xi_i(v)$ sont des fonctions de base (morceaux) continues. L'équation (2.24) est relativement difficile à résoudre, car il faut évaluer un grand nombre d'intégrales doubles pour construire les tenseurs B et C . Si $\beta(v/v')$ et $\Gamma(v)$ ne changent pas par rapport au temps, on peut calculer les tenseurs et de les réutiliser dans toute intégration, ce qui rend l'ensemble du processus de calcul possible.

4. L'approche de collocation :

Dans l'approche de collocation $\phi_i(v)$ sont des fonctions de base continues, mais les fonctions test sont les deltas ($\xi_i(v) = \delta(v - V_i^c)$), avec V_i^c les points de collocation.

L'équation résultante est également de la même forme que l'équation (2.24), mais les coefficients sont calculés comme suit :

$$\begin{aligned} A &= \left[\int_0^\infty \phi_i(V_i^c) dv \right]_{1 \leq k, j \leq s}, \\ B^j &= \left[\int_0^\infty \left(\int_v^\infty \beta(V_i^c/v') \Gamma(v') \phi_m(v') dv' \right) dv \right]_{m \leq s}, \\ C^j &= \left[\int_0^\infty \Gamma(V_i^c) \phi_k(V_i^c) \right]_{1 \leq k, m \leq s}, 1 \leq j \leq s. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Cette approche de calcul est moins difficile puisque tous les coefficients impliquent seulement des intégrales simples. Notons que si les fonctions de base ont la propriété d'interpolation $\phi_i(V_j) = 0$ pour $i \neq j$ et $\phi_i(V_i) = 1$ pour $i = j$, alors la matrice de masse A est une matrice unité [52].

L'avantage des méthodes de classes est de pouvoir calculer directement la distribution des particules. Cependant, leur précision dépend de plusieurs facteurs que sont la formule de l'EBP, le choix de la discrétisation et le nombre de classes [44].

2.2.3 Méthodes des moments

Les méthodes des moments sont une alternative à ces deux premières familles. Ces méthodes se basent sur un suivi des moments de la distribution, plutôt que de suivre la distribution elle-même. La précision de ces méthodes se traduit par leur conservation des deux premiers moments de la distribution, qui représentent physiquement le nombre total de particules et leur diamètre total (ou leur volume total si la variable interne considérée est le volume).

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 [44]. 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 [53], 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.

2.2.3.1 Méthode de quadrature de moments

L'EBP peut en outre être simplifiée en utilisant une transformation du moment, où l'instant $k^{\text{ème}}$ de la distribution, M_k est donnée par :

$$M_k = \int_0^{\infty} v^k n(v, t) dv. \quad (2.28)$$

Les moments d'ordre inférieur ont description physique de la distribution de taille de particule ; c'est à dire M_0 est en relation avec le nombre total de particules dans le système, M_1 est le volume total des particules.

Après l'application de la transformation du moment, l'équation du bilan de population (1.23) est représentée par un ensemble des équations différentielles ordinaires (ODEs) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial M_k(v, t)}{\partial t} + \underbrace{\int_0^{\infty} kv^{k-1} G(v, t) n(v, t) dv}_{\text{La croissance}} &= \underbrace{\int_0^{\infty} v^k \mathcal{Q}_{nuc} dv}_{\text{la nucléation}} \\ &+ \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^{\infty} n(v', t) \int_0^{\infty} (v + v')^k \omega(v - v', v') n(v, t) dv dv'}_{\text{l'apparition de l'agrégation}} \\ &- \underbrace{\int_0^{\infty} v^k n(v, t) \int_0^{\infty} \omega(v, v') n(v', t) dv dv'}_{\text{la disparition de l'agrégation}} \\ &+ \underbrace{\int_0^{\infty} v^k \int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv dv'}_{\text{l'apparition de la repture}} \\ &- \underbrace{\int_0^{\infty} v^k \Gamma(v) n(v, t) dv}_{\text{la disparition de la rupture}}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

La méthode quadrature des moments(MQMO) proposé est dérivé pour l'approximation des intégrales de l'équation (2.29), ce qui donne un système fermé des moments. Le système résultant peut être efficacement résolu en utilisant un solveur *ODE* standard. La méthode de la quadrature de Gauss est très utilisable en raison de leur efficacité de calcul

qui rapproche les intégrales définies d'une fonction.

Ce procédé convertit la fonction continue comme une somme pondérée des valeurs de fonctions discrètes à un intervalle donné. Dans les procédés classiques, l'intégrale d'une fonction continue est évaluée en additionnant les valeurs discrètes de la même fonction dans les points de longueurs égales, où chaque valeur a un poids considéré comme un coefficient. Cependant, des changements drastiques dans la fonction peuvent donner une mauvaise approximation de l'intégrale, donc l'adaptation des points de maillage sont nécessaires pour réduire l'erreur globale. La règle de la quadrature de Gauss remplit ces critères en donnant la liberté de choisir les poids et l'emplacement des points de maillage (les abscisses) à la fonction qui doit être évaluée [54].

Si $\Psi(v)$ est une fonction de poids non-négatif et $g(v)$ est une fonction non-spécifiée de v définie dans un intervalle donné $[a, b]$ et la méthode de quadrature de Gauss se rapproche de l'intégrale dans le domaine étant donné [29] :

$$\int_a^b \Psi(v)g(v)dv = \sum_{j=1}^N W_j g(v_j). \quad (2.30)$$

Si la fonction est régulière alors la méthode de la quadrature de Gauss se rapproche de la solution la plus efficace. Dans la méthode de la quadrature de Gauss, polynômes orthogonaux sont utilisés pour trouver des poids W_j et des abscisses v_j . On définit un produit scalaire de deux fonctions $r(v)$ et $S(v)$ sur une fonction des poids $\Psi(v)$ en tant que :

$$\langle r \setminus s \rangle = \int_a^b \Psi(v)r(v)S(v)dv. \quad (2.31)$$

Deux fonctions ayant zéro produit scalaire sont appelées comme orthogonale. Si aucune fonction des poids classique $\Psi(v)$ est donnée, l'information supplémentaire est nécessaire pour obtenir les poids et les abscisses comme :

$$M_k(t) = \int_0^\infty v^k n(v, t) \approx \sum_{j=1}^N v_j^k W_j. \quad (2.32)$$

Où

$n(v, t)$ est utilisée comme une fonction de poids $\Psi(x)$, et v^k est le $k^{\text{ème}}$ ordre du polynôme $p(v)$. Nous avons besoin de $2N$ moments, par exemple de M_0 jusqu'à M_{2N-1} , pour le calcul des N paires de poids et les abscisses.

L'approximation est exacte si $i \leq 2N - 1$. Nous mettons $N = 3$ pour améliorer la précision des résultats numériques. Par conséquent, l'équation (2.29) conduit à un système à six moment de la forme :

$$\begin{aligned} \frac{dM_k(t)}{dt} = & k \sum_{i=1}^N (v_i)^{k-1} W_i G(v_i, t) + a_{nuc}^{(k)} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N W_i \sum_{j=1}^N (v_i + v_j)^k \omega(v_i, v_j) W_j \\ & - \sum_{i=1}^N (v_i)^k W_i \sum_{j=1}^N \omega(v_i, v_j) W_j + \sum_{i=1}^N \Gamma_i W_i \beta_i^{-(k)} - \sum_{i=1}^N (v_i)^k \Gamma_i W_i, k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.33)$$

Où

$$a_{nuc}^{(k)} = \int_0^\infty v^k Q_{nuc} dv \quad (2.34a)$$

$$\beta_i^{-(k)} = \int_0^\infty v^k \beta(v/v') dv \quad (2.34b)$$

Pour obtenir les points de quadrature et les poids dans l'équation (2.33), on utilise des polynômes orthogonaux.

La procédure de dérivation des polynômes orthogonaux est donnée ci-dessous. Laissez-nous définir la relation de récurrence [55] :

$$p_{-1} = 0, \quad p_0 = 1, \quad p_j = (v - a_j)p_{j-1} - b_j p_{j-2} \quad (2.35)$$

$$a_j = \frac{\langle v p_{j-1} / p_{j-1} \rangle}{\langle p_{j-1} / p_{j-1} \rangle}, j = 1, 2, \dots \quad (2.36)$$

$$b_j = \frac{\langle p_{j-1}/p_{j-1} \rangle}{\langle p_{j-2}/p_{j-2} \rangle}, j = 1, 2, \dots \quad (2.37)$$

Depuis $n(v, t)$ est utilisée comme fonction de poids $\Psi(v)$, donc nous obtenons de l'équation (2.31) :

$$\langle p_j/p_j \rangle = \int_a^b n(v, t) p_j^2 dv. \quad (2.38)$$

Avec ces définitions, nous pouvons calculer les polynômes un après l'autre jusqu'à ce que nous atteignons le $n^{\text{ème}}$ polynôme nécessaire. Les racines de ce $n^{\text{ème}}$ polynôme représenteront les points de quadrature v_j . Pour expliquer la procédure, on calcule les deux premiers polynômes. Le polynôme de premier ordre est donné par :

$$p_1 = (v - a_1)p_0 = (v - a_1). \quad (2.39)$$

Ici, a_1 est nécessaire pour spécifier p_1 comme ci-dessous :

$$a_1 = \frac{\langle vp_0/p_0 \rangle}{\langle p_0/p_0 \rangle} = \frac{\int_0^\infty vn(v, t)p_0^2 dv}{\int_0^\infty n(v, t)p_0^2 dv} = \frac{M_1(t)}{M_0(t)}. \quad (2.40)$$

Ainsi, nous avons :

$$p_1(v) = v - \frac{M_1}{M_2}. \quad (2.41)$$

Ensuite, p_2 est donné par :

$$p_2(v) = (v - a_2)p_1 - b_2p_1. \quad (2.42)$$

D'après l'équation (2.36) et l'équation (2.37) :

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{\langle vp_1/p_1 \rangle}{\langle p_1/p_1 \rangle} = \frac{\int_0^\infty vn(v, t)p_1^2 dv}{\int_0^\infty n(v, t)p_1^2 dv} = \frac{\int_0^\infty vn(v, t)(v - \frac{M_1}{M_0})^2 dv}{\int_0^\infty n(v, t)(v - \frac{M_1}{M_0})^2 dv} \\ &= \frac{M_3M_0^2 - 2M_0M_1M_2 + M_1^3}{M_2M_0^2 - M_0M_1^2}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Et

$$b_2 = \frac{\langle p_1/p_1 \rangle}{\langle p_0/p_0 \rangle} = \frac{\int_0^\infty vn(v, t)(v - \frac{M_1}{M_0})^2 dv}{\int_0^\infty n(v, t)dv} = \frac{M_2 M_0 - M_1^2}{M_0^2}. \quad (2.44)$$

Alors, l'équation (2.42) devient :

$$p_2(v) = \frac{v^2(M_0 M_2 - M_1^2) + v(M_1 M_2 - M_0 M_3) + M_1 M_3 - M_2^2}{M_0 M_2 - M_1^2}. \quad (2.45)$$

De cette manière, nous pouvons calculer les polynômes d'ordre supérieur. Par conséquent, le polynôme d'ordre trois $p_3(v)$ est donnée par :

$$\begin{aligned} p_3(v) = v^3 + & \frac{(M_2 M_4 M_1 - M_0 M_4 M_3 + M_2 M_0 M_5 + M_3^2 M_1 - M_5 M_1^2 - M_2^2 M_3)v^2}{M_2^3 - M_2 M_4 M_0 - 2M_2 M_3 M_1 + M_3^2 M_0 + M_4 M_1^2} \\ & + \frac{(M_2 M_5 M_1 + M_0 M_4^2 - M_0 M_5 M_3 - M_4 M_3 M_1 - M_2^2 M_4 + M_3^2 M_2)v}{M_2^3 - M_2 M_4 M_0 - 2M_2 M_3 M_1 + M_3^2 M_0 + M_4 M_1^2} \\ & + \frac{2M_2 M_4 M_3 - M_2^2 M_5 - M_3^3 - M_4^2 M_1 + M_5 M_3 M_1}{M_2^3 - M_2 M_4 M_0 - 2M_2 M_3 M_1 + M_3^2 M_0 + M_4 M_1^2}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Les racines du polynôme choisi sont des points de quadrature (abscisses) v_j dans l'équation (2.33). Après avoir les abscisses, la prochaine étape consiste à calculer les poids de quadrature W_j . Selon Press et coll [55], l'expression de poids est donnée par :

$$W_j = \frac{\langle p_{N-1}/p_{N-1} \rangle}{p_{N-1}(v_i)p'_N(v_i)}, j = 1, 2, \dots, N. \quad (2.47)$$

Où N : représente l'ordre du polynôme sélectionné.

Enfin, le système d'équations différentielles dans l'équation (2.33) résultant peut être résolu en utilisant le solveur standard *ODE*.

- **Algorithme** : Dans ce qui suit, on présente un algorithme pour l'application de la méthode numérique explicite proposée. La méthode utilise les valeurs des variables dépendantes à l'étape de temps précédente pour calculer les valeurs à l'étape prochaine [29].

1. Utilisez la densité en nombre initial $n_0(v, 0)$ pour calculer les moments initiaux requis.
2. Ensuite, on utilise l'équation (2.29) pour calculer les valeurs discrètes du $M_k(t)$ au niveau des points discrets de calcul du temps donné.
3. Rapprocher les termes intégraux dans l'équation (2.29), utiliser la règle de la quadrature de Gauss (2.32).
4. Utiliser la relation de récurrence (2.32) pour dériver polynômes orthogonaux.
5. Les racines des polynômes orthogonaux et les abscisses sont requises.
6. Ensuite, utiliser l'équation (2.47) pour calculer les fonctions de poids.
7. Enfin, utiliser les abscisses, le poids et l'ODE solveur standard (intégré dans le Matlab) pour obtenir les moments nécessaires dans l'équation (2.29) pour toute la durée de la simulation.

2.2.3.2 Méthode de quadrature fixe de moments

Cette nouvelle méthode est développée pour résoudre l'équation du bilan de population transformée en moment.

Dans l'équation du bilan de la population, la fonction à intégrer est généralement un produit de la fonction de distribution et un taux de fermeture (rupture, coalescence, etc.). Alors les points de quadrature et les poids peuvent être calculés afin que les moments de la distribution d'origine sont conservés. Ceci améliore grandement la précision de la méthode numérique. La caractéristique la plus attrayante, cependant, la distribution des tailles est décrite directement par ces poids, et aucune forme pré-supposée pour la distribution est nécessaire lors de l'intégration. Les moments peuvent être exprimées en fonction de termes des points de quadrature et de poids tel que [56] :

$$\mu_k = \sum_{i=1}^{N_p} \omega_i z_i^k. \quad (2.48)$$

Où $\mu_k = k^{\text{ème}}$ moment de la densité de distribution.

N_p = nombre de points de quadrature.

ω_i = poids de quadrature.

z_i = point de quadrature.

Si les points de quadrature sont connus, l'équation (2.48) peut être écrit dans une forme matricielle comme :

$$(\mu) = [A] (\omega) . \quad (2.49)$$

Avec $[A]$: un opérateur linéaire qui fait la transformation de l'espace des poids de quadrature dans l'espace des moments. Les éléments de la matrice $[A]$ sont tout simplement :

$$A_{ij} = z_j^{i-1} . \quad (2.50)$$

L'opérateur $[A]$ est linéaire, il peut être inversé. Alors, tout l'ensemble de points de quadrature prédéterminés écrit : $(\omega) = [A]^{-1} (\mu)$.

Les points de quadrature prédéterminés sont déterminés avant l'intégration de temps des moments transformés de l'EBP , c'est à dire, la solution de modèle de la matrice de transformation est invariante selon le temps et peut être calculée à l'avance. Cette approche est appelée comme méthode de quadrature de point fixe (F-MQMO) [56] .

Il est bien connu que l'intégration numérique des fonctions régulières arbitraires sur un intervalle limité est effectuée le plus exactement avec quadratures où les points de quadrature sont choisis sous forme de zéro de polynômes orthogonaux [57]. Souvent, les polynômes de Jacobi sont choisis pour un tel ensemble de polynômes, où la condition d'orthogonalité pour l'intervalle unité est :

$$\int_0^1 v^\beta (1-v)^\alpha P_j(v) P_N(v) dv = 0, j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.51)$$

Où α et β sont des paramètres de pondération arbitraire. Calcul des zéros de ces polynômes est discuté en détail par [57]. Autre que les polynômes de Jacobi peuvent être uti-

lisés aussi bien, et les paramètres de la famille polynôme choisie peuvent être optimisés pour chaque cas. Notez également qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser les mêmes points de collocation pour chaque terme de l'équation du bilan de population, mais par exemple la séparation de l'ensemble optimisé peut être utilisé pour la rupture et la coalescence. Ensuite, la transformation linéaire pour des poids de collocation ne doit être effectuée deux fois pour chaque pas de temps. Pour plus de détails à propos des problèmes des polynômes spécifiques voir [58, 59].

Puisque la nature du processus est généralement connu lorsque l'équation du bilan de la population est résolue. L'ensemble des points de quadrature choisie peut également être affiné au cours de la solution de modèle. La possibilité d'optimiser l'ensemble des polynômes orthogonaux utilisés pour le calcul du point de quadrature peut être la caractéristique la plus prometteuse du modèle actuel.

La coordonnée interne est généralement illimitée, la mise à l'échelle est nécessaire pour les racines de polynômes, qui ont été calculés pour l'intervalle unité. La mise à l'échelle peut être fait simplement en multipliant la variable de longueur par une longueur maximale de particules, comme suit :

$$z_i = L_{max}(t)z_{0i}. \quad (2.52)$$

Où $L_{max}(t)$: le diamètre maximum de la distribution à l'instant t .

z_{0i} : la référence des racines dans l'intervalle d'unité.

Ici, le diamètre maximal est en fonction du temps. Cela permet aux points de quadrature de suivre l'évolution de la distribution.

Lorsque les racines du polynôme sont mis à l'échelle conformément à l'équation ci-dessus, l'opérateur linéaire inverse peut être exprimé comme suit :

$$[A]^{-1} = [A_0]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ & \ddots \\ 0 & L_{max} \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

Ensuite, la matrice d'origine A_0 (avec des racines de polynômes dans l'intervalle $[0, 1]$) peut être utilisée tel que :

$$(\omega) = [A_0]^{-1}(\mu'). \quad (2.54)$$

Avec des moments multipliés par le facteur d'échelle correspondant ça donne :

$$(\mu'_k) = L_{max}^{-1}(\mu_k). \quad (2.55)$$

La matrice A_0 peut être calculée et inversée avant que la solution de modèle, mais les moments devraient être adaptés à l'intervalle de l'unité au cours de la solution en utilisant l'équation (2.55). Cependant, une seule multiplication scalaire est nécessaire pour chaque moment.

Maintenant, le problème à l'échelle d'intervalle est réduite à un problème de trouver le diamètre maximal raisonnable pour la distribution. Il n'y a pas une méthode unique pour cela, mais heureusement, les corrélations tels que de la forme $L_{max} = a_1$ et elle a été trouvée numériquement :

Le suivant a été trouvée numériquement :

$$L_{max} = a_1 \left(\frac{\prod_{i=2}^{N_m} m_i}{\prod_{i=1}^{N_{m-1}} m_i} \right)^{1/N_{m-1}}. \quad (2.56)$$

Où N_m : le nombre des moments a été utilisé dans le calcul de la moyenne.

L'équation ci-dessus est équivalente à la moyenne géométrique du premier diamètre moyen N_{m-1} , tel que calculé à partir de deux moments consécutifs.

Une bonne valeur pour le paramètre a_1 a été trouvé est égale à 2 pour la plupart des cas, d'une valeur de 5 pour N_m si au moins six moments ont été suivies. L'utilisation des moments les plus importants (supérieurs à 3) dans l'équation de la mise à l'échelle ci-dessus permet aux distributions avec de longueurs à être décrites. Le choix du facteur d'échelle L_{max} est évidemment une certaine mesure, spécifique au système. Toutefois, le

choix peut être comparé à la formulation des conditions de fermeture de l'EBP, où une partie de la connaissance a priori le comportement du système est également nécessaire [56].

Une vertu de la présente méthode est que L_{max} n'a pas besoin d'être nécessairement mis à jour à chaque pas de temps. Ensuite, une valeur constante peut être utilisée jusqu'à ce qu'elle soit trop loin de la prédiction de l'équation(2.56).

Ensuite, les équations de fermeture de l'EBP ne doivent pas être calculées à chaque pas de temps, mais seulement si L_{max} ou un autre facteur qui apparaît dans ces fonctions sont mises à jour. Ceci est très avantageux dans le cas de fonctions de fermeture très complexes impliquant l'intégration numérique ou la solution itérative pour certaines variables [56].

