

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

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



جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم و التكنولوجيا
قسم: الكيمياء الصناعيّة
المرجع:

*Thèse présentée en vue de l'obtention
Du diplôme de*

**Doctorat en sciences
En chimie Industrielle**

Option : Génie Chimique

**SIMULATION NUMERIQUE DE LA POPULATION
DES GOUTTES POUR LES SYSTEMES
DISCONTINUS ET CONTINUS**

Présenté par :

SENOUCI SAMRA

Soutenu publiquement le 25/05/2016

Devant le jury composé de :

Mr. DEBABECHE Mahmoud	Pr	Univ. BISKRA	Président
Mr. HASSEINE Abdelmalek	Pr	Univ. BISKRA	Directeur de thèse
Mr. KORICHI Mourad	M.C.A	Univ. OUARGLA	Examineur
Mr. MADANI Hakim	M.C.A	Univ. BATNA	Examineur

Je dédie cette thèse

A ma Chère mère

A mon mari

A mes enfants : Ahmed Oubai

et Ghaith Ibrahim

A mes chères sœurs

A mes chers frères

A tous mes proches.

SENOUCI SAMRA

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.

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

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

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

Je tiens aussi à remercier Mr. MADANI Hakim, pour m'avoir fait honneur et plaisir en acceptant d'examiner ce travail.

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

Et enfin, je remercie ma mère qui m'a tout donné, mon époux, mes frères et mes sœurs.



RÉSUMÉS

RESUME

RESUME

L'équation de bilan de population a été utilisée pour modéliser une variété de systèmes particuliers. Cependant, quelques cas de solutions analytiques pour le processus de rupture existent, où la plupart de ces solutions sont pour le réacteur agité discontinu. Les solutions analytiques de l'EBP pour des processus particuliers sous l'influence de la rupture de particules dans les processus discontinu et continu sont étudiées. Les solutions analytiques sont obtenues à partir de l'équation intégral-différentielle de bilan de population régissant la fonction de densité de distribution en tailles des particules par deux approches analytiques. Le premier est la méthode de décomposition d'Adomian (MDA) et le second est la méthode de perturbation homotopique (MPH) MDA produit une série infinie qui converge uniformément à la solution exacte du problème, alors que le MPH convertit un problème difficile en problème simple, qui peut être facilement manipulé. Les résultats obtenus indiquent que les deux méthodes évitent les problèmes de stabilité numériques qui caractérise souvent les techniques numériques générales dans ce domaine.

ABSTRACT

Abstract

The population balance equation (PBE) has been used to model variety of particulate systems. However, few cases of analytical solutions for the breakage process exist, where most of these solutions are for the batch stirred vessel. The analytical solutions of the PBE for particulate processes under the influence of particle breakage in batch and continuous processes are studied. Analytic solutions are obtained from the integro-differential population balance equation governing the particle size distribution density function by two analytical approaches. The first one is the Adomian Decomposition Method (ADM) and the second one is the Homotopy Perturbation Method (HPM). ADM generates an infinite series which converges uniformly to the exact solution of the problem, while the HPM converts a difficult problem into a simple one, which can be easily handled. The results obtained indicate that the two methods avoid numerical stability problems that often characterizes general numerical techniques in this area.

ملخص

تستخدم معادلة التوازن السكاني من أجل محاكاة عدة ميادين مختلفة، غير أن بعض الحالات من الحلول التحليلية في عملية تمزق الجسيمات موجودة، حيث أن أغلبية هذه الحلول هي من أجل مفاعل خلاط متقطع. لقد درست الحلول التحليلية لمعادلة التوازن السكاني من أجل العمليات الجزئية تحت تأثير كسر الجزيئات في المفاعلات المتقطعة والمتواصلة. الحلول التحليلية وجدت انطلاقاً من المعادلة $\text{intégro-différentielle}$

لمعادلة التوازن السكاني تمثل دالة كثافة توزيع حجم الجزيئات بالاعتماد على طريقتين تحليليتين :

الطريقة الأولى طريقة التحلل ل Adomian .

و الطريقة الثانية طريقة الاضطراب ل He.

طريقة التحلل تنتج سلسلة لامتتهية تتقارب بانتظام سوية إلى الحل الصحيح للمسألة، حينئذ تحول طريقة الاضطراب مسألة عسيرة إلى مسألة بسيطة والتي يمكن أن تعالج بسهولة.

النتائج المتحصل عليها توضح أن كلتا الطريقتين تتجنب مشاكل الإستقرار العددي والتي تميز في الغالب التقنيات العددية في هذا المجال.



SOMMAIRE

Sommaire

NOMENCLATURE	i
LISTE DES FIGURES	iii
LISTE DES TABLEAUX	v
INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE I – MODELE DE BILAN DE POPULATION	4
1.1 Introduction	4
1.2. Formalisme général des bilans de population (bilan local)	5
1.3 Définition du bilan de population (bilan local)	5
1.4 Modèle de bilan de population	9
1.4.1. Agrégation	10
1.4.1.1. Equation de bilan de population	10
1.4.1.2. Méthodes numériques existantes	11
a. Technique d'Hounslow	11
b. Technique de pivot fixe	15
c. Méthode de volume finis	19
1.4.2. Rupture	23
1.4.2.1. Equation de bilan de population	23
1.4.2.2. Méthodes numériques existantes	25
1.4.2. Croissance	28
1.4.2.1. Equation de bilan de population.....	28

1.4.2.2. Méthodes numériques existantes	28
CHAPITRE II: METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION	31
2.1. Introduction	31
2.2. Méthode de résolution des équations integro-différentielles	31
2.2.1. Méthode des éléments finis	32
2.2.2. Méthode de volume finis.....	33
2.2.3. Méthode des différences finies	33
2.3. Méthode de résolution plus utilisées pour résoudre l'équation de bilan de population ...	35
2.3.1. Méthode standard des moments	35
2.3.1.1. Principe de la méthode	35
2.3.1.2. Ecriture de l'équation de bilan de population	38
2.3.1.3. Intérêts des moments	39
2.3.1.4. Avantages et limitations de la méthode	40
2.3.2. Méthode de quadrature des moments	40
2.3.2.1. Principe de la méthode	41
2.3.2.2. Ecriture de l'équation de bilan de population	41
2.3.2.3. Application numérique	43
2.3.2.4. Avantages et limitations de la méthode	43
2.3.3. Méthode de Monte-Carlo	43
2.3.3.1. Principe de la méthode	44
2.3.3.2. Exemple de la méthode directe	44
2.3.3.3. Méthode à N ou V constant (Méthode de Monte-Carlo à nombre constant)	46
2.3.3.4. Avantages et limitations de la méthode	47
2.3.4. Méthode de pivot fixe.....	47

2.3.5. Méthode de classes	49
2.3.5.1. Méthode d'Hounslow	51
2.3.6. Méthode de collocation	52
2.3.6.1. Discrétisation de la distribution de taille de particule	52
2.3.6.2. Coordonnées logarithmiques	53
2.3.7. Méthode d'itération variationnelle	55
CHAPITRE III : METHODE DE PERTURBATION HOMOTOPIQUE ET METHODE DE DECOMPOSITION D'ADOMAIN	57
3.1. Introduction	57
3.2. Méthode de perturbation homotopique	57
3.2.1. Introduction	57
3.2.2. Idée de base de la méthode de perturbation homotopique	59
3.2.3. Exemples	60
3.2.3.1. Equation intégró-différentielle non linéaire	60
3.2.3.2. Equation dynamique de gaz	65
3.3. Méthode de décomposition d'Adomain	67
3.3.1. Introduction	67
3.3.2. Idée de base de la méthode de la méthode d'Adomian	68
3.3.2.1. Polynômes d'Adomian	70
3.3.2.2. Méthode de décomposition d'Adomain pour l'équation de bilan de population	71
3.3.3. Exemples	74
3.3.3.1. Rupture de particules dans des systèmes discontinus (Fonction de rupture parabolique)	74
3.3.3.2. Résolution de l'équation de bilan de population pour la rupture par la méthode d'Adomain	77

CHAPITRE IV : RESULTATS NUMERIQUE	80
4.1. Introduction	80
4.2. Rupture de particules dans des systèmes discontinus	80
4.2.1. Rupture avec une distribution uniforme des particules fille et $\Gamma (v) = v$	81
4.2.1.1. Implémentation de la méthode d'Adomian	81
4.2.2.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique	83
4.2.2. Rupture avec une distribution uniforme de particules fille et $\Gamma (v) = v^2$	86
4.2.2.1. Implémentation de la méthode d'Adomian	86
4.2.2.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique	87
4.2.3. Problèmes de rupture physiquement appropriés	89
4.3. Rupture de particule dans les systèmes continus	92
4.3.1. Distribution exponentielle de particules d'alimentation avec une fréquence de rupture linéaire	92
4.3.1.1. Implémentation de la méthode d'Adomian	92
4.3.1.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique	95
4.3.2. Distribution d'alimentation de particules exponentielle avec la fréquence de rupture quadratique	97
4.3.2.1. Implémentation de la méthode d'Adomian	98
4.3.2.2. Implémentation de méthode de perturbation homotopique	99
Conclusion	102
Références bibliographiques	103



NOMENCLATURE

NOMENCLATURE

Notation

B	Terme de naissance
D	Distribution de Dirac
G	Terme de génération
Q_{int}	Distribution de Dirac
Q_{out}	Débit de sortie
M_j	Moment d'ordre j
N_t	Nombre total de particules
$n(v, t)dv$	Nombre numéroté de particules dans la taille s'étend v à $v + dv$, au temps t
$n_m(v, t)$	Composants de solution
$S(v)$	Taux de nucléation des particules de taille v
t	Temps (s)
\hat{V}	Volume de système

v, v' Volumes de particule

x Taille de particule

Lettres grecques

$\beta(v/v')dv$ Le nombre fractionnaire de particules formées dans la taille s'étend v à $v + dv$ formé sur la rupture de particule de volume v

$\theta(v)$ la fonction thêta de Heaviside

$\Gamma(v')$ Le nombre de particules dans la taille s'étend v à $v + dv$ disparaissant par unité de temps par la rupture

$\omega(v, v')$ Fréquence d'accumulation entre deux particules de volumes v et v'

δ Distribution de Dirac



LISTE DES FIGURES

LISTE DES FIGURES

Figures	Titre	Page
Figure 1.1	Trajectoires d'entités et bilan de population dans un espace à deux dimensions	6
Figure 2.1	Organigramme de l'algorithme de méthode de Monte-Carlo	40
Figure 2.2	schéma du choix des particules i et j pour la méthode de Monte-Carlo	41
Figure 4.1	Rupture de particule dans un système batch avec une distribution de particule fille uniforme, Dirac fonctionne comme une condition initiale et $\Gamma(v) = v$ en comparaison de la solution analytique. La ligne solide est la MDA et les méthodes MPH et la ligne pointillée est la solution exacte.	78
Figure 4.2	La rupture de particule dans un système batch avec une distribution de particule de fille uniforme, une fonction de Dirac comme une condition initiale et en comparaison de la solution analytique. La ligne continue est la MDA et les méthodes MPH et la ligne pointillée est la solution exacte	81
Figure 4.3	L'effet de troncature de série sur la fonction de densité en nombre pour la rupture de particule dans le système batch avec $\Gamma(v) = v$ $b(v/v') = 12(v' - v)/v^3$ et une condition initiale exponentielle	83
Figure 4.4	Erreur de troncature relative dispersée $\varepsilon(t, v) = u_4 - u_3 $.	83

Figure 4.5	fonction densité en nombre pour la rupture de particule dans un système continu avec $\Gamma(v) = v$ et $\beta(v/v') = 1/v$, rupture binaire, $a = 5$, Et une distribution d'alimentation exponentielle. La ligne continue est l'ADM et la ligne pointillée est le HPM.	89
Figure 4.6	fonction densité en nombre pour la rupture de particule dans un système continu avec $\Gamma(v) = v^2$ et $\beta(v/v') = 1/v$, rupture binaire, $a = 5$, Et une distribution d'alimentation exponentielle. La ligne continue est l'ADM et la ligne pointillée est le HPM.	93



LISTE DES TABLEAUX

LISTE DES TABLEAUX

Tableau	Titre	Page
Tableau1.1	Champs d'application du bilan de population	5
Tableau 3.1	Les résultats et les erreurs absolues correspondantes exemple 1	57



INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GENERALE

L'équation de bilan de population (EBP) est maintenant utilisée avec succès pour modéliser le comportement complexe des systèmes particuliers dans divers domaines de l'ingénierie tels que la physique de l'atmosphère, précipitation, cristallisation, production pharmaceutique, formation d'aérosol, chimie colloïdale, biologie et ainsi de suite [1]. Généralement ces processus impliquent la nucléation, la croissance, l'aggrégation et la rupture des particules comme des phénomènes seuls ou simultanés.

Plusieurs techniques numériques, telles que la méthode de résidus pondérés, méthode des moments, la collocation orthogonale, collocation sur les éléments finis, techniques de pivot, avaient été proposées dans la littérature et passées en revue par [1-7]. Dans [1], un examen complet sur les méthodes numériques disponibles pour résoudre l'équation de bilan de population a été discuté jusqu'au milieu des années 1980. Dans une série d'articles, Kumar et Ramkrishna [2, 3, 4] ont présenté des commentaires critiques aux techniques numériques précédentes pour résoudre l'EBP jusqu'aux mi-années 90. Ces auteurs ont découvert le problème de la cohérence interne en utilisant des méthodes directes de discrétisation basées sur des schémas de différences finies. À cet égard, ils ont présenté les méthodes de pivot fixe et de pivot mobile pour surmonter ce problème. Récemment, Santos et autres [7] utilisaient la méthode de double quadrature des moments généralisés (MDQMG) pour résoudre l'EBP seulement avec des moments où la distribution a été récupérée utilisant des algorithmes parallélisés pour réduire le temps de calcul. D'autre part, Attarakih [6] a présenté la MDQM cumulatif (MDQMC) pour surmonter la reconstruction de distribution qui est perdue en utilisant l'application de la MDQMG.

Une contribution remarquable fut apportée par Hasseine [8] qui appliqua pour la première fois une méthode semi analytique (méthode de décomposition d'Adomian) pour simuler le fonctionnement d'un réacteur en mode continu et discontinu à l'aide de la résolution de l'équation de bilan de population. Cette méthode est exemptée de problèmes cruciaux de la discrétisation numérique, et de stabilité qui caractérisent souvent des techniques numériques communes dans ce domaine. L'approche proposée est très utilisée dans les sciences appliquées et l'ingénierie pour résoudre des problèmes impliquant le différentiel, intégrale, intégral-différentiel et différentiel à retard, et les systèmes de telles équations [8-32]. Le travail dans cette large littérature peut être classé par catégorie en trois axes principaux méthodes de solution utilisant les méthodes homotopique [14-22, 29-31], les méthodes d'Adomian [8,23,24,26,27,32] et les applications diverses de ces méthodes à la physique (théorie des ondes solitaires [10]), la biologie (modélisation de la transmission d'impulsions nerveuses [25, 28]) et les problèmes d'écoulement de fluide (écoulement pour les fluides non newtoniens [30]).

La méthode de décomposition d'Adomian a été appliquée à une large classe des équations fonctionnelles [9,10] par des scientifiques et des ingénieurs depuis le début des années 1980. Adomian donne la solution comme une série infinie qui converge facilement à la solution exacte.

La limitation d'une telle approche est sa dépendance des noyaux de rupture de particules, et par conséquent chaque problème doit être traité indépendamment. Néanmoins ces méthodes fournissent toujours dans de nombreux cas des solutions analytiques, qui sont utiles pour les systèmes analytiques simplifiés et les problèmes de type banc pour examiner des techniques numériques.

La méthode de perturbation homotopique (MPH), proposée d'abord par He [12,13], pour résoudre des équations différentielles et intégrales (linéaires et non linéaires) a été le sujet des études analytiques et numériques étendues. La méthode, qui est un couplage entre la méthode de perturbation traditionnelle et d'homotopie dans la topologie, transforme en continue à un problème simple qui est facilement résolu.

L'essence de ces méthodes est d'obtenir la solution approximative sous une forme de série, qui converge rapidement vers la solution cherchée.

L'objectif de ce travail est donc d'appliquer ces nouvelles techniques qui sont la méthode de décomposition d'Adomain et la méthode de perturbation homotopique pour résoudre les équations de bilan de population en mode dynamique dans de nouvelles conditions considérées.

Ce manuscrit comporte quatre chapitres. Dans le premier chapitre, le modèle de l'équation de bilan de population est présenté.

Le deuxième chapitre présente les méthodes numériques retenues pour résoudre l'équation de bilan de population.

Le troisième chapitre décrit la méthode d'Adomain et la méthode de perturbation homotopique et présente quelques exemples de ces méthodes.

Le quatrième chapitre présente les résultats obtenus par l'utilisation de la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique dans les réacteurs continus et discontinus pour différents cas.

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



CHAPITRE I

CHAPITRE I

MODELE DE BILAN DE POPULATION

1.1.Introduction

La modélisation des procédés industriels est d'un grand intérêt industriel. Elle permet de prédire la qualité des produits obtenus par différents processus dans différentes conditions opératoires, a priori sans avoir besoin de construire des unités expérimentales. Cela est d'autant plus intéressant lorsqu'il s'agit de produits dangereux ou radioactifs. Par exemple la prédiction de la distribution de taille de particules est un élément clé pour le contrôle de la qualité des produits.

Le choix optimal, le dimensionnement ainsi que la compréhension du fonctionnement des procédés industriels nécessitent l'écriture des bilans de matière et d'énergie [33], [34]. Traditionnellement, ces deux bilans sont nécessaires, mais ils ne suffisent pas à prendre en compte les propriétés physiques des particules. Il faut alors introduire le comptage des particules en fonction de leur taille en s'appuyant sur la méthodologie générale des bilans de population.

1.2. Formalisme général des bilans de population (bilan local)

Le bilan de population est un formalisme permettant de décrire l'évolution au cours du temps (noté t) et dans l'espace (coordonnées d'un point de l'espace : x, y et z) d'une population d'entités dénombrables possédant un certain nombre M de propriétés [35]. Le champ d'application du bilan de population est large, et le tableau 1.1 donne un aperçu d'applications très diverses.

