

CORA

Coalescence, Rupture et Aggregation dans les milieux dispersés

Micheline Abbas (micheline.abbas@ensiacet.fr)

Olivier Masbernat

Eric Climent

Catherine Colin

1. Introduction
2. Bilans de population: position du problème
3. Fonction de distribution (taille et volume)
4. Métrologie
5. Equation de bilan de population
6. Termes sources et puits
7. Résolution numérique du bilan de population

1. Introduction

Génie des milieux dispersés

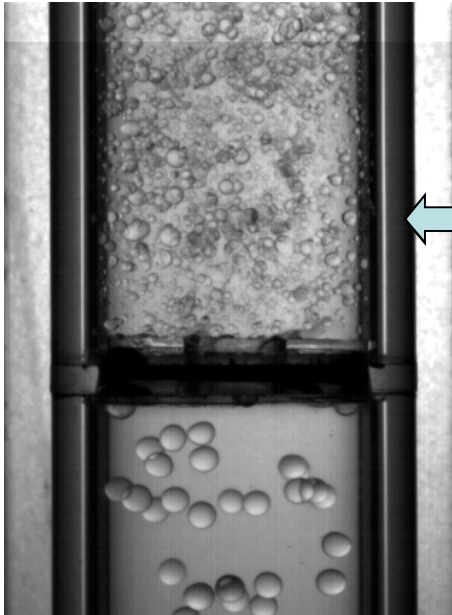
- Des systèmes très répandus (Industrie et Environnement) et des opérations à finalités diverses
 - *Transport* (extraction)
 - *Production* d'une suspension : cristallisation, broyage, enrobage, granulation, émulsification
 - *Séparation* (émulsion, suspension) sédimentation, décantation, centrifugation, hydrocyclone, filtration
 - *Transfert* avec ou sans réaction: extraction, absorption, adsorption, réaction en milieu hétérogène

Procédés et opérations: Colonne à bulles, réacteur agité, lit fluidisé, lit fixe, décanteur, filtration, broyage, émulsification

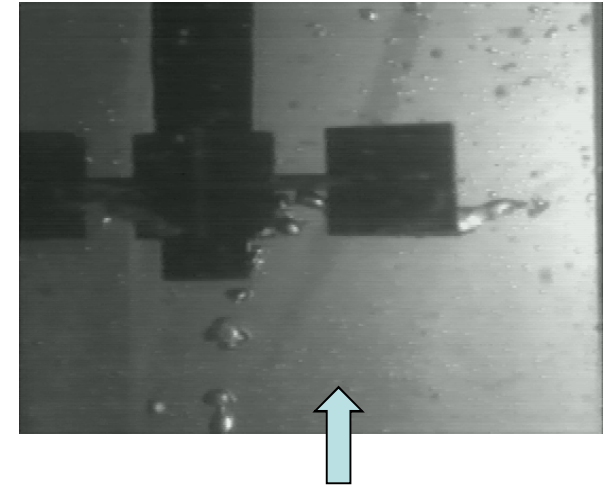
⇒ la phase dispersée: bulle, goutte ou particule

Des technologies très variées ; des régimes d'écoulement contrastés

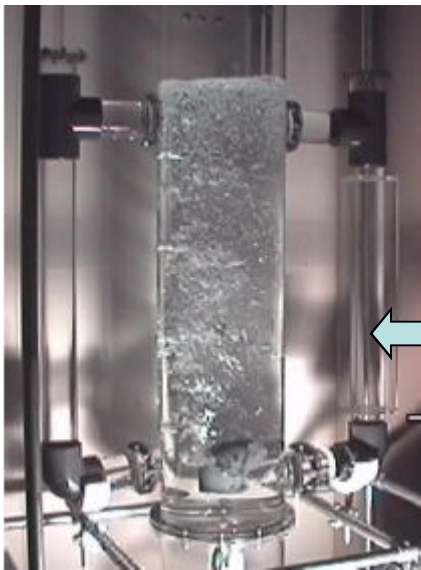
Exemples d'application



Emulsification huile/eau dans un écoulement turbulent au passage d'une restriction (LGC). La turbulence produite par l'écoulement en aval de l'orifice est responsable de la fragmentation des gouttes



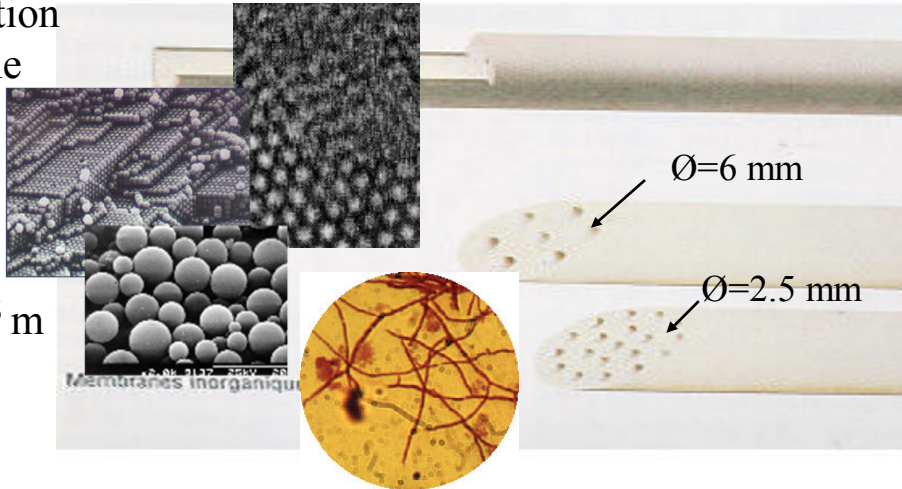
Réacteur agité gaz-liquide (LGC). Le mobile d'agitation permet d'assurer le mélange des deux phases et de casser les bulles. Plus les bulles sont petites, plus l'aire interfaciale est importante, et plus le mélange diphasique sera homogène.



Précipitation de bicarbonate en colonne à bulles (INSA, LISPB). Dans cet exemple (transfert réactif gaz-liquide), le champ hydrodynamique est entièrement contrôlé par la taille des bulles leur forme et leur concentration.

Ultrafiltration
tangentielle

$10^{-7} < d < 10^{-6}$ m



En filtration, on concentre les particules, par un flux transmembranaire au voisinage des pores de la membrane. Ceci peut entrainer leur agrégation, et la formation d'un gâteau de particules et le colmatage de la membrane

Génie des milieux dispersés

Quelle que soit la finalité de l'opération, le diamètre des inclusions d est un paramètre clé.

Transfert massique ou thermique:

$$J_{\psi} = K_{\psi} a_i \Delta\Psi$$

J_{ψ} : flux transféré (kg/s) ou (J/s)

K_{ψ} : coefficient de transfert (m/s)

a_i : aire interfaciale (surface/unité de volume) (m^{-1})

$\Delta\Psi$: potentiel d'échange (concentration, kg ; énergie interne, J)

Inclusion isolée: Sherwood (massique)/Nusselt (thermique)

$$Sh = \frac{K_M d}{D} = 2 + b Re_p^{1/2} Sc^{1/3} \quad \text{ou} \quad Nu = \frac{K_{Th} d}{\alpha} = 2 + a Re_p^{1/2} Pr^{1/3}$$

D diffusivité massique et $\alpha = \lambda / \rho c_p$ thermique (m^2/s)

Schmidt

$$Sc = \nu / D$$

Prandtl

$$Pr = \nu / \alpha$$

Reynolds particulière $Re = du_R / \nu$

Aire Interfaciale:

$$a_i = \frac{6\varphi}{d_s}$$

φ : concentration volumique des inclusions

d_s : diamètre moyen des inclusions

Objectif: maximiser J_{ψ} , c'est à dire maximiser a_i et K_{ψ} ...



Forte concentration et faible diamètre (limites...)

2. Bilans de populations

Application à l'étude des procédés en milieu dispersé

Position du problème...

Dans de nombreuses applications de génie des procédés, la variable d'état d'une population d'inclusions est le diamètre (particules sphériques) ou une dimension caractéristique (diamètre équivalent, volume, masse). On peut définir toutefois d'autres propriétés associées à un processus particulier (taux de recouvrement, densité de charges de surface, densité d'un marquage, activité biologique etc.)

La connaissance de la distribution granulométrique est fondamentale dans les procédés d'élaboration de particules à granulométrie contrôlée par croissance de taille (précipitation, cristallisation, enrobage, agrégation, coagulation) ou par fragmentation (broyage, émulsification, aérolisation).

La maîtrise des procédés de séparation ou de réaction en phase dispersée est fortement conditionnée par la connaissance *de l'aire interfaciale* (c'est la dire la surface de contact entre la phase dispersée et la phase continue par unité de volume) et donc par la distribution granulométrique.

Les interactions *hydrodynamiques* entre phase dispersée et phase continue dans un contacteur/réacteur ne peuvent plus être négligées en milieu concentré. L'importance et la nature de ces interactions dépend de l'inertie des particules (densité et *taille*) et de leur concentration. L'évolution d'une population au cours du temps peut s'accompagner d'une modification des propriétés hydrodynamiques de son environnement. Ex: Sédimentation

On veut connaître l'évolution d'une phase dispersée dénombrable (qu'on appellera Population) dans un procédé par rapport à une propriété d'état (granulométrie, composition, vitesse, etc.).

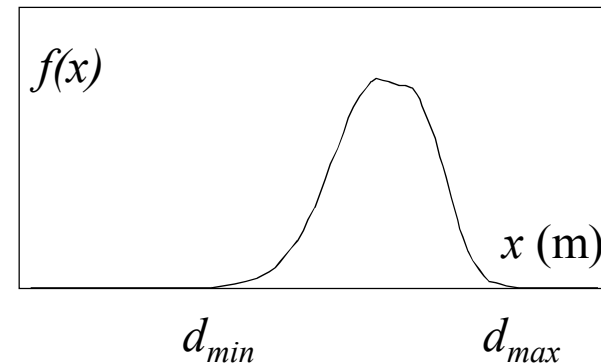
L'évolution de cette propriété d'état résulte d'interactions entre la phase dispersée et la phase continue (fragmentation, transfert de masse) ou d'interactions entre inclusions de la phase dispersée (coalescence, agrégation).