2.2.3.3 Méthode de quadrature directe des moments

1. Méthode de quadrature directe des moments pour EBPs Monovariante

La méthode de quadrature directe des moments (MQDMO) approche la fonction de distribution, ou la distribution de la taille des particules (PSD), figurant dans l'équation du bilan de population. Elle peut être considéré d'une sommation de fonctions multidimensionnelles delta de Dirac [60] :

$$f(\xi; v, t) = \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha}(v, t) \delta [\xi - \langle \xi \rangle_{\alpha}(v, t)]. \quad (2.57)$$

Où N : le nombre de fonctions delta,

$\omega(v, t)$: le poids de noeud α ,

Et

$$\delta [\xi - \langle \xi \rangle_{\alpha}] = \prod_{j=1}^{N_s} \delta (\xi_j - \langle \xi_j \rangle_{\alpha}). \quad (2.58)$$

Avec $\langle \xi_j \rangle_{\alpha}(v, t)$: le vecteur de la propriété (de longueur N_s) de noeud α .

Cette forme fonctionnelle présumée peut être considéré comme un ensemble de N phases dispersées distinctes. Chaque phase est caractérisée par un poids ω_{α} et

un vecteur de la propriété $\langle \xi_j \rangle_\alpha$. Lorsque $N_s = 1$, la répartition est monovariante, alors que si $N_s = 2$ la distribution est bivariable. En général, nous nous référons à des distributions multivariées si $N_s > 2$.

En utilisant l'équation (2.57) toute l'expression d'intégrale concernant la distribution $f(\xi; v, t)$ est transformée en une sommation et le problème de fermeture est trivial. Ceci est l'élément commun entre MQMO et MQDMO, qui diffèrent par la procédure utilisée pour obtenir des poids ω_α et abscisses $\langle \xi_j \rangle_\alpha$ [60].

MQDMO résout les équations de transport spatiales pour les poids et les abscisses et directement, à condition que les coefficients de pondération restent non négatifs dans l'algorithme numérique, les moments seront toujours réalisables. Ainsi, MQDMO offre un grand potentiel pour abaisser la difficulté de calcul dans dynamique des fluides (CFD), des simulations de l'évolution des populations de particules [53, 61].

Piskunov et Golubev [62] ont également proposé une extension de la méthode GA à cinétique de coagulation bivariables, ce qui devrait vraisemblablement donner les équations différentielles ordinaires équivalentes à MQDMO pour le cas spatialement homogène [62]. Ainsi, les deux principaux avantages de l'utilisation de la méthodologie de MQDMO sont que :

- Premièrement, elle est facilement appliquée à spatialement équations de transport non homogènes dans laquelle de nouveaux termes se posent en raison de gradients spatiaux [60], dépendant de la taille de convection [63], et de la taille de diffusion [64].
- Deuxièmement, elle conserve tous les moments de réalisation lorsqu'il est utilisé dans les modèles de transport discrétisés (par exemple, la modélisation atmosphérique et le climat) [50].

L'EBP écrite en termes de l'un de coordonnées interne (ξ) devient (spatiale et

dépendances de temps sont supprimées pour plus de simplicité)

$$\frac{\partial f(\xi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\langle u_i | \xi \rangle f(\xi)] - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial f(\xi)}{\partial x_i} \right) = S_\xi(\xi). \quad (2.59)$$

Où $\langle u_i | \xi \rangle$ à la vitesse moyenne conditionnée sur la valeur de la propriété ξ , et $S_\xi(\xi)$ est le terme de source (par exemple, en raison de la croissance, l'agrégation, la rupture, etc.) contenant intégrales et dérivées par rapport à ξ .

La coefficient de diffusion D_x peut être rendue plus générale en incluant les effets anisotropes et une dépendance à ξ . Cependant, pour la clarté de la présentation, on supposera qu'il est seulement une fonction de x et t .

Pour les systèmes de particules la vitesse moyenne conditionnelle $\langle u_i | \xi \rangle$ représente la relation entre la vitesse et le solide de coordonnées (c'est à dire, taille des particules) internes, et peut être modélisés par une équation de transport séparée ou par une relation algébrique basée sur une forme d'expression de coefficient de trainée. Le terme source $S_\xi(\xi)$ contient toutes les transformations que la phase solide peut éventuellement subir, tels que la nucléation, la croissance moléculaire, l'agrégation et la rupture [50].

Si l'équation(2.57) est substitué dans l'équation (2.59), on obtient :

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \delta(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \omega_\alpha) - \frac{\partial D_x}{\partial x_i} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} - D_x \frac{\partial^2 \omega_\alpha}{\partial x_i^2} \right] \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \left[\omega_\alpha \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial t} + \omega_\alpha \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \langle \xi \rangle_\alpha) - \omega_\alpha \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial D_x}{\partial x_i} \right. \\ & \left. - D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} - D_x \frac{\partial^2 \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i^2} \omega_\alpha - D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \right] \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \delta''(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \left[D_x \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \omega_\alpha \right] = S_\xi(\xi) \end{aligned} \quad (2.60)$$

Où $(\delta'(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha))$ et $(\delta''(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha))$: les dérivées première et secondaire de la fonction généralisée $(\delta(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha))$ [65],

Et $(\langle u_i \rangle)_\alpha = \langle u_i \mid \xi = \xi_\alpha \rangle$: la vitesse caractéristique associée à la fonction delta (ou phase dispersée) α .

Il est intéressant de souligner que, en utilisant cette approche chaque fonction delta est par convection dans l'espace physique avec sa propre vitesse. Ceci fournit une description plus appropriée de systèmes multiphasés polydispersés que de supposer que la vitesse est identique pour toutes les phases [63].

Si les abscisses pondérés $\varsigma_\alpha = \omega_\alpha \langle \xi_\alpha \rangle$ sont introduits, après quelques manipulations, l'équation(2.60) peut être réécrite comme suit :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^N \delta(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \omega_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \right) \right] \\
& - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \left\{ \frac{\partial \varsigma_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \varsigma_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_\alpha}{\partial x_i} \right) \right. \\
& \left. - \langle \xi \rangle_\alpha \left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \omega_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \right) \right] \right\} \\
& - \sum_{\alpha=1}^N \delta''(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \left[D_x \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \omega_\alpha \right] = S_\xi(\xi).
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Cette expression est le point de départ pour établir des équations de transport pour les poids et les abscisses. Notez que le terme de source $S_\xi(\xi)$ ne comporte pas de produits dérivés ou intégraux par rapport à x et t , sa forme exacte n'est pas important à ce stade de la dérivation.

Nous définissons maintenant a_α et b_α sont les termes des sources de les équations de transport de MQDMO pour les poids ω_α et abscisses pondérés ς_α , respectivement :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \omega_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \right) &= a_\alpha, \\
\frac{\partial \varsigma_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \varsigma_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_\alpha}{\partial x_i} \right) &= b_\alpha.
\end{aligned} \tag{2.62}$$

De plus, C_α définit comme suit :

$$C_\alpha = D_x \omega_\alpha \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \xi \rangle_\alpha}{\partial x_i}. \quad (2.63)$$

Selon ces définitions, l'équation(2.61) peut être réécrit sous une forme plus simple :

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N [\delta(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) - \delta'(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) \langle \xi \rangle_\alpha] a_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) b_\alpha \\ & = \sum_{\alpha=1}^N \delta''(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) C_\alpha + S_\xi(\xi). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Cette équation peut maintenant utilisée pour déterminer les fonctions inconnues a_α et b_α en appliquant la transformation de moment.

Notez que pour des systèmes homogènes $\langle \xi \rangle_\alpha$ ne dépend pas de t , dans ce cas C_α sera nulle pour tous les α .

D'autre part, pour les flux inhomogène C_α sera différent de zéro, en fait, est le terme essentiel qui oblige les poids et les abscisses à correspondre exactement aux moments. En d'autres termes, une fois que le poids ω_α et ς_α ont été initialisé, l'équation(2.62) détermine leurs valeurs à tous les temps futurs [60].

En général, MQDMO peut être appliquée pour tout ensemble indépendant des moments que l'utilisateur souhaite contrôler. Le meilleur choix de moments supplémentaires dépend habituellement de problème. Par exemple, si les moments d'ordre fractionnée ont notamment un sens physique (c'est à dire, ils apparaissent en quantités mesurables) ils peuvent être employés. Dans ce qui suit, on va utiliser les moments entiers pour dériver les équations de transport de MQDMO [50].

Les moments entiers de la distribution de la taille des particules sont définis par

Hulburt et Katz [20] comme :

$$M_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^k f(\xi) d\xi = \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha \langle \xi \rangle_\alpha^k. \quad (2.65)$$

Avec $M_k (k = 0, \dots, 2N - 1)$,

L'algorithme du produit-Différence (*PD*) utilise pour déterminer ω_α et $\langle \xi \rangle_\alpha$ [66]. Donc pour démontrer la résolution des équations de transport pour M_k en utilisant l'algorithme de (*PD*) à chaque pas de temps, les moments peuvent être prédits avec précision [60].

Le but de MQDMO est de dériver des équations de transport pour ω_α et ζ_α qui peuvent être résolus directement et qui donnent le même M_k sans recourir à l'algorithme de *PD*. Ce problème a été partiellement résolu dans les cas homogènes par McGraw et Wright [67] en utilisant la transformation de matrice jacobienne (JMT). En effet, la transformation de matrice jacobienne et MQDMO sont mathématiquement équivalentes pour le monovarié, cas homogène et la seule différence se trouve dans le choix des variables transportées. Cependant, un certain nombre de problèmes théoriques et numériques de détails ne sont pas abordés par (JMT). Le problème le plus notable est que la façon de déterminer les abscisses et les changements de poids dus au transport spatial pour des cas non homogènes. MQDMO surmonte cela et d'autres difficultés [60].

En revenant maintenant à la détermination de a_α et b_α , étant donné que :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^k \delta(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) d\xi &= \langle \xi \rangle_\alpha^k, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^k \delta'(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) d\xi &= -k \langle \xi \rangle_\alpha^{k-1}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^k \delta''(\xi - \langle \xi \rangle_\alpha) d\xi &= k(k-1) \langle \xi \rangle_\alpha^{k-2}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Le moment de l'équation (2.64) de transformation :

$$(1 - k) \sum_{\alpha=1}^N \langle \xi \rangle_{\alpha}^k a_{\alpha} + k \sum_{\alpha=1}^N \langle \xi \rangle_{\alpha}^{k-1} b_{\alpha} = \bar{S}_k^{(N)} + \bar{C}_k. \quad (2.67)$$

Où les moments de termes de sources sont approchés par :

$$\bar{S}_k^{(N)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^k S_{\xi}(\xi) d\xi. \quad (2.68)$$

Et

$$\bar{C}_k = k(k-1) \sum_{\alpha=1}^N \langle \xi \rangle_{\alpha}^{k-2} C_{\alpha}. \quad (2.69)$$

La forme de la fonction de densité a été supposée (l'équation (2.57)), les moments de termes des sources seront fermés (c'est à dire ils seront des fonctions de ω_{α} Et $\langle \xi \rangle_{\alpha}$). Cependant, la précision de la représentation de N -point en quadrature $\bar{S}_k^{(N)}$ va augmenter avec l'augmentation de N . Ainsi, étant donné que dans la plupart des applications, la précision globale de MQDMO sera contrôlée par la précision de $\bar{S}_k^{(N)}$, la valeur de N doit être choisie suffisamment grande pour atteindre la précision désirée dans les conditions du moment de source. Comme indiqué précédemment [50].

On peut le voir à partir de l'équation (2.67), les termes des sources des équations de transport le N poids ω_{α} et le N abscisses pondérée ς_{α} peuvent être définie par un système linéaire impliquant les premiers moments entiers ($k = 0, \dots, 2N - 1$).

Le système linéaire dans l'équation (2.67) peut être écrit sous forme matricielle comme $A\alpha = d$. Pour $N > 2$, le système linéaire peut être résolu numériquement à chaque nœud de grille à chaque étape de temps pour trouver $a(v, t)$ et $b(v, t)$. Il convient de souligner ici qu'il y a des cas pour lesquels la matrice A n'est pas de plein rang.

Ces cas se produisent lorsque l'un ou plusieurs abscisses ξ_α sont indistinctes. D'une manière générale, le fait que A est singulier signifie qu'il existe un certain sous-espace de α qui est égale zéro ($A\alpha = 0$), mais qu'il y a aussi un sous-espace qui peut être atteint par A ; la dimension de ce sous-espace est le rang de la matrice [68]. Si le rang de A est inférieure à sa dimension, le système linéaire n'a pas de solution unique, et il y aura un $N - \rho(A)$ dimensions de solutions [50].

On va mentionner la méthode de quadrature directe des moments pour EBP bivariable et multivariable dans les sections B.2 et B.3 l'annexe B.

2.2.3.4 Équivalence entre MQDMO et MQMO

La méthode MQDMO diffère de la MQMO par le fait que pour celle-ci, ce sont les poids et les abscisses qui sont suivis par des équations de transport et non pas les moments [44].

Pour le cas monovariable, la MQDMO est mathématiquement équivalent à la MQMO, mais a l'avantage d'être directement de résoudre sans recourir à l'algorithme de PD. Les prévisions de la MQDMO sont comparés avec les prédictions de la MQMO pour des cas spécifiques afin de démontrer cette équivalence. En outre, des problèmes numériques possibles, les limites et le performance de la MQDMO sont présentés et discutés [69]. L'approche numérique se présente comme suit [60] :

- D'abord les conditions initiales pour les poids ω_α et les abscisses pondérées ς_α ont été fixés. Lorsque la distribution initial de la taille des particules était simple, les conditions initiales ont été fixées en forçant les nœuds de reproduire la distribution de la taille des particules (PSD). Lorsque le PSD initial est plus complexe, les moments de la distribution M_k ont été calculées à l'aide de l'algorithme de PD
- Puis les coefficients de pondération correspondant ω_α et les abscisses ξ_α ont été calculés.

- Par suite, à chaque pas de temps, les moments du terme de source $\bar{S}_k^{(N)}$ ont été évalués, alors le système linéaire l'équation (2.67) a été résolu, et les termes des sources des poids et les abscisses ont été ainsi déterminé.
- Enfin, l'aide de l'ODE intégrateur (En Matlab) ω_α et ς_α ont été mis à jour pour le pas de temps correspondant. Une méthode similaire a été utilisée pour faire avancer les poids et les abscisses pondérés pour les cas non homogènes après discrétisation les dérivées spatiales en utilisant un deuxième ordre de schéma aux différences centrales implicites.

2.3 Méthodes semi-analytiques

2.3.1 Méthode de décomposition d'Adomian

La méthode de décomposition d'Adomian est utilisée comme une méthode alternative pour résoudre un large éventail de problèmes dont les modèles mathématiques impliqués, l'algébriques, le différentiels, l'intégrales, l'intégré-différentielle, les équations différentielles ordinaires d'ordre supérieur, les équations aux dérivées partielles.

Depuis les années 1980, Adomian a proposé une nouvelle ingénieuse méthode pour résoudre exactement des équations fonctionnelles non linéaires [70, 71]. La méthode a été appliquée à de nombreux problèmes de frontières dans le domaine de l'ingénierie, la physique, la biologie et la chimie parmi d'autres domaines [4, 72]

George Adomian (1923-1996) a introduit une méthode puissante pour résoudre les équations fonctionnelles non linéaire. Depuis lors, cette méthode est connue comme la méthode de décomposition Adomian (ADM) [71, 73].

La technique est basée sur une décomposition d'une solution d'une équation fonctionnelle non linéaire dans une série de fonctions. Chaque terme de la série est obtenu à partir d'un polynôme généré par un développement en série de puissance d'une fonction analytique.

Le procédé d'Adomian est très simple dans une formulation abstraite mais la difficulté se pose dans le calcul des polynômes et pour prouver la convergence de la série de fonctions. La première preuve de la convergence de l'ADM a été donnée par Cherruault [74], qui a utilisé des théorèmes de point fixe pour les équations abstraites fonctionnelles. Depuis lors, de nombreux articles sur la convergence de l'ADM ont été publiés, y compris les travaux d'Abbaoui et Cherruault [75], Himoun, et coll [76], Hosseini et Nasabzadeh [77], Lesnic [78], et Rach [79]. En outre, Babolian et Biazar [80] ont été introduit l'ordre de convergence de l'ADM, Boumenir et Gordon [81] ont été discuté de le taux de convergence de l'ADM, et El-Kalla [82] ont été donné un autre regard sur l'analyse d'erreur de l'ADM.

De nombreux auteurs ont discuté la similitude de la méthode de décomposition d'Adomian à d'autres solutions analytiques et numériques de problèmes initiaux pour les équations différentielles telle que la méthode Picard d'itérations successives [83].

La méthode de décomposition 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 :

$$Fu = g. \quad (2.70)$$

$$F = L + R + N. \quad (2.71)$$

En substituant l'équation (2.70) dans l'équation (2.71) on obtient :

$$Lu + Ru + Nu = g. \quad (2.72)$$

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 (2.72) comme suit :

$$Lu = g - Ru - Nu. \quad (2.73)$$

En multipliant l'équation (2.73) par L^{-1} , on obtient :

$$L^{-1}(Lu) = L^{-1}g - L^{-1}(Ru) - L^{-1}(Nu). \quad (2.74)$$

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

Par conséquent, l'équation (2.74) devient :

$$u = u_0 - L^{-1}(Ru) - L^{-1}(Nu). \quad (2.75)$$

Où

$$L^{-1}(Lu) = u - u(0) + tu'(0). \quad (2.76)$$

Donc, u peut être présenté comme une série :

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n. \quad (2.77)$$

Le terme non-linéaire de $N(u)$ sera décomposé par la série infinie des polynômes Adomian A_n [73, 85] :

$$A_n = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right]_{\lambda=0} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.78)$$

Concernant la convergence de la méthode de décomposition Adomian, elle a été intensivement étudiée par Cherruault [74], Cherruault et Saccomandi [86] et Abbaoui et Cherruault [75].

2.3.2 La méthode d'itération variationnelle

Méthode d'itération variationnelle d'abord a été proposé par le mathématicien chinois He [87,88]. Cette méthode a été employée pour résoudre une grande variété de problèmes linéaires et non linéaires avec des approximations convergeant rapidement vers des solutions précises.

Cette approche est avec succès et efficacement appliquée à diverses équations physiques telles que l'équation Korteweg-de Vries Burgers KdV [89], les équations de retard différentiels [90], les équations différentielles ordinaires autonomes [91], l'équation Blasius [92], et aussi cette procédure est étudiée dans [93] pour résoudre l'équation de Helmholtz. La technique d'itération variationnelle est utilisée pour résoudre l'équation de dispersion non linéaire, une équation différentielle partielle non linéaire résultant dans le processus de la compréhension du rôle de la dispersion non linéaire et à la formation de structures comme des gouttes de liquide [94].

La Technique d'itération de variationnelle a été utiliser aussi pour résoudre le problème de la coagulation, ce qui est un processus important dans de nombreux domaines scientifiques différents, est décrit comme un problème non linéaire. La coagulation est un procédé très importante dans une grande variété de propriétés physiques, chimiques et biologiques [95].

M.Tatari et coll [96]] ont trouvé la solution inverse semi-linéaire de l'équation parabolique par la MIV. En utilisant cette méthode une séquence convergente rapide se produit qui tend à la solution exacte du problème. Ainsi, le procédé d'itération variationnelle est adapté pour trouver le rapprochement de la solution sans discrétisation du problème.

Donc cette méthode est maintenant largement utilisée dans de nombreux domaines tels que la physique [97], la chimie [98], les sciences biomédicale [99] et les sciences de l'ingénierie pour étudier les équations aux dérivées partielles linéaires et non linéaires [100,101].

Nous pouvons écrire la forme générale de l'équation différentielle voir l'équation

(2.70) comme suit [88] :

$$F = L + N. \quad (2.79)$$

En substituant L'équation (2.70) dans l'équation (2.79) on obtient :

$$Lu + Nu = g. \quad (2.80)$$

Où L : un opérateur linéaire,

N : un opérateur non linéaire,

g : un terme inhomogène.

He [87, 102] a introduit la méthode d'itération variationnelle où une correction fonctionnelle pour l'équation (2.80) qui peut être écrite comme suit :

$$u_{n+1} = u_n(t) + \int_0^t \lambda(u_n(\xi) + N\tilde{u}(\xi) - g(\xi))d\xi. \quad (2.81)$$

Dans l'équation ci-dessus λ est un multiplicateur général de Lagrange, qui peut être identifié de manière optimale par la théorie variationnelle, et \tilde{u} une variation limitée qui signifie $\delta\tilde{u} = 0$ [103–105]. Alors, la solution est donnée par $u = \lim_{n \rightarrow \infty} u_n$.

2.3.3 Méthode de perturbation homotopique

La méthode de perturbation homotopique (MPH), a été proposée et développée par He [106–108]. Au cours des dernières années, l'application de la méthode de perturbation homotopique (MPH) pour résoudre un large problèmes complexes dans l'ingénierie. Allant de l'équation des ondes non linéaires [109, 110]. Pour obtenir la solution de modèle dynamique non linéaire comme l'équation dynamique des gaz [111] et aussi dans la mécanique des fluides [112, 113].

Alors, la MPH est largement utilisée par les scientifiques et les ingénieurs pour fournir une solution analytique approchée pour diverses équations linéaire et non linéaire sur un domaine fini [114].

Cela se fait en convertissant une équation complexe, qui décrit le problème, d'une équation simple qui est relativement plus facile à résoudre [115]. Contrairement aux méthodes d'analyse de perturbation, la MPH ne nécessite pas l'utilisation d'un petit paramètre de perturbation ou une linéarisation. La procédure de solution est simple, et seulement quelques itérations sont nécessaires pour obtenir une convergence extrêmement rapide de la série de la solution pour la plupart des problèmes [116].