Tableau 1.1. champs d'application du bilan de population [36]

Application	Entité	Propriétés
Mélange des fluides	Paquets de fluide	Age, taille, ...
Catalyse	Grain de catalyseur	Activité, surface active, ...
Biotechnologies	Microorganismes	Age, taille, ...
Cristallisation	Cristaux	Taille, forme, ...

1.3. Définition du bilan de population

Cas général Comme le rappelle Bourgeois (2003), le bilan de population est le cadre très souvent adopté pour l'étude de nombreux mécanismes de génie des procédés. Dans sa forme générale, le modèle du bilan de population est applicable à la majorité des procédés qui font intervenir des entités (des particules solides, des bulles, des gouttes, etc.) qui se distinguent les unes des autres par des variables discrètes ou continues (taille, forme, température, composition, position, etc.). Ramkrishna [37] donne une introduction complète au formalisme des bilans de population.

Chaque particule d'un système est caractérisée par des coordonnées externes x, y et z qui donnent la position spatiale de la particule au sein du système, et des coordonnées internes $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M$ comme sa taille, son volume ou sa composition chimique par exemple. Toutes les propriétés retenues sont indépendantes. L'espace forme par les variables externes et internes est appelé espace-phase, au sein duquel on peut distinguer l'espace géométrique (x, y, z) et l'espace des propriétés $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M)$. Au sein d'un système donné, la diversité de comportements des propriétés des particules peut être appréhendée par la notion statistique de répartition. Pour le modèle de bilan de

population, on utilise la densité de répartition en nombre. Dans le cas général ou on à M propriétés internes.

Nous noterons $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M$ les grandeurs quantifiant les M propriétés. La population est décrite par sa fonction de distribution en nombre.

$$n = n(x, y, z, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M, t) \quad (1.1)$$

Telle que $ndxdydzd\xi_1d\xi_2, \dots, d\xi_M$ représente le nombre d'entités contenues à l'instant t dans le volume élémentaire $dxdydz$ avec des grandeurs quantifiant les propriétés contenues dans les intervalles $[\xi_1, \xi_1 + d\xi_1], [\xi_2, \xi_2 + d\xi_2], \dots, [\xi_M, \xi_M + d\xi_M]$. Le nombre N_T total d'entités est donc, par définition de n :

$$N_T(t) = \int_{x=0}^{x=\infty} \int_{y=0}^{y=\infty} \int_{z=0}^{z=\infty} \int_{\xi_1}^{\xi_1=\infty} \dots \int_{\xi_M}^{\xi_M=\infty} = \check{n}dxdydzd\xi_1 \dots d\xi_M. \quad (1.2)$$

Le bilan de population est un bilan effectué sur un hypervolume de l'hypermpace à $M + 3$ dimensions formé par les trois dimensions « classiques » de l'espace physique et les M dimensions des propriétés. Si $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{\xi}_M)$ est une base de cet hypervolume selon les directions indiquées ci-dessus, une entité décrit au cours de son existence une trajectoire sur laquelle elle se déplace avec une vitesse généralisée \vec{v} :

$$\vec{v} = \frac{dx}{dt} \vec{x} + \frac{dy}{dt} \vec{y} + \frac{dz}{dt} \vec{z} + \sum_{i=1}^{i=M} \frac{d\xi_i}{dt} \vec{\xi}_i \vec{v}. \quad (1.3)$$

$\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt},$ et $\frac{dz}{dt}$ sont les composantes classiques de la vitesse dans l'espace physique à 3 dimensions et $\frac{d\xi_i}{dt}$ est le taux de transformation de la $i^{\text{ème}}$ propriété.

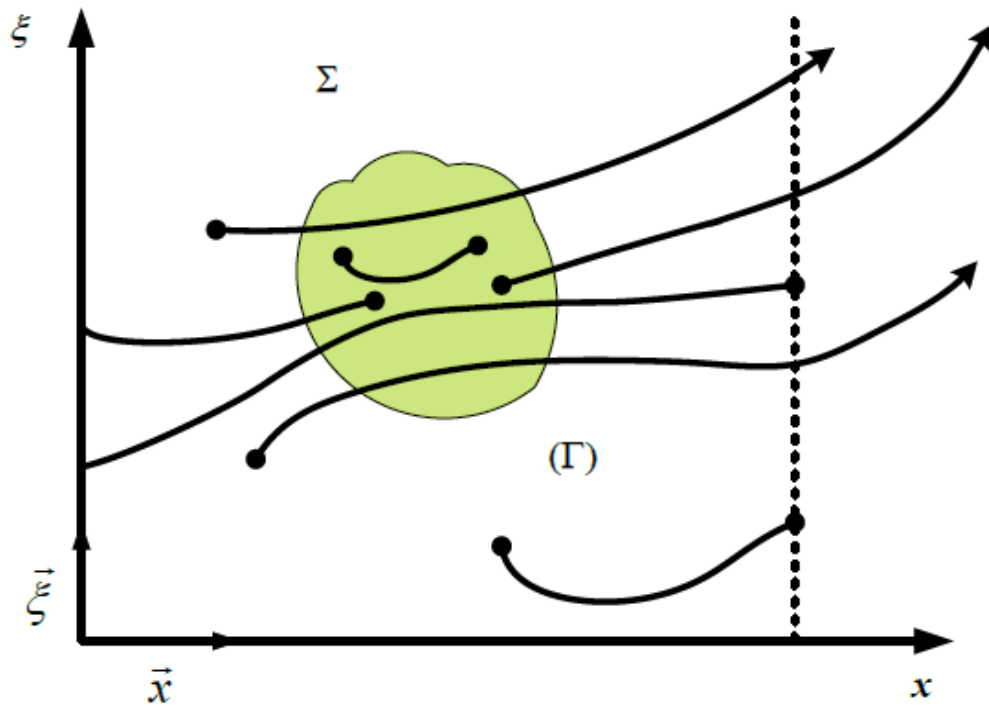


Figure 1.1. : Trajectoires d’entités et bilan de population dans un espace à deux dimensions [35]

La figure 1.1, ci-dessus donne une représentation de telles trajectoires dans le cas d’un hyperspace à deux dimensions : la dimension x de l’espace physique supposé ici monodimensionnel, et la dimension ξ de l’espace des propriétés. Il se peut que des entités disparaissent ou apparaissent, selon divers processus, et l’on introduit pour décrire ceci une fonction de génération \dot{G} :

$$\dot{G} = \frac{\text{(Nombre net d'entités apparaissant)}}{\left(\frac{\text{unité de}}{\text{temps}}\right) \left(\frac{\text{unité de}}{x}\right) \left(\frac{\text{unité de}}{y}\right) \left(\frac{\text{unité de}}{z}\right) \left(\frac{\text{unité de}}{\xi_1}\right) \left(\frac{\text{unité de}}{\xi_2}\right) \dots \left(\frac{\text{unité de}}{\xi_M}\right)} \quad (1.4)$$

Le bilan de population effectué sur l’hypervolume Σ délimité par une hypersurface s’écrit :

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{c} \text{Génération d'entités} \\ \text{dans } \Sigma \end{array} \right) \\ &= \left(\begin{array}{c} \text{Nombre d'entités qui} \\ \text{"sortent" de } \Sigma \text{ en} \\ \text{franchissant } (\Gamma) \end{array} \right) (\Gamma) + \left(\begin{array}{c} \text{accmulation d'entités} \\ \text{dans } \Sigma \end{array} \right) \end{aligned}$$

Ce qui se traduit mathématiquement par :

$$\int_{\Sigma} \dot{G} d\Sigma = \int_{(\Gamma)} n \vec{v} d\vec{n}_{nor} + \int_{\Sigma} \frac{\partial n}{\partial t} \quad (1.5)$$

Où $d\vec{n}_{nor}$ représente le vecteur unitaire sortant localement normal à (Γ) . La figure 1.1 donne de nouveau une image simplifiée dans un hyperespace à deux dimensions.

En effectuant la transformation mathématique suivante :

$$\int_{(\Gamma)} n \vec{v} d\vec{n}_{nor} = \int_{\Sigma} \text{div} (n \vec{v}) d\Sigma = \int_{\Sigma} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial x}{\partial t} \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial \xi_M} \left(n \frac{d\xi_M}{dt} \right) \right] d\Sigma. \quad (1.6)$$

On obtient alors le bilan de population général sous sa formulation locale :

$$\dot{G} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{dx}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(n \frac{dy}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(n \frac{dz}{dt} \right) + \sum_{i=1}^{i=M} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(n \frac{d\xi_i}{dt} \right) + \frac{\partial n}{\partial t}. \quad (1.7)$$

Cette section donne les éléments essentiels suffisants à l'écriture de la forme générale du bilan de population sous sa formulation locale.

1.4. Modèle de bilan de population

L'objet de cette partie est donné avis général sur le modèle de bilan de population, nous intéressons surtout à l'agrégation, la rupture, et la croissance. Nous représentons les méthodes de résolution les plus utilisées pour chaque cas.

L'équation (1.8) est une forme micro-distribuée de l'équation de bilan de population parce qu'il se réfère à une région microscopique dans l'espace. Dans des nombreux cas cette forme d'équation de bilan de population, est inutilement détaillée.

Donc il est sûr de supposer que les particules sont bien mélangées dans toute la région de coordonnées externe et donc de bilan de population peut être intégré sur tous les points dans l'espace. L'équation de bilan de population unidimensionnel général pour un système bien mélangé devient alors [38, 39] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t, x)}{\partial t} = & \frac{Q_{in}}{\tilde{V}} n_{in}(x) - \frac{Q_{out}}{\tilde{V}} n_{out}(x) - \frac{\partial [G(t, x)n(t, x)]}{\partial x} + B_{nuc}(t, x) + B_{agg}(t, x) \\ & - D_{agg}(t, x) + B_{break}(t, x) - D_{break}(t, x). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Cette équation doit être complétée avec les conditions initiales appropriées et de frontière. Le paramètre x représente la taille d'une particule. Les deux premiers termes du côté droit représentent le flux dans et d'un processus continu. Les symboles Q_{in} et Q_{out} définissent les débits d'entrée et de sortie du système. La nucléation et les taux de croissance sont donnés par $B_{nuc}(t, x)$ et $G(t, x)$ respectivement. Les termes nuc , agg , $break$ a été abrégée pour nucléation, l'agrégation et la rupture respectivement. Le volume de système est représenté par \tilde{V} . Un traitement par lots n'a aucun réseau dans le flux ou du flux de particules. Donc les deux premiers termes du côté droit d'équation (1.8) peuvent être enlevés pour un traitement par réacteur discontinue.

Il est commode de définir les moments de la distribution de taille de particule en ce moment. Le moment de la distribution en taille de particule n est défini comme :

$$\mu_j = \int_0^{\infty} x^j n(t, x) dx. \quad (1.9)$$

Les deux premiers moments représentent quelques propriétés importantes de la distribution. Le moment zéro ($j = 0$) et les premiers moments ($j = 1$) sont proportionnels au nombre total et à la masse totale de particules respectivement. En plus des deux premiers moments, le deuxième moment de la distribution sera utilisé pour comparer les résultats numériques.

1.4.1. Agrégation

1.4.1.1. Equation de bilan de population

Dans cette section nous discutons quelques techniques numériques pour résoudre des équations de bilan de population pour l'agrégation. Le phénomène d'agrégation apparaît dans une vaste gamme d'applications, par exemple dans la physique (agrégation de particules colloïdales), la météorologie (le transport d'aérosol, des minéraux), la chimie (réagissant des polymères, la formation de suie, des industries pharmaceutiques, des engrais). Le changement temporel de densité en nombre de particule dans un système physique dans l'espace homogène est décrit par l'équation de bilan de population bien connue suivante développée par Hulburt et Katz [40].

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' - n(t, v) \int_0^{\infty} \beta(v, v') n(t, v') dv'. \quad (1.10)$$

Où $t \geq 0$. Le premier terme représente la naissance des particules de taille x en raison de la coagulation des particules de tailles $(v - v')$ et ici nous nous référerons à la taille comme le volume de particule.

Le deuxième terme décrit la fusion des particules de taille v avec des autres particules. Le deuxième terme est appelé le terme de la mort. La nature du processus est dirigée par le noyau de coagulation β représent des propriétés du milieu physique. C'est non négatif et remplis la condition de symétrie $\beta(v, v') = \beta(v', v)$. Les solutions

analytiques d'EPB précédent peuvent être trouvées seulement dans quelques cas simple et donc nous avons besoin de techniques numériques pour le résoudre. Notez quoique, que les solutions analytiques connues soient très utiles pour l'agrégation.

1.4.1.2. Méthodes numériques existantes

Parmi techniques numériques diverses la méthode d'approximations successives, la méthode de transforme de Laplace, la méthode de moments, des résidus pondérés, des méthodes des éléments finis, des méthodes de volume finis et des méthodes de simulation de Monte Carlo, nous discutons ici seulement les méthodes des éléments finis et la méthode de volume de finis. Les méthodes des éléments finis sont bien connues dans le génie des procédés parce qu'ils sont simples de mettre en œuvre et produire les résultats numériques exacts de quelques propriétés choisies. D'autre part les méthodes de volume finis sont bien convenus pour résoudre des lois de conservation. La densité en nombre a basé EBP peut facilement être transformé à une loi de conservation de masse alors les méthodes de volume de finis peuvent être mis en œuvre.

a. Technique d'Hounslow

Hounslow et d'autres. [41] a proposé une technique relativement simple utilisant discrétisation géométrique où la largeur de classe i est directement proportionnelle à la largeur de la $(i-1)^{eme}$ classe. Il est facile de supposer que la taille la plus petite (le volume) dans la i^{eme} classe est $2i$ et la plus grande taille est $2i + 1$. Il y a 5 mécanismes d'interaction binaires qui sont responsables des changements de particules dans la classe i . Les descriptions détaillées des mécanismes peuvent être trouvées dans Hounslow et d'autres. [41]. Ici nous les présentons brièvement

Mécanisme 1 : les agrégations sont formées par des collisions entre des particules dans les $(i-1)^{eme}$ classes avec les particules dès le début aux $(i-1)$ classes. Quelques interactions donnent des particules dans la classe i et quelques interactions donnent des particules plus petites que la classe i . Le taux total de naissances dans la classe i résulte à l'expression suivante (après que l'inclusion du facteur de correction de volume discuté dans Hounslow et d'autres [34]).

$$B_i^{[1]} = \sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i+1} \beta_{i-1,j} N_i N_j. \quad (1.11)$$

Mécanisme 2 : le deuxième mécanisme est une naissance dans la classe i par la coalescence de deux particules de la classe $i - 1$. N'importe quel ensemble formé par deux particules de la classe $i-1$ aura comme conséquence une naissance dans la classe i . On donne la naissance totale en raison de ce mécanisme

$$B_i^{[2]} = \sum_{j=1}^{i-2} \frac{1}{2} \beta_{i-1,i-1} N_{i-1} N_{i-1} \quad (1.12)$$

Mécanisme 3 : ce mécanisme représente la mort dans la classe i due à la coalescence d'une particule de la taille la classe i avec une particule suffisamment assez grand pour le granule résultant pour être la plus grande que la limite supérieure de taille de la classe i . L'expression résultante (incluant le facteur de correction de volume) pour ce mécanisme résultats

$$D_i^{[3]} = N_i \sum_{j=1}^{i-1} 2^{j-i} \beta_{i,j} N_j \quad (1.13)$$

Mécanisme 4 : le quatrième mécanisme est la mort dans la classe i due à la coalescence d'une particule dans la classe i et une particule de cela ou d'une classe de taille plus élevée. Toutes les interactions enlèvent des particules de la classe i .

$$D_i^{[4]} = N_i \sum_{j=1}^I \beta_{i,j} N_j \quad (1.14)$$

Mécanisme 5 : quelques interactions entre les particules de classe i avec les particules d'abord produisent à la classe i les particules qui sont toujours dans la classe i . Ce mécanisme est aussi un mécanisme de naissance concernant la masse et d'autres moments plus élevés mais il n'a aucune effet sur le nombre de particules. Ce mécanisme est différent des autres. Hounslow et d'autres. [41] n'a pas considéré ce mécanisme pour la formulation de taux de changement des particules dans la classe i car le taux de changement de particules dues à ce mécanisme est zéro. Les particules deviennent plus grandes dans la classe en raison de ce mécanisme. Cela signifie que la masse augmente dans la classe tandis que le nombre de particules est constant. Hounslow et d'autres. [41] a présenté un facteur de correction de volume pour compenser ceci et probablement d'autre effet. Il peut jouer un rôle significatif par exemple en formulant une expression pour la distribution de masse pendant l'agrégation. En combinant tous les mécanismes indiqués ci-dessus, le taux net de changement de particules dans la classe i est donné par :

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i+1} \beta_{i-1,j} N_{i-1} N_j + \frac{1}{2} \beta_{i-1,i-1} N_{i-1}^2 - N_i \sum_{j=1}^{i-1} 2^{j-i} \beta_{i,j} N_j - N_i \sum_{j=i}^I \beta_{i,j} N_j$$

$$i = 1, 2, \dots, I$$

(1.15)

Ici on dénote le nombre total de classes. Litster et d'autres. [42] a généralisé cette technique à une discrétisation géométrique réglable de taille de la forme $x_{i+1/2} = 2^{1/q} x_{i-1/2}$, Où q est un nombre entier supérieur ou égal à un. Le On donne la discrétisation finale l'ensemble d'équations pour q est indiqué par :

$$\begin{aligned}
\frac{dN_i}{dt} = & \sum_{j=1}^{i-S(q)-1} \beta_{i-1,j} N_{i-1} N_j \frac{2^{(j-i+1)/q}}{2^{1/q} - 1} + \frac{1}{2} \beta_{i-q,i-q} N_{i-q}^2 \\
& + \sum_{k=2}^q \sum_{j=i-S(q-k+2)-k}^{i-S(q-k+i)-k} \beta_{i-k,j} N_{i-k} N_j \frac{2^{(j-i+1)/q} - 1 + 2^{-(k-1)/q}}{2^{1/q} - 1} \\
& + \sum_{k=2}^q \sum_{j=i-S(q-k+2)-k+2}^{i-S(q-k+i)-k+1} \beta_{i-k+1,j} N_{i-k+1} N_j \frac{-2^{(j-i)/q} + 2^{1/q} + 2^{-(k-1)/q}}{2^{1/q} - 1} \\
& - \sum_{j=1}^{i-S(q)} \beta_{i,j} N_i N_j \frac{2^{(j-i)/q}}{2^{1/q} - 1} - \sum_{j=i-S(q)+1}^I \beta_{i,j} N_i N_j.
\end{aligned}
\tag{1.16}$$

Où :

$$S(q) = \sum_{p=1}^q p.
\tag{1.17}$$

Les moments d'ordre élevé, de la distribution de particule en taille de peuvent être prévus correctement pour des valeurs suffisamment grandes de q . Une grande valeur de q implique qu'un grand nombre de classes est nécessaire pour couvrir le même domaine de taille. Par conséquent, le temps de calcul est exigé pour résoudre l'équation de bilan de population pour les plus grandes valeurs de q .