Généralement, ces interactions conduisent au développement d'une *distribution* de la variable d'état au sein de la population.

On appelle *bilan de population* l'équation de transport de cette distribution dans un volume de contrôle. La résolution du bilan de population permet de connaître l'évolution de la distribution dans le temps et dans l'espace. Les bilans de population sont largement utilisés en génie des procédés des milieux dispersés (contrôle d'une distribution granulométrique, de l'aire interfaciale)

3. Fonctions de distribution: taille et volume

On définit dans le contacteur une distribution ou densité de probabilité $f(x)$ par unité de volume, qui traduit la probabilité de trouver à une position donnée et à l'instant t une inclusion ayant la propriété $x=d$ (par exemple le diamètre). Par définition, on aura:



f est par exemple une densité en nombre par unité de volume $n(d)$ ou une densité en fraction volumique $P(d)$.

$$\int_{d_{min}}^{d_{max}} n(d)\delta d = N$$

$$\int_{d_{min}}^{d_{max}} P(d)\delta d = \phi$$

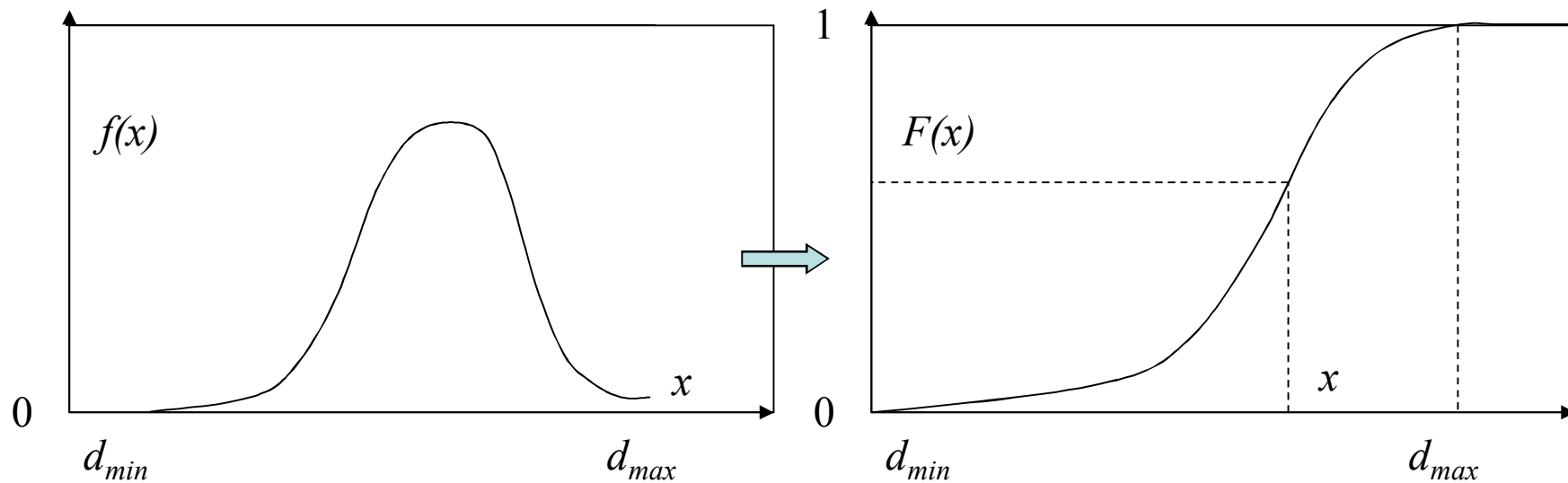
N est le nombre total de particules par unité de volume et Φ est la fraction volumique de la phase dispersée

$n(d)\delta d / N$ est la fraction numérique de gouttes dont le diamètre $\in [d-\delta d/2, d+\delta d/2]$

$P(d)\delta d$ est la fraction volumique de gouttes dont le diamètre $\in [d-\delta d/2, d+\delta d/2]$

Fonction de répartition

Il est parfois plus aisé d'accéder à la fonction de répartition ou probabilité cumulée. C'est la probabilité pour qu'une particule ait un diamètre $< x$



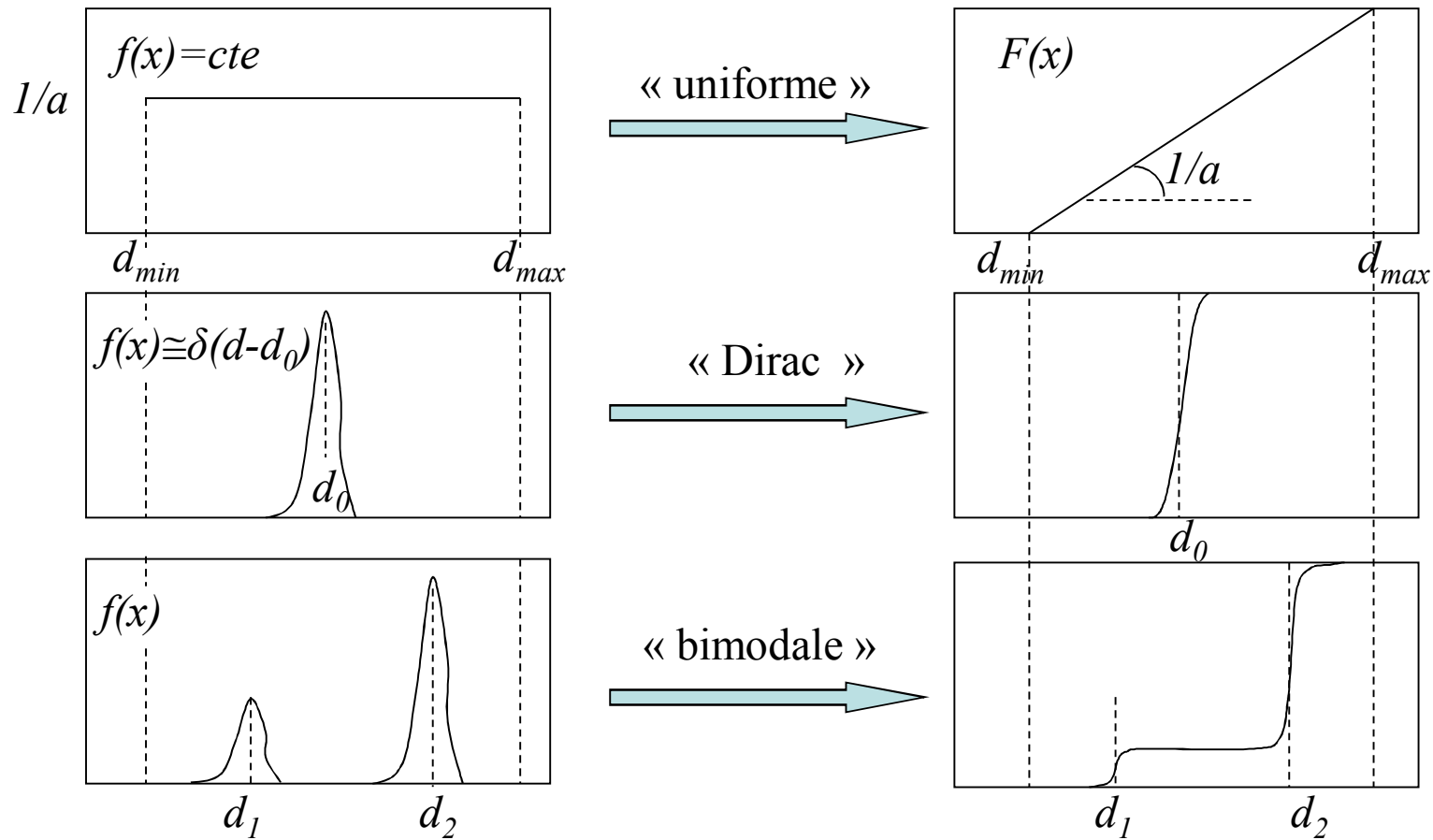
$$F(x) = \int_{d_{min}}^x f(y) dy \quad \longrightarrow$$

$$\frac{dF}{dx} = f(x) > 0$$

$$F(d_{min})=0 \text{ et } F(d_{max})=1$$

Densité et probabilité cumulée

Quelques exemples de distributions et de probabilités cumulées



Moments de la distribution

Pour caractériser une distribution, on utilise souvent ses moments. Le moment d'ordre n d'une distribution $f(x)$ est défini comme:

$$\overline{x^n} = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} x^n f(x) dx$$

Pour les distributions unimodales, classiquement on se limite aux moments d'ordre 1 et 2:

$$\bar{x} = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} x f(x) dx \quad \text{Valeur moyenne ou centrale}$$

$$\text{var}_x = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} (x - \bar{x})^2 f(x) dx \quad \text{Moment centré d'ordre 2 ou variance} \quad \text{écart type: } \sigma_x = \sqrt{\text{var}_x}$$

Montrer que: $\bar{x} = d_{\max} - \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} F(x) dx$ / $\text{var}_x = \overline{x^2} - \bar{x}^2$ / $\text{var}_x = d_{\max}^2 - \bar{x}^2 - 2 \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} x F(x) dx$

Pour identifier une distribution unimodale, on fait généralement appel à une loi à deux paramètres, la moyenne et l'écart type. Ex: distribution de Gauss ou loi normale, loi log-normale, Rosin-Rammler, etc.