La caractéristique importante de la MPH est qu'elle fournit une solution presque exacte à un large éventail de problèmes linéaires et non linéaires, sans la nécessité d'hypothèses irréalistes, la linéarisation, la discrétisation et le calcul des polynômes Adomian [117].

Pour illustrer le concept de base de la méthode de perturbation homotopique, l'équation suivante différentiel non linéaire est considérée comme [106, 111, 112, 117] :

$$A(u) - f(r) = 0, r \in \Omega \quad (2.82)$$

Avec des conditions aux limites :

$$B(u, \frac{\partial u}{\partial n}) = 0, r \in \tau. \quad (2.83)$$

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 (2.82).

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

f : est une fonction analytique connue en fonction de r , et τ : 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 (2.70), peut être réécrite comme suit :

$$L(u) + N(u) - f(r) = 0. \quad (2.84)$$

Par la technique d'homotopie [109, 110], nous construisons une homotopie $v(r, p) : \Omega \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$:

$$h(v, p) = (1 - p) [L(v) - L(u_0)] + p [A(v) - f(r)] = 0, p \in [0, 1], r \in \Omega. \quad (2.85a)$$

$$h(v, p) = [L(v) - L(u_0)] + p [N(v) - f(r)] = 0. \quad (2.85b)$$

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

u_0 : est une première approximation de l'équation (2.82), qui la satisfait évidemment les conditions aux limites dans l'équation (2.83) que nous avons :

$$h(v, 0) = L(v) - L(u_0) = 0. \quad (2.86)$$

$$h(v, 0) = A(v) - f(r) = 0. \quad (2.87)$$

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 (2.85a) et (2.85b) peut être écrite comme une série de puissance de p :

$$v = v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots \quad (2.88)$$

On pose $p = 1$ conduire à la solution approchée de l'équation (2.82) :

$$u = \lim_{p \rightarrow 1} v = v_0 + v_1 + v_2 + \dots \quad (2.89)$$

La convergence de cette méthode a été prouvée par He [116]. L'équation (2.85a) peut être réécrite comme :

$$\begin{aligned} h(v, p) = p \left[L(u_0) + N(v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots) - f(r) \right] \\ + \left[L(v_0 + pv_1 + p^2v_2 + \dots) - L(u_0) \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.90)$$

2.4 Conclusion

Tout au long de ce chapitre, nous avons présenté des différentes méthodes de résolution de l'équation du bilan de population, qui ont été appliquées dans les études précédentes :

- Dans la section 2.2, nous avons introduit les méthodes numériques comme :
 - les méthodes de Monte Carlo qui ont été classées comme des méthodes algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Ces méthodes sont particulièrement utilisées pour calculer des intégrales en dimensions plus grandes que un (1). Elles sont également couramment utilisées dans le bilan de population, où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme des particules. La comparaison des données mesurées à ces simulations peut permettre de mettre en évidence des caractéristiques inattendues, par exemple de nouvelles particules.
 - On a présenté les méthodes de classe, qui se basent sur une discrétisation de la population de particules en un nombre déterminé de classes et pour résoudre une équation différentielle comme l'équation du bilan de population on fait juste l'inégale dans chaque classe puis on calcule la sommation des résultats obtenu d'après le calcul d'intégrale dans chaque classe.
 - nous avons étudié les méthodes des moments qui se basent sur un suivi des moments de la distribution, plutôt que de suivre la distribution elle même.

Donc toutes ces différentes méthodes numériques sont différentes dans le processus de résolution de l'équation du bilan de population mais elles ont un unique objectif que la convergence vers la solution exacte ou bien l'approche de la solution exacte. Mais elles sont désavantagées au raison de la discrétisation lorsque la convergence vers la solution exacte est très difficile et prend beaucoup de temps dans certains cas pour cela les chercheurs vont vers les méthodes semi-analytique.

- Dans la section 2.3, nous avons étudié quelques méthodes semi-analytique comme :

- la méthode de décomposition d'Adomian résoudre des équations différentielles non linéaires ordinaires et partielles. La méthode a été développée par George Adomian. Elle est basée sur la décomposition de l'opérateur non linéaire en série.
- nous avons déjà présenté la méthode d'itération variationnelle. Récemment introduit par He , qui donne rapidement approximations successives convergentes de la solution exacte si une telle solution existe, a fait ses preuves dans la réalisation de solutions analytiques linéaires et les équations différentielles non linéaires.

Pour résoudre les problèmes non linéaires, il faut utiliser les polynômes de He. Cette méthode est préférable à des méthodes numériques comme il est libre de erreurs d'arrondi et ne nécessite / mémoire de grande puissance de l'ordinateur.

- On a étudié la méthode de perturbation homotopique, qui transforme un problème difficile dans un problème simple, qui peut ensuite être facilement résolu. et aussi elle permet d'approcher la solution exacte comme une somme infinie de termes analytiques.

La procédure de solution est simple, et seulement quelques itérations sont nécessaires pour obtenir une convergence extrêmement rapide de la série de la solution pour la plupart des problèmes.

Le caractère le plus important de la MPH est qu'elle fournit une solution presque exacte à un nombreux de problèmes linéaires et non linéaires, sans la nécessité d'hypothèses irréalistes, la linéarisation, la discrétisation et le calcul des polynômes d'Adomian.

Les méthodes semi-analytique présentées dans ce chapitre 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 de rapidement que celles des méthodes numériques.

Résultats et discussion

Sommaire

3.1 Introduction	68
3.2 Rupture des particules dans les systèmes discontinus	69
3.3 Rupture des particules dans les systèmes à écoulement continu . . .	75
3.4 Conclusion	82

3.1 Introduction

Les équations du bilan de population (EBPs) sont similaires aux équations du bilan de masse et d'énergie. Ils décrivent une loi du bilan pour un nombre d'individu d'une population donnée, tels que des cristaux, des gouttelettes, des bactéries,... etc.

Ce qui rend l'EBPs plus intéressantes que les équations de bilan de masse c'est l'incorporation de plusieurs phénomènes qui sont responsables de l'évolution de la population des individus. En plus par rapport aux flux d'entrée et de sortie de particules, c'est à dire, le système d'écoulement soit continu ou bien discontinu, il qu'il existe plusieurs autres mécanismes qui sont responsables de la variation de la population des particules

dans le même volume considéré. De nouvelles particules peuvent être nées d'une solution sursaturée donnée. Ce processus augmente la population de petites particules. Donc, la particule de taille inférieure peut se développer pour former une plus grande particule par le processus d'agrégation et une plus grosse peut subir la rupture pour former des particules de tailles inférieures.

En raison des phénomènes mentionnés ci-dessus pour la description du comportement dynamique des processus des particules qui consiste essentiellement à préciser l'évolution temporelle de la distribution des particules.

Le changement temporel de la fonction densité en nombre est décrit par l'équation du bilan de population (EBP), qui est une équation intégrale différentielle partielle (EIDP).

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'application de deux nouvelles techniques semi-analytiques : la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode d'itération variationnelle pour résoudre l'équation du bilan de population pour la rupture.

Dans la première section 3.2 nous allons résoudre l'EBP aux systèmes d'écoulement discontinu et aux systèmes d'écoulement continu dans la section 3.3.

3.2 Rupture des particules dans les systèmes discontinus

3.2.1 Cas 1. Fonction de rupture parabolique et $n(v, 0) = \delta(v - b)$

L'équation du bilan de population pour la rupture dans un système discontinu a été donnée par les équations (1.30) et (1.31).

L'équation (1.31) a été étudiée par Ziff et coll [18] pour le cas de rupture de polymère avec un taux général, qui est proportionnel au cube de la longueur et avec une distribution parabolique des particules filles .

Dans l'équation ci-dessus, $F(v, v')$ est le taux d'une particule de taille v qui se décompose en particules de tailles v' et $v - v'$. Ce taux de rupture est considéré comme $F(v, v') = vv'$. Où la rupture est préférentiellement dans le centre de la chaîne de poly-

mère [18].

Avec la condition initiale $n(v, 0) = \delta(v - b)$. L'équation (1.31) devient comme suit :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = 2 \int_v^\infty v(v' - v)n(v', t) dv' - \frac{v^3}{6}n(v, t) \quad (3.1)$$

3.2.1.1 Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)

Nous déterminons la solution de l'équation (3.1) par cette méthode comme suit :

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b). \quad (3.2)$$

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(btv - tv^2)\varphi(b - v). \quad (3.3)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v - b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b - v). \quad (3.4)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{1296}t^3v^9\delta(v - b) + \frac{1}{180}(b^6t^3v^2 - bt^3v^7)\varphi(b - v) \quad (3.5)$$

De la même façon, on peut calculer $n_4(v, t)$, $n_5(v, t)$, . . . , $n_m(v, t)$. En général $n_m(v, t)$ est la solution de :

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty 2v(v' - v)n_m(v', t) dv' - \frac{v^3}{6}n_m(v, t) \right) dt \quad (3.6)$$

Par conséquent, nous calculons le terme général comme suit :

$$n_{m+1}(v, t) = \frac{2^{2-m}3^{1-m}b(-tv^3)^m\varphi(b - v)}{(-4 + 3m)v^2\gamma(m)} \quad (3.7)$$

Alors

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_{m+1}(v, t) = e^{\frac{tv^3}{6}}\delta(v - b) + 4v^2b \left(\frac{t}{6} \right)^{\frac{4}{3}} \times \left(\gamma \left(\frac{-1}{3}, \frac{tv^3}{6} \right) - \gamma \left(\frac{-1}{3}, \frac{tb^3}{6} \right) \text{UnitStep}[b - v] \right) \quad (3.8)$$

Qui converge vers la solution exacte.

3.2.1.2 Méthode d'itération variationnelle de He

Par la même procédure utilisée par la méthode d'Adomian (MDA), nous pouvons trouver la solution de l'équation (3.1) par la méthode d'itération variationnelle comme suit :

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b) \quad (3.9)$$

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty 2v(v' - v)n_m(v', t) dv' - \frac{v^3}{6}n_m(v, t) - \frac{\partial n_m(v, t)}{\partial t} \right) dt + n_m(v, t). \quad (3.10)$$

$$n_1(v, t) = \delta(v - b) - \frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(btv - tv^2)\varphi(b - v). \quad (3.11)$$

$$n_2(v, t) = \delta(v - b) - \frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(btv - tv^2)\varphi(b - v) + \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v - b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b - v). \quad (3.12)$$

$$n_3(v, t) = \delta(v - b) - \frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(btv - tv^2)\varphi(b - v) + \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v - b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b - v) - \frac{1}{1296}t^3v^9\delta(v - b) + \frac{1}{180}(b^6t^3v^2 - bt^3v^7)\varphi(b - v). \quad (3.13)$$

La série ci-dessus peut être généralisée par la solution exacte suivante :

$$n(v, t) = 4v^2b \left(\frac{t}{6} \right)^{\frac{4}{3}} \left(\gamma \left(\frac{-1}{3}, \frac{tv^3}{6} \right) - \gamma \left(\frac{-1}{3}, \frac{tb^3}{6} \right) \text{UnitStep}[b - v] \right) + e^{\frac{tv^3}{6}} \delta(v - b). \quad (3.14)$$

En effet, les résultats obtenus par ces deux méthodes sont analytiques et par conséquent la stabilité de la solution numérique et les problèmes cruciaux de discrétisation numérique qui détériorent la performance des techniques antérieures sont totalement absents dans cette procédure.

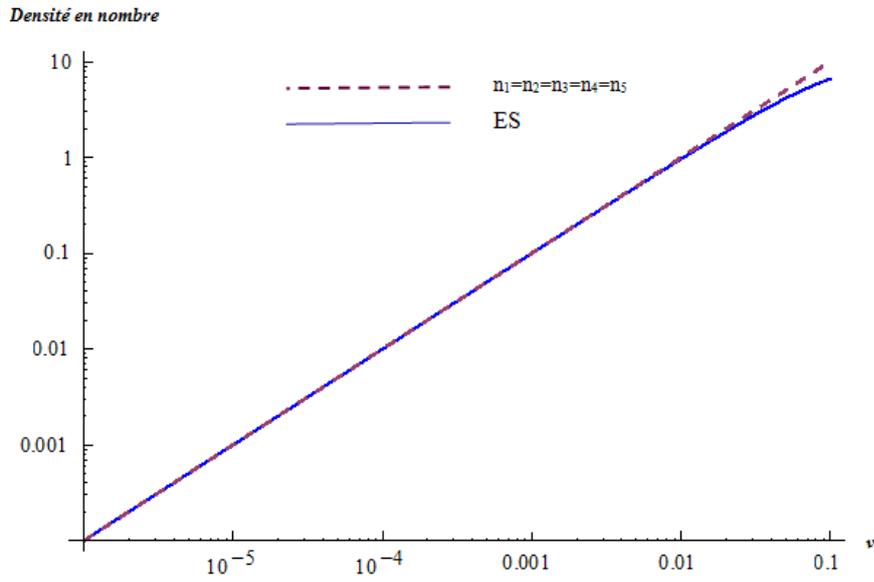


FIGURE 3.1: L'effet de la troncature de la solution en utilisant $n = 1 - 5$ itérations $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5)$ et la solution exacte (SE en ligne continue de l'équation (3.8) de la fonction de densité en nombre pour la rupture de particules.

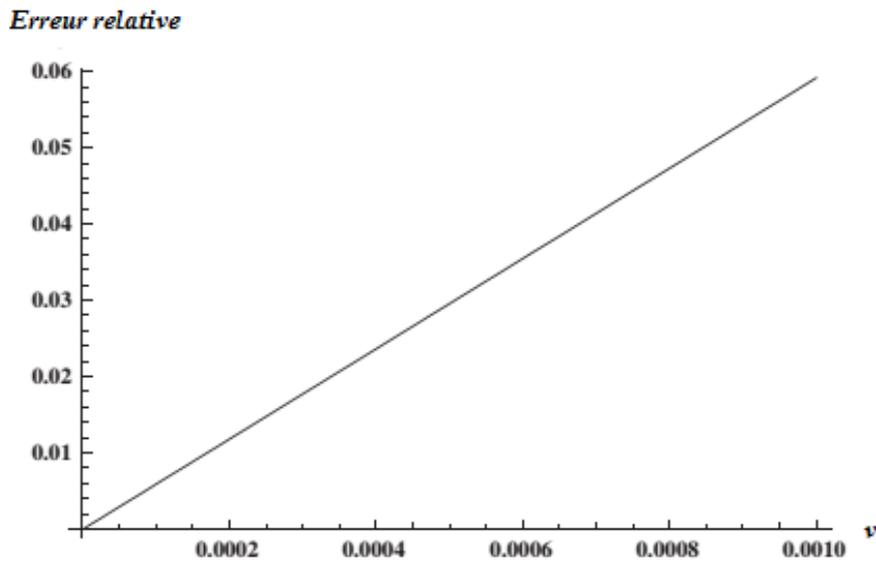


FIGURE 3.2: L'erreur relative entre la solution approchée (SA) et la solution exacte(SE).

3.2.2 Cas 2. Rupture binaire parabolique avec $n(v, 0) = e^{-v}$

Nous avons utilisé dans ce cas une distribution parabolique des particules filles pour la rupture binaire qui conserve la masse, et symétrique comme elle est proposé dans [118, 119] :

$$\beta(v/v') = \frac{24 \left(1 - \frac{h}{2}\right) \left(v^2 - vv' + \frac{v'^2}{4}\right)}{v^3} + \frac{h}{v'} \quad (3.15)$$

Notez pour que $\beta(v/v')$ soit positive, h doit satisfaire ($0 \leq h \leq 3$). D'autre part, pour ($0 < h < 2$), la fonction ci-dessus représente une parabole concave, tandis que pour $2 < h < 3$, elle représente une parabole convexe. A $h = 2$ la fonction est réduite à une rupture binaire uniforme.

L'objectif principal de ce cas est de comparer la solution donnée par la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode d'itération variationnelle de He. Dans ce cas, les résultats de simulation obtenus par les deux méthodes pour trois valeurs de h où ($h = 0, 1, 2$), ont été comparés avec les solutions analytiques [4], où les fréquences de rupture sont respectivement $\Gamma(v') = v$ et $\Gamma(v') = v^2$.

On tronque la série jusqu'au niveau $n = 5$ pour vérifier la validité des équations avec la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode d'itération variationnelle de He. Pour $h = 0$, et $h = 1$, les solutions analytiques ne sont pas disponibles dans la littérature.

D'autre part; pour trouver tous les termes de la série ce n'est pas une tâche facile parce que les polynômes sont très complexes. Pour $h = 2$ l'équation (3.15) est réduite à la rupture binaire uniforme, où les fréquences de rupture $\Gamma(v') = v$ et $\Gamma(v') = v^2$ ont été utilisés. Tous les termes de la série obtenue par les deux méthodes sont simples et la déduction du terme général comme une sommation finie donnant une forme analytique pour la solution de ce cas particulier [4]

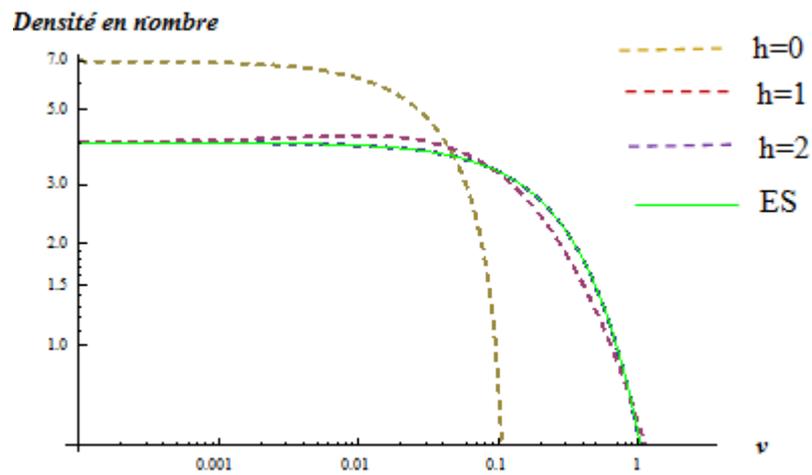


FIGURE 3.3: La densité en nombre des particules avec une distribution parabolique de particules filles pour trois valeurs de $h = 0, 1, 2$ et comparaisons avec les solutions analytiques [4] pour $\Gamma(v') = v^2$.

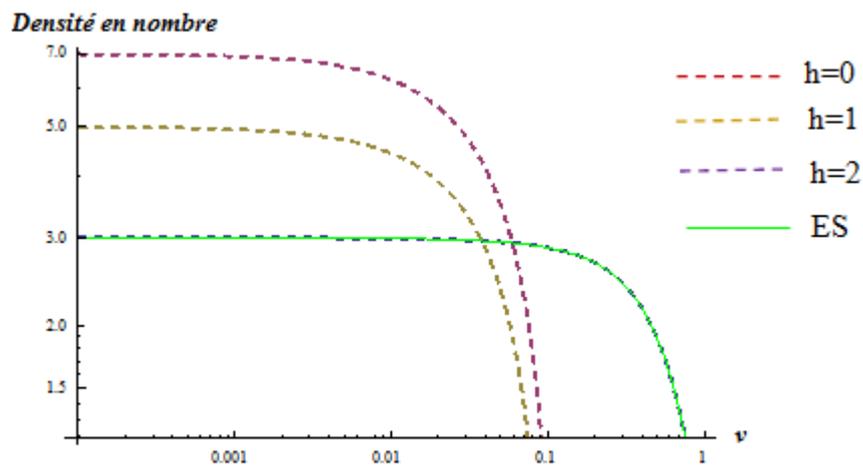


FIGURE 3.4: La densité en nombre des particules avec une distribution parabolique de particules filles pour trois valeurs de $h = 0, 1, 2$ et comparaisons avec les solutions analytiques [4] pour $\Gamma(v') = v$.