Ensuite, Wynn [43] a montré que la discrétisation réglable n'est pas valable pour toutes les valeurs de q . Pour $q > 4$, la formulation (1.16) n'est pas correcte. On donne la formulation correcte selon Wynn [43] comme:

$$\begin{aligned}
\frac{dN_i}{dt} = & \sum_{j=1}^{i-S_1} \frac{2^{(j-i+1)/q}}{2^{1/q}} \beta_{i-1,j} N_{i-1} N_j \\
& + \sum_{p=2}^q \sum_{j=i-S_p-1}^{i-S_p} \frac{2^{(j-i+1)/q} - 1 + 2^{-(p-1)/q}}{2^{1/q} - 1} \beta_{i-p,j} N_{i-p} N_j + \frac{1}{2} \beta_{i-p,i-q} N_{i-q}^2 \\
& + \sum_{p=1}^{q-1} \sum_{j=i+1-S_p}^{i+1-S_p} \frac{2^{1/q} - 2^{(j-i)/q} - 2^{p/q}}{2^{1/q}} \beta_{i-p,j} N_{i-p} N_j \\
& - \sum_{j=1}^{i-S_1+1} \frac{2^{(j-i)/q}}{2^{1/q} - 1} \beta_{i,j} N_i N_j - \sum_{j=i-S_1+2}^I \beta_{i,j} N_i N_j
\end{aligned}
\tag{1.18}$$

Où :

$$S_p = \text{Int} \left[1 - \frac{q \ln(1 - 2^{-p/q})}{\ln 2} \right]
\tag{1.19}$$

Avec $\text{Int} [x]$ étant la partie entière de x . Wynn et d'autres. [43] a présenté ce paramètre pour corriger les limites des sommes qui étaient erronées dans le travail original de Litster et d'autres. [42].

b. Technique de pivot fixe

La discrétisation discuté ci-dessus a l'inconvénient qu'elle peut seulement être appliquée sur une grille spécifique. Kumar et Ramkrishna [44] ont développé la technique de pivot fixe. Cette technique préserve vraiment non seulement le nombre et la masse des particules, mais elle peut aussi être généralisée pour la conservation de n'importe quelles deux propriétés désirées de la population. Cette technique divise la classe de taille entière en petites classes. La taille d'une classe peut être choisie arbitrairement. La classe de taille contenue entre deux tailles $x_{i-1/2}$ et $x_{i+1/2}$ est appelé la classe i . La population de particule dans cette classe de taille est représentée par une taille x_i , appelé le point de grille, tel cela $x_{i-1/2} < x_i < x_{i+1/2}$. Une nouvelle particule de taille x dans la classe de taille $[x_i, x_{i+1}]$, formé en raison de la rupture ou

l'agrégation, peut être représenté en assignant les fractions $a_1(x, x_i)$ et $a_2(x, x_{i+1})$, aux populations à x_i et x_{i+1} respectivement, Pour la cohérence avec deux propriétés générales $f_1(x)$ et $f_2(x)$, ces fractions doivent satisfaire les équations suivantes

$$a_1(x, x_i)f_1(x_i) + a_2(x, x_{i+1})f_1(x_i + 1) = f_1(x). \quad (1.20)$$

$$a_1(x, x_i)f_2(x_i) + a_2(x, x_{i+1})f_2(x_i + 1) = f_2(x). \quad (1.21)$$

En outre, ces équations peuvent être généralisées pour la cohérence avec plus de deux propriétés en assignant la taille de particule x à plus de deux points de grille. La population au volume représentatif x_i obtient une particule fractionnaire pour chaque particule qui est née dans la classe de taille $[x_i; x_{i+1}]$ ou $[x_{i-1}; x_i]$. En intégrant l'équation continue (1.10) sur une classe i , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{dN_i(t)}{dt} = & \frac{1}{2} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_0^x \beta(t, x - \epsilon) n(t, x - \epsilon) n(t, \epsilon) d\epsilon dx \\ & - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} n(t, x) \int_0^\infty \beta(t, x - \epsilon) n(t, \epsilon) d\epsilon dx \end{aligned} \quad (1.22)$$

Dénotons les premiers et deuxièmes termes du côté droit par B_i et D_i respectivement. Nous considérons maintenant le terme de naissance qui a été modifié selon Kumar et Ramkrishna [44] comme :

$$\begin{aligned} B_i^{FP} = & \frac{1}{2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} a_1(x, x_i) \int_0^x \int_0^x \beta(t, x - \epsilon) n(t, x - \epsilon) n(t, \epsilon) d\epsilon dx \\ & + \frac{1}{2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} a_1(x, x_i) \int_0^x \beta(t, x - \epsilon) n(t, x - \epsilon) n(t, \epsilon) d\epsilon dx. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Kumar et Ramkrishna ont considéré que des particules avec des concentrations en nombre N_i , $i = 1; 2; \dots; I$, sont assises aux tailles x_i $i = 1; 2; \dots; I$ respectivement. Mathématiquement la fonction de densité en nombre $n(t, x)$ peut être représenté en termes de distribution de Dirac (delta de Dirac) comme :

$$n(t, x) \approx \sum_{i=1}^I N_i \delta(x - x_i). \quad (1.24)$$

Substituant la densité en nombre (1.24) dans l'équation (1.23), le terme de naissance discret peut être obtenu. Pour la cohérence avec des nombres et la masse, on donne le taux de naissances discret pour l'agrégation est donné par :

$$B_i^{FP} = \sum_{\substack{j \geq k \\ x_i - \leq x < x_{i+1}}} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}\right) \eta(x) \beta_{j,k} N_j N_k. \quad (1.25)$$

Avec :

$$\eta(x) = \begin{cases} \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x_i \leq x < x_{i+1} \\ \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x_{i-1} \leq x < x_i \end{cases} \quad (1.26)$$

Où $x = x_j + x_k$ et $\beta_{i,k} = \beta(t, x_j, x_k)$

De la même façon le taux de mortalité peut être obtenu en substituant la densité en nombre de l'équation (1.24) dans le terme de la mort D_i . L'ensemble final d'équation discrète donne comme :

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{\substack{j \geq k \\ x_{i-1} \leq x < x_{i+1}}} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}\right) \eta(x) \beta_{j,k} N_j N_k - N_i \sum_{k=1}^I \beta_{i,k} N_k, \quad i = 1, 2, \dots, I. \quad (1.27)$$

Bien que la technique possède beaucoup de caractéristiques de flexibilité, les auteurs ont montré que la technique proposée a l'inconvénient de sur-prévision de la

densité en nombre dans le grand domaine de taille quand appliqué sur des grilles grossières. En conséquence, il surestime fortement les moments plus élevés de la distribution en taille de particule. Kumar et Ramkrishna ont aussi développé une technique de pivot mobile [45] pour surmonter la sur- prévision. La dernière technique est plus complexe et donne des difficultés pour résoudre l'ensemble résultant des équations ordinaires (des ODES). L'approche de pivot mobile de la discrétisation du EBP comme conséquence un système des équations raides.

C'est aussi d'intérêt de simplifier la formulation de pivot fixe pour les grilles géométriques du type $x_{i+1} = 2x_i$. La formulation (1.27) pour les grilles $x_{i+1} = 2x_i$ prend la forme suivante dans ce cas :

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i-1} \beta_{i-1,j} N_{i-1} N_j + \frac{1}{2} \beta_{i-1,i-1} N_{i-1}^2 + N_i \sum_{j=1}^{i-1} (1 - 2^{j-i}) \beta_{i-1} N_j \\ & - N_i \sum_{j=1}^I \beta_{i,j} N_j. \end{aligned} \quad (1.28)$$

L'équation précédente peut être simplifiée :

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i-1} \beta_{i-1,j} N_j + \frac{1}{2} \beta_{i-1,i-1} N_{i-1}^2 + N_i \sum_{j=1}^{i-1} 2^{j-i} \beta_{i-1,j} N_j - N_i \sum_{j=i}^I \beta_{i,j} N_j. \quad (1.29)$$

Cette équation est exactement la même comme l'équation de bilan de population discrétisée d'Hounslow (1.17). Notez que les termes de naissance et de mort (les termes de renouvellement) ont différents des expressions dans les deux discrétisations, mais la forme finale des deux plans est identique. Dans la discrétisation d'Hounslow, les termes de la naissance et de mort calculent les taux nets de renouvellement tandis que dans la technique de pivot fixe toute la naissance totale et les taux de mortalité sont calculés.

c. Méthode de volume finis

Maintenant nous présentons une approche complètement différente, la méthode de volume finis, pour résoudre l'équation de bilan de population d'agrégation. Les méthodes de volume finis sont fréquemment utilisées pour résoudre les lois de conservation. Filbet et Lauren [46] ont appliqué l'approche de volume finis à l'équation de bilan de population d'agrégation par la modalisation du processus d'agrégation comme loi de conservation de masse, (voir aussi Makino et d'autres. [47]). D'abord nous présentons la loi de conservation de masse pour le processus d'agrégation et ensuite la discrétisation de volume finis pour résoudre le modèle.

i) Loi de conservation de masse pour l'agrégation

Le processus d'agrégation peut être décrit comme flux massique le long de la coordonnée de masse. Ainsi, l'évolution de la distribution de masse peut être exprimée selon les lois de conservation de masse suivantes comme :

$$\frac{\partial xn(x)}{\partial t} + \frac{\partial F(x)}{\partial x} = 0. \quad (1.30)$$

Où $n(x)$ est la densité en nombre et $F(x)$ est le flux massique à travers x . Pour le cas d'agrégation binaire, les résultats des événements d'agrégation sont insignifiants, c'est-à-dire deux particules de masses x_1 et x_2 formera une nouvelle particule de masse $x_1 + x_2$. Dans le cas de fragmentation il dépend de la distribution de masse de fragments créés par un impact. La fréquence d'agrégation entre particules de masses x_1 et particules de masses x_2 par $\beta_{x_1, x_2} n(x_1)n(x_2)$.

Où :

$$\beta_{x_1, x_2} = \beta_{x_2, x_1}$$

Est le taux d'agrégation d'une particule de masse $0 < x_1 < x$ contre des particules de masse x_2 .

Considérez une particule de masse x_1 avec $0 < x_1 < x$ qui entre en collision avec une particule de masse x_2 satisfaisant $x - x_1 < x_2 < \infty$. En conséquence de cet événement d'agrégation, il y a un flux massique à travers x que l'on donne considérant les deux cas suivants.

- D'abord, considérez la collision entre les particules de masses x_1 pour $0 < x_1 < x$ et x_2 pour $x \leq x_2 < \infty$. Dans ce cas, on voit aisément que le flux massique par x est x_1 .
- Les collisions restantes où les particules de masses x_1 pour $0 < x_1 < x$ entrent en collision avec les particules de masses x_2 avec $x - x_1 \leq x_2 < x$ le flux à travers x est simplement $x_1 + x_2$.

Maintenant en additionnant toutes les paires des particules qui donnent le débit massique à travers x , nous obtenons le flux massique total à travers x comme :

$$\begin{aligned}
 F(x) &= \frac{1}{2} \int_0^x \int_{x-x_1}^x (x_1 + x_2) \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1 \\
 &\quad + \int_0^x \int_x^\infty x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1
 \end{aligned}
 \tag{1.31}$$

Le facteur 1/2 apparaît dû pour doubler le compte de collisions dans cette gamme. Le premier terme peut plus loin être simplifié comme suit :

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{1}{2} \int_0^x \int_{x-x_1}^x (x_1 + x_2) \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1. \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^x \int_{x-x_1}^x x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1 + \frac{1}{2} \int_0^x \int_{x-x_1}^x x_2 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1.
 \end{aligned}
 \tag{1.32}$$

Changeant l'ordre d'intégration du deuxième terme et échangeant ensuite les variables d'intégration x_1 et x_2 , le premier terme (I) prend la forme simplifiée suivante :

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{2} \int_0^x \int_{x-x_1}^x x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1 + \frac{1}{2} \int_0^x \int_{x-x_1}^x x_2 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1. \\
&= \int_0^x \int_{x-x_1}^x x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1.
\end{aligned}$$

(1.33)

Ceci utilisant la fonction de flux réduit simplement à :

$$F(x) = \int_0^x \int_{x-x_1}^{\infty} x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1.$$

(1.34)

En substituant la fonction de flux $F(x)$ dans l'équation (1.30), nous arrivons :

$$\frac{\partial x n(x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_0^x \int_{x-x_1}^{\infty} x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1 \right) = 0.$$

(1.35)

Maintenant nous montrons que la loi de conservation de masse ci-dessus (1.35) peut facilement être transformée à l'équation de bilan de population continue standard.

En se servant de la règle d'intégration de Leibnitz, nous obtenons :

$$\frac{\partial x n(x)}{\partial t} + \int_0^x \frac{\partial}{\partial x} \int_{x-x_1}^{\infty} x_1 \beta_{x_1, x_2} n(x_1) n(x_2) dx_2 dx_1 + \int_0^{\infty} x \beta_{x, x_2} n(x) n(x_2) dx_2 = 0.$$

(1.36)

D'avantage en appliquant la règle d'intégration de Leibnitz en premier terme, cette équation prend la forme suivante :

$$\frac{\partial x n(x)}{\partial t} = \int_0^x x_1 \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 - \int_0^{\infty} x \beta_{x, x_2} n(x) n(x_2) dx_2.$$

(1.37)

Le premier terme du côté droit peut être divisé dans deux parties :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial xn(x)}{\partial t} &= \int_0^x \left(\frac{x}{2} + x_1 - \frac{x}{2} \right) \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 - \int_0^\infty x \beta_{x, x_2} n(x) n(x_2) dx_2 \\
&= \frac{x}{2} \int_0^x x_1 \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 - \int_0^\infty x \beta_{x, x_2} n(x) n(x_2) dx_2. \\
&+ \int_0^x \frac{x_1}{2} \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 \\
&\quad - \int_0^x \frac{(x-x_1)}{2} \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1. \\
&= \frac{x}{2} \int_0^x x_1 \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 - \int_0^\infty x \beta_{x, x_2} n(x) n(x_2) dx_2. \\
&+ \frac{1}{2} \int_0^x x_1 \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 - \frac{1}{2} \int_0^x x_1 \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1. \\
&= \frac{x}{2} \int_0^x \beta_{x_1, x-x_1} n(x_1) n(x-x_1) dx_1 - x \int_0^\infty \beta_{x, x_2} n(x) n(x_2) dx_2.
\end{aligned}
\tag{1.38}$$

Ainsi, divisant par x l'équation (1.38) transforme en équation d'agrégation classique (1.10).

ii) Discrétisation numérique

Considérons un domaine fini $[0, x_i]$ pour le calcul. Nous considérons la méthode de volume finis pour la discrétisation d'équation (1.28). Nous discrétisons le temps dans niveau discret $t_m, m = 1; 2, \dots$ et l'espace dans les classes $A_i = [x_{i-1/2}; x_{i+1/2}], i = 1; 2; \dots \dots I$. Intégrant la loi de conservation sur une classe dans espace-temps $A_i \times [t_m, t_{m+1}]$ nous obtenons :

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} x n(t_{m+1}, x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} x n(t_n, x) dx - \int_{t_m}^{t_{m+1}} \left(F(t, x_{i+1/2}) - F(t, x_{i-1/2}) \right) dt. \quad (1.39)$$

Nous pouvons récrire l'équation ci-dessus comme

$$g_i^{m+1} = g_i^m - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (J_{i+1/2}^m - J_{i-1/2}^m), \quad i = 1, 2, \dots, I. \quad (1.40)$$

Où g_i^m dénote une approximation de la moyenne de cellule de $g(t^m; x) = xn(t^m; x)$ sur la classe i au temps t_m et $J_{i+1/2}^m$ rapproche le flux sur la frontière de la classe. C'est le flux numérique. Selon Filbet et Lauren Le lit [45], le flux numérique a été rapproché comme suit :

$$J_{i+1/2}^m = \sum_{k=1}^i \Delta x_k \Delta g_k^m \left[\sum_{j=\alpha_{i,k}}^I \int_{\Lambda_j} \frac{\beta(u, x_k)}{u} du g_j^m + \int_{x_{i-1/2}-x_k}^{x_{\alpha_{i,k}}-1/2} \frac{\beta(u, x_k)}{u} du g_{\alpha_{i,k}-1}^m \right]. \quad (1.41)$$

Le nombre entier $\alpha_{i,k}$ correspond à l'indice de la classe tel que $x_{i+1/2} - x_k$. Les auteurs ont indiqué que la formulation (1.40) fournit une exactitude du second degré. Il est important de le souligner contrairement à la technique de pivot fixe la formulation (1.40) est cohérente seulement avec le premier moment.

1.4.2. Rupture

1.4.2.1. Equation de bilan de population

Des bilans de population pour la rupture sont connus dans la granulation, la cristallisation, la science atmosphérique et beaucoup d'autre particule des problèmes liés d'ingénierie. La forme générale d'équation de bilan de population pour la rupture donnée comme [48] :

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} = \int_x^\infty b(x, \epsilon) S(\epsilon) n(t, \epsilon) d\epsilon - S(x) n(t, x). \quad (1.42)$$

La fonction de rupture $b(x, \epsilon)$ est la fonction de densité de probabilité pour la formation des particules de taille x de la particule de taille. La fonction de sélection $S(\epsilon)$ décrit le taux auquel les particules sont sélectionnées pour se casser. La fonction de rupture aux propriétés suivantes :

$$\int_0^x b(x, \epsilon) d\epsilon = \bar{N}(x). \quad (1.43)$$

$$\int_0^x \epsilon b(x, \epsilon) d\epsilon = x. \quad (1.44)$$

La fonction $N(x)$ représente le nombre de fragments obtenus à partir de la rupture de particule de la taille x .