Diamètre de Sauter et aire interfaciale

Fraction volumique φ : volume de la dispersion/volume total

$$\varphi = \frac{1}{V} \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} n(d) \frac{\pi d^3}{6} \delta d \quad \text{ou} \quad \varphi = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} P(d) \delta d$$

Diamètre de Sauter: c'est le diamètre moyen volume/surface de la dispersion

$$d_{32} = \frac{\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} n(d) d^3 \delta d}{\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} n(d) d^2 \delta d} \quad \text{Montrer que: } d_{32} = \frac{\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} P(d) \delta d}{\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} (P(d)/d) \delta d}$$

Aire interfaciale: l'aire interfaciale est définie comme la surface de contact entre la phase dispersée et la phase continue dans un volume donné. Pour une distribution en nombre de particules sphériques, on a:

$$a_I = \frac{1}{V} \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} n(d) \pi d^2 \delta d \quad \text{Montrer que: } a_I = 6 \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} (P(d)/d) \delta d \quad \text{et que: } a_I = 6\varphi / d_{32}$$

Rq: on trouve parfois pour caractériser une distribution le d_{50} et le d_{90} :

$$F(d_{50}) = \int_{d_{\min}}^{d_{50}} f(x) dx = 0.5 \quad \text{et} \quad F(d_{90}) = \int_{d_{\min}}^{d_{90}} f(x) dx = 0.9 \quad \text{etc..}$$

Pour les opérations de transfert, le flux interfacial est proportionnel à l'aire interfaciale. L'efficacité du flux transféré est donc conditionnée par des valeurs élevées de φ et faibles de d_{32} . **Quelles sont les limites?**

4. Métrologie

Le suivi d'une population d'inclusions dans un contacteur/réacteur dispersé est difficile (accès, opacité). La mesure in situ par des techniques non intrusives (qui ne perturbent pas l'écoulement) n'est pas réalisable en règle générale, et on a le plus souvent recours à des prélèvements en ligne vers des cellules de mesures ou à l'utilisation de sondes intrusives (sondes optiques, conductimétriques, laser).

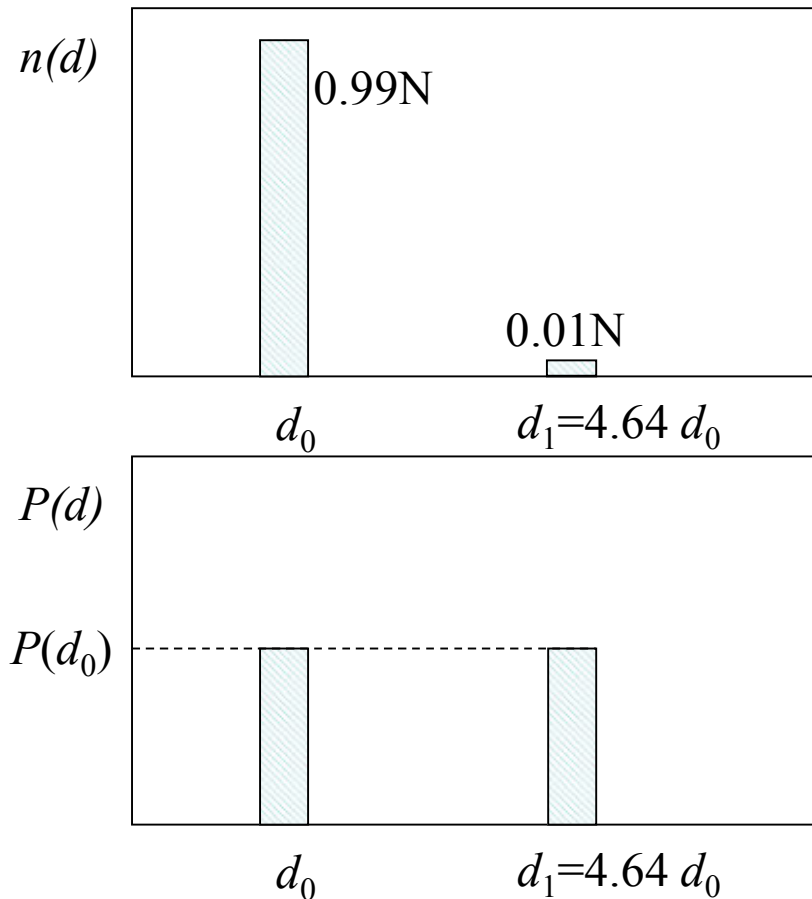
Pour les grosses particules ($>1\text{mm}$), les principes de mesure reposent sur les variations d'indice de réflexion (sonde optique) ou d'impédance (résistance, capacité) au passage des particules sur la sonde. Dans ce cas, on ne mesure toutefois que des distributions de cordes et non des diamètres. Pour des milieux relativement dilués et transparents, les techniques de visualisation par ombroscopie peuvent s'avérer pertinentes.

Pour les petites particules, les méthodes optiques utilisent les propriétés de diffusion de la lumière des particules, notamment la relation entre l'angle de diffusion et le diamètre de particule (théorie de Mie). De manière générale, en milieu concentré, ces méthodes nécessitent la dilution préalable de l'échantillon, même si quelques techniques en rétro diffusion sont en cours de développement.

Quelque soit la technique utilisée, il est important de connaître la plage des diamètres mesurables par cette technique ainsi que la nature de la grandeur mesurée (corde, diamètre, surface, volume).

Exemple d'interprétation des mesures $n(d)$ vs. $P(d)$

La métrologie fixe la nature de la grandeur mesurée. Lorsque les distributions de taille sont relativement étalées, les représentations en nombre ou en volume diffèrent énormément. Une représentation en volume sera beaucoup plus sensible à l'évolution de la taille qu'une représentation en nombre, mais privilégie de facto les grandes tailles. Se pose alors le problème de la représentativité de l'échantillon mesuré au regard des plus grands diamètres de la distribution.



Exemple:

$$V(d_1) = 100V(d_0)$$

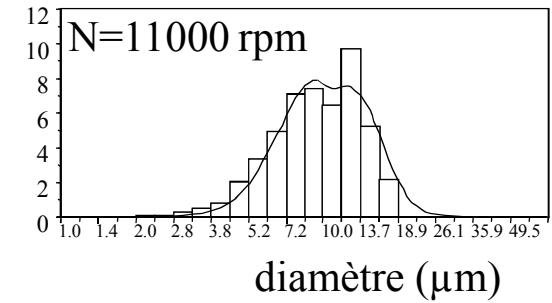
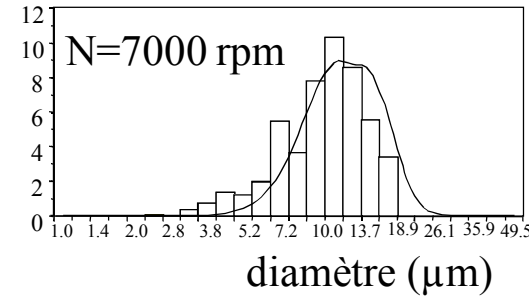
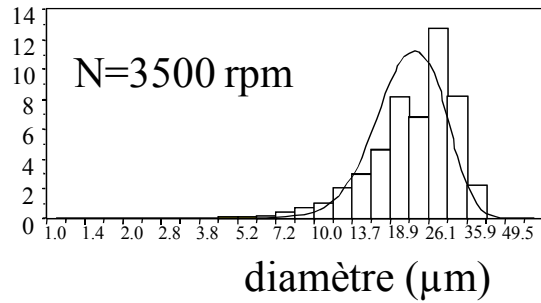


$$P(d_0) = 0.99NV(d_0) \cong P(d_1) = NV(d_0)$$

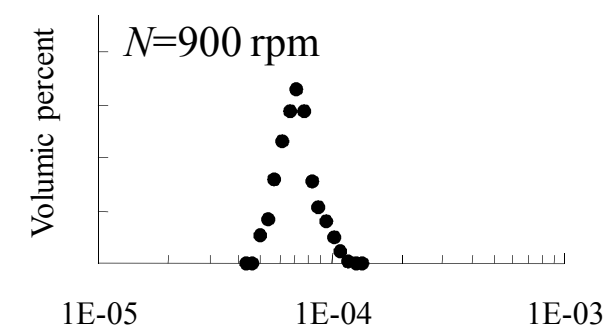
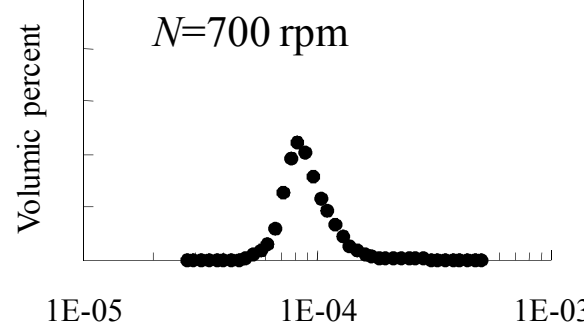
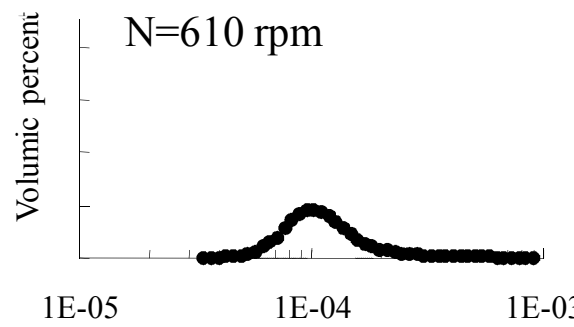
Calculer les diamètres moyens
en nombre et en volume