3.3 Rupture des particules dans les systèmes à écoulement continu

3.3.1 Cas 1. Rupture avec distribution de particules filles uniforme et

$$\Gamma(v') = v$$

Dans ce cas, une condition initiale égale à zéro et une alimentation monodispersée sont utilisées. La distribution d'alimentation monodispersée est représentée mathématiquement par la fonction delta de Dirac comme suit :

$$n^{feed}(v) = \frac{t\delta(v-b)}{\theta}. \quad (3.16)$$

En introduisant cette équation dans l'équation du bilan de population (EBP) nous obtenons :

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{1}{\theta} \left(n^{feed}(v,t) - n(v,t) \right) + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v',t) dv' - \Gamma(v)n(v,t). \quad (3.17)$$

Maintenant, nous réécrivons l'équation (3.17) :

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{n^{feed}(v)}{\theta} + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v',t) dv' - n(v,t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right). \quad (3.18)$$

Par conséquent, la dernière forme de rupture de la particule dans un système à écoulement continu, qui convient à l'application des MDA et MIV, est donnée par :

$$n(v,t) = \frac{n^{feed}(v)}{\theta}t + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v',t) dv' - n(v,t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) \right) dt. \quad (3.19)$$

3.3.1.1 Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)

La solution par le schéma récursif de la MDA est donnée par :

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_m(v', t) dv' - n_m(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) \right) dt. \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.20)$$

$$n_1(v, t) = - \frac{t^2 \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v - b) - 2b\varphi(b - v) \right)}{2\theta}. \quad (3.21)$$

$$n_2(v, t) = \frac{t^3 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v - b) - 4b\varphi(b - v) \right)}{6\theta}. \quad (3.22)$$

$$n_3(v, t) = - \frac{t^4 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v - b) - 6b\varphi(b - v) \right)}{24\theta}. \quad (3.23)$$

$$n_m(v, t) = (-1)^m \frac{t^{m+1} \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^{m-1} \delta(v - b) - 2mb\varphi(b - v) \right)}{(m+1)! \theta}. \quad (3.24)$$

En utilisant le terme général ci-dessus, la somme générale est donnée par :

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{t^{m+1} \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^{m-1} \delta(v - b) - 2mb\varphi(b - v) \right)}{(m+1)! \theta}. \quad (3.25)$$

Donc, la solution exacte simplifiée est :

$$n(v, t) = - \frac{e^{t(v^2 + \frac{1}{\theta})} \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v - b) + \left(2b + \frac{2}{\theta}bt + 2btv^2 \right) UnitStep[b - v] \right)}{\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \theta} + \frac{\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v - b) + 2b UnitStep[b - v]}{\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \theta}. \quad (3.26)$$

3.3.1.2 Méthode d'itération variationnelle de He (MIV)

Comme dans le cas de MDA, la solution en utilisant la MIV est calculée comme suit :

$$n_0 = \frac{t\delta(v-b)}{\theta}. \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} n_{m+1}(v, t) = & \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n_m(v', t) dv' - \Gamma(v)n_m(v, t) + \frac{\partial n_m(v, t)}{\partial t} \right) dt \\ & + n_m(v, t). \end{aligned} \quad (3.28)$$

À partir de laquelle on calcule les termes solutions comme suit :

$$n_1(v, t) = -\frac{t^2 \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) - 2b\varphi(b-v) \right)}{2\theta}. \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} n_2(v, t) = & -\frac{t^2 \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) - 2b\varphi(b-v) \right)}{2\theta} \\ & + \frac{t^3 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) - 4b\varphi(b-v) \right)}{6\theta}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} n_3(v, t) = & -\frac{t^2 \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) - 2b\varphi(b-v) \right)}{2\theta} \\ & + \frac{t^3 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) - 4b\varphi(b-v) \right)}{6\theta} \\ & - \frac{t^4 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) - 6b\varphi(b-v) \right)}{24\theta}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Par conséquent, la solution exacte est :

$$\begin{aligned} n(v, t) = & -\frac{e^{t(v^2 + \frac{1}{\theta})} \left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) + \left(2b + \frac{2}{\theta}bt + 2btv^2 \right) \text{UnitStep}[b-v] \right)}{\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \theta} \\ & + \frac{\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \delta(v-b) + 2b \text{UnitStep}[b-v]}{\left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \theta}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

L'équation (3.32) a essentiellement la même solution que celle trouvée en utilisant la méthode de MDA.

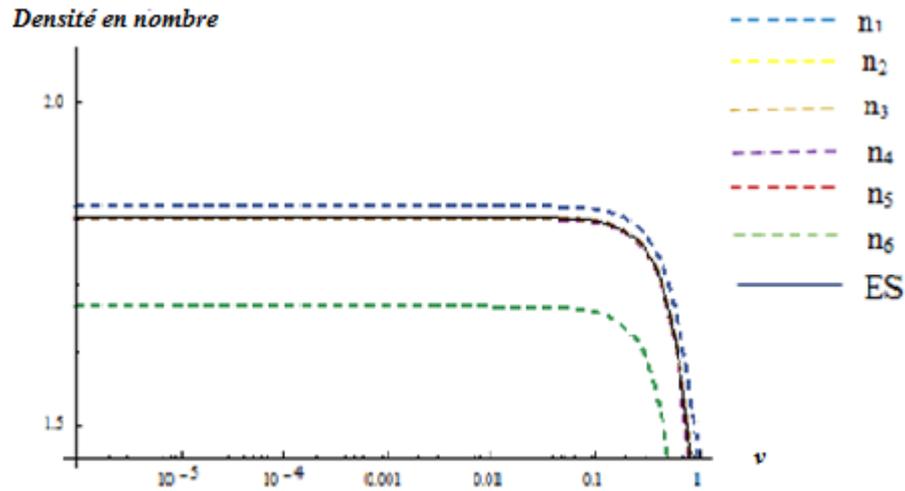


FIGURE 3.5: Effet de la troncature de la série sur la solution en utilisant la série pour $n = 1 - 6$ itérations ($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$) et comparaison à la solution exacte donnée par l'équation (3.32) (*SE* ligne continue) pour une fonction de distribution parabolique des particules filles dans un système d'écoulement continu.

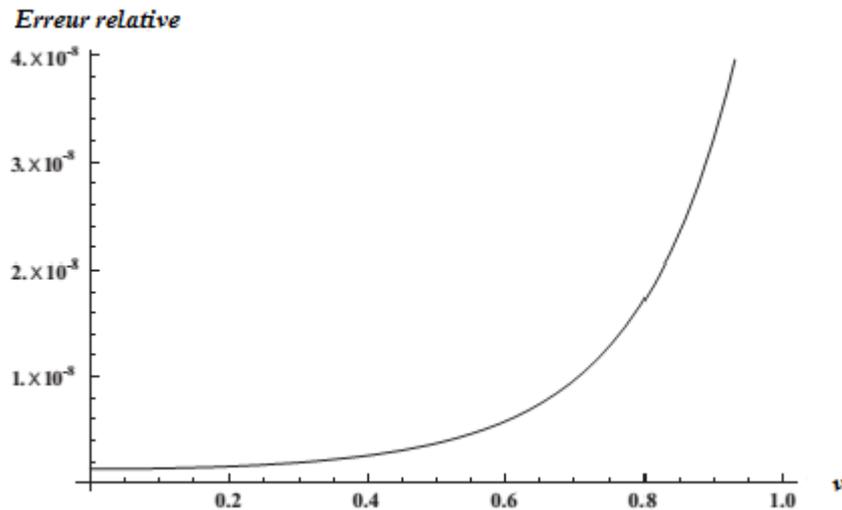


FIGURE 3.6: L'erreur relative entre la solution approchée (SA) et la solution exacte(SE).

3.3.2 Cas 2. Rupture avec une distribution des particules fille uniforme et $\Gamma(v') = v^2$

Dans ce cas, la condition initiale est nulle et la distribution d'alimentation est une fonction exponentielle par rapport à v . L'équation du bilan de population (EBP) pour ce cas particulier est donné par :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{\theta} \left(n^{feed}(v, t) - n(v, t) \right) + \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \quad (3.33)$$

Donc, la forme finale de l'équation à résoudre est :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{n^{feed}(v)}{\theta} + \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) \quad (3.34)$$

3.3.2.1 Méthode de décomposition d'Adomian (MDA)

Maintenant, le schéma récursif d'Adomian est donné par :

$$n_0(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta}. \quad (3.35)$$

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_m(v', t) dv' - n_m(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) \right) dt. \quad (3.36)$$

$m = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right). \quad (3.37)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6\theta} e^{-v} t^3 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right) \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right). \quad (3.38)$$

$$n_3(v, t) = \frac{1}{24\theta} e^{-v} t^4 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^2 \left(\frac{1}{\theta} - 6 - 6v + v^2 \right). \quad (3.39)$$

En utilisant les termes ci-dessus, le terme général est déduit comme suit :

$$n_m(v, t) = (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)! \theta} e^{-v} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^{m-1} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 - 2m(1+v) \right). \quad (3.40)$$

Et la sommation finale peut être écrite comme suit :

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)! \theta} e^{-v} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^{m-1} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 - 2m(1+v) \right). \quad (3.41)$$

Enfin, cette somme est réduite à :

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{\frac{1}{\theta} + v^2 + 2(1+v)}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} - e^{t(v^1 + \frac{1}{\theta})} \left(\frac{2(1+v + tv^2 + tv^3) + \frac{1}{\theta}(1 + 2t + 2tv) + v^2}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} \right) \right). \quad (3.42)$$

3.3.2.2 Méthode d'itération variationnelle de He (MIV)

L'application de la MIV à l'équation (3.33) donne :

$$n_0(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta}. \quad (3.43)$$

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_m(v', t) dv' - n_m(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) \right) dt. \quad (3.44)$$

$$n_1(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta} - \frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right). \quad (3.45)$$

$$n_2(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta} - \frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right) + \frac{1}{6\theta} e^{-v} t^3 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right) \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right). \quad (3.46)$$

$$n_3(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta} - \frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right) + \frac{1}{6\theta} e^{-v} t^3 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right) \left(\frac{1}{\theta} - 2 - 2v + v^2 \right) - \frac{1}{24\theta} e^{-v} t^4 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^2 \left(\frac{1}{\theta} - 6 - 6v + v^2 \right). \quad (3.47)$$

Par conséquent, la solution exacte est donnée par :

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{\frac{1}{\theta} + v^2 + 2(1+v)}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} - e^{t(v^1 + \frac{1}{\theta})} \left(\frac{2(1+v + tv^2 + tv^3) + \frac{1}{\theta}(1 + 2t + 2tv) + v^2}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} \right) \right) \quad (3.48)$$

Cette équation est essentiellement la même solution que celle trouvée en utilisant la MDA (l'équation (3.42)).

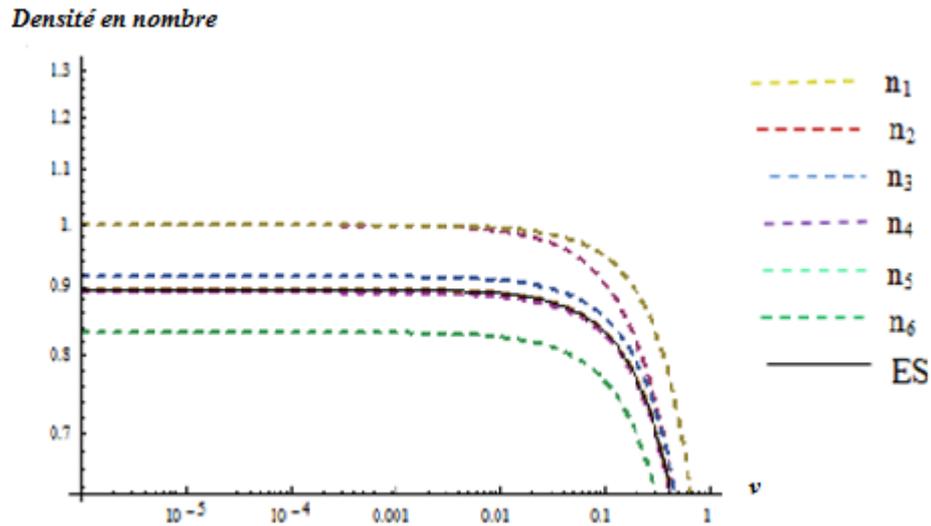


FIGURE 3.7: l'effet de la troncature de la série sur la solution en utilisant la série pour $n = 1 - 6$ itérations ($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$) et comparaison à la solution exacte donnée par l'équation (3.42) (SE ligne continue) pour une fonction de distribution paraboliques des particules filles dans un système continu.

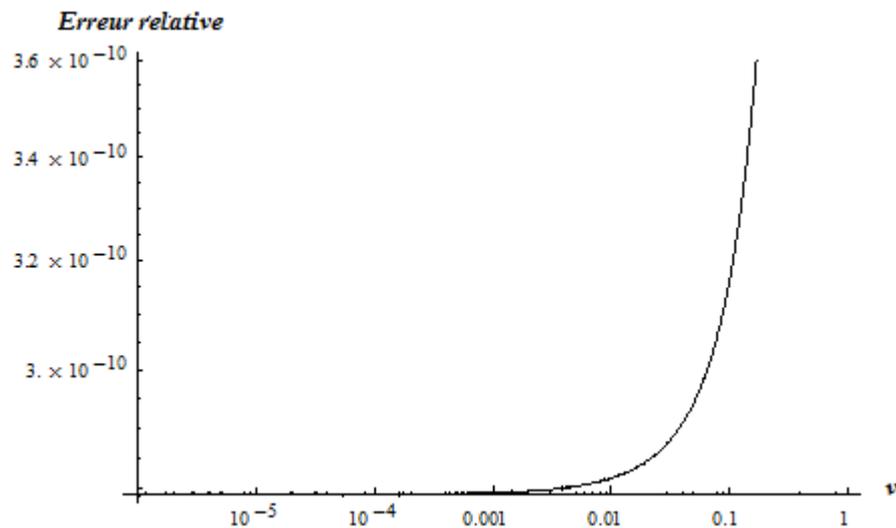


FIGURE 3.8: L'erreur relative entre la solution approchée (SA) et la solution exacte (SE).

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons examiné l'application de la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode d'itération variationnelle pour résoudre l'équation intégrodifférentielle du bilan de population pour la rupture dans les deux systèmes continu et discontinu. Les résultats de résolution de l'équation du bilan de population obtenus par la méthode d'Adomian et la méthode d'itération variationnelle sont très identiques pour les deux systèmes et dans tous les cas étudiés.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude de résolution de l'équation de bilan de population pour les systèmes continus et discontinus.

La méthode de décomposition d'Adomian et la méthode d'itération variationnelle ont été utilisés avec succès pour résoudre les équations de bilan de population de particules dans les systèmes d'écoulements continus et discontinus avec des formes fonctionnelles hypothétiques de fréquences de rupture et de distributions de particules filles.

Les solutions obtenues par les techniques des MDA et MIV étaient des séries de puissances infinies avec des conditions initiales appropriées. Les deux méthodes ont données de bonnes approximations aux solutions exactes avec leur série qui convergent rapidement pour tous les cas étudiés dans ce travail.

On conclut que les deux méthodes utilisées sont robuste et efficaces et ont une capacité remarquable à résoudre l'équation de bilan de population de point de vue analytique ou numérique.

Comme perspectives, il serait intéressant :

- D'introduire d'autre méthodes semi-analytiques de résolution de l'équation de bilan de population et faire des comparaisons entre elles afin de montrer l'intérêt d'utilisation de ces méthodes en génie des procédés.

- De résoudre l'équation de bilan de population avec incorporation des phénomènes d'agrégation et de croissance afin de simuler le comportement réel des phases dispersées dans diverses applications dans de nombreuses disciplines de recherche scientifique telles que biologique, environnementale et chimique....

Bibliographie

- [1] 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.
- [2] Shamsul Qamar. *Modeling and simulation of population balances for particulate processes*. PhD thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsbibliothek, 2008.
- [3] Jitendra Kumar. *Numerical approximations of population balance equations in particulate systems*. PhD thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsbibliothek, 2006.
- [4] 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.
- [5] Doraiswami Ramkrishna. *Population balances : Theory and applications to particulate systems in engineering*. Academic press, 2000.

-
- [6] z and Ning. Distinct element simulation of impact breakage of lactose agglomerates. modeling of coating in a jet-fluidized bed. *Advanced Powder Technology*, 18(5) :311–327, 2007.
- [7] Karen P Hapgood, Melvin XL Tan, and Darren WY Chow. A method to predict nuclei size distributions for use in models of wet granulation. *Advanced Powder Technology*, 20(4) :293–297, 2009.
- [8] Maximilian L Eggersdorfer and Sotiris E Pratsinis. Agglomerates and aggregates of nanoparticles made in the gas phase. *Advanced Powder Technology*, 25(1) :71–90, 2014.
- [9] Anwesha Chaudhury, Avi Kapadia, Anuj V Prakash, Dana Barrasso, and Rohit Ramachandran. An extended cell-average technique for a multi-dimensional population balance of granulation describing aggregation and breakage. *Advanced Powder Technology*, 24(6) :962–971, 2013.
- [10] Cai Y Ma, Xue Z Wang, and Kevin 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. *Advanced Powder Technology*, 18(6) :707–723, 2007.
- [11] Rudiyanto Gunawan, Irene Fusman, and Richard D Braatz. High resolution algorithms for multidimensional population balance equations. *AIChE Journal*, 50(11) :2738–2749, 2004.
- [12] Anwesha Chaudhury, Alexander Niziolek, and Rohit Ramachandran. Multi-dimensional mechanistic modeling of fluid bed granulation processes : an integrated approach. *Advanced Powder Technology*, 24(1) :113–131, 2013.

-
- [13] SM Alavi, L Mirmomen, and K Saleh. Experimental study and particle population modeling of coating in a jet-fluidized bed. *Advanced Powder Technology*, 18(3) :311–327, 2007.
- [14] Omid Ashrafi, Hassan Nazari-Pouya, Navid Mostoufi, and Rahmat Sotudeh-Gharebagh. Particle size distribution in gas-phase polyethylene reactors. *Advanced powder technology*, 19(4) :321–334, 2008.
- [15] Nagaravi Kumar Varma Nadimpalli, Venkata Sudheendra Buddhiraju, and Venkataramana Runkana. Modeling and simulation of carbon black synthesis in an aerosol flame reactor. *Advanced Powder Technology*, 22(1) :141–149, 2011.
- [16] EL Goldberg and SV Pavlov. Particle interaction in the grinding model. *Advanced Powder Technology*, 5(3) :281–287, 1994.
- [17] Ya Yao, Yi-Jun He, Zheng-Hong Luo, and Lan Shi. 3d cfd-pbm modeling of the gas–solid flow field in a polydisperse polymerization fbr : The effect of drag model. *Advanced Powder Technology*, 25(5) :1474–1482, 2014.
- [18] Robert M Ziff and ED McGrady. The kinetics of cluster fragmentation and depolymerisation. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 18(15) :3027, 1985.
- [19] PJ Blatz and AV Tobolsky. Note on the kinetics of systems manifesting simultaneous polymerization-depolymerization phenomena. *The journal of physical chemistry*, 49(2) :77–80, 1945.
- [20] Ho M Hulburt and Stanley Katz. Some problems in particle technology : A statistical mechanical formulation. *Chemical Engineering Science*, 19(8) :555–574, 1964.
- [21] D Randolph Alan and A Larson Maurice. Theory of particulate processes, 1988.

-
- [22] Krassimir D Danov, Ivan B Ivanov, Theodor D Gurkov, and Rajendra P Borwankar. Kinetic model for the simultaneous processes of flocculation and coalescence in emulsion systems. *Journal of colloid and interface science*, 167(1) :8–17, 1994.
- [23] Cheng-Fa Lu and LA Spielman. Kinetics of floc breakage and aggregation in agitated liquid suspensions. *Journal of colloid and interface science*, 103(1) :95–105, 1985.
- [24] Mark Z Jacobson. 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 (1984–2012)*, 107(D19) :AAC–2, 2002.
- [25] Friedrich Srienc. Cytometric data as the basis for rigorous models of cell population dynamics. *Journal of biotechnology*, 71(1) :233–238, 1999.
- [26] Nikos V Mantzaris and Prodromos Daoutidis. Cell population balance modeling and control in continuous bioreactors. *Journal of Process Control*, 14(7) :775–784, 2004.
- [27] Achim Gerstlauer. Herleitung und reduktion populationsdynamischer modelle am beispiel der flüssig-flüssig-extraktion. *FORTSCHRITT BERICHTE-VDI REIHE 3 VERFAHRENSTECHNIK*, 1999.
- [28] Simon M Iveson, James D Litster, Karen Hapgood, and Bryan J Ennis. Nucleation, growth and breakage phenomena in agitated wet granulation processes : a review. *Powder technology*, 117(1) :3–39, 2001.
- [29] Safyan Mukhtar. *Numerical Solutions of Population Balance Models in Dispersed Systems*. PhD thesis, COMSATS Institute of Information Technology, Islamabad, 2011.

- [30] Stefan Heinrich, Mirko Peglow, Matthias Ihlow, Markus Henneberg, and Lothar Mörl. Analysis of the start-up process in continuous fluidized bed spray granulation by population balance modelling. *Chemical Engineering Science*, 57(20) :4369–4390, 2002.
- [31] JP Barone, W Furth, and S Loynaz. Simplified derivation of the general population balance equation for a seeded, continuous flow crystallizer. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 58(1) :137–138, 1980.
- [32] HP Robert and WG Don. Perry's chemical engineers handbookmcgraw-hill. *New York*, 1985.
- [33] Iltaf Hussain, Safyan Mukhtar, Shamsul Qamar, and Aasim Ullah Jan. Bivariate extension of quadrature method of moments for solving volume-based population balance models. *World Applied Sciences Journal*, 23(12) :41–47, 2013.
- [34] Jitendra Kumar, M Peglow, G Warnecke, S Heinrich, and L Mörl. Improved accuracy and convergence of discretized population balance for aggregation : The cell average technique. *Chemical Engineering Science*, 61(10) :3327–3342, 2006.
- [35] Benjamin J McCoy and Giridhar Madras. Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation. *Chemical Engineering Science*, 58(13) :3049–3051, 2003.
- [36] PB Dubovskii, VA Galkin, and IW Stewart. Exact solutions for the coagulation-fragmentation equation. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 25(18) :4737, 1992.
- [37] Man Hoi Lee. On the validity of the coagulation equation and the nature of runaway growth. *Icarus*, 143(1) :74–86, 2000.
- [38] BK Mishra. Monte carlo simulation of particle breakage process during grinding. *Powder Technology*, 110(3) :246–252, 2000.