Dans la littérature, il est commun pour écrire l'équation de bilan de population ci-dessus pour la rupture binaire comme, voir Ziff et McGrady [46] :

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} = 2 \int_x^\infty \tilde{B}(x, \epsilon - x) n(t, \epsilon) d\epsilon - n(t, \epsilon) \int_0^x \tilde{B}(x, \epsilon - x) d\epsilon. \quad (1.45)$$

Où :

$$\tilde{B}(x, y) = \tilde{B}(y, x). \quad (1.46)$$

Donne le taux que $(x + y)$ fait divise dans un x - mer et un y - mer.

Les relations entre b, S et B peuvent être trouvées de l'équation (1.42) et l'équation (1.45).

$$S(x) = \int_0^x \tilde{B}(x, \epsilon - x) d\epsilon, \quad \text{et} \quad b(x, \epsilon) = 2\tilde{B}(x, \epsilon - x)/S(\epsilon). \quad (1.47)$$

L'équation de bilan de population ci-dessus (1.42) peut seulement être résolu analytiquement pour les formes très simples des fonctions de rupture et de sélection, voir [48, 49, 50]. Ceci mène certainement à un examen de méthodes numériques pour résoudre l'équation de bilan de population. Les méthodes numériques se rangent dans plusieurs catégories: méthodes stochastiques, [51, 52], méthodes d'élément finis, Everson et d'autres. [53], méthodes sectionnelles Kumar et Ramkrishna [45] et méthodes de moment [54, 55].

Les méthodes stochastiques (Monte-Carlo) sont très efficaces pour résoudre des équations de bilan de population multi-dimensionnelles, puisque d'autres techniques numériques deviennent par informatique très chères dans de tels cas. Larges variétés de méthodes d'élément finis, des résidus pondérés, la méthode de collocation orthogonale et la méthode de Galerkin sont aussi utilisées pour résoudre des équations de bilan de population de rupture. Dans ces méthodes, la solution est rapprochée comme les combinaisons linéaires de fonctions de base sur nombre fini de sous-domaine. Dans des temps récents, les méthodes sectionnelle sont devenues par informatique très attractives. Une revue détaillée des méthodes sectionnelle a été récemment donné par Vanni [56]. Dans la méthode de moment, l'équation de fragmentation est transformée dans un système d'ODES décrivant l'évolution des moments de la distribution en taille de particule.

1.4.2.2. Méthodes numériques existantes

Les méthodes sectionnelle sont les alternatives les plus importantes pour résoudre les équations de bilan de population puisqu'ils sont simples de mettre en application et prévoir des propriétés de particule précisément. Plusieurs méthodes sectionnelles pour l'équation de bilan de population de rupture, ont récemment proposé

par Hill et Ng [57], Kumar et Ramkrishna [44], aussi bien que Vanni [58]. Nous les discutons brièvement ici.

Hounslow et d'autres [41] a proposé une méthode numérique pour résoudre les problèmes d'agrégation qui ont apparu pour être la première méthode de discrétisation qui préserve les deux premiers moments. Après ceci Hill et Ng [57] a développé une méthode de discrétisation pour l'équation de bilan de population générale de rupture. Ils sont utilisé deux facteurs de correction dans l'équation discrétisée pour préserver les deux premiers moments. Afin de calculer les facteurs de correction ils ont imposé deux conditions : l'évaluation correcte de masse totale (le premier moment) et l'évaluation correcte du nombre total (le moment d'ordre zéro). Puisque le calcul des facteurs de correction n'était pas possible pour le cas général, ils ont considéré trois formes différentes de la fonction de rupture et une forme spéciale de la fonction de sélection $S(x) = S_0 x^\alpha$.

Ensuite, Vanni [58] a modifié la méthode discrétisée de Hill et Ng [57] pour le rendre plus général. En gardant la formulation entière le même, Vanni a changé la deuxième condition pour calculer le facteur de correction. Il a considéré l'évaluation correcte de le terme de la mort tandis que Hill et Ng [57] ont imposé la prédiction correcte du nombre total de particules. La méthode devient plus générale, mais finalement elle mène aux solutions moins précises.

Hounslow et d'autres. [59] a présenté une nouvelle discrétisation pour la rupture de l'équation de bilan de population. Ils ont calculé la sélection et les fonctions de rupture en imposant la condition d'évaluation correcte du nombre total et le mouvement de volume de granule d'un intervalle à un l'autre. La formulation prévoit le nombre total et la masse totale correctement, mais les fonctions de la sélection et de la rupture exigent le calcul beaucoup d'intégrales simples et doubles. Plus tard, Tan et d'autres. [60], a utilisé cette discrétisation dans son travail sur la granulation à lit fluidisé. Une procédure semblable comme nous avons dans la formulation des équations Kumar et Ramkrishna [44] se sont appliqués la technique de pivot fixe à l'équation de bilan de population de rupture. On le constate que le la technique de pivot fixe est plus général que des techniques précédemment existantes. Une procédure semblable comme nous avons dans la formulation des équations discrétisées pour l'agrégation peut être suivi pour obtenir les équations discrétisée pour la rupture. Leurs ensembles finals

d'équations discrétisées pour la conservation exacte du nombre et masse prennent dans ce cas la forme suivante :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = \sum_{k=i}^I \eta_{i,k} S_k N_k(t) - S_i N_i(t) \quad i = 1, 2, \dots, I. \quad (1.48)$$

Ici, S_k est $S(x_k)$ et la fonction $\eta_{i,k}$ est décrit par :

$$\eta_{i,k} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} a_1(x, x_i) b(x, x_k) dx + \int_{x_{i-1}}^{x_i} a_2(x, x_i) b(x, x_k) dx.$$

$$a_1(x, x_i) = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}.$$

$$a_2(x, x_i) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}.$$
(1.49)

Notez que les propriétés locales suivantes de conservation se tiennent

$$a_1(x, x_i) + a_2(x, x_i) = 1. \quad (1.50)$$

$$x_i a_1(x, x_i) + x_{i+1} a_2(x, x_i) = x_i. \quad (1.51)$$

Le concept fondamental derrière la technique de pivot fixe peut être récapitulé comme suit. Supposons une nouvelle particule d'une taille qui n'est pas une représentative d'aucune classe apparaît en raison de la rupture de plus grandes particules. La particule doit être divisée aux représentants voisins de telle façon que le nombre et la masse soient conservés. Dans ce processus de diffusion numérique est bien sûr possible en raison de la mission (l'attribution) de particules aux représentants à qui ils n'appartiennent pas vraiment.

Néanmoins, des résultats tout à fait satisfaisants peuvent être obtenus par cette technique. Cependant, il sera montré plus tard que la technique de pivot fixe sur-prévoit les résultats.

Puisque dans le processus de rupture Les particules coulent vers les particules plus petites, La technique de pivot fixe surestime la densité en nombre de particules plus petites.

1.4.3. Croissance

1.4.3.1. Equation de bilan de population

Un processus de croissance est commun dans une vaste gamme de processus particulière incluant la cristallisation et granulation. L'équation de bilan de population pour la croissance pure est donnée comme suit :

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial [G(x)n(t, x)]}{\partial x} = 0. \quad (1.52)$$

C'est une équation de type hyperbolique due au terme de croissance. . Il souffre de beaucoup de difficulté informatique. Un examen détaillé de quelques plans numériques simples utilisés pour résoudre de telles équations sera présenté ici. Les méthodes plus complexes peuvent être trouvées dans Hundsdorfer et Verwer [61] aussi bien que dans LeVeque [62].

1.4.3.2. Méthodes numériques existantes

Des méthodes de volume finis sont connues pour être une bonne approche pour résoudre de telles équations, puisqu'ils incorporent automatiquement la conservation du nombre dans un processus de croissance. Nous discutent d'abord brièvement la méthode de volume finis. Alors, des problèmes numériques avec ces méthodes seront mentionnés. Notre intérêt ici est dans la formulation d'une forme de semi-discrétisation de l'équation ci-dessus de sorte que la méthode de lignes (MDL). L'approche peut facilement être appliquée. La raison de l'approche de MDL est ici l'accouplement facile du divers processus comme l'agrégation, la rupture etc. et bien sûr facilement disponible Intégrateurs d'ODE. Nous discrétisons le domaine dans classes spatiales

égales $\Omega_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ et définissez comme nœuds $x_i = (x_{i-1/2} + x_{i+1/2})/2$ les centres des classes. Intégration directe d'équation (1.51) au-dessus de chaque classe donne la formulation semi-discrète :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = G(x_{i-1/2})n(t, x_{i-1/2}) - G(x_{i+1/2})n(t, x_{i+1/2}). \quad i = 1, 2, \dots, I \quad (1.53)$$

Donne au premier ordre la discrétisation contre le vent de différence de diverses méthodes pour les solutions numériques d'équation (1.52) peuvent être obtenues à partir de différent choix de l'approximation de $n(t; x_{i+1/2})$ et $n(t; x_{i-1/2})$ en termes de $N_i(t)$. L'approximation la plus facile $n(t; x_{i+1/2}) \approx N_i(t) / \Delta x$ donne le premier ordre contre le vent différence discrétisation :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta x} [G(x_{i-1/2})N_{i-1} - G(x_{i+1/2})N_i]. \quad (1.54)$$

Le choix :

$$n(t, x_{i+1/2}) \approx \frac{1}{2\Delta x} [N_i(t) + N_{i+1}(t)]. \quad (1.55)$$

Donne la discrétisation de central du deuxième ordre

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = \frac{1}{2\Delta x} [G(x_{i-1/2})\{N_{i-1}(t) + N_i(t)\} - G(x_{i+1/2})\{N_i(t) + N_{i+1}(t)\}]. \quad (1.56)$$

L'équation de bilan de population, (1.52) est résolue utilisant le premier ordre et deuxième ordre central.

Discrétisation pour $G(v) = 1$ et :

$$n(0, x) = \begin{cases} 1, & 2 \leq x \leq 4, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

(1.57)

Le résultat obtenu est présenté dans [63].



CHAPITRE II

CHAPITRE II: METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION

2.1. Introduction

Beaucoup de méthodes ont été développées pour résoudre des problèmes, en électrostatique, en magnétostatique, en électromagnétisme en génie chimique, etc. Beaucoup de logiciels ont été mis au point et sont maintenant disponibles, présentant une large gamme de performances et des caractéristiques variées. Il est souvent possible de trouver une méthode qui soit bien adaptée à un type de problèmes avec des contraintes données (temps de résolution, précision...), mais il est impossible de trouver une méthode globale capable de résoudre tous ces problèmes avec des performances optimales.

La complexité des systèmes d'équations intégrales-différentielles ne permet pas de trouver aisément une solution approchée.

2.2. Méthode de résolution des équations integro-différentielles

Les méthodes les plus utilisées pour résoudre les équations intégrales-différentielles sont :

- La méthode des éléments finis;
- La méthode des volumes finis;

- La méthode des différences finis.

Dans les sections suivantes, une brève description de ces méthodes est faite.

2.2.1. Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis fut développée et appliquée en premier lieu en génie civil et en mécanique, et n'a trouvé sa place que peu à peu en électricité, vers la fin des années 1960. Cette méthode est fondée sur une formulation intégrale. Le principe de la méthode des éléments finis est de découper le domaine d'intégration à deux ou trois dimensions en données élémentaires de taille finie. Sur chacun de ces sous-domaines, appelés éléments finis, la fonction inconnue est approchée par une combinaison linéaire de polynômes à une ou plusieurs variables de faible degré. Les coefficients de chaque polynôme sont déterminés par la valeur de la fonction en des points particuliers que l'on appelle les nœuds de l'élément. Par exemple, en deux dimensions, on pourra choisir des triangles comme éléments finis, leurs sommets pour nœuds et les polynômes de degré inférieur ou égal à 1 comme base. Une fois effectué le découpage en éléments finis, les valeurs de la fonction en chaque nœud deviennent les inconnues à déterminer.

En électromagnétisme, la méthode des éléments finis a été utilisée en premier lieu pour étudier des guides d'ondes de section arbitraire, des guides partiellement remplis de diélectrique et de lignes imprimées blindées - structures où l'on détermine les champs sur la section droite (problèmes à deux dimensions). Plusieurs développements algébriques ont été considérés pour représenter les champs. Des problèmes tridimensionnels ont aussi été abordés, notamment l'étude de cavités partiellement chargées de diélectrique, et les réflexions produites par des objets disposés dans des guides d'ondes. La méthode a été adaptée à l'étude de cavités cylindriques circulaires destinées à des accélérateurs de particules.

Le découpage en triangles ou en tétraèdres implique une grille finie et donc une structure bornée. La méthode a été adaptée au traitement de problèmes ouverts en plaçant des frontières absorbantes. On peut l'utiliser pour des antennes de dimensions finies, et disposées sur des surfaces courbées [64].

2.2.2. Méthode des volumes finis

Cette méthode est basée sur des techniques développées et validées en dynamique des fluides numérique. Elle permet d'étudier des problèmes de diffraction, de rayonnement, de compatibilité électromagnétique, ou d'interférence et de blindage. La méthode des volumes finis en régime temporel met en œuvre les équations de Maxwell dans leur forme conservative [65].

Compte tenu de l'importance des structures filaires dans les problèmes de compatibilité électromagnétique C.E.M., un schéma de fil mince a été introduit dans un logiciel [66]. Une insertion dans un schéma numérique des volumes finis présente l'avantage de pouvoir modéliser de façon conforme des fils obliques. On évite ainsi l'inconvénient des différences finies, ce qui permet d'obtenir les fréquences de résonance exactes.

De plus, un schéma volumes finis peut être appliqué aussi bien au domaine temporel qu'au domaine fréquentiel. Cette caractéristique est importante car elle permet d'utiliser dans les deux cas la même structure de données, le même maillage, le même post-traitement et les inconnues sont calculées aux mêmes endroits. Ainsi, dans l'optique de travailler à des fréquences plus élevées en utilisant des techniques multi-domaine/multi-méthode, le schéma volumes finis semble bien adapté pour un couplage temporel/fréquentiel.

La technique de volumes finis semble s'adapter parfaitement à des problèmes de C.E.M. mais aussi au calcul de section efficace radar, de guide d'onde, de cavité résonante ou encore de rayonnement d'antenne.

2.2.3. Méthode des différences finies

La méthode des différences finies permet aussi d'étudier des champs qui varient dans le temps, en résolvant de manière approchée les équations de Maxwell. Leur traitement dans le domaine temporel permet notamment d'étudier des régimes transitoires, des systèmes non linéaires, voire des structures qui varient dans le temps et l'espace.

La méthode FDTD (Finite Différences in Time Domain) introduit par Yee [67] s'appuie sur une discrétisation en carrés ou en cubes de l'espace avec des pas de discrétisation $\Delta x, \Delta y$ et Δz . Toutes les dérivées spatiales sont remplacées par des opérateurs discrétisés ce qui donne le nom de différences finies. La dérivation par rapport au temps est également discrétisée, avec un pas temporel Δt .

On choisit généralement $\Delta x = \Delta y = \Delta z$, ce qui donne une grille FDTD cubique. Pour assurer la stabilité des résultats, il faut que les distances entre nœuds et les périodes satisfassent la relation :

$$v_{max}\Delta t \leq \frac{1}{\sqrt{(\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2} + (\Delta z)^{-2}}}$$

Où v_{max} est la vitesse de phase maximale.

La méthode des différences finies calcule les six composantes des champs à chaque période, en fonction de celles de la période précédente, pour chaque cellule - et en présence de pertes, il faut aussi tenir compte des périodes antérieures. Une étude détaillée requiert un grand nombre de points de discrétisation, ce qui implique un nombre important de places en mémoire et un temps de calcul considérable. Ces besoins informatiques importants ont, par le passé, considérablement freiné l'implémentation de la méthode. Par conséquent, on a dû consacrer beaucoup de temps et de moyens pour améliorer la modélisation des structures, en vue de faire un usage optimal de l'espace en mémoire et pour accélérer les calculs [68].

Toutefois, les moyens informatiques augmentent rapidement, avec la disponibilité croissante de processeurs massivement parallèles, tandis que des logiciels performants sont maintenant disponibles. De nombreux utilisateurs ont acquis une solide expérience dans l'utilisation de la méthode des différences finies pour résoudre les problèmes les plus divers. Il s'agit donc d'une méthode qui présente de grandes potentialités pour analyser les champs dans de nombreuses structures utilisées en électromagnétisme - pour autant que l'on dispose de moyens informatiques adéquats.

2.3. Méthodes de résolution plus utilisées pour résoudre l'équation de bilan de population

Il existe différentes méthodes pour résoudre l'équation de bilan de population, les plus couramment utilisées sont:

- La méthode des moments;
- La méthode des quadratures des moments ;
- La méthode des classes;
- La méthode de Monte Carlo ;
- La méthode de Monte Carlo à nombre constant;
- La méthode de pivot fixe;
- La méthode de collocation
- La méthode d'itération variationnelle de He.

2.3.1. Méthode standard des moments (MSM)

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

La méthode standard des moments a été proposée par Randolph et Larson (1971). Elle consiste à transformer l'équation de bilan de population en un ensemble d'équations de transport des moments de la distribution.

2.3.1.1. Principe de la méthode

Le principe de la méthode est, par l'intermédiaire de l'outil mathématique que sont les moments, d'accéder directement à la distribution en taille des particules (car le moment d'ordre 0 est égal au nombre total de particules comme le montre la relation (2.1) et d'intégrer la coordonnée interne de taille à l'extérieur de l'équation.

La transformation de ce bilan de population par la méthode des moments consiste donc à poser le moment d'ordre k suivant :

$$m_k = \int_0^{\infty} L^k n(L, t) dL. \quad (2.1)$$

Considérant la population répartie de façon homogène et caractérisée par sa densité en nombre (v), on définit le moment d'ordre j de la distribution par rapport à la taille (volume) de particule par :

$$M_j = \int_0^{\infty} v^j n(v) dv \quad j = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (2.2)$$

Selon cette définition, le moment d'ordre zéro M_0 , de la distribution représente la concentration numérale et le moment d'ordre un M_1 , représente la fraction volumique de particules dans la phase contenue. L'interprétation physique des moments d'ordre supérieur est plus délicate.

En appliquant cet opérateur mathématique à l'équation de bilan de population on obtient un système d'équations différentielles, dont les variables sont les différents moments de la distribution :

$$\frac{dM_j}{dt} = \Theta_j(\vec{M}, v). \quad \text{Pour } j = 0, 1, \dots, 4 \text{ à } 6 \text{ en général} \quad (2.3)$$

Le nombre limité d'équations à résoudre (par comparaison à la méthode des classes) est un avantage évident de cette méthode.