Quelques exemples de mesures

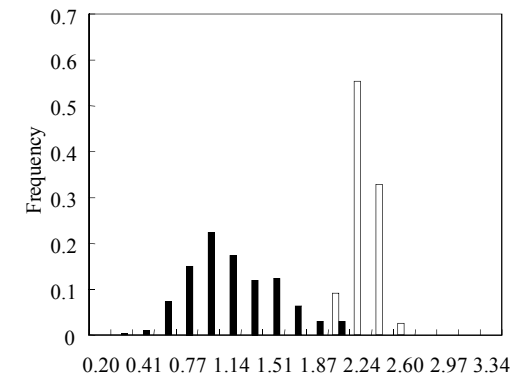
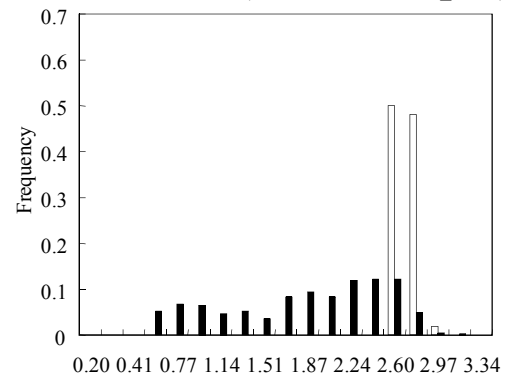
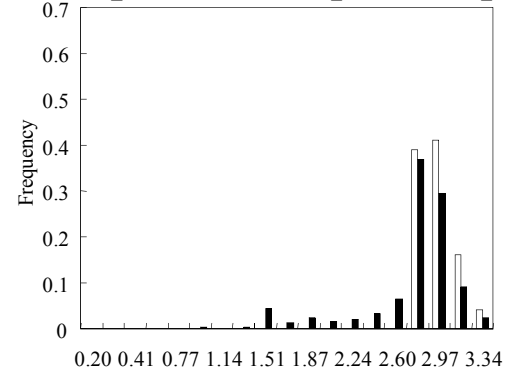
Suspensions liquide-liquide en émulsificateur (mesures par DSC)



Suspensions liquide-liquide en cuve agitée (granulométrie à laser)



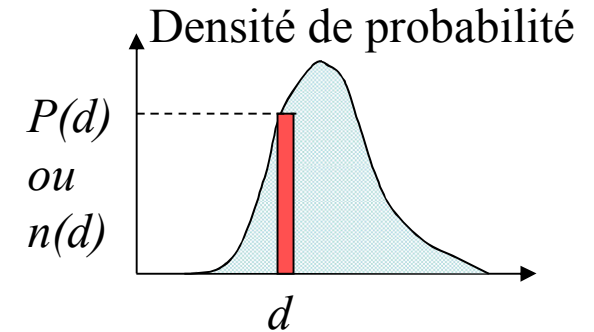
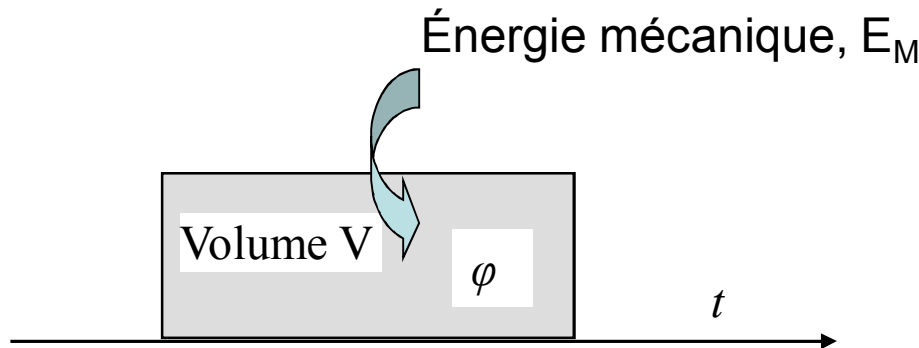
Suspensions liquide-liquide en conduite (ombroscopie)



Equation de bilan de population

Les bilans de populations sont des bilans matière par classe de taille d'inclusions permettent de traduire le taux de variation de la densité de probabilité d'une distribution par rupture, fragmentation, coalescence ou agrégation, au sein d'une dispersion en écoulement.

Formulation globale (ex: réacteur agité liquide-liquide)



$P(d)$: en volume

$n(d)$: en nombre

$$\varphi = \int_0^{d_{\max}} P(d) \delta d \quad N(t) = \int_0^{d_{\max}} n(d,t) \delta d$$

Dans un volume fermé homogène, ce bilan s'écrit:

$$\frac{\partial n(d,t)}{\partial t} = h(d,t) = P^+ + P^- \quad \left. \begin{array}{l} P^+ : \text{terme source} \\ P^- : \text{terme puits} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Fragmentation,} \\ \& \\ \text{Coalescence/Agrégation} \end{array}$$

Note: on peut formuler le bilan de population en utilisant le diamètre $n(d,t)$ ou le volume $n(v,t)$

5. Formulation d'un bilan de population

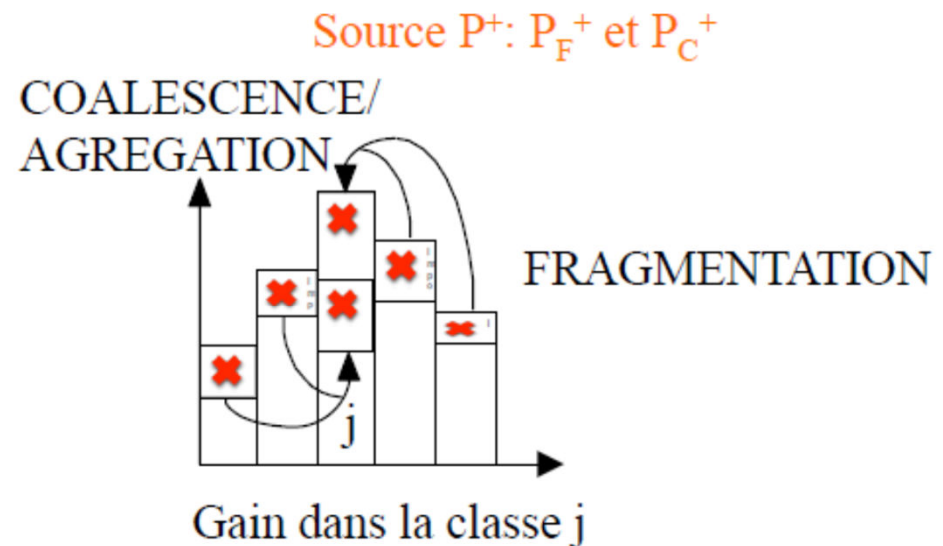
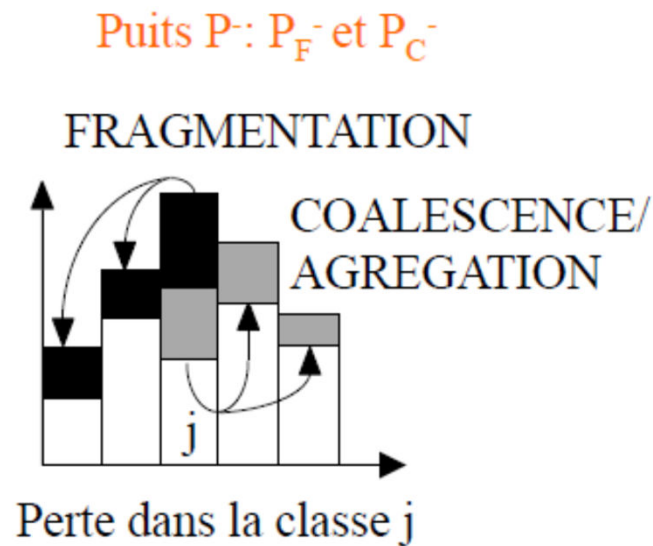
On fait l'hypothèse d'un volume contenant un grand nombre de particules. Ce volume de fluide est parfaitement micro-mélangé et l'hydrodynamique n'intervient pas de façon locale

$$n(v,t) \Rightarrow \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = h(v,t) \longrightarrow \begin{array}{l} \text{Termes sources et puits} \\ \text{liés à la rupture et à} \\ \text{l'agrégation} \end{array}$$

$n(v,t)$: densité en nombre de particules de volume v
à l'endroit considéré à l'instant t
= nombre de particules par unité de volume
dont le volume est compris entre v et $v + dv$

Termes sources et puits du BP

Pour une classe de diamètre d_j de la distribution donnée, le terme source correspond à la coalescence de gouttes de classes inférieures d_{j-k} et de rupture de classes supérieures d_{j+k} . Le terme puits correspond à la rupture des gouttes de diamètre d_j et à la coalescence de celles-ci avec des gouttes de n'importe quelle classe d_i (y compris d_j).



Expressions de P_F^+ , P_C^+ et P_F^- , P_C^- ?