- [39] RC Everson, D Eyre, and QP Campbell. Spline method for solving continuous batch grinding and similarity equations. *Computers & chemical engineering*, 21(12) :1433–1440, 1997.
- [40] Sanjeev Kumar and D Ramkrishna. On the solution of population balance equations by discretization—i. a fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science*, 51(8) :1311–1332, 1996.
- [41] Sanjeev Kumar and D Ramkrishna. On the solution of population balance equations by discretization—ii. a moving pivot technique. *Chemical Engineering Science*, 51(8) :1333–1342, 1996.
- [42] M Kostoglou and AJ Karabelas. An assessment of low-order methods for solving the breakage equation. *Powder Technology*, 127(2) :116–127, 2002.
- [43] M Kostoglou and AJ Karabelas. Optimal low order methods of moments for solving the fragmentation equation. *Powder technology*, 143 :280–290, 2004.
- [44] 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.
- [45] Kangtaek Lee and Themis Matsoukas. Simultaneous coagulation and break-up using constant-n monte carlo. *Powder Technology*, 110(1) :82–89, 2000.
- [46] Xiaoming Hao, Haibo Zhao, Zuwei Xu, and Chuguang Zheng. Population balance-monte carlo simulation for gas-to-particle synthesis of nanoparticles. *Aerosol Science and Technology*, 47(10) :1125–1133, 2013.
- [47] Daniel E Rosner and Suyuan Yu. Mc simulation of aerosol aggregation and simultaneous spheroidization. *AIChE journal*, 47(3) :545–561, 2001.

- [48] 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.
- [49] Matthew Smith and Themis Matsoukas. Constant-number monte carlo simulation of population balances. *Chemical Engineering Science*, 53(9) :1777–1786, 1998.
- [50] 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.
- [51] Menwer M Attarakih, Hans-Jörg Bart, and Naim M Faqir. Numerical solution of the spatially distributed population balance equation describing the hydrodynamics of interacting liquid–liquid dispersions. *Chemical Engineering Science*, 59(12) :2567–2592, 2004.
- [52] Adrian Sandu and Christian Borden. A framework for the numerical treatment of aerosol dynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 45(4) :475–497, 2003.
- [53] 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.
- [54] Safyan Mukhtar, Iltaf Hussain, and Arshed Ali. Quadrature method of moments for solving volume-based population balance models. *World Applied Sciences Journal*, 20(12) :1574–1583, 2012.
- [55] William H Press. *Numerical recipes 3rd edition : The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [56] Ville Alopaeus, Marko Laakkonen, and Juhani Aittamaa. Numerical solution of moment-transformed population balance equation with fixed quadrature points. *Chemical Engineering Science*, 61(15) :4919–4929, 2006.

-
- [57] John Villadsen and Michael L Michelsen. *Solution of differential equation models by polynomial approximation*, volume 7. Prentice-Hall Englewood Cliffs, NJ, 1978.
- [58] PN Singh and D Ramkrishna. Transient solution of the brownian coagulation equation by problem-specific polynomials. *Journal of Colloid and Interface Science*, 53(2) :214–223, 1975.
- [59] Kendree J Sampson and Doraiswami Ramkrishna. A new solution to the brownian coagulation equation through the use of root-shifted problem-specific polynomials. *Journal of colloid and interface science*, 103(1) :245–254, 1985.
- [60] Daniele L Marchisio and Rodney O Fox. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36(1) :43–73, 2005.
- [61] Alessandro Zucca, Daniele L Marchisio, Antonello A Barresi, and Rodney O Fox. Implementation of the population balance equation in cfd codes for modelling soot formation in turbulent flames. *Chemical Engineering Science*, 61(1) :87–95, 2006.
- [62] VN Piskunov and AI Golubev. The generalized approximation method for modeling coagulation kinetics—part 1 : justification and implementation of the method. *Journal of Aerosol Science*, 33(1) :51–63, 2002.
- [63] Rong Fan, Daniele L Marchisio, and Rodney O Fox. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas–solid fluidized beds. *Powder technology*, 139(1) :7–20, 2004.
- [64] RR Upadhyay and OA Ezekoye. Treatment of size-dependent aerosol transport processes using quadrature based moment methods. *Journal of aerosol science*, 37(7) :799–819, 2006.

- [65] G Arfken and HJ Weber. Mathematical methods for physicists. 1985. *San Diego : Academic.*
- [66] Roy G Gordon. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 9(5) :655–663, 1968.
- [67] Robert McGraw and Douglas L Wright. Chemically resolved aerosol dynamics for internal mixtures by the quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 34(2) :189–209, 2003.
- [68] Gene H Golub and Charles F Van Loan. Matrix computations. 1996. *Johns Hopkins University, Press, Baltimore, MD, USA*, pages 374–426, 1996.
- [69] Marco Vanni. Approximate population balance equations for aggregation–breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 221(2) :143–160, 2000.
- [70] George Adomian. A review of the decomposition method in applied mathematics. *Journal of mathematical analysis and applications*, 135(2) :501–544, 1988.
- [71] G Adomian. Solving frontier problems of physics : The decomposition method. 1994. *Klumer, Boston.*
- [72] 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.
- [73] George Adomian. *Nonlinear stochastic systems theory and application to physics*, volume 46. Springer Science & Business Media, 1989.
- [74] Yves Cherruault. Convergence of adomian’s method. *Kybernetes*, 18(2) :31–38, 1989.

- [75] K Abbaoui and Y Cherruault. Convergence of adomian's method applied to differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 28(5) :103–109, 1994.
- [76] N Himoun, K Abbaoui, and Y Cherruault. New results of convergence of adomian's method. *Kybernetes*, 28(4) :423–429, 1999.
- [77] Mohammad Mahdi Hosseini and H Nasabzadeh. On the convergence of adomian decomposition method. *Applied mathematics and computation*, 182(1) :536–543, 2006.
- [78] D Lesnic. Convergence of adomian's decomposition method : periodic temperatures. *Computers & Mathematics with Applications*, 44(1) :13–24, 2002.
- [79] Brian H Rudall and Randolph C Rach. A new definition of the adomian polynomials. *Kybernetes*, 37(7) :910–955, 2008.
- [80] ESMAEIL Babolian and J Biazar. On the order of convergence of adomian method. *Applied Mathematics and Computation*, 130(2) :383–387, 2002.
- [81] A Boumenir and M Gordon. The rate of convergence for the decomposition method. 2004.
- [82] Ibrahim L El-Kalla. Error analysis of adomian series solution to a class of nonlinear differential equations. *Appl. Math. E-Notes*, 7 :214–221, 2007.
- [83] N Bellomo and D Sarafyan. On adomian's decomposition method and some comparisons with picard's iterative scheme. *Journal of mathematical analysis and applications*, 123(2) :389–400, 1987.
- [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] G Adomian. A review of the decomposition method and some recent results for nonlinear equations. *Mathematical and Computer Modelling*, 13(7) :17–43, 1990.
- [86] 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.
- [87] Jihuan He. A new approach to nonlinear partial differential equations. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2(4) :230–235, 1997.
- [88] Ji-Huan He. Variational iteration method—a kind of non-linear analytical technique : some examples. *International journal of non-linear mechanics*, 34(4) :699–708, 1999.
- [89] AA Soliman. A numerical simulation and explicit solutions of kdv-burgers’ and lax’s seventh-order kdv equations. *Chaos, Solitons & Fractals*, 29(2) :294–302, 2006.
- [90] Jihuan He. Variational iteration method for delay differential equations. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2(4) :235–236, 1997.
- [91] Ji-Huan He. Variational iteration method for autonomous ordinary differential systems. *Applied Mathematics and Computation*, 114(2) :115–123, 2000.
- [92] Jihuan He. Approximate analytical solution of blasius’ equation. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 4(1) :75–78, 1999.
- [93] Shaher Momani and Salah Abuasad. Application of he’s variational iteration method to helmholtz equation. *Chaos, Solitons & Fractals*, 27(5) :1119–1123, 2006.
- [94] Ji-Huan He and Xu-Hong Wu. Construction of solitary solution and compacton-like solution by variational iteration method. *Chaos, Solitons & Fractals*, 29(1) :108–113, 2006.

-
- [95] EM Abulwafa, MA Abdou, and AA Mahmoud. The solution of nonlinear coagulation problem with mass loss. *Chaos, Solitons & Fractals*, 29(2) :313–330, 2006.
- [96] Mehdi Tatari and Mehdi Dehghan. He’s variational iteration method for computing a control parameter in a semi-linear inverse parabolic equation. *Chaos, Solitons & Fractals*, 33(2) :671–677, 2007.
- [97] Shimin Guo and Liquan Mei. The fractional variational iteration method using he’s polynomials. *Physics Letters A*, 375(3) :309–313, 2011.
- [98] 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.
- [99] 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.
- [100] Ghader Rezazadeh, Hadi Madinei, and Rasool Shabani. Study of parametric oscillation of an electrostatically actuated microbeam using variational iteration method. *Applied Mathematical Modelling*, 36(1) :430–443, 2012.
- [101] 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.
- [102] Ji-Huan He. *Non-perturbative methods for strongly nonlinear problems*. dissertation. de-Verlag im Internet GmbH, 2006.
- [103] Ji-Huan He. Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 167(1) :57–68, 1998.

-
- [104] Ji-Huan He. Approximate solution of nonlinear differential equations with convolution product nonlinearities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 167(1) :69–73, 1998.
- [105] Fazhan Geng. A modified variational iteration method for solving riccati differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 60(7) :1868–1872, 2010.
- [106] Ji-Huan He. Homotopy perturbation technique. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 178(3) :257–262, 1999.
- [107] Ji-Huan He. Comparison of homotopy perturbation method and homotopy analysis method. *Applied Mathematics and Computation*, 156(2) :527–539, 2004.
- [108] Ji-Huan He. Addendum : new interpretation of homotopy perturbation method. *International Journal of Modern Physics B*, 20(18) :2561–2568, 2006.
- [109] Ji-Huan He. Application of homotopy perturbation method to nonlinear wave equations. *Chaos, Solitons & Fractals*, 26(3) :695–700, 2005.
- [110] Turgut Öziş and Ahmet Yıldırım. Traveling wave solution of korteweg-de vries equation using he’s homotopy perturbation method. *International Journal of Non-linear Sciences and Numerical Simulation*, 8(2) :239–242, 2007.
- [111] 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.
- [112] A Ranjbar Noiey, N Haghparast, M Miansari, 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.

-
- [113] AM Siddiqui, M Ahmed, and QK Ghori. Couette and poiseuille flows for non-newtonian fluids. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 7(1) :15–26, 2006.
- [114] Ahmet Yildirim and Sefa A Sezer. Analytical solution of linear and non-linear space-time fractional reaction-diffusion equations. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 8(1), 2010.
- [115] M Ghasemi, E Babolian, et al. Numerical solutions of the nonlinear integro-differential equations : Wavelet-galerkin method and homotopy perturbation method. *Applied mathematics and computation*, 188(1) :450–455, 2007.
- [116] Ji-Huan He. Recent development of the homotopy perturbation method. *Topological Methods in Nonlinear Analysis*, 31(2) :205–209, 2008.
- [117] Lin Jin. Homotopy perturbation method for solving partial differential equations with variable coefficients. *International Journal of Contemporary Mathematical Sciences*, 3(28) :1395–1407, 2008.
- [118] Priscilla J Hill and Ka M Ng. New discretization procedure for the breakage equation. *AIChE Journal*, 41(5) :1204–1216, 1995.
- [119] Stelios Rigopoulos and Alan G Jones. Finite-element scheme for solution of the dynamic population balance equation. *AIChE journal*, 49(5) :1127–1139, 2003.
- [120] Daniel E Rosner and Jouni J Pykönen. Bivariate moment simulation of coagulating and sintering nanoparticles in flames. *AIChE Journal*, 48(3) :476–491, 2002.
- [121] Douglas L Wright, Robert McGraw, and Daniel E Rosner. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering of particle populations. *Journal of Colloid and Interface Science*, 236(2) :242–251, 2001.

-
- [122] Rodney O Fox and Herbert L. Stiles. *Computational models for turbulent reacting flows*, volume 419. Cambridge university press Cambridge, 2003.
- [123] Liguang Wang and Rodney O Fox. Comparison of micromixing models for cfd simulation of nanoparticle formation. *AIChE Journal*, 50(9) :2217–2232, 2004.

Les Fonctions mathématique

On présente un rappel sur les fonctions mathématiques utilisées dans les chapitres précédents.

A.1 Fonction de Dirac

Représente le delta de Dirac $\delta(b - v)$ une fonction qui prend 0 pour tout les valeurs numérique x différents de 0.

A.2 Fonction de heavisideTheta

$$\varphi(b - v) = \begin{cases} 1 & \text{si } b < v \\ 0 & \text{si } b > v \end{cases}$$

$$\frac{d\varphi(b-v)}{dv} = -\delta(b - v) \quad D[\text{heavisideTheta}[x], x] = \text{DiracDelta}[x]$$

A.3 Fonction de Gamma

La fonction de gamma incomplète est donnée par l'intégrale : $\gamma(a, z) = \int_z^\infty t^{a-1} e^{-t} dt$.

A.4 Fonction de Unit Step

$$UnitStep[b - v] = \begin{cases} 1 & \text{si } b < v \\ 0 & \text{si } b > v \end{cases}$$

La méthode de quadrature des moments

Dans cet annexe, on explique la transformation de coordonnées internes multiples dans la méthode quadrature des moments et la méthode de quadrature directe des moments pour EBP bivariable ou multivariable.

B.1 Transformation de coordonnées internes multiples

L'équation du bilan de la population et la transformation de moment doivent être formulées séparément pour chaque cas multidimensionnel, en fonction de la nature des coordonnées internes. Cependant, la formule de quadrature lui-même peut être étendu pour des intégrales multiples résultant de la transformation de moment multidimensionnel d'une manière simple. Quelques exemples des problèmes avec plusieurs coordonnées internes des cas où la taille des particules et la distribution de forme doivent être modélisé, ou lorsque l'âge de particules ou de composants chimiques de distributions de concentration doivent être modélisé en plus de la distribution de la taille, pour ne citer que quelques-uns. Dans ces cas, la méthode des moments se traduit par des moments mixtes. Dans ce qui suit, l'extension de la présente méthode est disponible pour les deux coordonnées internes, mais peut être étendue aux cas multidimensionnels en suivant les

instructions ci-dessous [56].

Les moments mixtes sont définis comme :

$$\mu_{ab} = \int_0^\infty \int_0^\infty n(L_1, L_2) L_1^a L_2^b dL_1 dL_2. \quad (\text{B.1})$$

Ceci peut être approximée par une quadrature à deux dimensions comme :

$$\mu_{ab} \approx \sum_{i=1}^{Np1} \sum_{j=1}^{Np2} \omega_{ij} z_{1i}^a z_{2j}^b. \quad (\text{B.2})$$

Bien que deux dimensions, la transformation est toujours linéaire, et peut être écrite sous une forme unidimensionnelle simplement par la renumérotation des points de quadrature en une seule séquence. Ensuite, la difficulté supplémentaire (en plus du grand nombre de variables) dans le traitement de multiples coordonnées internes est juste une indexation correcte des points de quadrature et de poids. Si nous utilisons, par exemple, l'indice unique à la suite de numérotation pour le réseau de quadrature points et les pondérations correspondantes :

$$m = i + (j - 1)(n_a + 1), i = 1, \dots, n_a + 1, j = 1, \dots, n_b + 1. \quad (\text{B.3})$$

Alors les moments mixtes peuvent être écrites en une seule somme :

$$\mu_{ab} = \sum_{m=1}^{(n_a+1)(n_b+1)} \omega_m z_{1i}^a z_{2j}^b. \quad (\text{B.4})$$

Ceci est la même forme que dans le seul cas de coordonnées internes, et des poids ω_m peuvent être trouvés par une inversion de matrice simple. Dans l'équation suivante, le principe de l'indexation est affichée :

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \mu_{00} \\ \mu_{10} \\ \vdots \\ \mu_{n_a n_b} \end{pmatrix} &= \begin{bmatrix} \omega_1 z_{11}^0 z_{21}^0 + \omega_2 z_{12}^0 z_{21}^0 + \cdots \\ \omega_1 z_{11}^1 z_{21}^0 + \omega_2 z_{12}^1 z_{21}^0 + \cdots \\ \vdots \\ \omega_2 z_{12}^{n_a} z_{21}^{n_b} + \omega_2 z_{12}^{n_a} z_{21}^{n_b} + \cdots \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} z_{1i}^a z_{2j}^b \\ \vdots \\ \omega_{(n_a+1)(n_b+1)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{(n_a+1)(n_b+1)} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Maintenant, les poids de quadrature peuvent être trouvés pour chaque point de quadrature par matrice similaire inversion comme dans le cas unidimensionnel. Le solde de la population est alors résolu en forme de quadrature multidimensionnelle de l'équation de bilan de la population. Il est également évident à partir de la formulation ci-dessus que plus de deux coordonnées internes peuvent être manipulés seulement par la numérotation approprié des points de quadrature et de poids.

B.2 Méthode de quadrature directe des moments pour EBP bivariables

Dans ce cas l'équation du bilan de population réduit à :

$$\frac{\partial f(\xi_1, \xi_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\langle u_i | \xi_1, \xi_2 \rangle f(\xi_1, \xi_2)] - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial f(\xi_1, \xi_2)}{\partial x_i} \right) = S_\xi(\xi_1, \xi_2). \tag{B.6}$$

Où S_ξ représente tous les termes sources dans l'espace de phase (ξ_1, ξ_2) . Le cas bivariables dans sa formulation générale a des nombreuses applications. Par exemple, il peut être appliqué pour décrire la zone de volume et de surface de nanoparticules formées dans des réacteurs en aérosol. Dans le cas de la coagulation et de frittage simultané, Rosner et

coll [120] ont proposé un MQMO bidimensionnelle avec $N = 3$ noeuds. Bien que l'algorithme proposé est très efficace grâce à l'excellente estimation initiale obtenue par la technique à trois points décrite par Wright et coll [121], le problème peut être étonnamment accéléré en utilisant MQDMO.

Les équations de transport de MQDMO bivariabes ont la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \omega_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \right) &= a_\alpha, \\ \frac{\partial \varsigma_{1\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \varsigma_{1\alpha}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_{1\alpha}}{\partial x_i} \right) &= b_{1\alpha}, \\ \frac{\partial \varsigma_{2\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \varsigma_{2\alpha}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_{2\alpha}}{\partial x_i} \right) &= b_{2\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Où les abscisses pondérées sont définies par :

$$\begin{aligned} \varsigma_{1\alpha} &= \omega_\alpha \langle \xi_1 \rangle_\alpha, \\ \varsigma_{2\alpha} &= \omega_\alpha \langle \xi_2 \rangle_\alpha, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Les côtés de droite de l'équation (B.7) se trouvent en résolvant le système linéaire comme suit :

Dans le cas monovariabes : Le système linéaire dans l'équation (2.67). peut être écrit sous forme matricielle :

$$A\alpha = d \quad (\text{B.9})$$

Où $A = [A_1 A_2]$. Les termes sur le côté gauche de l'équation (B.9) sont définis par :

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ 0 & \dots & 0 \\ -\langle \xi \rangle_1^2 & \dots & -\langle \xi \rangle_N^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 2(1-N)\langle \xi \rangle_1^{2N-1} & \dots & 2(1-N)\langle \xi \rangle_N^{2N-1} \end{bmatrix} \quad (\text{B.10})$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \cdots & 1 \\ 2\langle \xi \rangle_1 & \cdots & 2\langle \xi \rangle_N \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (2N-1)\langle \xi \rangle_1^{2N-2} & \cdots & (2N-1)\langle \xi \rangle_N^{2N-2} \end{bmatrix} \quad (\text{B.11})$$

Et

$$\alpha = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_N & b_1 & \cdots & b_N \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}. \quad (\text{B.12})$$

Notez que A ne dépend pas aux poids ω_α , et donc peut être défini pour les abscisses avec $\omega_\alpha = 0$. De même, les conditions sur le côté droit sont définies par :

$$d = A_3 C + \beta. \quad (\text{B.13})$$

Avec

$$C = \begin{bmatrix} C_1 & \cdots & C_N \end{bmatrix}^T. \quad (\text{B.14})$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 \\ 2 & \cdots & 2 \\ 6\langle \xi \rangle_1 & \cdots & 6\langle \xi \rangle_N \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 2(2N-1)(N-1)\langle \xi \rangle_1^{2N-3} & \cdots & 2(2N-1)(N-1)\langle \xi \rangle_N^{2N-3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

Et

$$\beta = \begin{bmatrix} \overline{S}_0^{(N)} & \cdots & \overline{S}_{2N-1}^{(N)} \end{bmatrix}^T. \quad (\text{B.16})$$

Si les abscisses $\langle \xi \rangle_\alpha$ sont uniques, alors A sera au plein rang de arbitraire N . Dans ce cas, les termes de sources pour les équations de transport des poids ω_α et abscisses pondérées ς_α peuvent être trouvés simplement en inversant A :

$$\alpha = A^{-1}d. \quad (\text{B.17})$$

Par exemple, si $N = 1$, la solution est :

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{S}_0^{(1)} \\ \bar{S}_1^{(1)} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.18})$$

Et ainsi

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle \omega_1) &= \frac{\partial}{\partial x_i} (D_x \frac{\partial \omega_1}{\partial x_i}) + \bar{S}_0^{(1)}, \\ \frac{\partial \varsigma_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle \varsigma_1) &= \frac{\partial}{\partial x_i} (D_x \frac{\partial \varsigma_1}{\partial x_i}) + \bar{S}_1^{(1)}. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Pour ce cas, les termes de sources ne comportent pas de C_α puisque dans A_3 les deux premières lignes ne contiennent des éléments nuls. De même, les moments des termes de sources $\bar{S}_0^{(1)}$ et $\bar{S}_1^{(1)}$ dépendent de ω_1 et $\langle \xi \rangle_1$, et seront donc habituellement inexacts. Il est intéressant de souligner que cette représentation que les moments d'ordre zéro et d'ordre un de la PSD sont calculés, Alors que la variance est (par hypothèse) nulle. Dans les cas où le moment d'ordre zéro est constante, $\bar{S}_0^{(1)} = 0$ et $\bar{S}_1^{(1)}$ est le terme de source évalué à $\langle \xi \rangle_1$, qui est connu pour être inexact pour les termes de source non-linéaires comme expliqué par Fox [122]. Pour $N = 2$, le PSD est décrite par deux fonctions delta [50].