Cependant, la résolution du système d'équations (2.3) présente deux difficultés majeures, que sont la fermeture du jeu d'équations et la reconstruction de la fonction de distribution.

Le problème de fermeture, intervient lorsque la résolution du système d'équations précédent nécessite la connaissance de moments extérieurs à ce système.

Cette situation arrive notamment régissant l'évolution d'un moment fait intervenir un moment d'ordre plus élevé [69].

L'objet n'est pas ici de présenter toutes les techniques de fermeture existantes ; nous nous limitons donc à celles les plus rencontrées dans la littérature.

La méthode la plus simple consiste à supposer que la population est monodispersée (ici en volume) [70]. Avec cette hypothèse, le volume moyen v_n suffit à caractériser la population et la relation de fermeture du problème s'obtient de la façon suivante:

$$n(v) = M_0 \delta(v - v_n), v_n = \frac{M_1}{M_0}. \quad (2.4)$$

$$M_j = M_0 v_n^j = M_0^{1-j} M_1^j \quad (2.5)$$

Cette approximation facile ainsi grandement le problème, mais est par la même extrêmement réductrice.

En suivant la même idée, la fonction de distribution de la population peut être modélisée par une distribution connue, le plus souvent une distribution log-normale. A partir des moments M_0, M_1 et M_2 il est alors possible de calculer la moyenne géométrique \bar{v} et l'écart type σ de la distribution, qui permettent d'accéder aux autres moments nécessaires :

$$\bar{v} = \frac{M_1^2}{M_0^{3/2} M_2^{1/2}}. \quad (2.6)$$

$$\ln^2 \sigma = \ln \frac{M_2 M_0}{M_1^2}. \quad (2.7)$$

$$M_j = M_0 \bar{v}^j e^{j^2/2} \ln^2 \sigma. \quad (2.8)$$

Bien que moins réductrice que la précédente, cette technique de fermeture nécessite de connaître, a priori, la forme de la fonction de distribution, qui doit répondre à une fonction mathématique simple ce qui reste une hypothèse forte.

2.3.1.2. Ecriture de l'équation de bilan de population

Rappelons l'expression générale du bilan de population tenant compte des phénomènes d'agrégation et de rupture, en coordonnées de taille :

$$\frac{dn(L, t)}{dt} = B_a(L, t) - D_a(L, t) + B_b(L, t) - D_b(L, t). \quad (2.9)$$

En utilisant le moment d'ordre k , le bilan de population devient :

$$\frac{dm_k(t)}{dt} = (\bar{B}_a^k - \bar{D}_a^k) + (\bar{B}_b^k - \bar{D}_b^k). \quad (2.10)$$

Avec :

$$\bar{B}_a^k = \frac{1}{2} \int_0^\infty n(\lambda, t) \int_0^\infty \beta(u, \lambda) (u^3 + \lambda^3)^{k/3} n(u, t) du d\lambda \text{ et } u^3 = L^3 - \lambda^3. \quad (2.11)$$

$$\overline{D_a^k} = \int_0^\infty L^k n(L, t) \int_0^\infty \beta(L, \lambda) n(\lambda, t) d\lambda dL. \quad (2.12)$$

$$\overline{B_b^k} = \int_0^\infty L^k \int_L^\infty a(\lambda) b(L/\lambda) n(\lambda, t) d\lambda dL. \quad (2.13)$$

$$\overline{D_b^k} = \int_0^\infty L^k a(L) n(L, t) dL. \quad (2.14)$$

2.3.1.3. Intérêts des moments

Les moments sont des outils de calculs intéressants car ils permettent d'accéder à des grandeurs caractéristiques des particules :

$$m_0 = \int_0^\infty n(L) dL = N_T. \quad (2.15)$$

Avec N_T est le nombre total de particules.

Pour connaître la distribution de taille en nombre des particules, il nous suffit donc de tracer l'évolution du moment d'ordre 0.

$$m_1 = \int_0^\infty L n(L) dL \Rightarrow L_T = k_L \frac{m_1}{m_0}. \quad (2.16)$$

Avec L_T est la taille moyenne des particules et k_L un facteur en forme de taille ($k_L = 1$ dans le cas de sphères).

$$m_2 = \int_0^{\infty} L^2 n(L) dL \Rightarrow A_T = k_A \frac{m_2}{m_1}. \quad (2.17)$$

Avec A_T la surface moyenne des particules et k_A un facteur de forme surfacique ($k_A = \pi$ dans le cas de sphères).

$$m_3 = \int_0^{\infty} L^3 n(L) dL \Rightarrow V_T = k_V \frac{m_3}{m_0}. \quad (2.18)$$

Avec V_T le volume moyen des particules et k_V un facteur de forme volumique ($k_V = \pi/6$ dans le cas de sphères).

2.3.1.4. Avantages et limitations de la méthode

L'avantage principal de cette méthode est qu'elle permet de ne travailler que sur un petit nombre de scalaires car, pour avoir une bonne approximation de la distribution de taille, seuls les cinq premiers moments sont nécessaires. Cependant, cette méthode n'est pas applicable dans tous les cas, car seules les équations avec noyaux d'agrégation indépendante de la taille peuvent être vraiment atteintes précisément.

2.3.2. Méthode de quadrature des moments

Plus récemment des méthodes plus performantes, ne nécessitant aucune hypothèse quant à la distribution, ont été développées. Ces méthodes basées sur une interpolation entre les différents moments de la distribution, fournissent des résultats beaucoup plus satisfaisants que les méthodes citées précédemment. De telles techniques ont notamment été utilisées par Frenklach et Harris [71] et Diemer et Olson [70].

Mc Graw [72] a également proposé une technique de fermeture générale, basée sur une méthode de quadrature gaussienne, fournissant de très bons résultats. Cette méthode, aujourd'hui largement répandue, est appelée Méthode De Quadrature des Moments

2.3.2.1. Principe de la méthode

Cette méthode a été développée à l'origine par McGraw [72], pour modéliser l'évolution du comportement d'aérosols. Le but de l'extension de cette méthode aux phénomènes d'agrégation est de valider le modèle en rendant compte d'un système simultané nucléation-croissance-agrégation qui soit moins « lourd » à traiter. Pour cela, l'hypothèse faite est :

$$n(L, t) \approx \sum_{i=1}^{N_q} w_i(t) \delta[L - L_i(t)]. \quad (2.19)$$

Où les w_i et les L_i sont respectivement les poids (fractions massiques), et les tailles des particules de la distribution que l'on veut déterminer.

Le moment d'ordre k s'écrit alors :

$$m_k(t) = \int_0^{\infty} n(L) L^k dL \approx \sum_{i=1}^{N_q} w_i L_i^k(t). \quad (2.20)$$

Pour une approximation d'ordre N_q , il suffit d'avoir les $2 N_q$ premiers moments. Les w_i et les L_i sont alors déterminés par l'algorithme de produit-différence de Gordon [73] qui est basé sur la minimisation de l'erreur commise en remplaçant l'intégrale par une approximation de quadrature.

2.3.2.2. Ecriture des équations

L'équation de transport s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{dm_k}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_i w_i \sum_j w_j (L_i^3 + L_j^3)^{k/3} \beta_{i,j} - \sum_i L_i^k w_j \sum_j \beta_{i,j} w_j + \sum_i a_i \bar{b}_i^k w_i \\ & - \sum_i L_i^k a_i w_i. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Avec :

$$\beta_{i,j} = \beta(L_i, L_j), \quad a_i = a(L_i) \quad \text{et} \quad \bar{b}_i^k = \int_0^\infty L^k b(L/L_i) dL. \quad (2.22)$$

Car :

$$\begin{aligned} \bar{B}_a^k = & \frac{1}{2} \int_0^\infty n(\lambda, t) \int_0^u \beta(u, \lambda) (u^3 + \lambda^3)^{k/3} n(\lambda, t) du d\lambda \\ & \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N w_i \sum_i^N \beta_{i,j} (L_i^3 + L_j^3)^{k/3} w_j. \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\bar{D}_a^k = \int_0^\infty L^k \int_0^\infty n(L, t) \int_0^\infty \beta(L, \lambda) n(\lambda, t) dL d\lambda \approx \sum_i w_i L_i^k \sum_i \beta_{i,j} w_j. \quad (2.24)$$

$$\bar{B}_b^k = \int_0^\infty L^k \int_L^\infty a(\lambda) b(L/\lambda) n(\lambda, t) \approx \int_0^\infty L^k \sum_i a_i b(L/L_i) w_i dL \approx \sum_i a_i \bar{b}_i^k w_i. \quad (2.25)$$

Et :

$$\bar{D}_b^k = \int_0^\infty L^k a(L) n(L, t) dL \approx \sum_i a_i w_i L_i^k. \quad (2.26)$$

2.3.2.3. Application numérique

Le principe de la résolution, qui ne sera pas décrit ici, est basé sur l'algorithme de Gordon [73] et la théorie des moments canoniques.

Le modèle a été validé par Marchisio et al. [74-76] avec $N_q = 3$ pour des équations avec un taux de croissance indépendant de la taille, un taux de croissance dépendant de la taille et pour différents noyaux d'agrégation. Dans le cas de $N_q = 3$ seuls les six premiers moments (m_0, \dots, m_5), sont nécessaires et l'approximation de la quadrature est donnée par :

$$m_k = \sum_{i=1}^{N_q=3} w_i L_i^k = w_1 L_1^k + w_2 L_2^k + w_3 L_3^k. \quad (2.27)$$

La connaissance des w_i et des L_i suffit pour boucler l'équation du bilan de population.

Il a été montré [72, 74, 75, 76, 77] que cette quadrature d'ordre $N_q = 3$ est suffisante pour définir avec une bonne précision les moments de la distribution de taille.

2.3.2.4. Avantages et limitations de la méthode

L'avantage principal de cette méthode est que, par rapport aux autres méthodes présentées, et pour une même précision des résultats, elle utilise un très petit nombre de scalaires. De plus, elle permet des résultats plus précis que les autres méthodes directes pour les équations avec un taux de croissance dépendant de la taille et avec un noyau d'agrégation. Enfin, elle nécessite un temps de calcul très court, puisque les équations à résoudre sont relativement simples et peu nombreuses.

2.3.3. Méthode de Monte-Carlo

La méthode de Monte Carlo est l'une des méthodes les plus utilisées pour modéliser la distribution de taille de particules, elle a été utilisée par (Zhao et Zheng [78], Briesen [79]) entre autres. Le but de cette méthode est de suivre l'évolution

de l'ensemble des particules discrétisées en réalisant aléatoirement la sélection d'évènements probables. Dans la méthode courante de Monte Carlo, il faut d'abord choisir l'intervalle de temps et un élément de volume.

2.3.3.1. Principe de la méthode

Le terme de « Monte-Carlo » est utilisé pour décrire n'importe quelle approche probabiliste à un problème mathématique donné qui est résolu par le prélèvement stochastique d'échantillons. Cela implique invariablement la génération de nombreux nombres aléatoires.

2.3.3.2. Exemple de la méthode directe (DSMC)

Parmi les différentes méthodes de Monte-Carlo, on peut retenir celle-ci permettant d'effectuer une simulation directe et selon un scénario aléatoire, sur un échantillon restreint de la population. Cette méthode a été décrite par Kruis et al [80].

Considérons une population de N particules. On peut définir, préalablement au calcul, les grandeurs suivantes :

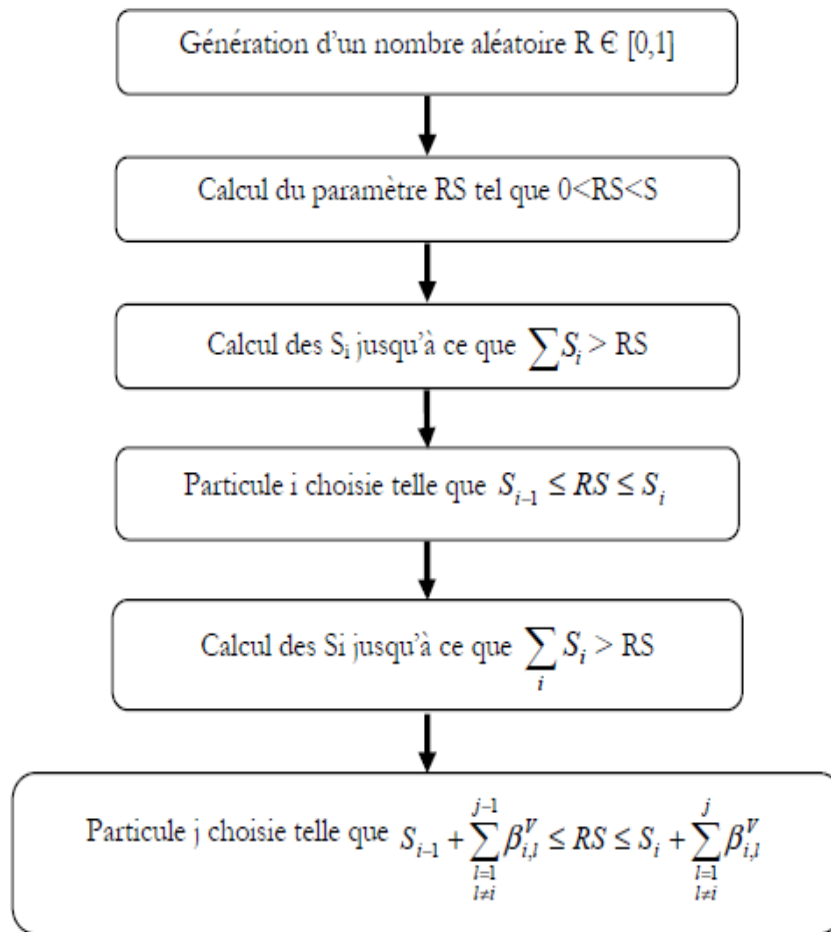


Figure 2.1. Organigramme de l'algorithme de méthode de Monte-Carlo

[81]

La Figure 2.2, représente schématiquement comment se fait le choix des particules i et j .

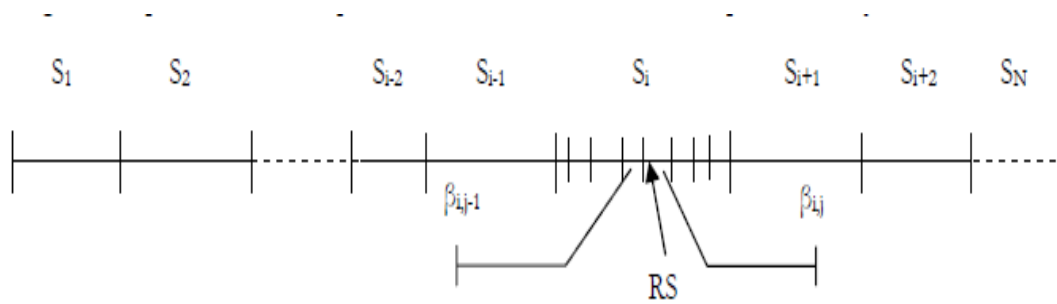


Figure 2.2. Schéma du choix des particules i et j pour la méthode de Monte-Carlo [81]

2.3.3.3. Méthode à N ou V constant (Méthode de Monte-Carlo à nombre constant)

La méthode la plus courante consiste à considérer classiquement que le volume de particules étudié est constant et que le nombre de particules évolue au cours du processus d'agrégation. Une autre méthode appelée « méthode de Monte Carlo à nombre constant » a aussi été mise au point ces dernières années [82, 83].

Cette méthode revient à étendre ou contracter le volume physique représenté par la simulation afin de continuellement maintenir un volume de réaction qui contient un nombre constant de particules. Le volume qui est suivi est donc continuellement ajusté afin de contenir toujours le même nombre de particules.

Ces deux méthodes de Monte Carlo à volume et nombre constant décrivent le même système physique et, en considérant un nombre suffisamment large de particules, les deux convergent vers la même solution.

Cependant, l'avantage de la méthode à nombre constant est qu'elle permet de faire des simulations sur un temps quasi infini alors que ce n'est pas possible avec la méthode classique, à masse constante, qui est limitée par la possibilité d'aboutir à un très petit nombre de particules dû à la perte de particules.

2.3.3.4. Avantages et limitations de la méthode

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

D'ailleurs, sa nature discrète s'adapte naturellement aux processus de croissance ce qui implique des événements discrets. Elle permet de plus de réduire l'erreur commise lors de chaque simulation.

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

2.3.4. Méthode de pivot fixe

La technique de pivot fixe est également basée sur l'idée de la modification de naissance. S'accorder à Kumar et Ramkrishna [84], l'équation. (2.28) est modifié selon :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} n(v, t) dv \\ \approx \int_{v_i}^{v_{i+1}} \lambda_i^+ \int_v^{v_{max}} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' dv \\ + \int_{v_{i-1}}^{v_i} \lambda_i^-(v) \int_v^{v_{max}} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' dv - \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} \Gamma(v) n(v, t) dv. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Où :

$$\lambda_i^+(v) = \frac{v - v_{i\pm 1}}{v_i - v_{i\pm 1}}. \quad (2.29)$$

Maintenant substituant l'approximation de densité en nombre :

$$n(v, t) \approx \sum_{i=1}^I N_i(t) \delta(v - v_i). \tag{2.30}$$

Dans l'équation précédente, nous obtenons l'équation discrétisée suivante :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = \sum_{k=i}^I \eta_{ik} \Gamma(v_k) N_k(t) - \Gamma(v_i) N_i(t), \quad i = 1, \dots, I. \tag{2.31}$$

Ici le η de fonction est décrit par :

$$\eta_{ik} = \int_{v_i}^{v_{i+1}} \lambda_i^+(v) \beta(v, v_k) dv + \int_{v_{i-1}}^{v_i} \lambda_i^-(v) \beta(v, v_k) dv, \quad i, k = 1, \dots, I, k \geq i. \tag{2.32}$$

Les premiers et deuxièmes termes intégraux réduisent à zéro pour $I = k$ et $I = 1$, respectivement. Notez que le premier terme est zéro pour $I = k$ dûla la propriété (2). Dans le reste $\Gamma_i = \Gamma(i)$. Le système ci-dessus d'équation ordinaire. (2.32) peut être écrit dans forme de matrice (2.33) avec :

$$\begin{bmatrix} \eta_{11}\Gamma_1 - \Gamma_1 & \eta_{12}\Gamma_1 - \Gamma_2 & \dots & \eta_{1I}\Gamma_I \\ 0 & \eta_{12}\Gamma_1 - \Gamma_2 & & \eta_{2I}\Gamma_I \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ 0 & 0 & & \eta_{II}\Gamma_I - \Gamma_I \end{bmatrix} \tag{2.33}$$

Le concept fondamental derrière la technique de pivot fixe peut être récapitulé comme suit. Supposez une nouvelle particule d'une taille qui n'est pas un représentant d'aucune cellule semble dû à la rupture de plus grandes particules. La particule doit être divisée à voisin représentants de telle manière que le nombre et la masse soient

conservés. Dans ce processus la diffusion numérique est naturellement due possible à l'attribution des particules aux représentants à qui ils n'appartiennent pas vraiment. Néanmoins, tout à fait satisfaisant des résultats peuvent être obtenus par cette technique. D'ailleurs, nous verrons plus tard que la technique de pivot fixe est une méthode d'ordre zéro sur la maille aléatoire non-uniforme.