Lois de fermeture ou lois phénoménologiques

Lois phénoménologiques

✓ Agrégation/Coalescence

Taux de collision x Proba de coalescence/agrégation

Taux de collision: débit (vitesse) de collision x Proba de trouver 2 particules au même endroit = $n^2(d, t)$ si milieu dilué

$$\longrightarrow \frac{dn(d, t)}{dt} = -\text{Pr}_{\text{coal/agr}} \times \Theta_{\text{coll}} = -\text{Pr}_{\text{coal/agr}} n^2(d, t) Q_{\text{coll}} = -\text{Pr}_{\text{coal/agr}} n^2(d, t) u_{\text{coll}} S_i$$

$Q_{\text{coll}} \propto u_{\text{coll}} (\text{hydro}, d) d^2$ Noyau d'agrégation/coalescence: fréquence x volume

✓ Rupture/Fragmentation

Taux de déformation x proba de rupture

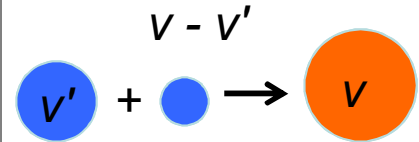
$$\longrightarrow \frac{dn(d, t)}{dt} = -\Gamma(d) \times n(d, t) = -\text{Pr}_{\text{Breakup}} \times f_{\text{hydro}}(d) \times n(d, t)$$

$\Gamma(d)$: Noyau de rupture: fréquence

Termes source/puits

- Terme source lié à l'agrégation (Q fréquence) :

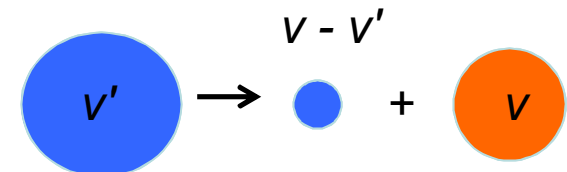
$$P_C^+ = h(v, t) = \frac{1}{2} \int_0^v n(v-v', t) n(v', t) Q(v-v', v') dv'$$



P^+

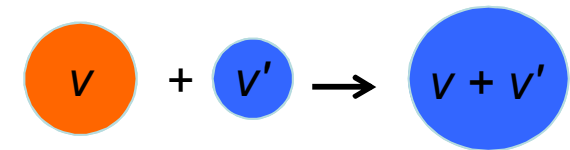
- Terme source lié à la rupture (Γ fréquence) :

$$P_F^+ = h(v, t) = \int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv'$$



- Terme puits lié à l'agrégation :

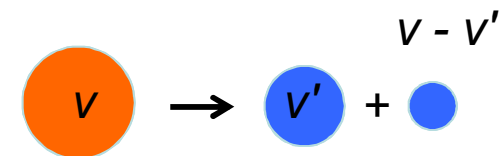
$$P_C^- = h(v, t) = -n(v, t) \int_0^\infty n(v', t) Q(v, v') dv'$$



P^-

- Terme puits lié à la rupture :

$$P_F^- = h(v, t) = -\Gamma(v) n(v, t)$$



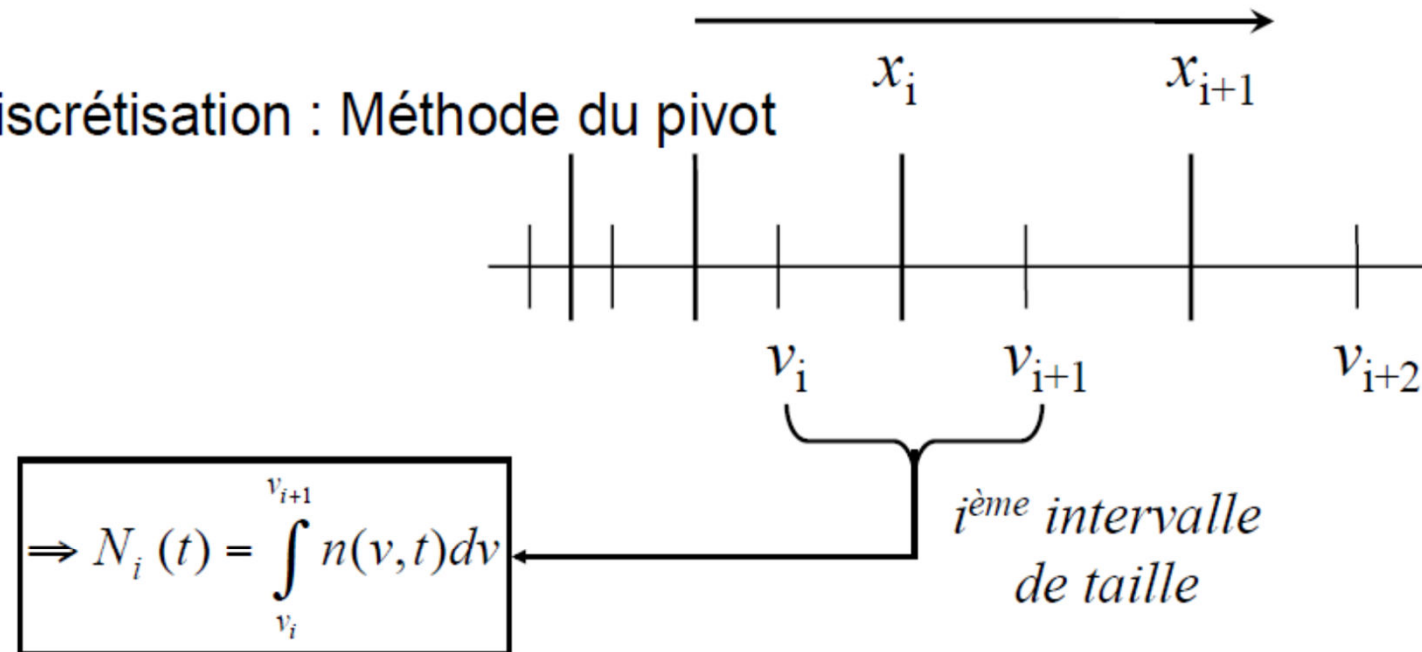
Formulation de la PBE

Formulation générale de l'équation de bilan de population sur une zone parfaitement micro-mélangée (sans croissance, ni dissolution) :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = & \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^v n(v-v',t)n(v',t)Q(v-v',v') dv'}_{\text{source par agrégation}} - \underbrace{n(v,t) \int_0^\infty n(v',t)Q(v,v') dv'}_{\text{puits par agrégation}} \\
 & + \underbrace{\int_v^\infty \beta(v,v')\Gamma(v')n(v',t) dv'}_{\text{source par rupture}} - \underbrace{\Gamma(v)n(v,t)}_{\text{puits par rupture}}
 \end{aligned}$$

Résolution numérique de la PBE (méthode des classes)

1. Discrétisation : Méthode du pivot

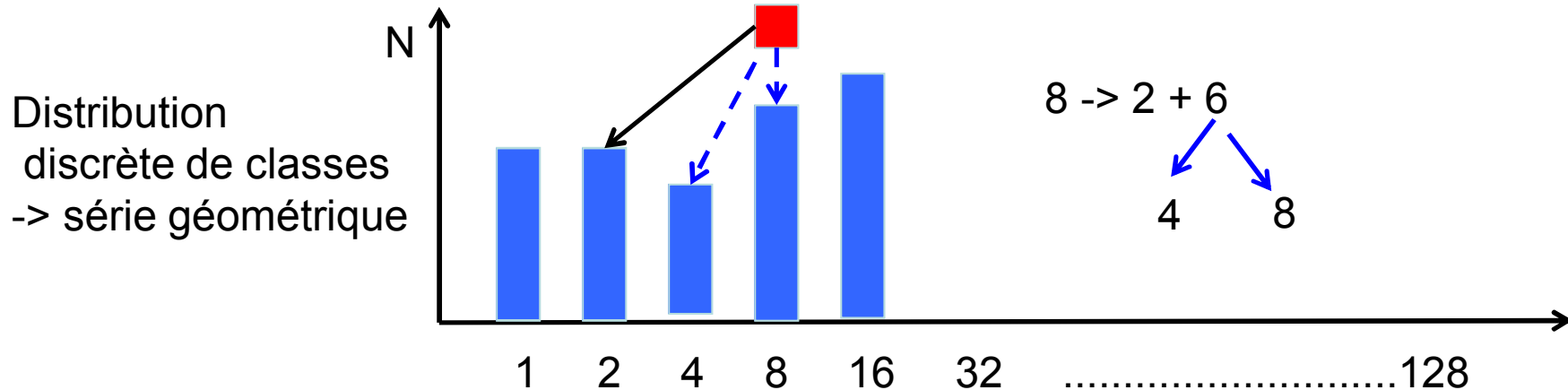
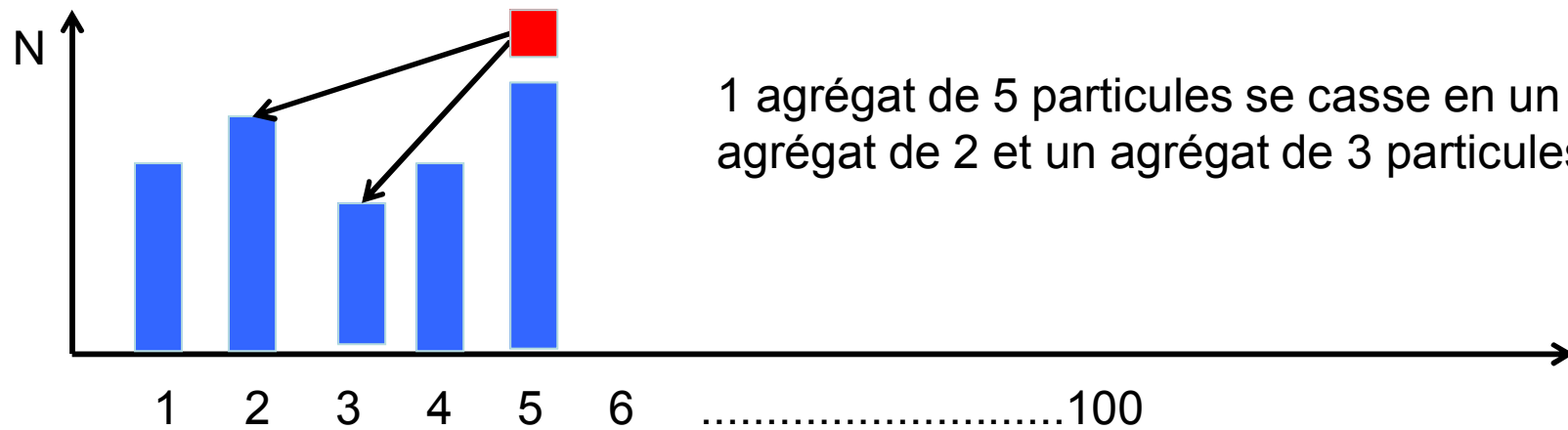


$$\Rightarrow \frac{dN_i(t)}{dt} = \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \left[\frac{1}{2} \int_0^v n(v-v',t)n(v',t)Q(v-v',v') dv' - \dots + \dots - \dots \right]$$

S. Kumar and D. Ramkrishna, « On the solution of population balance equations by discretization (Part I, fixed pivot technique) ». (1996). Chem. Eng. Science, 51 p. 1311.