Et

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ -\langle \xi \rangle_1^2 & -\langle \xi \rangle_2^2 & 2\langle \xi \rangle_1 & 2\langle \xi \rangle_2 \\ -2\langle \xi \rangle_1^3 & -2\langle \xi \rangle_2^3 & 3\langle \xi \rangle_1^2 & 3\langle \xi \rangle_2^2 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.20})$$

Il est intéressant pour ce cas d'analyser les équations de transport résultant lorsque les termes de sources des moment sont nuls : $\bar{S}_k^{(2)} = 0$ pour $k = 0, \dots, 3$. Dans ce cas, le rôle

des termes C_α qui résultent de la représentation du mode finie de la durée de diffusion spatiale. Pour ce cas, l'équation (B.9) présente la solution suivante :

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \frac{6(C_2 - C_1)}{(\langle \xi \rangle_1 - \langle \xi \rangle_2)^2}, \\
 a_2 &= -a_1, \\
 b_1 &= \frac{-2C_1(\langle \xi \rangle_1 + 2\langle \xi \rangle_2) + 2C_2(\langle \xi \rangle_2 + 2\langle \xi \rangle_1)}{(\langle \xi \rangle_1 - \langle \xi \rangle_2)^2}, \\
 b_2 &= -b_1.
 \end{aligned} \tag{B.21}$$

Les termes de sources résultant dans les équations de transport de MQDMO l'équation (2.62) veillés à ce que l'effet de la diffusion spatiale sur les moments est correctement représenté lors de la résolution pour les poids et les abscisses .

* **Cas bivariables** : Dans ce cas , la distribution de la taille des particules (PSD) est représentée par des points pondérés dans l'espace de phase (ξ_1, ξ_2) :

$$f(\xi_1, \xi_2) = \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha \delta(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha). \tag{B.22}$$

Si l'équation (B.22) est remplacée dans l'équation (B.6), l'équation de transport devient :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\alpha=1}^N \delta(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha) a_\alpha \\
 & - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha) (b_{1\alpha} - \langle \xi_1 \rangle_\alpha a_\alpha) \\
 & - \sum_{\alpha=1}^N \delta(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta'(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha) (b_{2\alpha} - \langle \xi_2 \rangle_\alpha a_\alpha) \\
 & = \sum_{\alpha=1}^N \delta''(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha) C_{11\alpha} \\
 & + \sum_{\alpha=1}^N 2\delta'(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta'(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha) C_{12\alpha} \\
 & + \sum_{\alpha=1}^N \delta(\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle_\alpha) \delta''(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle_\alpha) C_{22\alpha} + S_\xi(\xi_1, \xi_2).
 \end{aligned} \tag{B.23}$$

Avec

$$C_{\beta\gamma\alpha} = D_x \frac{\partial \langle \xi_\beta \rangle_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \xi_\gamma \rangle_\alpha}{\partial x_i} \quad (\text{B.24})$$

Les fonctions inconnues a , b_1 et b_2 sont les termes des sources pour les équations de transport MQDMO bivariable :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \omega_\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_i} \right) &= a_\alpha, \\ \frac{\partial \varsigma_{1\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \varsigma_{1\alpha}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_{1\alpha}}{\partial x_i} \right) &= b_{1\alpha}, \\ \frac{\partial \varsigma_{2\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_\alpha \varsigma_{2\alpha}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_{2\alpha}}{\partial x_i} \right) &= b_{2\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Où les abscisses sont définies par pondérés :

$$\begin{aligned} \varsigma_{1\alpha} &= \omega_\alpha \langle \xi_1 \rangle_\alpha, \\ \varsigma_{2\alpha} &= \omega_\alpha \langle \xi_2 \rangle_\alpha, \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Comme dans le cas de monovariable, les termes des sources dans MQDMO peuvent être trouvés en utilisant la transformation de moment en termes de moments mixtes entier d'ordre $\{k, l\}$:

$$M_{kl} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_1^k \xi_2^l f(\xi_1, \xi_2) d\xi_1 d\xi_2. \quad (\text{B.27})$$

Si le moment de transformation est appliqué à l'équation (B.25), le système d'équations linéaires suivant est obtenu :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^N \left[(1-k-l) \langle \xi_1 \rangle_\alpha^k \langle \xi_2 \rangle_\alpha^l a_\alpha + k \langle \xi_1 \rangle_\alpha^{k-1} \langle \xi_2 \rangle_\alpha^l b_{1\alpha} + l \langle \xi_1 \rangle_\alpha^k \langle \xi_2 \rangle_\alpha^{l-1} b_{2\alpha} \right] &= \bar{S}_{kl}^{(N)} \\ + \sum_{\alpha=1}^N \left[k(k-1) \langle \xi_1 \rangle_\alpha^{k-2} \langle \xi_2 \rangle_\alpha^l C_{11\alpha} + 2kl \langle \xi_1 \rangle_\alpha^{k-1} \langle \xi_2 \rangle_\alpha^{l-1} C_{12\alpha} + l(l-1) \langle \xi_1 \rangle_\alpha^k \langle \xi_2 \rangle_\alpha^{l-2} C_{22\alpha} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Où le terme de source de moment mixte $\overline{S}_{kl}^{(N)}$ est défini par :

$$\overline{S}_{kl}^{(N)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_1^k \xi_2^l S_\xi(\xi_1, \xi_2) d\xi_1 d\xi_2. \quad (\text{B.29})$$

Et l'exposant (N) est utilisé pour nous rappeler que $\overline{S}_{kl}^{(N)}$ est approchée par un arrangement de quadrature de N points.

Pour le cas de bivariable il y a $3N$ variables inconnues $(a_\alpha, b_{1\alpha}, b_{2\alpha})$, et donc un nombre égal de moments mixtes doivent être utilisés avec l'équation (B.28).

Le système linéaire résultant d'équations $3N$ peut être écrit sous forme de matrice :
 $A\alpha = D$

Où

$$\alpha = \left[a_1 \quad \cdots \quad a_N b_{11} \quad b_{1N} b_{21} \quad \cdots \quad b_{2N} \right]^T = \begin{bmatrix} a \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.30})$$

Pour $N = 1$, le choix naturel des moments mixtes est $\{k, l\} = \{0, 0\}, \{0, 1\}, \{1, 0\}$.
Alors, les équations de transport pour réduire MQDMO :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle \omega_1) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \omega_1}{\partial x_i} \right) &= \overline{S}_{00}^{(1)}, \\ \frac{\partial \varsigma_{11}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle \varsigma_{11}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_{11}}{\partial x_i} \right) &= \overline{S}_{10}^{(1)}, \\ \frac{\partial \varsigma_{21}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle \varsigma_{21}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_x \frac{\partial \varsigma_{21}}{\partial x_i} \right) &= \overline{S}_{01}^{(1)}. \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Comme dans le cas monovariable, les quadratures d'un point utilisé pour rapprocher les termes des sources sur le côté droit sont généralement inexacts. Ainsi, seuls les cas avec $N > 1$ seront normalement d'intérêt.

Pour $N = 2$, la fonction de la densité est décrite par deux points en quadrature. Depuis chaque point α dans l'espace de phase est déterminé par trois paramètres $\{\omega_\alpha, \langle \xi_1 \rangle_\alpha, \xi_1 \}_\alpha$, ix moments mixtes sont nécessaires pour clore le problème. Il n'y a pas de façon unique pour

choisir les moments.

Si les moments six mixtes ont l'ordre le plus bas : $\{k, l\} = \{0, 0\}, \{1, 0\}, \{0, 1\}, \{2, 0\}, \{1, 1\}$ et $\{0, 2\}$; sont choisis, alors la matrice de coefficient a la forme suivante [60] :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ -\langle \xi_1 \rangle_1^2 & -\langle \xi_1 \rangle_2^2 & 2\langle \xi_1 \rangle_1 & 2\langle \xi_1 \rangle_2 & 0 & 0 \\ -\langle \xi_1 \rangle_1 \langle \xi_2 \rangle_1 & -\langle \xi_1 \rangle_2 \langle \xi_2 \rangle_2 & \langle \xi_2 \rangle_1 & \langle \xi_2 \rangle_2 & \langle \xi_1 \rangle_1 & \langle \xi_1 \rangle_2 \\ -\langle \xi_2 \rangle_1^2 & -\langle \xi_2 \rangle_2^2 & 0 & 0 & 2\langle \xi_2 \rangle_1 & 2\langle \xi_2 \rangle_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.32})$$

En règle générale, nous pouvons déduire de l'équation (B.32) que, pour avoir une représentation correcte de la distribution de taille des particules (PSD) au niveau du second moment, le nombre de nœuds N doit être supérieur au nombre de propriétés N_s .

Lorsque on travaille avec la densité de distribution de taille des particules de monovariante ($N_s = 1$), N doit être au moins égal à deux afin de prédire la variance.

Et pour la distribution de taille des particules bivariante ($N_s = 2$), N doit être au moins égal à trois, afin de représenter correctement les moments d'ordre secondaire.

Notez, cependant, qu'il est possible d'utiliser $N = 2$ pour le cas de deux variables si $\{k, l\} = \{1, 1\}$ est remplacé dans l'équation (B.32) par un moment d'ordre supérieur (c'est à dire, $\{2, 2\}$).

En règle générale, même pour le cas multivariante où $N_s > 2$, il est généralement possible de trouver un ensemble de moments pour toute valeur de $N \leq N_s$ pour lesquels A est plein des rangs .

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \left[(1 - k - l) \langle \xi_1 \rangle_{\alpha}^k \langle \xi_2 \rangle_{\alpha}^l a_{\alpha} + k \langle \xi_1 \rangle_{\alpha}^{k-1} \langle \xi_2 \rangle_{\alpha}^l b_{1\alpha} + l \langle \xi_1 \rangle_{\alpha}^k \langle \xi_2 \rangle_{\alpha}^{l-1} b_{2\alpha} \right] \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \left[k(k-1) \langle \xi_1 \rangle_{\alpha}^{k-2} \langle \xi_2 \rangle_{\alpha}^l C_{11\alpha} + 2kl \langle \xi_1 \rangle_{\alpha}^{k-1} \langle \xi_2 \rangle_{\alpha}^{l-1} C_{12\alpha} + l(l-1) \langle \xi_1 \rangle_{\alpha}^k \langle \xi_2 \rangle_{\alpha}^{l-2} C_{22\alpha} \right] \\ &+ \bar{S}_{kl}^{(N)}. \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Pour le cas de bivariables, il y a $3N$ des inconnues $(a_\alpha, b_{1\alpha}, b_{2\alpha})$, Et donc un nombre égal de moments mixtes doivent être utilisés avec l'équation (B.36).

La stratégie optimale de choisir les moments mixtes est indiqué dans une application ci-dessous, le choix affectera les valeurs prédites des poids et des abscisses. Dans certains cas, comme lorsque les valeurs non nulles de $f(\xi_1, \xi_2)$ sont limitées à un domaine fini, certains choix de moments peuvent conduire à des abscisses qui se trouvent en dehors du domaine (et sont donc irréalisable). Une autre considération pourrait être la forme $(3N \times 3N)$ du coefficient de matrice A résultant de l'équation (B.36). Par exemple :

$$a_\alpha = \frac{1}{N} \bar{S}_{00}^{(N)}, \text{ for } \alpha = 1, \dots, N. \quad (\text{B.34})$$

Et en utilisant seulement des moments non mixtes, la matrice de coefficients est simplifiée et conduite à la matrice de deux équation $(N \times N)$, pour b_1 et b_2 :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^N \langle \xi_1 \rangle_\alpha^{k-1} b_{1\alpha} &= \frac{1}{k} \bar{S}_{k0}^{(N)} + (k-1) \sum_{\alpha=1}^N \left[\langle \xi_1 \rangle_\alpha^{-2} C_{11\alpha} + \frac{1}{kN} \bar{S}_{00}^{(N)} \right] \langle \xi_1 \rangle_\alpha^k, \\ \sum_{\alpha=1}^N \langle \xi_2 \rangle_\alpha^{k-1} b_{2\alpha} &= \frac{1}{k} \bar{S}_{0k}^{(N)} + (k-1) \sum_{\alpha=1}^N \left[\langle \xi_2 \rangle_\alpha^{-2} C_{22\alpha} + \frac{1}{kN} \bar{S}_{00}^{(N)} \right] \langle \xi_2 \rangle_\alpha^k. \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Où $k = 1, \dots, N$. Notez que les équations (B.37) et (B.35) utilisent uniquement $2N+1$ au lieu de moments $3N$ la forme découplée offre de grands avantages de calcul lorsqu'il est étendu à la grande N_s [60].

B.3 Méthode de quadrature directe des moments pour EBP multivariée

Notant que la version de l'équation (B.36) à plusieurs variables :

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \left[\left(1 - \sum_{n=1}^{N_s} k_n \right) \prod_{n=1}^{N_s} \langle \xi_n \rangle_{\alpha}^{kn} \right] a_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{n=1}^{N_s} \frac{\partial}{\partial \langle \xi_n \rangle_{\alpha}} \left(\prod_{m=1}^{N_s} \langle \xi_m \rangle_{\alpha}^{km} \right) b_{n\alpha} \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \sum_{n=1}^{N_s} \sum_{m=1}^{N_s} \frac{\partial^2}{\partial \langle \xi_n \rangle_{\alpha} \partial \langle \xi_m \rangle_{\alpha}} \left(\prod_{p=1}^{N_s} \langle \xi_p \rangle_{\alpha}^{kp} \right) C_{nm\alpha} + \bar{S}_{k_1, \dots, k_{N_s}}^{(N)}. \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Où le moment mixte du terme de source est défini par :

$$\bar{S}_{k_1, \dots, k_{N_s}}^{(N)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{n=1}^{N_s} \xi_n^{kn} \right) S_{\xi}(\xi) d\xi. \quad (\text{B.37})$$

En choisissant un ensemble indépendant de faible moments d'ordre (k_1, \dots, K_{N_s}) , l'équation (2.28) génère un système linéaire qui peut être utilisé pour trouver $(N_s + 1)$ puis les termes des sources inconnues $(a_{\alpha}, b_{1\alpha}, \dots, b_{N_s\alpha})$. Apparaissant dans les équations de transport de MQDMO pour $\omega_{\alpha}, \varsigma_{1\alpha}, \dots, \varsigma_{N_s\alpha}$ l'équation (B.7) [123].

ANNEXE C

Notations

Notation	Notion
Notions de base	
Les longueurs des particules	l, l'
Les volumes des particules	v, v'
Le nombre des particules dans la gamme de taille v à $v + dv$, au temps t	$n(v, t)$
Le nombre de concentration	$N_i(t)$
La vitesse de croissance	G
La naissance (l'apparition) et la mort (la disparition) de particules pendant les processus d'agrégation	Q_{agr}^{\pm}
La naissance (l'apparition) et la mort (la disparition) de particules pendant les processus de rupture	Q_{rup}^{\pm}
La vitesse de dissolution	Q_{diss}^-
La vitesse de nucléation	Q_{nuc}
Les flux d'entrée et de sorties de system respectivement	Q_e et Q_s
La naissance ou bien l'apparition des particules	B

Le mort ou bien la disparition des particules	D
Le vecteur d'état de particules	X
Le débit volumétrique	\dot{v}
Les composants de la solution	u_m
La fonction non-spécifiée	$g(v)$
Les poids et des abscisses	W_j, v_j

Lettres grecques

Le nombre fractionnaire des particules formées dans la gamme de taille v à $v + dv$ formées lors de la rupture de la particule du volume v'	$\beta(v/v')$
La fonction de Dirac	δ
La fonction de gamma	γ
La fréquence de rupture des particules entre deux volumes v à $v + dv$	$\Gamma(v')$
La fréquence d'agrégation des particules entre deux volumes v et v'	$\omega(v, v')$
La fonction de Heaviside Theta	φ
Le temps de séjour	θ
La fonction de poids	$\Psi(v)$

Abréviations

La distribution de taille de particule	DTP
L'équation du bilan de population	EBP
La méthode de quadrature de point fixe	$FMQMO$
La méthode de décomposition d'Adomian	MDA
La méthode d'itération variationnelle	MIV
La méthode de quadrature directe des moment	$MQDMO$
La méthode quadrature de moments	$MQMO$
La méthode de perturbation homotopique	MPH

Les équations différentielles ordinaires

ODE

TABLE C.1: Table de notations

ANNEXE D

**Article : Analytical solutions of the particle breakage
equation by the Adomian decomposition and the
variational iteration methods**



Original Research Paper

Analytical solutions of the particle breakage equation by the Adomian decomposition and the variational iteration methods

A. Hasseine^{a,b,*}, Z. Barhoum^{a,b}, M. Attarakih^{c,d}, H.-J. Bart^d^a Laboratory LAR-GHYDE, University of Biskra, Algeria^b Department of Chemical Engineering, University of Biskra, Algeria^c Faculty of Eng. & Tech., Chem. Eng. Dept., The University of Jordan, 11942 Amman, Jordan^d Chair of Separation Science and Technology, Center for Mathematical Modeling, Kaiserslautern University, P.O. Box 3049, D-67653 Kaiserslautern, Germany

ARTICLE INFO

Article history:

Received 30 March 2014

Received in revised form 16 July 2014

Accepted 19 August 2014

Available online 11 October 2014

Keywords:

Population balance equations

Particle breakage

Adomian decomposition method

Variational iteration method

ABSTRACT

The breakage in batch and continuous systems has attained high interest in chemical engineering and granulation from a process and from a product quality perspective. The wet granule breakage process in a high shear mixer will influence and may control the final granule size distribution. In this work, we developed analytical solutions of the particle breakage using the population balance equation (PBEs) in batch and continuous flow systems. To allow explicit solutions, we approximate particle breakage mechanisms with assumed functional forms for breakage frequencies. This new framework for solving (PBEs) for batch and continuous flow systems proposed in this work uses the Adomian decomposition method (ADM) and the variational iteration method (VIM). These semi-analytical methods overcome the crucial difficulties of numerical discretization and stability that often characterize previous solutions in of the PBEs. The results obtained in all cases show that the predicted particle size distributions converge exactly in a continuous form to that of the analytical solutions using the two methods.

© 2014 The Society of Powder Technology Japan. Published by Elsevier B.V. and The Society of Powder Technology Japan. All rights reserved.

1. Introduction

Granulation is an important process in a wide range of industries, including agricultural products, detergents, pharmaceutical, food, ore processing, fertiliser and chemical engineering [1,2]. Generally the granulation process is well known as a combination of three rate processes, namely wetting and nucleation, consolidation and growth, breakage and attrition and this is analogous to the process used by chemical engineers in reactor engineering and reactor design [3]. Once these processes are sufficiently understood, then it will be possible to theoretically predict the effect of formulation properties, equipment type and operating conditions on granulation behaviour [4].

The population balance equation is used in a number of diverse engineering fields such as granulation [5–8], crystallization [9,10], fluid bed [11,12], reactors [13,14] the grinding [15], polymerization [16–18], chemical engineering [19,20], emulsification [21], flocculation [22], aerosol [23], biological [24], Process Control [25].