2.3.5. Méthodes des classes

Les méthodes dites méthodes des classes consiste à discrétiser la distribution de particules, par rapport à l'espace des coordonnées internes (limité ici à une seule dimension), et à supposer que la distribution, relativement à cette coordonnée interne, est constante au sein de chacune des classe ainsi formées.

Dans le cas d'une discrétisation par rapport au volume v des particules, la distribution en taille (volume) des particules est divisée en M sections $[v_i, v_{i+1}]$.

Les particules contenues dans une section (ou classe) donnée, sont ainsi caractérisée par un même volume, représentatif de la section et noté x_i .

En appliquant cette discrétisation, l'équation de bilan de population pour chacune des M classes considérées, s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = & + \frac{1}{2} \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^\infty \omega(v-v', v') n(v, t) n(v-v', t) dv' \\ & - \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv \int_0^\infty \omega(v, v') n(v', t) dv' \\ & + \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t). \end{aligned} \quad (2.34)$$

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

$$N_i(t) = \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv. \quad (2.35)$$

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

Deux approches classiques sont possibles :

- La méthode M-I, qui consiste à appliquer le théorème de la moyenne au noyau d'agglomération ω .
- La méthode M-II, qui consiste à appliquer ce même théorème à la densité en nombre

La méthode M-I se traduit ainsi par :

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^{\infty} \omega(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' = N_i(t) N_k(t) \omega_{i,k}. \quad (2.36)$$

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' = N_k(t) \beta_{i,k} \Gamma_k. \quad (2.37)$$

Avec :

$$\omega_{i,k} = \omega(x_i, x_k), \quad v_i \leq x_i \leq v_{i+1} \text{ et } v_k \leq x_k \leq v_{k+1}.$$

Tandis que la méthode M-II donne :

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^{\infty} \omega(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' = \bar{n}_i(t) \bar{n}_k(t) \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^{\infty} \omega(v, v') dv'. \quad (2.38)$$

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' = \bar{n}_k(t) \int_{v_i}^{v_{i+1}} dv \int_0^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') dv'. \quad (2.39)$$

Avec :

$$\bar{n}_i(t) = \frac{1}{v_{i+1} - v_i} \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv. \quad (2.40)$$

La méthode M-II est en règle générale très gourmande en temps de calcul, en raison des intégrales double à évaluer dans l'équation (2.39), et elle est, de ce fait moins utilisée.

De nombreuses formulations de l'EBP ont ainsi été développées en employant les méthodes M-I et M-II.

Notre propos n'est pas ici de toutes les détailler, et nous nous limitons à la présentation de la méthode de Hounslow (M-I)

2.3.5.1. Méthode de Hounslow

La méthode de Hounslow est une méthode M-I reposant sur une discrétisation de l'espace des coordonnées internes suivant une suite géométrique de raison 2, telle que $v_{i+1} = 2v_i$.

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

taille de particules en nombre. Cette méthode donne la PSD directement, néanmoins son utilisation est conditionnée à connaître a priori la gamme de taille des particules et il est possible qu'un nombre important de classes soit nécessaire. Pour inclure l'équation de bilan de population dans la simulation, l'équation est écrite en fonction de la fraction volumique de la taille des particules, α_i de la i ème fraction, dont le volume se trouve entre v_i et v_{i+1} .

$$\alpha_i = N_i v_i \quad i = 0, 1, \dots, N - 1, \quad (2.41)$$

$$\alpha_i = N_i v_i = \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv. \quad (2.42)$$

v_i est le volume qu'occupent les particules de taille L_i .

2.3.6. Méthode de collocation

En mathématiques, une méthode de collocation est une méthode pour la solution numérique d'équations différentielles ordinaires, équations aux dérivées partielles et équations intégrales.

La méthode de collocation est un semi- discrétisation dans taille de particule (v), suivi par une intégration de temps du système résultant d'équations différentielles ordinaires. Le semi-discrétisation dans la taille est fait en projetant la solution sur un laps de temps sous spatial fini-dimensionnel $\{\varphi_1(v), \dots, \varphi_s(v)\}$;

Ceci généralise l'approche à éléments. finis l'équation dynamique est imposée pour tenir exactement dans un certain sous espace (l'approche de Galerkin) ou à un certain ensemble de nœuds.

2.3.6.1. Discrétisation de la distribution de taille de particule

On donne une approximation finie-dimensionnelle à la distribution de nombre continue. Laissez $\{\varphi_i\} 1 \leq i \leq s$ être un ensemble de fonctions de base continues; alors :

$$n(v, t) = \sum_{i=1}^s n_i(t) \varphi_i(v), \quad \varphi_i(v) = \text{fonction de base.} \quad (2.43)$$

$$n^T = [n_1(t), \dots, n_s(t)]^T. \quad (2.44)$$

La représentation (2.43) place le problème dans le cadre général des méthodes de projection. Par exemple φ_i peut être des polynômes par morceaux ou peut être des polynômes orthogonaux. Le résultat est une distribution continue $n(v, t)$. Les approximations d'ordre élevé peuvent être obtenues en augmentant l'ordre des fonctions de base sans changer le nombre des points s .

Nous notons dans le passage que l'approche sectionnelle pleine-stationnaire peut être formellement moulée dans la forme (2.43) à l'aide des fonctions de base Dirac $\varphi_i(v) = \delta(v - V_i)$. Avec V_i sont les points de collocation.

2.3.6.2. Coordonnées logarithmiques

Dans des coordonnées logarithmiques les arguments (disputes) de fonction de base sont changés en conséquence

$$\varphi_i = \varphi_i(x).$$

2.3.6.3. Rupture Pure

Dans le cas de rupture pure, l'équation de rupture théorique pour des particules seules-composantes est :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t). \quad (2.45)$$

L'approche de Galerkin

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^s n_i'(t) \varphi_i(v) &= \sum_{k=1}^s n_k(t) \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') \varphi_k(v') dv' \\
&\quad - \sum_{k=1}^s n_k(t) \int_0^{\infty} \varphi_k \Gamma(v) \xi_j(v) dv.
\end{aligned}
\tag{2.46}$$

Ici $n_i'(t)$ dénote la dérivée par rapport le temps de $n_i(t)$ L'équation résultante est multipliée par la fonction de test $\xi_j(v)$ ($j = 1, \dots, s$) et intégré de $v = 0$ à ∞ pour obtenir un système d'équations différentielles ordinaires s.

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^s n_i'(t) \int_0^{\infty} \varphi_i(v) \xi_j(v) dv &= \sum_{k=1}^s n_k(t) \int_0^{\infty} \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') \varphi_k(v') dv' \right) \xi_j(v) dv - \sum_{k=1}^s n_k(t).
\end{aligned}
\tag{2.47}$$

Nous construisons les matrices suivantes de coefficients intégraux :

$$A = \left[\int_0^{\infty} \varphi_i(v) \xi_j(v) dv \right]
\tag{2.48}$$

$$B^j = \left[\int_0^{\infty} \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') \varphi_k(v') dv' \right) \xi_j(v) dv \right]
\tag{2.49}$$

$$C^j = \left[\int_0^\infty \varphi_k \Gamma(v) \xi_j(v) dv \right] \quad (2.50)$$

Si $n(t)$ est un vecteur les équations (2.46) et (2.47) devient

$$An'(t) = \begin{bmatrix} n^T(t)(B^1 - C^1)n(t) \\ \dots \\ n^T(t)(B^n - C^n)n(t) \end{bmatrix} \quad (2.51)$$

$$An'(t) = [(B - C) \times n(t)].n(t) \quad (2.52)$$

2.3.7. Méthode d'itération variationnelle

La méthode d'itération variationnelle, était d'abord proposée par He. Cette méthode est maintenant très utilisée dans beaucoup de domaines tels que la physique, la chimie, le biomédical et les ingénieries pour étudier les équations différentielles partielles linéaires et non linéaires.

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

$$Fu = g. \quad (2.53)$$

Nous pouvons écrire la forme générale d'une équation différentielle. (2.53) comme suit :

$$F = L + N. \quad (2.54)$$

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

He a présenté La méthode d'itération variaonnelle où une correction fonctionnelle pour l'équation (2.54) peut être écrite comme :

$$u_{n+1}(t) = u_n(t) + \int_0^t \lambda(u_n(\xi) + N\tilde{u}_n(\xi) - g(\xi)) d\xi. \quad (2.55)$$

Dans l'équation ci-dessus λ est un multiplicateur lagrangien général, qui peut être identifié de façon optimale par l'intermédiaire de la théorie variationnelle, et la D.C.A. est une variation restreinte qui signifie [85-87]. En conséquence, la solution est donnée par $u = \lim_{n \rightarrow \infty} u_n$ [88].



CHAPITRE III

CHAPITRE III

METHODE DE PERTURBATION HOMOTOPIQUE ET METHODE DE DECOMPOSITION D'ADOMAIN

3.1. Introduction

Les années récentes ont vu le développement important dans l'utilisation de diverses méthodes pour la solution numérique de l'équation de bilan de population.

Le but du travail actuel est d'appliquer la méthode de perturbation homotopique et la méthode de décomposition d'Adomian. La solution de ces méthodes est dérivée sous forme de série entière avec les composants calculables faciles.

3.2.Méthode de perturbation homotopique

3.2.1. Introduction

Les phénomènes linéaires et non linéaires jouent un rôle important dans de divers domaines de la science et de l'ingénierie il est toujours très difficile résoudre la plupart des modèles des problèmes de vie réelle. Par conséquent, des solutions analytiques approximatives ont été présentées. Les années récentes ont vu le développement important dans l'utilisation de diverses méthodes pour les solutions numérique et analytique de l'équation différentielle partielle, la méthode de perturbation homotopique (MPH) a été utilisée pour résoudre ces équations. Cette méthode est la plus efficace et la plus commode pour des équations linéaires et non linéaires [89-100].

La méthode de perturbation homotopique a été largement utilisée pour résoudre des problèmes de frontière non linéaire et de valeur initiale. Donc la méthode de perturbation homotopique a de grand intérêt à beaucoup de chercheurs et de scientifiques. La méthode de perturbation homotopique (MPH), d'abord présentée par Ji Huan He en 1998 [101-103], il aussi a été développé et amélioré cette méthode. La méthode de perturbation homotopique, est un outil mathématique puissant pour étudier une grande variété de problèmes surgissant dans différents domaines. Elle est obtenue avec succès par l'accouplement de la théorie de l'homotopie dans la topologie avec la théorie de la perturbation.

Dans la méthode de perturbation homotopique, un problème compliqué dans l'étude est continuellement déformé dans un problème simple qui est facile de résoudre pour obtenir une solution analytique ou approximative [104].

Dans cette méthode la solution est considérée comme addition d'une série infinie qui converge habituellement rapidement à la solution précise. Cette méthode déforme sans interruption, les problèmes difficiles à l'étude dans un problème simple, facile à résoudre. Presque toutes les méthodes de perturbation sont fondées sur l'hypothèse de l'existence d'un petit paramètre dans l'équation. La majorité de problèmes non linéaires, particulièrement ceux qui ont la non-linéarité forte, n'ont aucun petit paramètre du tout et les solutions approximatives obtenues par les méthodes de perturbation, dans la plupart des cas, sont valables seulement pour de petites valeurs du petit paramètre. Généralement, les solutions de perturbation sont uniformément valables tant qu'un paramètre de système scientifique est petit. Cependant, nous ne pouvons pas compter entièrement sur les approximations, parce qu'il n'y a aucun critère sur lequel le petit paramètre existe. Ainsi, il est essentiel de vérifier la validité des approximations numériquement et/ou expérimentalement. Pour surmonter ces difficultés, on a proposé récemment la méthode de perturbation homotopique.

3.2.2. Idée de base de la méthode de perturbation Homotopique

Pour illustrer les idées fondamentales de la méthode d'analyse homotopique, nous considérons l'équation non linéaire suivante :

$$A(u) - f(r) = 0, r \in \Omega. \quad (3.1)$$

Avec les conditions aux limites suivantes :

$$B(u, \partial u / \partial n) = 0, r \in \Gamma. \quad (3.2)$$

Où A est un opérateur fonctionnel général, B est un opérateur de frontière, $f(r)$ est une fonction analytique connue, et Γ est la frontière du domaine Ω . d'une façon générale, l'opérateur A peut être divisé en deux parts de L et N , où L est un linéaire, tandis que N est l'opérateur non linéaire. L'équation (3.1) peut, donc, être réécrite comme suit :

$$L(u) + N(u) - f(r) = 0. \quad (3.3)$$

La technique de la méthode de perturbation homotopique de He [12-22] définit l'homotopie comme suit:

$$v(r, p): \Omega \times [0; 1] \rightarrow \mathcal{R}$$

Ce qui satisfait

$$H(v, p) = (1 - p)[l(v) - l(u_0)] + p[l(v) + N(v) - f(r)] = 0. \quad (3.4)$$

Où elle peut s'écrire sous une forme équivalente :

$$H(v, p) = l(v) - l(u_0) + pL(u_0) + p[N(v) - f(r) = 0]. \quad (3.5)$$

Dans les équations ci-dessus $r \in \Omega$ et $p \in [0, 1]$ est un paramètre d'encastrement, et u_0 est une première approximation pour la solution de l'équation (3.1), qui remplit les conditions aux limites.

Évidemment, des équations (3.4) et (3.5), nous avons :

$$H(v, 0) = L(v) - L(u_0). \quad (3.6)$$

$$H(v, 1) = L(v) - N(v) - f(r) = 0. \quad (3.7)$$

Selon la méthode de perturbation homotopique, nous pouvons d'abord employer le paramètre d'encastrement p comme petit paramètre et assumer cela la solution d'équation (3.5) peut être écrit comme série entière dans p .

La variation de p de zéro à l'unité est juste de $v(r, p)$ à partir de u_0 à $u(r)$. En topologie, ceci s'appelle la déformation, $L(v) - L(u_0)$ et $L(v) - N(v) - f(r)$ sont homotopiques. Le principe de base est que la solution des équations (3.4) et (3.5) peut être exprimée comme une série entière en p .

$$v = v_0 + v_1 p + v_2 p^2 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} v_i p^i. \quad (3.8)$$

Considérant $p = 1$ la solution approximative de l'équation (3.8) sera obtenu comme suit:

$$u = \lim_{p \rightarrow 1} v = v_0 + v_1 + v_2 + \dots \quad (3.9)$$

La convergence de la série (3.9) a été prouvée dans [12,32].

2.3.2. Exemples

2.3.2.1. Equation intégrro-différentielle non linéaire

Considérez l'équation intégrro-différentielle non linéaire suivante [105].:

$$u'(x) = 1 + \int_0^x u(t)u'(t)dt. \quad (3.10)$$

Pour $x \in [0,1]$ avec la solution exacte $u(x) = \sqrt{2}\tan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}x\right)$.

Par la méthode de perturbation homotopique, Laisser :

$$L(u) = u'(x) - g(x) = 0.$$

(3.11)

Et par conséquent, nous pouvons choisir un homotopie convexe tels que :

$$H(v, p) = v'(x) - g(x) - p \int_0^x k(x, t, v(t), v'(t)) dt = 0.$$

(3.12)

Et tracez sans interruption une courbe implicitement définie d'un point de départ $H(v, 0)$ à une fonction de solution $H(v, 1)$. Substituant (3.11) dans (3.12), et égalisant les termes avec des puissances identiques de p , nous avons

Et comparant les coefficients de puissances égales de p :

$$p^0: v_0'(x) = g(x) \Rightarrow v_0(x) = x.$$

(3.13)

$$p^1: v_1'(x) = \int_0^x v_0(t)v_0'(t) dt \Rightarrow v_1(x) = \frac{1}{6}x^3.$$

(3.14)

$$p^2: v_2'(x) = \int_0^x (v_0(t)v_1'(t) + v_1(t)v_0'(t)) dt \Rightarrow v_2(x) = \frac{1}{30}x^5.$$

(3.15)

$$p^3: v_3'(x) = \int_0^x (v_0(t)v_2'(t) + v_1(t)v_1'(t) + v_2(t)v_0'(t)) dt \Rightarrow v_3(x) = \frac{1}{2520}x^7.$$

(3.16)

$$\begin{aligned}
p^4: v_4'(x) &= \int_0^x (v_0(t)v_3'(t) + v_1(t)v_2'(t) + v_2(t)v_1'(t) + v_3(t)v_0'(t))dt \Rightarrow v_4(x) \\
&= \frac{29}{22680}x^9.
\end{aligned}
\tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
p^5: v_5'(x) &= \int_0^x (v_0(t)v_4'(t) + v_1(t)v_3'(t) + v_2(t)v_2'(t) + v_3(t)v_1'(t) + v_4(t)v_0'(t))dt \\
&\Rightarrow v_5(x) = \frac{431}{2494800}x^{11}.
\end{aligned}
\tag{3.18}$$

Par conséquent, la solution approximative de l'exemple 1 peut être clairement obtenue par :

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(x) = x + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{30}x^5 + \frac{1}{2520}x^7 + \frac{29}{22680}x^9 + \frac{431}{2494800}x^{11} + \dots
\tag{3.19}$$

En pratique, tous les termes de série (3.20), ne peut pas être déterminé et donc nous utilisons une approximation de la solution par la série tronquée (3.21) :

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(x).
\tag{3.20}$$

$$\varphi_m = \sum_{n=0}^{m-1} v_n(x) \quad \text{avec} \quad u(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} \varphi_m(x)
\tag{3.21}$$

Les résultats et les erreurs absolues correspondantes sont présentés dans la Tableau 3.1 (avec six termes).