Résolution numérique de la PBE (méthode des classes)

Problématique : redistribution des particules agrégées ou rompues sur des classes discrètes

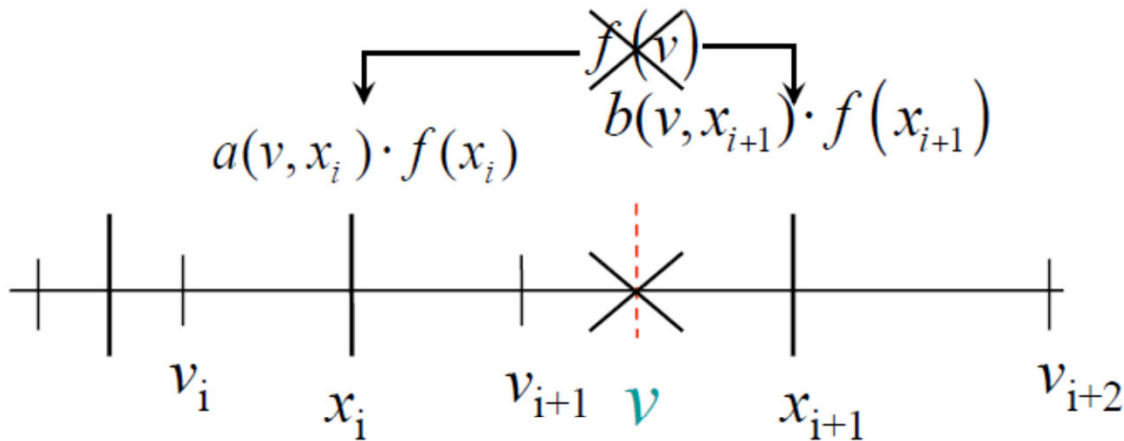


Résolution numérique de la PBE

(méthode des classes)

2. Conservation de propriétés intégrales $F(t) = \int_0^{\infty} f(x)n(x,t)dx$

Redistribution sur les pivots
adjacents



Deux propriétés peuvent être conservées
(consistance mathématique) $\begin{cases} f_1(v) = v^\xi \\ f_2(v) = v^v \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \xi = 0 & \text{Nombre} \\ v = 1 & \text{Masse} \end{cases}$

Résolution numérique de la PBE

(méthode des classes)

3. Expression discrète des termes puits et source :

$$n(v, t) = \sum_{i=1}^p N_i(t) \delta(v - x_i)$$

➤ Terme puits lié à la rupture :

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} h(v, t) dv = - \int_{v_i}^{v_{i+1}} \Gamma(v) n(v, t) dv \Rightarrow -\Gamma(x_i) N_i(t)$$

➤ Terme puits lié à l'agrégation :

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} h(v, t) dv = - \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) \int_0^{\infty} n(v', t) Q(v, v') dv' dv \Rightarrow -N_i(t) \sum_{j=1}^p Q(x_i, x_j) N_j(t)$$

Résolution numérique de la PBE

(méthode des classes)

➤ Terme source lié à la rupture :

On désire conserver deux propriétés intégrales

$$S_{r,i} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} b(v, x_i) \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' dv$$
$$+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} a(v, x_i) \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' dv$$

Injection de $n(v, t) = \sum_{i=1}^P N_i(t) \delta(v - x_i)$ et des expressions de $a(v, x_i)$, $b(v, x_i)$:

$$S_{r,i} = \sum_{k=i}^M \underline{n_{i,k}} \Gamma_k N_k(t)$$

Relié à β , a et b .



Résolution numérique de la PBE

(méthode des classes)

- Terme source lié à l'agrégation :

On désire conserver deux propriétés intégrales

$$S_{a,i} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} b(v, x_i) \frac{1}{2} \int_0^v n(v-v', t) n(v', t) Q(v-v', v') dv' dv$$

$$+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} a(v, x_i) \frac{1}{2} \int_0^v n(v-v', t) n(v', t) Q(v-v', v') dv' dv$$

Injection de $n(v, t) = \sum_{i=1}^P N_i(t) \delta(v - x_i)$ et des expressions de $a(v, x_i)$, $b(v, x_i)$:

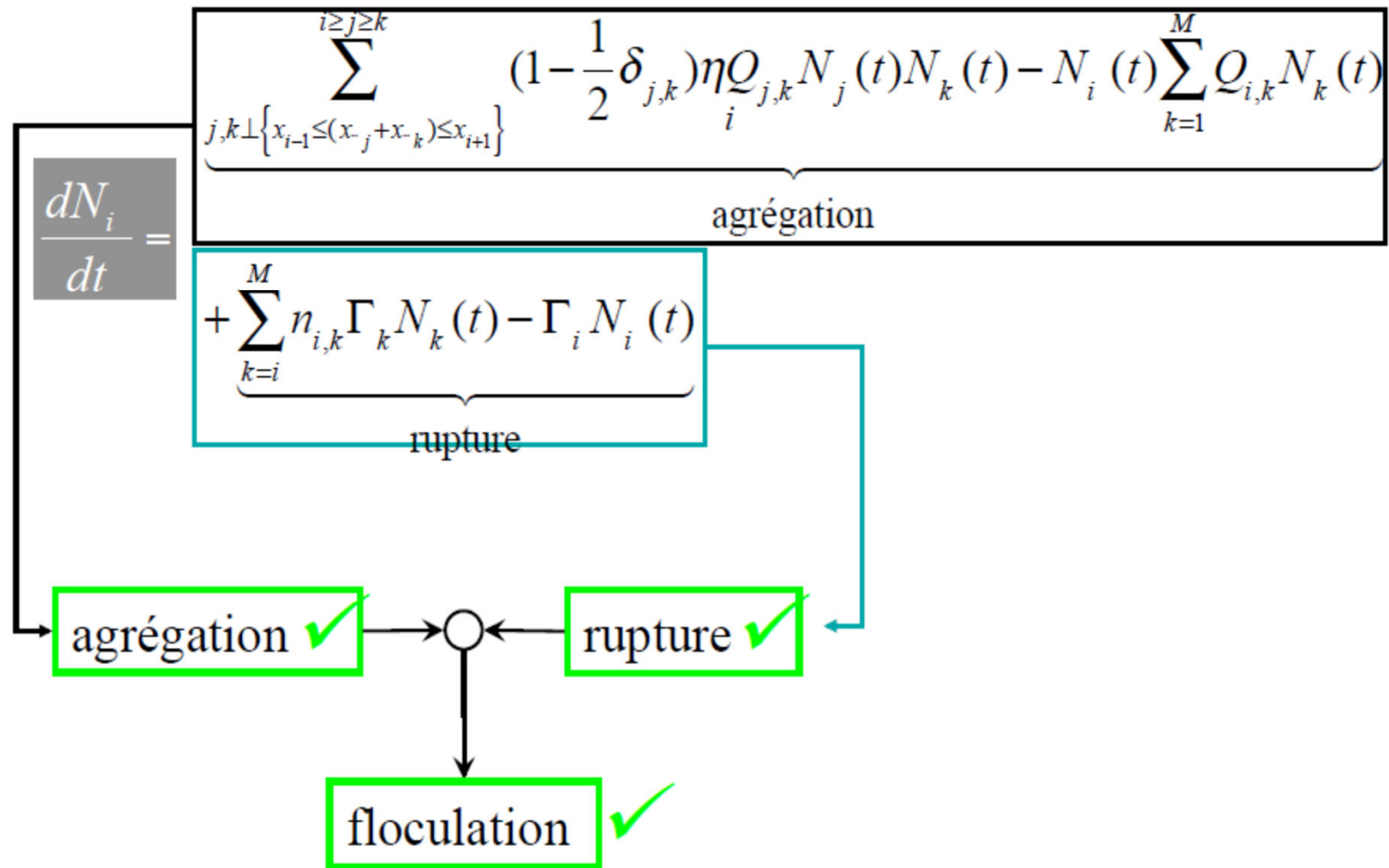
$$S_{a,i} = \sum_{j,k \perp \left\{ \begin{array}{l} i \geq j \geq k \\ x_{i-1} \leq (x_j + x_k) \leq x_{i+1} \end{array} \right\}} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}\right) \eta_i Q_{j,k} N_j(t) N_k(t)$$

relié à a et b.



Résolution numérique de la PBE

4. Formulation discrète d'un problème complet :



Les noyaux (exemples pour l'agrégation)

Auteurs	$Q(r_i, r_j)$	Conditions d'écoulement
Smoluchowski 1917	$\frac{2kT}{3\mu} (R_i + R_j) \left(\frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \right)$	brownien
Smoluchowski 1917	$\frac{4}{3} \gamma (R_i + R_j)^3$	laminaire
Saffman et Turner 1956	$\sqrt{\frac{8\pi}{15}} \left(\frac{\varepsilon_m}{\nu} \right)^{1/2} (R_i + R_j)^3$	turbulent agrégats $< l_K$
Abrahamson 1975	$5,0 (U_i^2 + U_j^2)^{1/2} (R_i + R_j)^2$	turbulent agrégats $> l_K$

A démontrer pendant un exercice sur l'agrégation

Phénomènes Physiques: particules colloïdales

Mouvement Brownien dû aux fluctuations thermiques

$$Re = \frac{\rho u^{(0)} 2a}{\mu} = \frac{\textit{inertie}}{\textit{viscosite}}$$

$$Pe = \frac{au^{(0)}}{D^{(0)}} = \frac{\textit{sedimentation}}{\textit{diffusion}}$$

$$D^{(0)} = \frac{kT}{6\pi\mu a} \quad \text{Coefficient de diffusion: Stokes - Einstein}$$

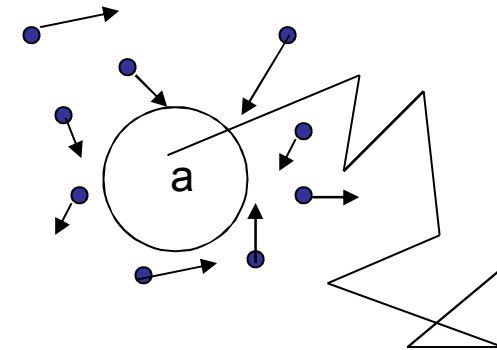


Table 1. Sedimentation parameters for isolated spheres with $\rho_s = 1.1 \text{ g/cm}^3$, $\rho = 1.0 \text{ g/cm}^3$, $\mu = 0.01 \text{ g/cm-s}$, $g = 981 \text{ cm/s}^2$ and $T = 293^\circ\text{C}$.