In general, the population balance equation (PBE) is a well-established equation for describing the evolution of the dispersed phase. It represents the net rate of number of particles that are formed by breakage, aggregation, growth and could be written for a flow into a well-stirred vessel as [26–30]:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \frac{\partial [Gn(v, t)]}{\partial v} = \frac{1}{\theta} (n^{feed}(v, t) - n(v, t)) + \phi(v, t), \quad (1)$$

where the first term is the rate of accumulation of particle of size v , the second term is the convective flux along the particle internal coordinate with a growth velocity G . The first term on the right hand side is the net bulk flow into the vessel and the second term is the net rate of particle generation by aggregation and breakage and is given by [29–34]:

$$\begin{aligned} \phi(v, t) = & -\Gamma(v)n(v, t) - \int_0^\infty \omega(v, v')n(v, t)n(v', t)dv' \\ & + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v', t)dv' \\ & + \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v-v', v')n(v, t)n(v-v', t)dv' + S(v), \quad (2) \end{aligned}$$

where $\Gamma(v)$ and $\omega(v, v')$ are the breakage and aggregation frequencies, respectively, and $\beta(v/v') dv$ is the number of daughter particles

* Corresponding author at: Department of Chemical Engineering, University of Biskra, Algeria.

E-mail address: hasseine@yahoo.fr (A. Hasseine).

Nomenclature

$n(v, t)dv$	number of particles in size range v to $v+dv$, at time t
t	Time
$u_m(v, t)$	solution components
v, v'	particle volumes
<i>Greek letters</i>	
$\beta(v/v')dv$	fractional number of particles formed in the size range v to $v+dv$ formed upon breakage of particle of volume v'

δ	Dirac delta function
$\Gamma(v')$	number of particles in the size range v to $v+dv$ disappearing per unit time by breakage
θ	residence time
$\omega(v, v')$	aggregation frequency between two particles of volumes v and v'
γ	gamma function
φ	Heaviside Theta

having volume in the range, which are formed upon breakage of a particle of volume v' . The first two terms on the right hand side represent particle loss due to breakup and aggregation succeeded by two terms which represent particle formation due to breakup and aggregation, $S(v)$ is rate at which particles of size v are nucleated.

The objective of this paper is to solve certain forms of the above equation, which is partial integro-differential equation using two new techniques: The Adomian decomposition method and the Variational iteration method. These new techniques have attained high interest in applied mathematics and chemical engineering, because they allow solution of both linear and nonlinear functional equations of various kinds (algebraic, ordinary differential, partial differential, delay differential integral, ...) without discretizing the equations or approximating the operators by such schemes as linearization or perturbation, which changes the physical problem to one that is amenable by prior art. The solution, when it exists, is found in the form of a rapidly converging series such that the time and space coordinates are not discretized.

Of course some problems remain open. For instance, practical convergence of the Adomian decomposition series may be ensured even if the hypotheses of known methods are not satisfied. That means that there still exist opportunities for further theoretical studies of convergence for more general situations. Furthermore, it is not always easy to take into account the boundary conditions for complex domains.

1.1. The Adomian decomposition method

Since the 1980s, Adomian proposed a new and ingenious method for exactly solving nonlinear functional equations [35,36]. The method has been applied to many frontier problems in engineering, physics, biology and chemistry among other fields [30–38]. The Adomian decomposition method (ADM) gives the solution as an infinite series, which usually converges to the exact solution [39].

The general form of a differential equation can be written as

$$Fu = g. \quad (3)$$

$$F = L + R + N. \quad (4)$$

By substituting Eqs. (4) into (3) one gets:

$$Lu + Ru + Nu = g, \quad (5)$$

where L is easily invertible operator, R is the remainder of the linear operator and N corresponds to the non-linear terms.

We can write Eq. (5) as

$$Lu = g - Ru - Nu. \quad (6)$$

By multiplying Eq. (6) by L^{-1} we obtain:

$$L^{-1}(Lu) = L^{-1}g - L^{-1}(Ru) - L^{-1}(Nu), \quad (7)$$

where $L^{-1} = \int \dots \int (\cdot)(dt)^n$ is the inverse of operator L .

Therefore, Eq. (7) becomes

$$u = u_0 - L^{-1}(Ru) - L^{-1}(Nu), \quad (8)$$

where

$$L^{-1}(Lu) = u - u(0) - tu'(0), \quad (9)$$

$$\text{and } u_0 = u(0) + tu'(0) + L^{-1}g. \quad (10)$$

Therefore, u can be presented as a series,

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n. \quad (11)$$

The non-linear term $N(u)$ will be decomposed by the infinite series of Adomian Polynomials A_n [40,41],

$$Nu = \sum_n A_n, \quad (12)$$

where the Adomian's polynomials are given by

$$A_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{d\lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right] \Big|_{\lambda=0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

Concerning the convergence of the Adomian decomposition method, it was intensively studied by Cherruault [42], Cherruault and Saccomandi [43] and Abbaoui and Cherruault [44].

1.2. The variational iteration method

The variational iteration method was first proposed by He [45,46]. This method is now widely used in many fields such as Physics [47], Chemistry [48], Biomedical [49] and Engineering sciences to study linear and non-linear partial differential equations [50,51].

We can write the general form of a differential Eq. (3) as follows [52]

$$F = L + N \quad (14)$$

By substituting Eqs. (3) into (14) one gets

$$Lu + Nu = g, \quad (15)$$

where L is a linear operator, N a nonlinear operator and g is an inhomogeneous term.

He [53,54] introduced the VIM where a correction functional for Eq. (15) can be written as

$$u_{n+1}(t) = u_n(t) + \int_0^t \lambda(u_n(\xi) + N\tilde{u}_n(\xi) - g(\xi))d\xi. \quad (16)$$

In the above equation 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 $\delta\tilde{u}_n = 0$ [55–57]. Consequently, the solution is given by $u = \lim_{n \rightarrow \infty} u_n$.

2. Illustrative test cases

2.1. Particle breakage in batch systems

2.1.1. Case 1. Parabolic breakage function and $n(v, 0) = \delta(v - b)$

The PBE as given by Eqs. (1) and (2) for particle breakage in a batch system can be written as [58].

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = 2 \int_v^\infty n(v',t)F(v, v' - v)dv' - n(v,t) \int_0^v F(v', v - v')dv'. \quad (17)$$

Eq. (17) was studied by Ziff [58] for the case of polymer breakage with a general rate, which is proportional to the cube of the length and with a parabolic daughter distribution.

In the above equation, $F(v, v')$ is the rate that a particle of size v breaks up into particles of sizes v' and $v - v'$. This rate of breakage is taken as $F(v, v') = v, v'$, where breakage is preferentially in the center of polymer chain [58].

With the initial condition: $n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b)$, Eq. (17) becomes

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = 2 \int_v^\infty v(v' - v)n(v',t)dv' - \frac{v^3}{6} n(v,t). \quad (18)$$

✓ The Adomian decomposition method (ADM)

We find the solution to Eq. (18) by the ADM as follows:

$$n_0(v,t) = n(v,0) = \delta(v - b), \quad (19)$$

$$n_1(v,t) = -\frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(bt v - tv^2)\varphi(b - v), \quad (20)$$

$$n_2(v,t) = \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v - b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b - v), \quad (21)$$

$$n_3(v,t) = -\frac{1}{1296}t^3v^9\delta(v - b) + \frac{1}{180}(b^6t^3v^2 - bt^3v^7)\varphi(b - v). \quad (22)$$

Similarly, we can compute $n_4(v, t), n_5(v, t), \dots, n_m(v, t)$. In general $n_m(v, t)$ is the solution of

$$n_{m+1}(v,t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty 2v(v' - v)n_m(v',t)dv' - \frac{v^3}{6}n_m(v,t) \right) dt. \quad (23)$$

Hence we calculate the general term as:

$$n_m(v,t) = \frac{2^{2-m}3^{1-m}b(-tv^3)^m\varphi(b - v)}{(-4 + 3m)v^2\gamma(m)}. \quad (24)$$

Then

$$n(v,t) = \sum_{m=0}^\infty n_m(v,t) = e^{\frac{tv^3}{6}}\delta(v - b) + 4v^2b\left(\frac{t}{6}\right)^{\frac{4}{3}} \times \left(\gamma\left(-\frac{1}{3}, \frac{tv^3}{6}\right) - \gamma\left(-\frac{1}{3}, \frac{tb^3}{6}\right) \text{UnitStep}[b - v] \right), \quad (25)$$

which converges to the exact solution.

✓ The He's variational iteration method (VIM)

Using similar procedure as that used by the ADM, we can find the solution to Eq. (18) by the VIM as follows:

$$n_0(v,t) = n(v,0) = \delta(v - b), \quad (26)$$

$$n_{m+1}(v,t) = n_m(v,t) + \int_0^t \left(\int_v^\infty 2v(v' - v)n_m(v',t)dv' - \frac{v^3}{6}n_m(v,t) - \frac{\partial n_m(v,t)}{\partial t} \right) dt \quad m = 0, 1, 2 \quad (27)$$

$$n_1(v,t) = \delta(v - b) - \frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(bt v - tv^2)\varphi(b - v), \quad (28)$$

$$n_2(v,t) = \delta(v - b) - \frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(bt v - tv^2)\varphi(b - v) + \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v - b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b - v), \quad (29)$$

$$n_3(v,t) = \delta(v - b) - \frac{1}{6}tv^3\delta(v - b) + 2(bt v - tv^2)\varphi(b - v) + \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v - b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b - v) - \frac{1}{1296}t^3v^9\delta(v - b) + \frac{1}{180}(b^6t^3v^2 - bt^3v^7)\varphi(b - v). \quad (30)$$

The above series can be generalized as follows:

$$n(v,t) = e^{\frac{tv^3}{6}}\delta(v - b) + 4v^2b\left(\frac{t}{6}\right)^{\frac{4}{3}} \left(\gamma\left(-\frac{1}{3}, \frac{tv^3}{6}\right) - \gamma\left(-\frac{1}{3}, \frac{tb^3}{6}\right) \text{UnitStep}[b - v] \right). \quad (31)$$

Indeed, the results obtained by these two methods are analytic and consequently the stability of the numerical solution and the crucial problems of numerical discretization which deteriorated the performance of the earlier techniques are completely absent in the present method.

Fig. 1 shows the effect of truncating the solution using $n = 1-5$ iterations (n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) and the exact solution ES (continuous line Eq. (25)) of the number density function for particle breakage.

Fig. 2 depicts the relative error between the approximate solution (AS) and the exact solution (ES), where the relative error is defined as $|(AS - ES)/ES| \times 100$.

2.1.2. Case 2. Parabolic Binary Breakage with $n(v, 0) = e^{-v}$

We used in this case a parabolic daughter particle distribution for binary breakage which conserves mass, and is symmetric as suggested by [59,60]:

$$\beta(v/v') = \frac{24(1 - \frac{h}{2})(v^2 - vv' + \frac{v'^2}{4})}{v'^3} + \frac{h}{v'}. \quad (32)$$

Note that for $\beta(v/v')$ to be positive h must satisfy $(0 \leq h \leq 3)$. On the other hand, for $0 < h < 2$, the above function represents a concave parabola, while for $2 < h < 3$, it represents a convex parabola. At $h = 2$ the function is reduced to the uniform binary breakage.

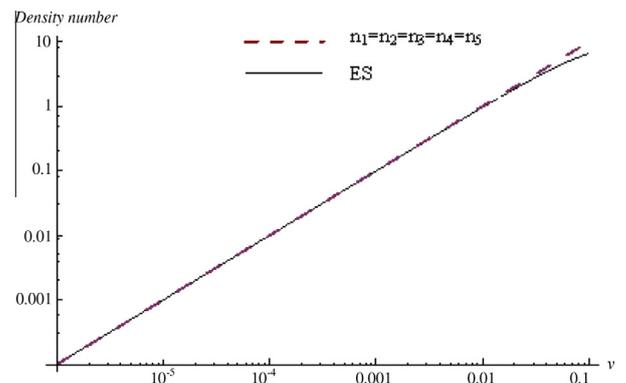


Fig. 1. The effect of truncating the series solutions (n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) as compared to the exact solution ES (continuous line) on the number density function for particle breakage.

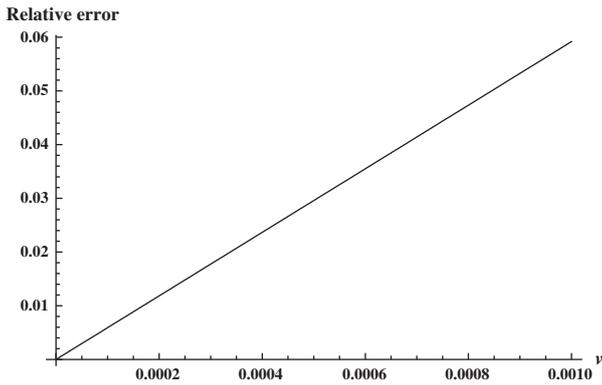


Fig. 2. The relative error between ADM and Exact solution.

The main aim of this case is to compare the solution given by the Adomian decomposition method and He's variational iteration method. In this case the simulation results obtained by both methods for three values of h ($h = 0, 1, 2$), were compared with analytical solutions [30], where the breakage frequency $\Gamma(v) = v$ and v^2 respectively.

We truncate the series up to level $n = 5$ to verify the validity of the equations with the Adomian decomposition method and He's variational iteration method. At $h = 0$, and $h = 1$, the analytical solutions are not available in the literature. On the other hand; to find all the terms of the series is not easy task because the polynomials are very complex. For $h = 2$ Eq. (31) is reduced to the uniform binary breakage, where the breakage frequencies $\Gamma(v) = v$ and v^2 were used. All the terms of the series obtained by both methods are simple and the deduction of the general term as a closed summation gives an analytical form for the solution of this particular case [30]

Figs. 3 and 4 shows the particle number density with parabolic daughter particle distribution for three values of h ($h = 0, 1, 2$) and comparisons with the analytical solutions [30] for the cases of $\Gamma(v) = v$ and v^2

2.2. Particle breakage in continuous flow systems

2.2.1. Case 1. Breakage with a uniform daughter particle distribution and $\Gamma(v) = v$

In this case, a zero initial condition and a monodisperse feed particle distribution are used. The monodisperse feed distribution is mathematically represented by the Dirac delta function:

$$n^{feed}(v) = \frac{t\delta(v-b)}{\theta}. \tag{33}$$

Using this equation, the PBE for this case is reduced to:

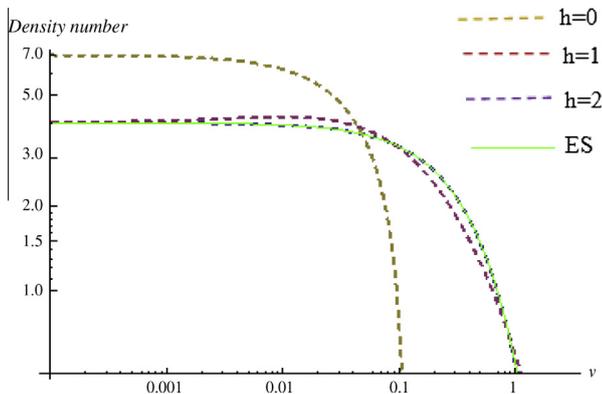


Fig. 3. Particle breakage in a batch system with parabolic daughter particle distribution using $h = 0, 1, 2$ as compared to the analytical solution [30] for $h = 2$ and $G(v) = v$.

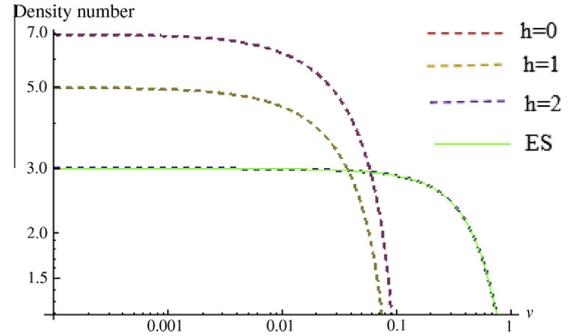


Fig. 4. Particle breakage in a batch system with parabolic daughter particle distribution using $h = 0, 1, 2$ as compared to the analytical solution [30] for $h = 2$ and $G(v) = v$.

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{1}{\theta} (n^{feed}(v,t) - n(v,t)) + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v',t)dv' - \Gamma(v)n(v,t). \tag{34}$$

Now, we rewrite Eq. (34) as

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{n^{feed}(v)}{\theta} + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v',t)dv' - n(v,t)\left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta}\right). \tag{35}$$

Therefore, the last form of particle breakage in a continuous flow system, which is suitable for applying the ADM and VIM methods, is given by:

$$n(v,t) = \frac{n^{feed}(v)}{\theta}t + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v',t)dv' - n(v,t)\left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta}\right) \right) dt. \tag{36}$$

➤ The Adomian decomposition method (ADM)

The solution by the ADM recursion scheme is given by:

$$n_0 = \frac{\delta(v-b)}{\theta}t, \tag{37}$$

$$n_{m+1} = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n_m(v',t)dv' - n_m(v,t)\left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta}\right) \right) dt \quad m = 0, 1, 2, \dots \tag{38}$$

$$n_1 = -\frac{t^2\left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)\delta(v-b) - 2b\varphi(b-v)\right)}{2\theta}, \tag{39}$$

$$n_2 = \frac{t^3\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)\left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)\delta(v-b) - 4b\varphi(b-v)\right)}{6\theta}, \tag{40}$$

$$n_3 = -\frac{t^4\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)^2\left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)\delta(v-b) - 6b\varphi(b-v)\right)}{24\theta}, \tag{41}$$

$$n_m = (-1)^m \frac{t^{(m+1)}\left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)^{m-1}\delta(v-b) - 2mb\varphi(b-v)\right)}{(m+1)!\theta}. \tag{42}$$

Using the above general term, the general summation is given by:

$$n(v,t) = \sum_{m=0}^\infty (-1)^m \frac{t^{(m+1)}\left(\left(v^2 + \frac{1}{\theta}\right)^{m-1}\delta(v-b) - 2mb\varphi(b-v)\right)}{(m+1)!\theta}. \tag{43}$$

Therefore, the exact solution is simplified to:

$$n(v, t) = \frac{(v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) + 2b\text{UnitStep}[b - v]}{(v^2 + \frac{1}{\theta})^2\theta} - \frac{e^{-t(v^2 + \frac{1}{\theta})} \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) + (2b + \frac{2}{\theta}bt + 2btv^2)\text{UnitStep}[b - v] \right)}{(v^2 + \frac{1}{\theta})^2\theta} \tag{44}$$

➤ The He's variational iteration method (VIM)

As in the case of ADM, the solution using the VIM is derived as follows

$$n_0 = \frac{\delta(v - b)}{\theta}t, \tag{45}$$

$$n_{m+1}(v, t) = n_m(v, t) + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n_m(v', t)dv' - \Gamma(v)n_m(v, t) - \frac{\partial n_m(v, t)}{\partial t} \right) dt. \tag{46}$$

From which we calculate the solutions components

$$n_1(v, t) = -\frac{t^2 \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) - 2b\varphi(b - v) \right)}{2\theta}, \tag{47}$$

$$n_2(v, t) = -\frac{t^2 \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) - 2b\varphi(b - v) \right)}{2\theta} + \frac{t^3 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) - 4b\varphi(b - v) \right)}{6\theta}, \tag{48}$$

$$n_3(v, t) = -\frac{t^2 \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) - 2b\varphi(b - v) \right)}{2\theta} + \frac{t^3 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right) \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) - 4b\varphi(b - v) \right)}{6\theta} - \frac{t^4 \left(v^2 + \frac{1}{\theta} \right)^2 \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) - 6b\varphi(b - v) \right)}{24\theta}. \tag{49}$$

Therefore, the exact solution is:

$$n(v, t) = \frac{(v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) + 2b\text{UnitStep}[b - v]}{(v^2 + \frac{1}{\theta})^2\theta} - \frac{e^{-t(v^2 + \frac{1}{\theta})} \left((v^2 + \frac{1}{\theta})\delta(v - b) + (2b + \frac{2}{\theta}bt + 2btv^2)\text{UnitStep}[b - v] \right)}{(v^2 + \frac{1}{\theta})^2\theta}. \tag{50}$$

From the above results, one can see that if the iteration converges then it will converge to the same exact solution $n(v, t)$ using the two methods.

Fig. 5 shows the effect of the truncation of the series on the solution using $n = 1-6$ iterations ($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$) using the exact solution as given by Eq. (43) (ES continuous line) for the case of continuous parabolic daughter particle distribution.

Fig. 6 shows the relative error between the approximate solution (AS) and the exact solution (ES), where the relative error is defined as $= \left| \frac{AS-ES}{ES} \right| \times 100$.

2.2.3. Case 2. Breakege with a uniform daughter particle distribution and $\Gamma(v) = v^2$

In this case, we consider the initial condition as zero and the feed distribution is exponential function with respect to v . The PBE for this particular case is given by:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{\theta} (n^{feed}(v, t) - n(v, t)) + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - \Gamma(v)n(v, t). \tag{51}$$

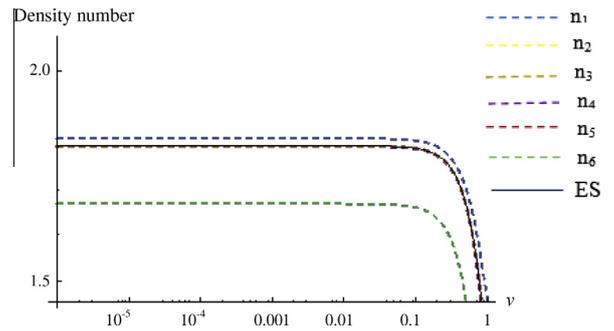


Fig. 5. The effect of truncating the series solutions ($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$) as compared to the exact solution from Eq. (43) (ES continuous line) on the number density function for continuous parabolic daughter particle distribution.