Tableau 3.1. Les résultats et les erreurs absolues correspondantes exemple 1
[105]

x	Exact solution	HPM	$e(\varphi_6)$
0	0	0	0
0.0312	0.03120	0.03120	0
0.0625	0.06254	0.06254	0
0.0938	0.09394	0.09394	0
0.1250	0.12533	0.12533	0
0.1562	0.15684	0.15684	0
0.1875	0.18861	0.18861	0
0.2188	0.22056	0.22056	0
0.2500	0.25264	0.25264	0
0.2812	0.28496	0.28496	0
0.3125	0.31769	0.31769	0
0.3438	0.35074	0.35073	1×10^{-5}
0.3750	0.38404	0.38403	1×10^{-5}
0.4062	0.41775	0.41774	1×10^{-5}
0.4375	0.45201	0.45199	2×10^{-5}
0.4688	0.48676	0.48673	3×10^{-5}
0.5000	0.52193	0.52188	5×10^{-5}
0.5312	0.55768	0.55760	8×10^{-5}
0.5625	0.59417	0.59405	1.2×10^{-4}
0.5938	0.63134	0.63118	1.6×10^{-4}
0.6250	0.66914	0.66890	2.4×10^{-4}
0.6562	0.70774	0.70740	3.4×10^{-4}
0.6875	0.74732	0.74685	4.7×10^{-4}
0.7188	0.78784	0.78720	6.4×10^{-4}
0.7500	0.82924	0.82838	8.6×10^{-4}
0.7812	0.87172	0.87058	1.14×10^{-3}
0.8125	0.91552	0.91401	1.51×10^{-3}
0.8438	0.96059	0.95861	1.98×10^{-3}
0.8750	1.00689	1.00433	2.56×10^{-3}
0.9062	1.05466	1.05138	3.28×10^{-3}
0.9375	1.10419	1.10002	4.17×10^{-3}
0.9688	1.15547	1.15020	5.27×10^{-3}
1.0000	1.20846	1.20185	6.61×10^{-3}

L'homotopie peut être aisément construit comme suit [105] :

$$H(v, p) = v'(x) - g(x)$$

$$- \int_0^x \left[(1-p)\sqrt{2}\tan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}t\right) \left(1 + \tan^2\left(\frac{\sqrt{2}}{2}t\right)\right) + pv(t)v'(t) \right] dt = 0.$$

(3.22)

En substituant (3.8) dans (3.23) et égalisant les termes avec les pouvoirs identiques de p , nous avons :

$$\begin{aligned}
 p^0: v_0'(x) &= g(x) + \int_0^x \sqrt{2} \tan\left(\frac{\sqrt{2}}{2} t\right) \left(1 + \tan^2\left(\frac{\sqrt{2}}{2} t\right)\right) dt = 1 + \tan^2\left(\frac{\sqrt{2}}{2} x\right) \\
 &\Rightarrow v_0(x) = \sqrt{2} \tan\left(\frac{\sqrt{2}}{2} x\right).
 \end{aligned}
 \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}
 p^1: v_1'(x) &= \int_0^x \left[-\sqrt{2} \tan\left(\frac{\sqrt{2}}{2} t\right) \left(1 + \tan^2\left(\frac{\sqrt{2}}{2} t\right)\right) + v_0(t) v_0'(t) \right] dt = 0. \Rightarrow v_1(x) \\
 &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

$$p^2: v_2'(x) = \int_0^x (v_0(t) v_1'(t) + v_1(t) v_0'(t)) dt = 0 \Rightarrow v_2(x) = 0.
 \tag{3.25}$$

$$p^3: v_3'(x) = \int_0^x (v_0(t) v_2'(t) + v_1(t) v_1'(t) + v_2(t) v_0'(t)) dt = 0 \Rightarrow v_3(x) = 0.
 \tag{3.26}$$

Nous répétons même travail comme le cas précédent nous avons :

$$v_4 = v_5(x) = \dots = 0.
 \tag{3.27}$$

Donc :

$$u(x) = \sqrt{2} \tan\left(\frac{\sqrt{2}}{2} x\right).
 \tag{3.28}$$

2.3.2.2. Equation dynamique de gaz

L'équation classique de dynamique de gaz est donnée par :

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{u^2(x, t)}{2} \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) - u(x, t) - u(x, t)(1 - u(x, t)) = 0. \quad (3.29)$$

Où :

$u(x, t)$: Degré de température

t : Temps d'au zéro absolu, secondes,

x : Distance de zéro à 1,

Considérez l'équation (3.30), et supposez que la condition initiale comme suivent et supposez que nous avons aucun état de frontière.

$$u(x, 0) = g(x). \quad (3.30)$$

Où $g(x)$ est la condition initiale de l'équation de gaz.

La solution exacte par la méthode de décomposition d'Adomian [99] a été exprimée comme suit :

$$\begin{aligned} v(x, t) = & a(1 - e^{-x}) + at(1 - e^{-x}) - a^2t(1 - e^{-x})^2 - a^2t(e^{-x} - e^{-2x}) \\ & + \frac{a^2t^2}{2}(1 - e^{-x}) + \frac{a^2t^2}{2}(1 + e^{-x} - e^{-2x} + ae^{-2x}) + \dots \end{aligned} \quad (3.31)$$

Pour résoudre l'équation (3.29) au moyen de la méthode de perturbation homotopique, nous considérons le processus suivant après la séparation des parties linéaires et non-linéaires de l'équation.

L'homotopie peut être construit comme suit [106] :

$$\begin{aligned}
H(u, p) = (1 - p) \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right) \\
+ p \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{u^2(x, t)}{2} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - u(x, t)(1 - u(x, t)) \right).
\end{aligned}
\tag{3.32}$$

Substitution $u = u_0 + pu_1 + \dots$ dans l'équation (3.32) et réarrangement de l'équation résultante basé sur les puissances de termes p , on a :

$$p^0: \frac{\partial}{\partial t} u_0(x, t) = 0.
\tag{3.33}$$

$$p^1: \frac{1}{2} u_0^2(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u_0(x, t) + u_0^2(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} u_1(x, t) - u_0(x, t) = 0.
\tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
p^2: 2u_0(x, t)u_1(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} u_2(x, t) + \frac{1}{2} u_0^2(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u_1(x, t) - u_1(x, t) \\
+ u_0(x, t)u_1(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u_0(x, t) = 0.
\end{aligned}
\tag{3.35}$$

Avec les conditions initiales suivantes:

$$\begin{aligned}
u_0(x, 0) = g(x) = a(1 - e^{-x}), \\
u_i(0, t) = 0, \quad i = 1, 2, \dots
\end{aligned}
\tag{3.36}$$

$u(x, t)$ peut être écrit comme suit en résolvant les équations (3.33), (3.34) et (3.35) :

$$u_0(x, t) = a(1 - e^{-x})
\tag{3.37}$$

$$u_1(x, t) = -\frac{a}{2} (a^2 e^{-2x} - 2a^2 e^{-3x} + 2a - 4ae^{-x} + 2ae^{-2x} - 2 + 2e^{-x})t.
\tag{3.38}$$

$$\begin{aligned}
u_2(x, t) = & -\frac{at^2}{8}(-8a^2 + 12a + 32e^{-x} + a^4e^{-x} + 4e^{-x} - 24ae^{-x} - 8a^4e^{-2x} \\
& - 40a^2e^{-2x} + 12a^3e^{-4x} + 16a^2e^{-3x} + 12ae^{-2x} + 18a^4e^{-3x} \\
& - 16a^4e^{-4x} + 5a^4e^{-5x} - 4 - 12a^3e^{-x} + 36a^3e^{-3x}).
\end{aligned}
\tag{3.39}$$

De la même manière, nous obtenons le reste de composants.

Selon la méthode de perturbation homotopique, nous pouvons conclure que :

$$\lim_{p \rightarrow 1} u(x, t) = u_0(x, t) + u_1(x, t) + u_2(x, t) + \dots
\tag{3.40}$$

Par conséquent, substituant les valeurs des $u_0(x, t)$, $u_1(x, t)$ et $u_2(x, t)$ des équations (3.38), (3.39) et (3.40) dans l'équation (3.41). Rendement :

$$\begin{aligned}
u(x, t) = & a(1 - e^{-x}) - \frac{a}{2}(a^2e^{-x} - 2a^2e^{-2x} + a^2e^{-3x} + 2a - 4ae^{-x} - 2 + 2e^{-x})t \\
& - \frac{at^2}{8}(-8a^2 + 12a + 32a^2e^{-x} + a^4e^{-x} + 4e^{-x} - 24ae^{-x} - 8a^4e^{-2x} \\
& - 40a^2e^{-2x} + 12a^3e^{-4x} + 16a^2e^{-3x} + 12ae^{-2x} + 18a^4e^{-3x} \\
& + 12ae^{-2x} + 18a^4e^{-3x} - 16a^4e^{-4x} + 5a^4e^{-5x} - 4 - 12a^3e^{-x} \\
& + 36a^3e^{-3x}).
\end{aligned}
\tag{3.41}$$

3.3.Méthode de décomposition d'Adomian

La méthode décompositionnelle d'Adomian permet de résoudre des problèmes fonctionnels de différents types: équations algébriques, différentielles, intégrales, intégréo-différentielles, aux dérivées partielles (EDP).

3.3.1. Introduction

Cette méthode est d'abord proposée par le mathématicien américain, George Adomian avec les buts de résoudre le problème physique de frontière [107], la méthode de décomposition d'Adomian a été appliquée avec succès pour résoudre beaucoup types

d'équations fonctionnelles linéaires et non-linéaires. Par exemple F. Olga et Al-[108] a utilisé la méthode de décomposition d'Adomain pour donner des solutions approximatives pour des problèmes de valeur initiaux singuliers, A. H. H. Oda et Al-[109] a résolu les systèmes non-linéaires d'équations différentielles partielles A. M. Wazwaz [110] a appliqué la méthode de décomposition d'Adomian pour résoudre des équations de Schrodinger non-linéaires récemment, la méthode de décomposition d'Adomian a été appliqué pour la solution des problèmes de contrôle optimale linéaire et non linéaires par A. Forkharian et Al-[111], la comparaison de la méthode de décomposition d'Adomian avec d'autre méthode dans [112,113].

3.3.2. Idée de base de la méthode d'Adomian

La méthode s'adapte aussi bien aux problèmes linéaires qu'aux problèmes non linéaires. Il suffit qu'on puisse écrire l'équation sous la forme canonique. Qui est appelée forme canonique d'Adomian.

Le principe de la méthode est le suivant: considérons l'équation fonctionnelle (sous la forme canonique) [114] :

$$u - Nu = f. \quad (3.42)$$

Où N est un opérateur différentiel non linéaire et f une fonction connue.

La méthode d'Adomian consiste à rechercher la solution sous forme d'une série:

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n. \quad (3.43)$$

Et à décomposer le terme non linéaire Nu sous forme d'une série:

$$Nu = \sum_{n=0}^{\infty} u_n. \quad (3.44)$$

Les termes A_n sont appelés polynômes d'Adomian et sont obtenus grâce à la relation suivante

$$A_n = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d\lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right] \right]_{\lambda=0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.45)$$

Où λ est un paramètre réel introduit par convenance. En remplaçant les relations (3.44) et (3.45) dans (3.43), on obtient :

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n = f + \sum_{n=0}^{\infty} A_n. \quad (3.46)$$

Ce qui entraîne par identification :

$$\begin{cases} u_0 = f(t) \\ u_1 = A_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{n+1} = A_{n+1} \end{cases} \quad (3.47)$$

Il est à noter que cette identification n'est pas unique mais c'est la seule qui permet de définir explicitement les u_n . La relation (3.47) permet de calculer tous les termes de la série sans ambiguïté car les A_n ne dépendent que de u_0, u_1, \dots, u_n .

En pratique, il est presque toujours impossible de calculer la somme de la série $\sum_{n=0}^{\infty} u_n$, (sauf cas très particulier). Aussi se contente-t-on généralement d'une solution approchée φ_n sous la forme de série tronquée :

$$\varphi_n = \sum_{i=0}^{n-1} u_i. \quad (3.48)$$

En résumé, après la détermination des $(A_n)_{n \geq 0}$ une sommation donne la solution approchée de l'équation. Cependant la question qu'on peut d'ores et déjà se poser, c'est comment déterminer les $(A_n)_{n \geq 0}$ et à quelles conditions converge la méthode.

3.2.2.1. Polynômes d'Adomian

Les polynômes d'Adomian sont définis par la formule [114]:

$$\begin{cases} A_0(u_0) = N(u_0) \\ A_n(u_0, u_1, \dots, u_n) = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d\lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right] \right]_{\lambda=0} \end{cases} . \quad (3.49)$$

La formule proposée par G. Adomian pour le calcul des polynômes d'Adomian $(A_n)_{n \geq 0}$ est la suivante:

$$A_0(u_0) = N(u_0), \quad (3.50)$$

$$A_1(u_0, u_1) = u_1 \frac{\partial}{\partial u} N(u_0), \quad (3.51)$$

$$A_2(u_0, u_1, u_2) = u_2 \frac{\partial}{\partial u} N(u_0) + \frac{1}{2!} u_1^2 \frac{\partial^2}{\partial u^2} N(u_0), \quad (3.52)$$

$$A_2(u_0, u_1, u_2, u_3) = u_3 \frac{\partial}{\partial u} N(u_0) + \frac{1}{2!} u_1 u_2 \frac{\partial^2}{\partial u^2} N(u_0) + \frac{1}{3!} u_1^3 \frac{\partial^3}{\partial u^3} N(u_0). \quad (3.53)$$

Cette formule s'écrit sous la forme :

$$A_n = \sum_{v=0}^n c(v, n) N^{(v)}(u_0), n \geq 1. \quad (3.54)$$

Où $c(v, n)$ représente la somme de tous les produits (divisées par $m!$) des v termes u_i dont la somme des indices i est égales à n , m étant le nombre de répétitions des mêmes termes dans le produit. La relation (3.55) permet de trouver les polynômes A_n , mais en pratique, il est difficile de les déterminer quand n devient grand $n > 5$. Par la suite d'autres formules ont été proposées mais elles s'avèrent inefficaces en pratique vu leur complexité d'une part et l'absence de justification de l'écriture de ces formules d'autre part.

C'est dans les années 1994 que K. Abbaoui propose et démontre une formule récurrente pratique de calcul des A_n . La formule d'Abbaoui est déduite de la relation (3.49) donnée dans la définition des polynômes d'Adomian.

3.2.2.2. Méthode de décomposition d'Adomian pour l'équation de bilan de population

La méthode de décomposition d'Adomian [9-10] est basée sur la recherche d'une solution sous forme de série et sur la décomposition de l'opérateur non-linéaire en une série pour laquelle les termes sont calculés périodiquement en utilisant les polynômes d'Adomian. Cette technique a démontré beaucoup d'avantages par rapport aux techniques classiques [9]. Elle sera appliquée pour trouver la solution de l'équation intégral-différentielle de bilan de population remplissant les conditions aux limites appropriées au modèle spécifique. Considérons l'équation intégral-différentielle linéaire suivante :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau} (n^{feed}(v, t) - n(v, t)) + \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') dv' - \Gamma(v)n(v, t). \quad (3.55)$$

Posons :

$$L_t = \frac{\partial}{\partial t}.$$

Et :

$$L_v = \frac{\partial}{\partial v}.$$

Puis l'équation (3.55) s'écrit:

$$L_t n = \frac{1}{\tau} (n^{feed}(v, t) - n(v, t)) + \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') dv' - \Gamma(v)n(v, t). \quad (3.56)$$

En utilisant l'opérateur intégral $L_t^{-1} = \int_0^t (\cdot) dt$ l'équation ci-dessus prend la forme suivante:

$$L_t^{-1} L_t n = L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') dv' - \Gamma(v)n(v, t) \right) + L_t^{-1} \left(\frac{1}{\tau} (n^{feed}(v, t) - n(v, t)) \right). \quad (3.57)$$

La dernière équation est mise maintenant sous la forme standard appropriée à la méthode d'Adomian comme suit:

$$n = n(0) + L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') dv' - \Gamma(v)n(v, t) \right) + L_t^{-1} \left(\frac{1}{\tau} (n^{feed}(v, t) - n(v, t)) \right). \quad (3.58)$$

La technique de décomposition consiste à représenter la solution de l'équation (3.55) comme série :

$$n = \sum_{i=0}^{\infty} n_i. \quad (3.59)$$

Et en admettant que les noyaux de rupture des particules sont indépendants du temps, finalement nous obtenons pour la rupture des particules dans un système discontinu la série de forme suivante :

$$\sum_{i=0}^{\infty} n_i = n(0) + L_t^{-1} \left(\int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') \sum_{i=0}^{\infty} n_i dv' - \Gamma(v) \sum_{i=0}^{\infty} n_i \right). \quad (3.60)$$

Puisque n_0 est défini par la condition initiale, $n(0, v)$ nous pouvons maintenant écrire :

$$n_1 = L_t^{-1} \left(\int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n_0 dv' - \Gamma(v) n_0 \right). \quad (3.61)$$

$$n_2 = L_t^{-1} \left(\int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n_1 dv' - \Gamma(v) n_1 \right). \quad (3.62)$$

D' où l'ordre ci-dessus peut être généralisé comme suit :

$$n_{m+1} = L_t^{-1} \left(\int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n_m dv' - \Gamma(v) n_m \right). \quad (3.63)$$

Maintenant, avec les n_m déterminés, nous construisons la solution comme suit :

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \varphi_m = n. \quad (3.64)$$

$$\varphi_m = \sum_{i=0}^{m-1} n_i. \quad (3.65)$$

Notez que la preuve de convergence de cette technique a été formellement prouvée et justifiée dans [115-117].

Dans la section suivante nous vous proposons deux exemples pour l'application de la méthode d'Adomain sur l'équation de bilan de population.