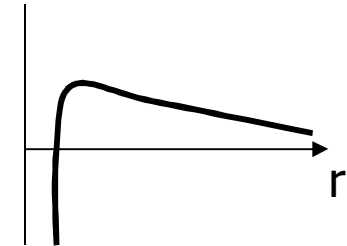
$2a$ (μm)	U° (cm/s)	D° (cm^2/s)	Re	Pe
0.1	5×10^{-8}	4×10^{-8}	3×10^{-11}	6×10^{-6}
1	5×10^{-6}	4×10^{-9}	3×10^{-8}	0.06
10	5×10^{-4}	4×10^{-10}	3×10^{-5}	6×10^2
100	0.05	4×10^{-11}	0.03	6×10^6

Phénomènes Physiques: particules colloïdales

Interaction hydrodynamiques : Stokes $\sim 1/r$ --- Ecoulement Potentiel $\sim 1/r^3$

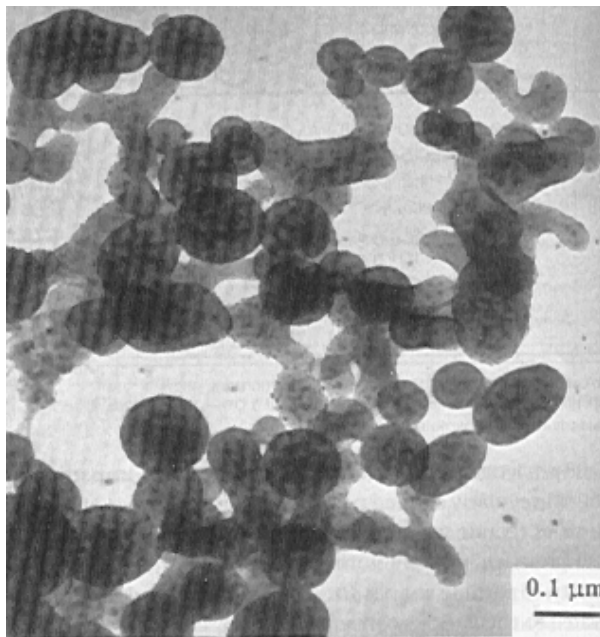
Particules chargées : répulsion électrostatique (“longue portée”)

Forces de Van der Waals : attraction (“très courte portée”)

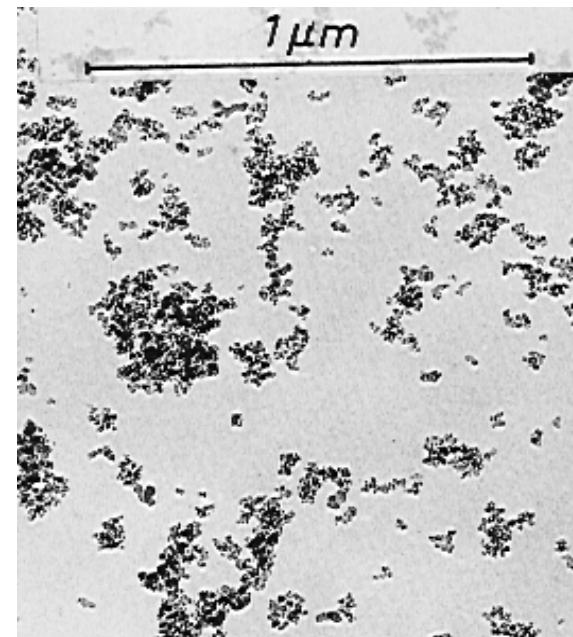


Stabilité d' une suspension : génération de floccs

Van der Waals + Agitation Brownienne >> Hydrodynamique + Electrostatique



PbO-SiO₂-PbSiO₃ composite



AEROSIL from Degussa, Inc.

Diffusion par mouvement Brownien

$$m_p \frac{dV}{dt} = -6\pi\mu aV + F(t)$$

Equation de Langevin $F_i = \xi_i \sqrt{\frac{12\pi\mu akT}{dt}}$

Diffusion de Stokes-Einstein

$$D = \frac{kT}{6\pi\mu a}$$

Forces inter-particulaires (DLVO)

Attraction (Van der Waals)

$$V_A = -\frac{A_H}{6} \left[\frac{D^2}{2(r^2 + 2Dr)} + \frac{D^2}{2(r^2 + 2Dr + D^2)} + \text{Ln} \frac{r^2 + 2Dr}{r^2 + 2Dr + D^2} \right]$$

Répulsion électro-statique

$$V_R = \frac{\pi\epsilon_r\epsilon_0 D}{2} (\psi_{\delta 1}^2 + \psi_{\delta 2}^2) \left[\frac{2\psi_{\delta 1}\psi_{\delta 2}}{\psi_{\delta 1}^2 + \psi_{\delta 2}^2} \text{Ln} \left[\frac{1 + \exp(-\kappa r)}{1 - \exp(-\kappa r)} \right] + \text{Ln}(1 - \exp(-2\kappa r)) \right]$$

$$\left(\frac{A_H}{kT}, \frac{\epsilon_r\epsilon_0\psi^2 D}{kT}, \kappa D \right)$$

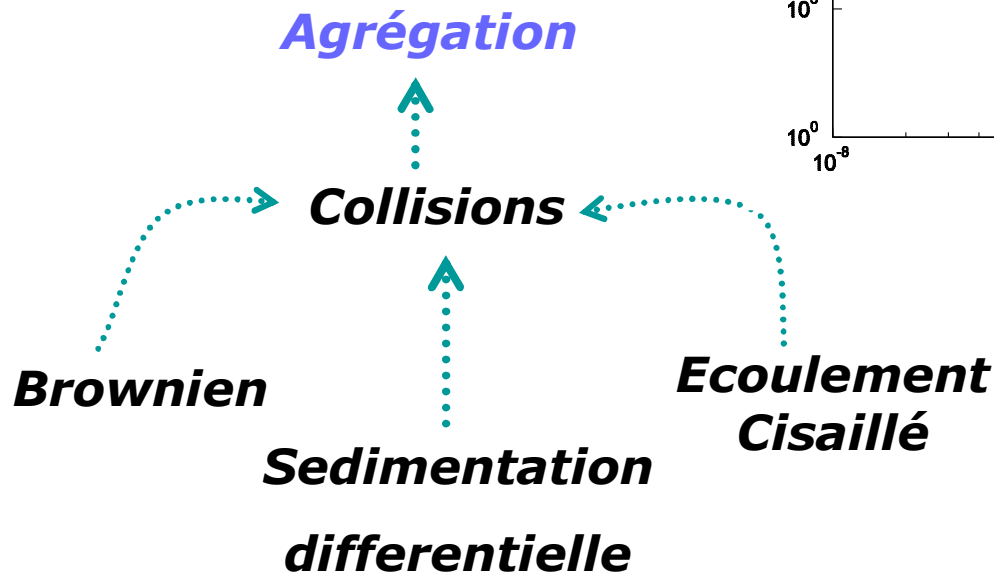
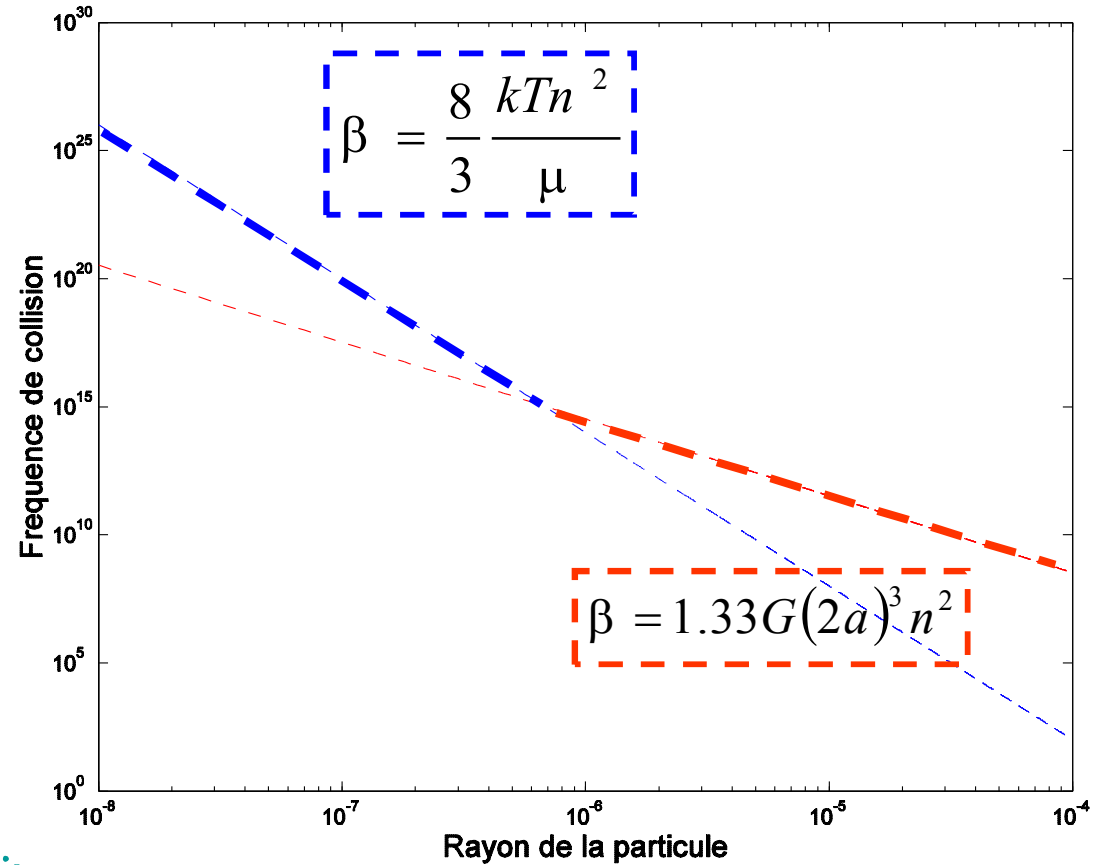
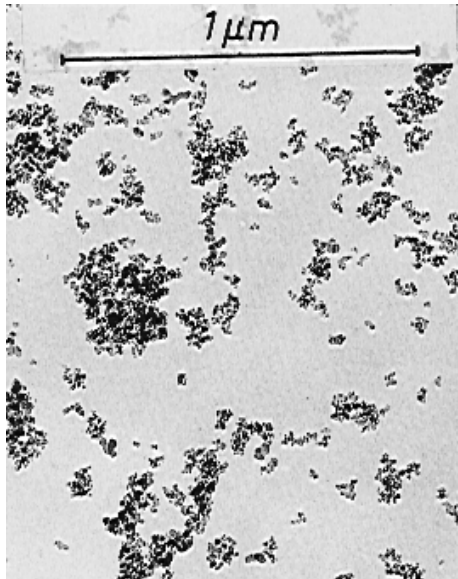
Attraction
Diffusion