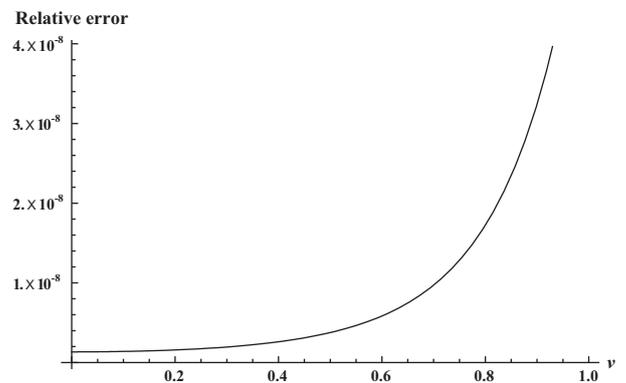


Fig. 6. The relative error = between ADM and Exact solution.

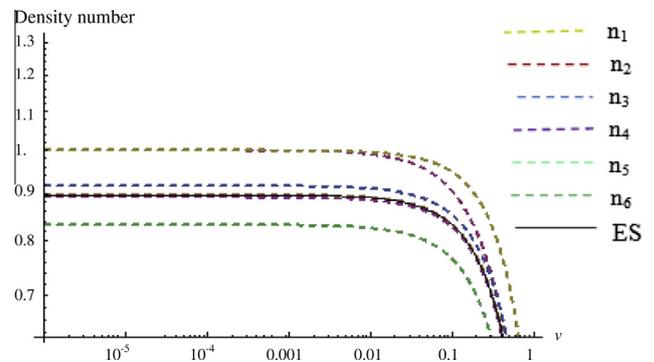


Fig. 7. The effect of truncating the series solutions ($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$) as compared to the exact solution ES (continuous line from Eq. (59)) on the number density function for continuous parabolic daughter particle distribution.

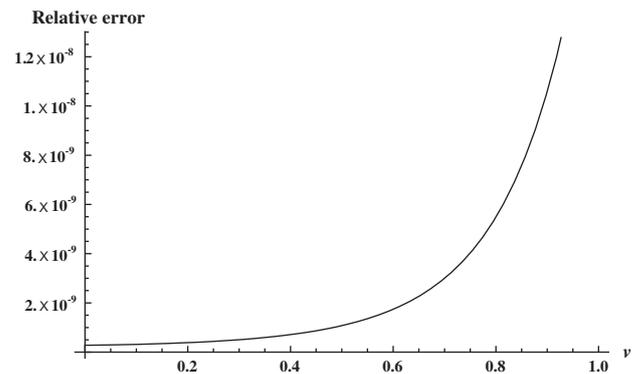


Fig. 8. The relative error between ADM and Exact solution.

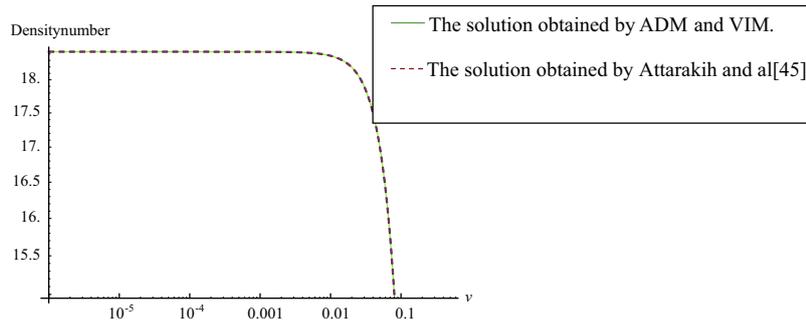


Fig. 9. Steady-state number density function for particle breakup in a continuous stirred vessel with $\Gamma(v) = v^2$ and $\beta(v/v') = 1/v'$, binary breakup, $t = 50$ s, $\theta = 100$ s and an exponential feed distribution.

Therefore, the final form of the equation to be solved is given as:

$$n(v, t) = \frac{n^{feed}(v, t)}{\theta} t + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) n(v, t) \right) dt. \tag{52}$$

✓ The Adomian decomposition method

Now, the Adomian recursion scheme is given by:

$$n_0 = \frac{te^{-v}}{\theta}, \tag{53}$$

$$n_{m+1} = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n_m(v', t)dv' - n_m(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\theta} \right) \right) dt \quad m = 0, 1, 2, \dots \tag{54}$$

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(-2 + \frac{1}{\theta} - 2v + v^2 \right), \tag{55}$$

$$n_2(v, t) = -\frac{1}{6\theta} e^{-v} t^3 \left(\frac{1}{\theta} - v^2 \right) \left(-2 + \frac{1}{\theta} - 2v + v^2 \right), \tag{56}$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24\theta} e^{-v} t^4 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^2 \left(-6 + \frac{1}{\theta} - 6v + v^2 \right). \tag{57}$$

Using the above terms, the general term is deduced as:

$$n_m = (-1)^m \times \frac{t^{m+1}}{(m+1)! \theta} e^{-v} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^{m-1} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 - 2m(1+v) \right). \tag{58}$$

And the closed summation can be written as:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^\infty (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)! \theta} e^{-v} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^{m-1} \left(\frac{1}{\theta} + v^2 - 2m(1+v) \right). \tag{59}$$

Finally, this summation is reduced to:

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{\frac{1}{\theta} + v^2 + 2(1+v)}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} - e^{-t(v^2 + \frac{1}{\theta})} \left(\frac{2(1+v + tv^2 + tv^3) + \frac{1}{\theta}(1 + 2t + 2tv) + v^2}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} \right) \right) \tag{60}$$

✓ The He's variational iteration method

The application of the VIM to Eq. (52) gives:

$$n_0 = \frac{te^{-v}}{\theta}, \tag{61}$$

$$n_{m+1}(v, t) = n_m(v, t) + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n_m(v', t)dv' - \Gamma(v)n_m(v, t) - \frac{\partial n_m(v, t)}{\partial t} \right) dt, \tag{62}$$

$$n_1(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta} - \frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(-2 + \frac{1}{\theta} - 2v + v^2 \right), \tag{63}$$

$$n_2(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta} - \frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(-2 + \frac{1}{\theta} - 2v + v^2 \right) + \frac{1}{6\theta} e^{-v} t^3 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right) \left(-4 + \frac{1}{\theta} - 4v + v^2 \right), \tag{64}$$

$$n_3(v, t) = \frac{te^{-v}}{\theta} - \frac{1}{2\theta} e^{-v} t^2 \left(-2 + \frac{1}{\theta} - 2v + v^2 \right) + \frac{1}{6\theta} e^{-v} t^3 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right) \times \left(-4 + \frac{1}{\theta} - 4v + v^2 \right) - \frac{1}{24\theta} e^{-v} t^4 \left(\frac{1}{\theta} + v^2 \right)^2 \left(-6 + \frac{1}{\theta} - 6v + v^2 \right). \tag{65}$$

Therefore, the exact solution is given by:

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{\frac{1}{\theta} + v^2 + 2(1+v)}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} - e^{-t(v^2 + \frac{1}{\theta})} \times \left(\frac{2(1+v + tv^2 + tv^3) + \frac{1}{\theta}(1 + 2t + 2tv) + v^2}{\theta(v^2 + \frac{1}{\theta})^2} \right) \right). \tag{66}$$

This equation is essentially the same solution as that found using the ADM method (Eq. (60)).

Fig. 7 shows the effect of the series truncation on the series solution using $n = 1-6$ iterations ($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$) and are compared to the exact solution as given by Eq. (59) (ES continuous line) for continuous parabolic daughter particle distribution function.

Fig. 8 depicts the relative error between the approximate solution (AS) and the exact solution (ES), where the relative error is defined previously in this work.

Fig. 9 shows the number density at steady state as predicted using the ADM and VIM series solutions, which are very close to the exact one. The exact solution was determined using the Laplace transform method [61].

3. Conclusions

The Adomian decomposition and the variational iteration methods were employed successfully for solving the particle population balance equations in batch and continuous flow systems with assumed functional forms of breakage frequencies and daughter particle distributions.

The solutions obtained by the ADM and VIM techniques were infinite power series with appropriate initial conditions. The two methods were found to produce good approximations to the exact solutions with their rapidly converging series for all the cases studied in this work.

Acknowledgement

The authors wish to thank the DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft) for supporting this work.

Appendix A

We summarize here only all different cases functions defined as

1. Dirac delta function

Represents the Dirac delta $\delta(v - b)$ function returns 0 for all numeric x other than 0

2. The Heaviside Theta function

$$\varphi(b - v) = \begin{cases} 1, & b < v \\ 0, & b > v \end{cases}$$

$$\frac{d\varphi(b - v)}{dv} = -\delta(b - v)$$

$$D[\text{Heaviside Theta}[x], x] = \text{DiracDelta}[x]$$

3. The Gamma function

The incomplete gamma function is given by the integral

$$\gamma(a, z) = \int_z^\infty t^{a-1} e^{-t} dt$$

4. The Unit Step function

$$\text{UnitStep}[b - v] = \begin{cases} 1, & b < v \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

References

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] J.D. Litster, Scaleup of wet granulation processes: science not art, *Powder Technol.* 130 (2003) 35–40.
- [4] S.M. Iveson, J.D. Litster, K. Hapgood, B.J. Ennis, Nucleation growth and breakage phenomena in agitated wet granulation processes: a review, *Powder Technol.* 117 (2001) 3–39.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] M.L. Eggersdorfer, S.E. Pratsinis, Agglomerates and aggregates of nanoparticles made in the gas phase, *Adv. Powder Technol.* 25 (2014) 71–90.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] R. Gunawan, I. Fusman, R.D. Braatz, High resolution algorithms for multidimensional population balance equations, *AIChE J.* 50 (2004) 2738–2749.
- [11] A. Chaudhury, A. Niziolek, R. Ramachandran, Multi-dimensional mechanistic modeling of fluid bed granulation processes: an integrated approach, *Adv. Powder Technol.* 24 (2013) 113–131.
- [12] S.M. Alavi, L. Mirmomen, K. Saleh, Experimental study and particle population modeling of coating in a jet-fluidized bed, *Adv. Powder Technol.* 18 (2007) 311–327.
- [13] O. Ashrafi, H. Nazari-Pouya, N. Mostoufi, R.S. Gharebagh, Particle size distribution in gas-phase polyethylene reactors, *Adv. Powder Technol.* 19 (2008) 321–334.
- [14] N.K.V. Nadimpalli, V.S. Buddhiraju, V. Runkana, Modeling and simulation of carbon black synthesis in an aerosol flame reactor, *Adv. Powder Technol.* 22 (2011) 141–149.
- [15] E.L. Goldberg, S.V. Avlov, Particle interaction in the grinding model, *Adv. Powder Technol.* 5 (1994) 281–287.
- [16] 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).
- [17] R.M. Ziff, E.D. McGrady, The kinetics of cluster fragmentation and depolymerisation, *J. Phys. A: Math. Gen.* 18 (1985) 3027–3037.
- [18] P.J. Blatz, A.V. Tobolsky, Note on the kinetics of system manifesting simultaneous polymerization depolymerization phenomena, *J. Phys. Chem.* 49 (1945) 77.
- [19] H. Hulburt, S. Katz, Some problems in particle technology, a statistical mechanical formulation, *Chem. Eng. Sci.* 19 (1964) 555–574.
- [20] A.D. Randolph, M.A. Larson, *Theory of Particulate Processes*, second ed., Academic Press, New York, 1988.
- [21] K.D. Danov, I.B. Ivanov, T.D. Gurkov, R.P. Borwankar, Kinetic model for the simultaneous processes of flocculation and coalescence in emulsion systems, *J. Colloid Interface Sci.* 8 (1994) 167.
- [22] C.F. Lu, L.A. Spielman, Kinetics of floc breakage and aggregation in agitated liquid suspensions, *J. Colloid Interface Sci.* 95 (1985) 103.
- [23] 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>.
- [24] F. Sreenc, Cytometric data as the basis for rigorous models of cell population dynamics, *J. Biotechnol.* 71 (1999) 233–238.
- [25] N.V. Mantzaris, P. Daoutidis, Cell Population balance modeling and control in continuous bioreactors, *J. Process Control* 14 (2004) 775–784.
- [26] J.P. Barone, W. Furth, S. Loynaz, Simplified derivation of the general population balance equation for a seeded, continuous flow crystallizer, *Can. J. Chem. Eng.* 58 (1980) 137–138.
- [27] L.M. Ribeiro, P.F.R. Regueiras, M.M.L. Guimaraes, C.M.C. Madureira, J.J.C. Cruz-Pintu, The dynamic behavior of liquid–liquid agitated dispersions, the hydrodynamics, *Comput. Chem. Eng.* 19 (1995) 333–343.
- [28] J.D. Lister, D.J. Smit, M.J. Hounslow, Adjustable discretized population balance for growth and aggregation, *AIChE J.* 41 (1995) 591–603.
- [29] M.M. Attarakih, H.J. Bart, N.M. Faqir, Optimal moving and fixed grids for the solution of discretized population balances in batch and continuous systems: droplet breakage, *Chem. Eng. Sci.* 58 (2003) 1251–1269.
- [30] A. Hasseine, A. Bellagoun, H.J. Bart, Analytical solution of the droplet breakup equation by the adomian decomposition method, *Appl. Math. Comput.* 218 (2011) 2249–2258.
- [31] K.J. Valentas, A.R. Amundson, Breakage and coalescence in dispersed phase systems, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 5 (1966) 533–542.
- [32] S. Kumar, D. Ramkrishna, On the solution of population balance equations by discretization—i. a fixed pivot technique, *Chem. Eng. Sci.* 51 (1996) 1311–1332.
- [33] Y.P. Gokhale, R. Kumar, J. Kumar, W. Hintz, G. Warnecke, J. Tomas, Disintegration process of surface stabilized sol-gel tio2 nanoparticles by population balances, *Chem. Eng. Sci.* 64 (2009) 5302–5307.
- [34] J. Kumar, G. Warnecke, M. Peglow, S. Heinrich, Comparison of numerical methods for solving population balance equations incorporating aggregation and breakage, *Powder Technol.* 189 (2009) 218–229.
- [35] Adomian, A review of the decomposition method in applied mathematics, *J. Math. Anal. Appl.* 135 (1988) 501–544.
- [36] G. Adomian, *Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method*, Kluwer Academic Publishers, Boston, 1994.
- [37] M.J. Pujol, P. Grimalt, A non-linear model of cerebral diffusion: stability of finite differences method and resolution using the adomian method, *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow* 13 (2003) 473–485.
- [38] L.D. Blanco-Cocom, E.J. Ávila-Vales, The use of the adomian decomposition method for a sirc influenza model, *Adv. Differ. Equ. Control. Process.* 5 (2010) 115–127.
- [39] A.-M. Wazwaz, A comparison between Adomian decomposition method and Taylor series method in the series solutions, *Appl. Math. Comput.* 97 (1998) 37–44.
- [40] G. Adomian, *Nonlinear Stochastic Systems Theory and Applications to Physics*, Kluwer, Norwell, MA, 1989.
- [41] G. Adomian, A review of the decomposition method and some recent results for nonlinear equations, *Math. Compd. Modell.* 18 (1990) 17–43.
- [42] Y. Cherruault, Convergence of Adomian's method, *Kybernetes* 18 (1989) 31–38.
- [43] Y. Cherruault, G. Saccomandi, B. Some, New results for convergence of Adomian's method applied to integral equations, *Mathl. Comput. Modelling* 16 (1992) 85–93.
- [44] K. Abbaoui, Y. Cherruault, Convergence of Adomian's method applied to differential equations, *Mathl. Comput. Modell.* 28 (5) (1994) 103–110.
- [45] J.H. He, Variational iteration method for autonomous ordinary differential systems, *Appl. Math. Comput.* (2000) 115–123.

- [46] J.H. He, X.H. Wu, Construction of solitary solution and compaction-like solution by variational iteration method, *Chaos, Solitons Fractals* 29 (2006) 108–113.
- [47] S. Guo, L. Mei, The fractional variational iteration method using He's polynomials, *Phys. Lett. A* 375 (2011) 309–313.
- [48] D.D. Ganji, M. Nourollahi, E. Mohseni, Application of He's methods to nonlinear chemistry problems, *Comput. Math. Appl.* 54 (2007) 1122–1132.
- [49] Ahmet Yıldırım, Variational iteration method for modified Camassa–Holm and Degasperis–Procesi equations, *Int. J. Numer. Meth. Biomed. Eng.* 26 (2010) 266–272.
- [50] G. Rezazadeh, H. Madinei, R. Shabani, Study of parametric oscillation of an electro statically actuated microbeam using variational iteration method, *Appl. Math. Model.* 36 (2012) 403–443.
- [51] D. Altıntan, Ö. Uğurb, Solution of initial and boundary value problems by the variational iteration method, *J. Comput. Appl. Math.* 259 (2014) 790–797.
- [52] J.H. He, Variational iteration method—a kind of non-linear analytical technique: some examples, *Internat. J. Non-linear Mech.* 34 (1999) 699–708.
- [53] J.H. He, A new approach to nonlinear partial differential equations, *Comm. Nonlinear Scinumer. Simul.* 2 (1997) 203–205.
- [54] J.H. He, Non-perturbative methods for strongly nonlinear problems, Dissertation. de-Verlagim Internet GmbH, Berlin, 2006.
- [55] J.H. He, Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Comput. Meth. ApplMechEng.* 68 (1998). 167–57.
- [56] J.H. He, Approximate solution of nonlinear differential equations with convolution product nonlinearities, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 167 (1998) 69–73.
- [57] F. Geng, A modified variational iteration method for solving Riccati differential Equations, *Comput. Math. Appl.* 60 (2010) 1868–1872.
- [58] R.M. Ziff, E.D. Mc Grady, Kinetics of polymer degradation, *Macromolecules* 19 (1986) 2513–2519.
- [59] P.J. Hill, K.M. Ng, New discretization procedure for the breakage equation, *AIChE J.* 41 (1995) 1204–1216.
- [60] S. Rigopoulos, A.G. Jones, Finite-element scheme for solution of the dynamic population balance equation, *AIChE J.* 49 (2003) 1127–1139.
- [61] M. Attarakih, H.J. Bart, N.M. Faqir, Solution of the droplet breakage equation for interacting liquid–liquid dispersions: a conservative discretization approach, *Chem. Eng. Sci.* 59 (2004) 2547–2565.

Resolution of population balance equation for continuous and batch systems

Abstract

The breakage in batch and continuous systems has attained high interest in chemical engineering and granulation from a process and from a product quality perspective. The wet granule breakage process in a high shear mixer will influence and may control the final granule size distribution.

In this work, we developed analytical solutions of the particle breakage using the population balance equation (PBEs) in batch and continuous flow systems. To allow explicit solutions, we approximate particle breakage mechanisms with assumed functional forms for breakage frequencies. This new framework for solving (PBEs) for batch and continuous flow systems proposed in this work uses the Adomian decomposition method (ADM) and the variational iteration method (VIM).

These semi-analytical methods overcome the crucial difficulties of numerical discretization and stability that often characterize previous solutions in of the PBEs. The results obtained in all cases show that the predicted particle size distributions converge exactly in a continuous form to that of the analytical solutions using the two methods.

Keywords: Population balance equation, Breakage, Adomian decomposition method, Variational iteration method.

Résolution de l'équation de bilan de population Pour les systèmes continus et discontinus

Soutenue le .. /.. /.... par

Barhoum Zineb

Devant le jury composé de :

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

Faculté des Sciences et de la technologie

En vue de l'obtention du Diplôme de

Doctorat en LMD en

Chimie Industrielle

Option: Génie des Procédés et Environnements

Résumé

La rupture dans les procédés discontinus et continus a atteint un grand intérêt pour le génie chimique et la granulation d'un processus et d'un point de vue de la qualité du produit. Le processus de rupture granule humide dans un mélangeur à cisaillement élevé et influencera peut contrôler la répartition finale des tailles de granulés.

Dans cette thèse, nous avons développé des solutions analytiques de la rupture des particules à l'aide de l'équation du bilan de la population dans deux systèmes à flux continu et discontinu. Pour permettre des solutions explicites, nous mécanismes approximatives de rupture des particules avec des formes fonctionnelles hypothétiques pour des fréquences de rupture. Ce nouveau cadre pour résoudre l'équation du bilan de population (PBE) pour les systèmes à flux continu et discontinu proposé dans cette thèse utilise la méthode de décomposition Adomian (ADM) et la méthode d'itération variationnelle (VIM).

Ces méthodes semi-analytiques à surmonter les difficultés cruciales de discrétisation numérique et la stabilité qui caractérisent souvent les solutions précédentes dans des inhalateurs protecteurs. Les résultats obtenus montrent dans tous les cas que les distributions de taille de particule prédit exactement convergent sous une forme continue à celle des solutions analytiques en utilisant les deux méthodes.

Mots clés: Équation du bilan de la population, Rupture, Méthode décomposition d'Adomian, méthode d'itération variationnel.