Repulsion
Diffusion

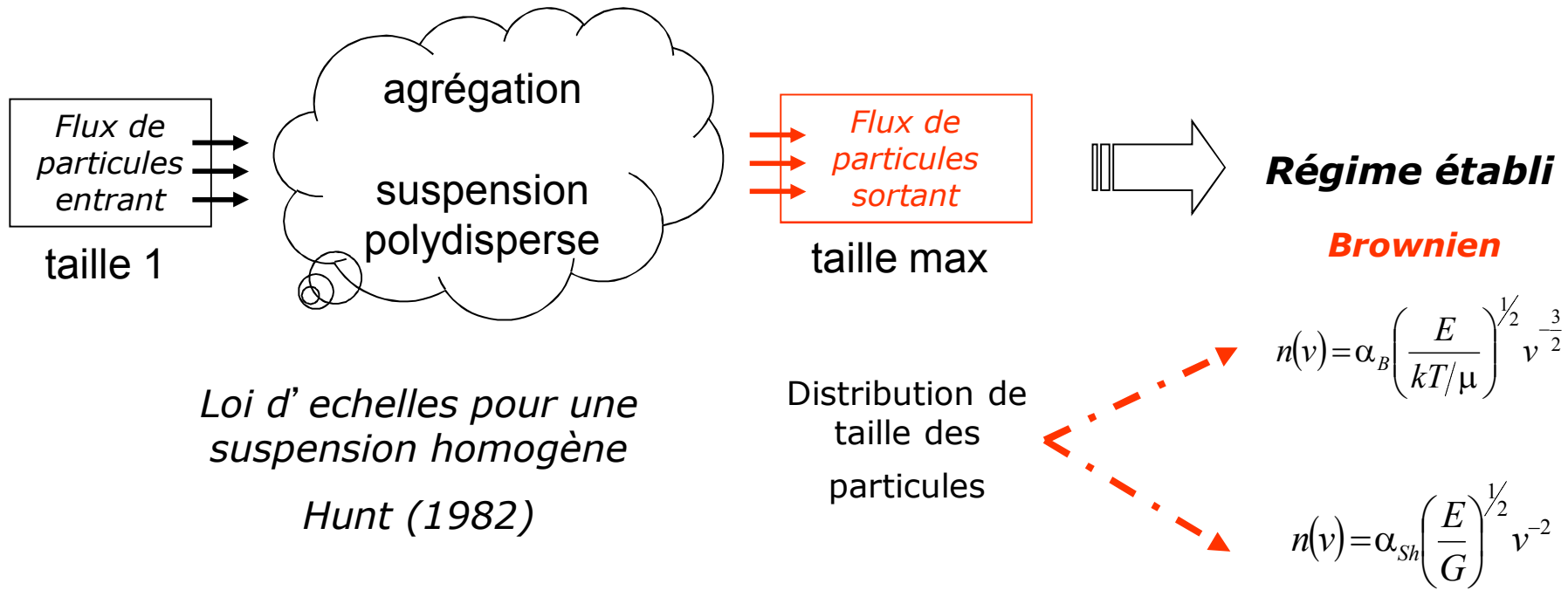
Echelle de portée
de la répulsion

Agrégation de particules colloïdales

(distribution de tailles)

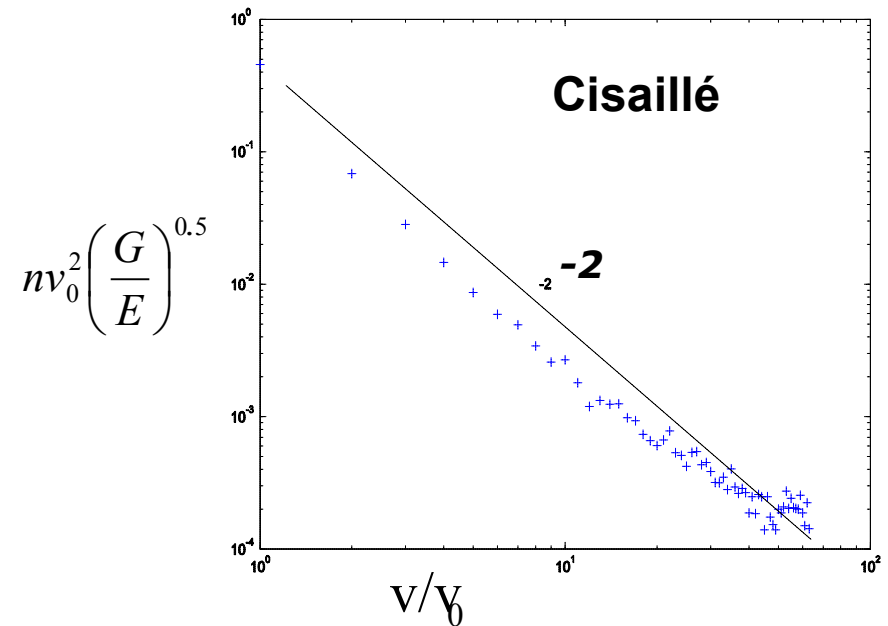
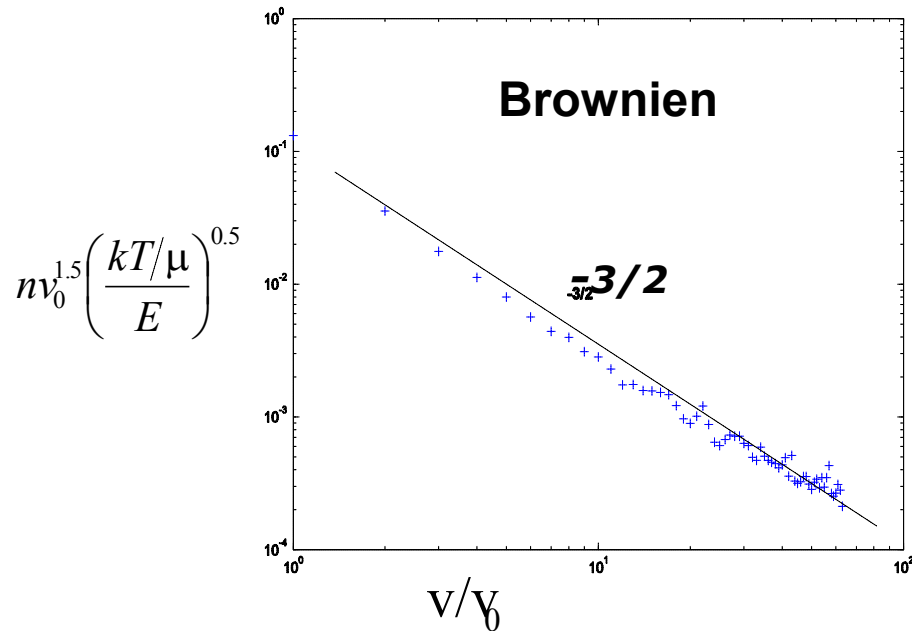


Régime d'agrégation dépend du mécanisme prépondérant dans le rapprochement des particules en suspension



Résultats de simulations 3D homogènes

Cisailé



Remerciements et Références

Ce résumé de cours est largement inspiré de l'exposé de B. Haut (Univ. de Liège) lors de la Journée Thématique FERMaT : Bilan de Population

Les programmes Matlab ont été développés durant le stage de Master de C. Dumas au LIPE sous la direction d'A. Liné.

Ouvrage de référence : Population Balances (Ramkrishna)

Articles sur la méthode PBE :

S. Kumar and D. Ramkrishna, « On the solution of population balance equations by discretization (Part I , fixed pivot technique) ». (1996). Chem. Eng. Science, 51 p. 1311.

M.J. Hounslow, R.L. Ryall, V.R. Marshall, « A dicretized population balance for nucleation, growth and aggregation (1988) ». AIChE 34, p. 1821.

FIN