3.3.3.Exemples

3.3.3.1. Rupture de particules dans des systèmes discontinus (Fonction de rupture parabolique)

Nous considérons l'équation suivante :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \frac{\partial [Gn(v, t)]}{\partial v} = \frac{1}{\theta} \left(n^{feed}(v, t) - n(v, t) \right) + \phi(v, t). \quad (3.66)$$

Là où le premier terme est le taux d'accumulation de particule de la taille v , le deuxième terme est le flux convecteur le long de la coordonnée interne de particules avec une vitesse de croissance G . Le premier terme du côté droit est taux de distributions des rétentions des particules entrantes et le deuxième terme est le taux net de génération de particules par l'agrégation et la rupture et est donné par :

$$\begin{aligned}
\varphi(v, t) = & -\Gamma(v)n(v, t) \\
& - \int_0^\infty \omega(v, v')n(v, t)n(v', t)dv' + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v', t)dv' \\
& + \frac{1}{2} \int_0^v \omega(v - v', v')n(v, t)n(v - v', t) + S(v).
\end{aligned}
\tag{3.67}$$

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

L'équation de bilan de population comme donné par les équations (3.66) et (3.67) pour la rupture de particule dans un système batch peut être écrit comme [118] :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = 2 \int_v^\infty n(v', t) F(v, v' - v)dv' - n(v, t) \int_0^v F(v, v' - v)dv'
\tag{3.68}$$

L'équation (3.68) a été étudiée par Ziff [118] pour le cas de rupture polymérique avec un taux général, qui est proportionnel au cube de la longueur et avec une distribution de particule fille parabolique.

Dans l'équation ci-dessus, $F(v, v')$ est le taux qu'une particule de taille v divise en particules de tailles v' et $v' - v$.

La condition initiale $n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b)$ l'équation (3.66) devient

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = 2 \int_v^\infty v(v, v' - v)n(v', t)dv' - \frac{v^3}{6}n(v, t)
\tag{3.69}$$

Si nous appliquons la méthode de décomposition d'Adomain, nous trouvons la solution d'équation (3.69), comme suit :

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b),
\tag{3.70}$$

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{6}tv^3\delta(v-b) + 2(btv - tv^2)\varphi(b-v), \quad (3.71)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{72}t^2v^6\delta(v-b) - \frac{1}{6}(b^3t^2v^2 - bt^2v^4)\varphi(b-v), \quad (3.72)$$

$$n_3(v, t) = \frac{1}{1296}t^3v^9\delta(v-b) + \frac{1}{180}(b^6t^3v^2 - bt^3v^7)\varphi(b-v). \quad (3.73)$$

De même façon nous pouvons calculer $n_4(v, t), n_5(v, t), \dots, n_m(v, t)$. En général

$n_m(v, t)$ est la solution de :

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty 2v(v'-v)n_m(v', t)dv' - \frac{v^3}{6}n_m(v, t) \right) dt. \quad (3.74)$$

Par conséquent nous calculons le terme général comme :

$$n_m(v, t) = \frac{2^{2-m}3^{1-m}b(-tv^3)^m\varphi(b-v)}{(-4+3m)v^2\gamma(m)}. \quad (3.75)$$

Puis :

$$\begin{aligned}
n(v, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) \\
&= e^{\frac{tv^3}{6}} \delta(v - b) + 4v^2 b \left(\frac{t}{6}\right)^{\frac{4}{3}} \\
&\quad \times \left(\gamma\left(-\frac{1}{3}, \frac{tv^3}{6}\right) - \gamma\left(-\frac{1}{3}, \frac{tb^3}{6}\right) \text{unitstep}(b - v) \right).
\end{aligned}
\tag{3.76}$$

Qui converge à la solution exacte [88].

3.3.3.2. Résolution de l'équation de bilan de population pour la rupture par la méthode d'Adomian [114]

Considérons le problème suivant :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t).
\tag{3.77}$$

L'équation (3.77) c'est une équation de bilan de population pour la rupture dans le cas de processus discontinu avec la distribution uniforme des particules filles et supposons la condition initiale $n_0(v, t) = ve^{-v}$.

Intégrons l'équation (3.56) par rapport à t , nous obtenons

$$n(v, t) = n(v, 0) - \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \right) dt.
\tag{3.78}$$

Supposons que la solution de l'équation (3.78) donnée par la méthode de décomposition d'Adomian est:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t). \quad (3.79)$$

Avec les termes de la série sont déterminés par l'algorithme récursif d'Adomian

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = ve^{-v}, \quad (3.80)$$

$$\begin{aligned} n_1(v, t) &= \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' - \Gamma(v) n_0(v, t) \right) dt \\ &= te^{-v}(2 + 2v - v^2). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Et de la même manière nous calculons les termes $n_2(v, t)$, $n_3(v, t)$, ... , $n_m(v, t)$.

$$n_2(v, t) = e^{-v}t^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{11}{4}v - \frac{1}{4}v^2 + \frac{5}{8}v^3 - 120v^4 + v^5 \right), \quad (3.82)$$

$$n_3(v, t) = e^{-v}t^3 \left(-\frac{5}{3} + \frac{1}{3}v + \frac{203}{84}v^2 + \frac{49}{168}v^3 + \frac{1}{4}v^4 + \frac{7}{168}v^5 - \frac{1}{480}v^6 + v^7 \right), \quad (3.83)$$

En général $n_m(v, t)$ est la solution :

$$n_m(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n_{m-1}(v', t) dv' - \Gamma(v) n_{m-1}(v, t) \right) dt. \quad (3.84)$$

Enfin nous calculons le terme général $n_m(v, t)$ comme suit :

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^m}{m!} t^{m-1} e^{-v} v^m (1 + t)(-m - mt + 2t^2) \quad (3.85)$$

D'où la solution finale est :

$$\begin{aligned}
 n(v, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) \\
 &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^m}{m!} t^{m-1} v^m (-m - mt + 2t^2) \right) e^{-v} \\
 &= e^{-(1+t)v} (1+t)(2t + v + tv).
 \end{aligned}$$

(3.86)

Qui converge à la solution exacte (voir [114])



CHAPITRE IV

CHAPITRE IV

RESULTATS NUMERIQUE

4.1.Introduction

Bien que la méthode de décomposition Adomian et la méthode de perturbation homotopique pour la solution de la rupture des particules dans des procédés discontinus et continus sont appliqués dans ce travail, ils sont généralement applicables pour tout ensemble de fonctions. Cependant, il est souhaitable de bien vérifier nos résultats en démontrant l'efficacité de ces deux méthodes semi-analytiques proposées.

4.2. Rupture de particules dans des systèmes discontinus

Dans tous les cas d'étude suivante les équations de bilan de population sont testées en comparant les résultats de la méthode de décomposition d'Adomian avec des résultats obtenus par la méthode de perturbation homotopique.

4.2.1. Rupture avec une distribution uniforme des particules fille et $\Gamma(v) = v$

4.2.1.1. Implementation de la méthode d'Adomian

Dans cette section nous voulons décrire comment utiliser la méthode de décomposition d'Adomian pour l'équation de rupture. Maintenant, nous considérons le problème de valeur initiale pour le système discontinu.

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = n(v, t) = \int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v) n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t). \quad (4.1)$$

La condition initiale est la fonction delta de Dirac.

Dans ce qui suit, nous résolvons ce problème par la méthode de décomposition d'Adomian.

D'abord, intégrant l'équation (4.1) par rapport à t nous avons :

$$n(v, 0) + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \right) dt. \quad (4.2)$$

Nous ne supposons que la solution de l'équation. (4.1) a la forme de la série de décomposition d'Adomian

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t). \quad (4.3)$$

Où les composants de la solution $n_m(v, t)$ sont déterminés par le schéma de récursion d'Adomian suivant :

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b). \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned}
n_1(v, t) &= \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' - \Gamma(v) n_0(v, t) \right) dt \\
&= t(-v\delta(v-b) + 2\theta(b-v)).
\end{aligned} \tag{4.5}$$

De même, nous pouvons calculer :

$$n_2(v, t), n_3(v, t), \dots, n_m(v, t) \tag{4.6}$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 (-v^2 \delta(v-b) + 2(b-3v)\theta(b-v)); \tag{4.7}$$

$$n_3(v, t) = \frac{1}{6} t^3 v (-v^2 \delta(v-b) + 6(b-2v)\theta(b-v)); \tag{4.8}$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{24} t^4 v^2 (-v^2 \delta(v-b) + 4(3b-5v)\theta(b-v)). \tag{4.9}$$

Et en général, $n_m(v, t)$ est la solution de :

$$n_m(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n_{m-1}(v', t) dv' - \Gamma(v) n_{m-1}(v, t) \right) dt. \tag{4.10}$$

Enfin nous calculons le terme général comme suit :

$$\begin{aligned}
n_m(v, t) = & \frac{(-1)^{m+1}}{(m+1)!} t^{m+1} v^{m-1} (v^2 \delta(v-b)) \\
& + (bm + bm^2 - 2v - 3mv - m^2 v) \theta(b-v) \\
& + t(-v\delta(v-b) + 2\theta(b-v)) + \delta(v-b).
\end{aligned}
\tag{4.11}$$

Donc :

$$n(v, t) = \sum_{m=1}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv} \left(\delta(v-b) + \theta(b-v)(2t + t^2(b-v)) \right).
\tag{4.12}$$

4.2.1.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique

Afin de résoudre l'équation (4.1) par la méthode de perturbation homotopique, nous devons construire l'homotopie suivante :

$$\begin{aligned}
hp_1 = (1-p) & \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \frac{\partial n_0(v, t)}{\partial t} \right) \\
& + p \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \right).
\end{aligned}
\tag{4.13}$$

Nous pouvons supposer que la solution de l'équation (4.13) peut être écrite comme une série entière en p , comme suit :

$$n(v, t) = n_0(v, t) + pn_1(v, t) + p^2 n_2(v, t) + p^3 n_3(v, t).
\tag{4.14}$$

Selon la fonction delta de Dirac, l'approximation initiale est :

$$n_0(v, t) = \delta(v-b).
\tag{4.15}$$

Substituons les équations (4.14) et (4.15) dans l'équation (4.13) et après un réarrangement basé sur les puissances des p -termes, nous aurons :

$$\frac{\partial n_1(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v') n_0(v', t)dv' - \Gamma(v)n_0(v, t); \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial n_2(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v') n_1(v', t)dv' - \Gamma(v)n_1(v, t); \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial n_3(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v') n_2(v', t)dv' - \Gamma(v)n_2(v, t). \quad (4.18)$$

La résolution des équations (4.16) - (4.18), nous donne :

$$n_1(v, t) = t(-v\delta(v - b) + 2\theta(b - v)); \quad (4.19)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2}t^2(-v^2\delta(v - b) + 2(b - 3v)\theta(b - v)); \quad (4.20)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{6}t^3v(v^2\delta(v - b) + 6(b - 2v)\theta(b - v)). \quad (4.21)$$

Et ainsi de suite. De cette manière, le reste des termes peut être obtenu. Selon la méthode de perturbation homotopique, nous pouvons noter :

$$n(x, t) = \sum_m n_m(x, t), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

Et puis :

$$\begin{aligned} n_m(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{(m+1)!} t^{m+1} v^{m-1} (v^2 \delta(v-b)) \\ + (bm + bm^2 - 2v - 3mv - m^2v) \theta(b-v) \\ + t(-v\delta(v-b) + 2\theta(b-v)) + \delta(v-b). \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$n_m(x, t) = e^{-tv} \left(\delta(v-b) + \theta(b-v)(2t + t^2(b-v)) \right). \quad (4.24)$$

On peut voir que si l'itération converge pour les deux méthodes elle converge vers la solution exacte comme rapporté dans [119].

La figure 1 montre la densité en nombre à l'état stationnaire prédite par des séries de solutions par la méthode d'Adomain et la méthode de perturbation homotopique, qui sont identiques à la solution exacte reportée dans [119].

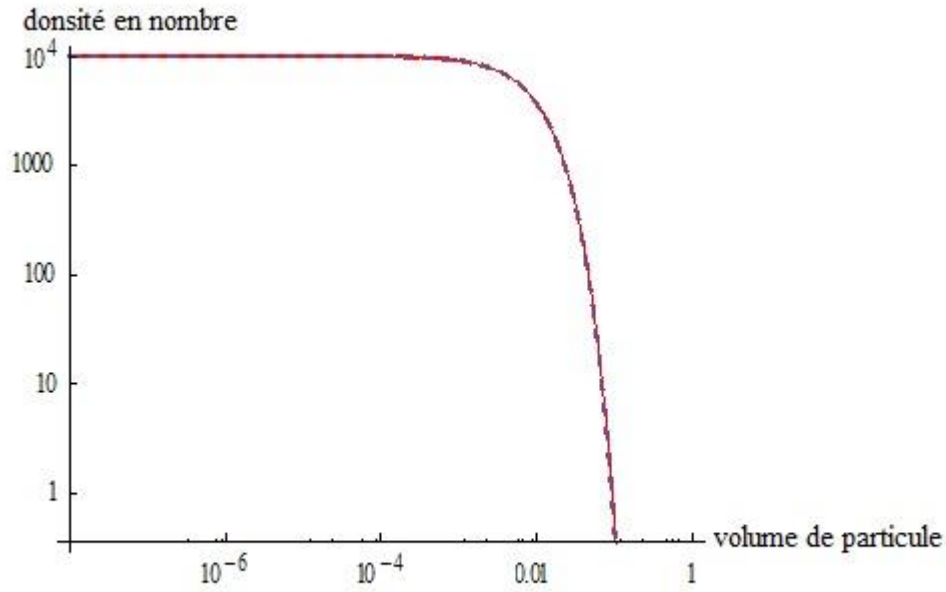


Figure 4.1. Rupture de particule dans un système batch avec une distribution de particule fille uniforme, Dirac fonctionne comme une condition initiale et $\Gamma(v) = v$ en comparaison de la solution analytique [119]. La ligne solide est la solution par la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique et la ligne pointillée est la solution exacte

4.2.2. Rupture avec une distribution uniforme de particules fille et $\Gamma(v) = v^2$

Dans ce cas, le taux de rupture de particules est proportionnel à son volume. Les juste premiers termes sont calculés avec le même algorithme, qui a été utilisé dans le premier cas.

4.2.2.1. Implémentation de la méthode d'Adomian

La condition initiale est :

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b); \quad (4.25)$$

$$n_1(v, t) = t(-v^2\delta(v - b) + 2b\theta(b - v)); \quad (4.26)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 v^2 (v^2 \delta(v - b) - 4b\theta(b - v));$$
(4.27)

$$n_3(v, t) = \frac{1}{6} t^3 v^4 (v^2 \delta(v - b) - 6b\theta(b - v));$$
(4.28)

$$n_4(v, t) = \frac{1}{24} t^4 v^6 (v^2 \delta(v - b) - 8b\theta(b - v));$$
(4.29)

Le terme général est:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv^2} (\delta(v - b) + 2bt\theta(b - v)).$$
(4.30)

Maintenant, la solution générale peut être écrite comme suit :

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv^2} (\delta(v - b) + 2bt\theta(b - v)).$$
(4.31)

4.2.2.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique

Nous utilisons la même condition initiale (équation (4.25)), et la méthode de perturbation homotopique donne les termes suivants:

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - v_f);$$
(4.32)

$$n_1(v, t) = t(-v^2 \delta(v - b) + 2b\theta(b - v));$$
(4.33)

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 v^2 (v^2 \delta(v - b) - 4b\theta(b - v));$$
(4.34)

$$n_3(v, t) = \frac{1}{6} t^3 v^4 (v^2 \delta(v - b) - 6b\theta(b - v));$$
(4.35)

$$n_4(v, t) = \frac{1}{24} t^4 v^6 (v^2 \delta(v - b) - 8b\theta(b - v));$$
(4.36)

La solution générale peut être écrite maintenant en forme finale, qui est essentiellement la même comme celle obtenue par la méthode de décomposition d'Adomain :

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv^2} (\delta(v - b) + 2bt\theta(b - v)).$$
(4.37)

La figure suivante montre la fonction de densité en nombre à l'état stationnaire prédite par des séries solutions par la méthode de composition d'Adomain et la méthode de perturbation homotopique, qui sont identiques aux solutions exactes.

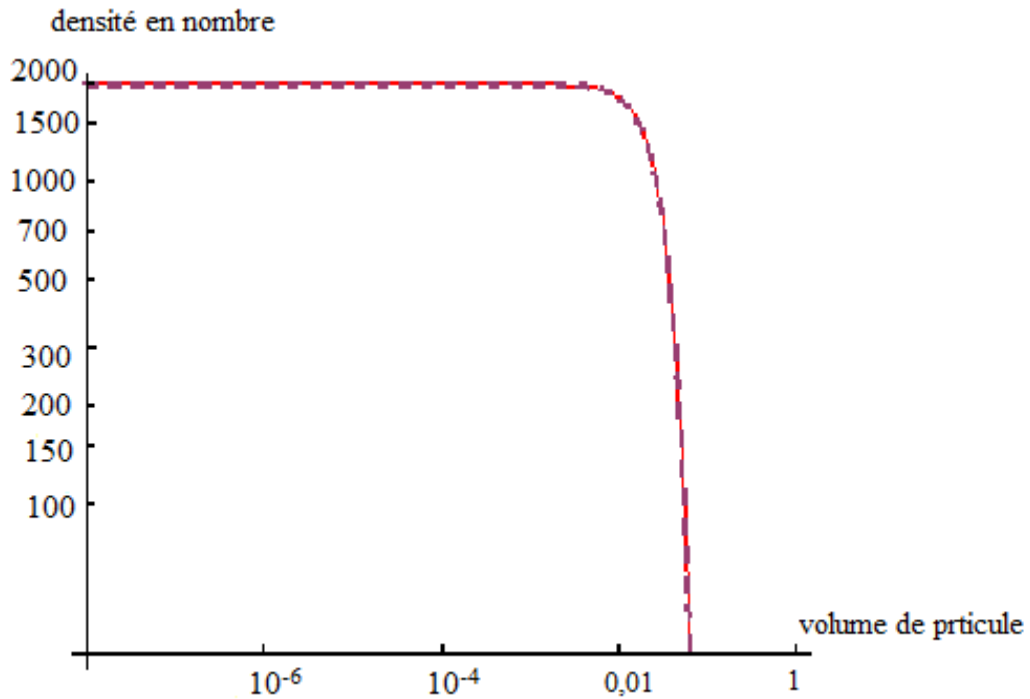


Figure 4.2. La rupture de particule dans un système batch avec une distribution de particule de fille uniforme, une fonction de Dirac comme une condition initiale et en comparaison de la solution analytique [119]. La ligne continue est la solution par la méthode d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique et la ligne pointillée est la solution exacte

4.2.3. Problèmes de rupture physiquement appropriés

Le but principal de ce cas est de comparer la solution donnée par la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique à un problème physiquement approprié où la solution analytique n'est pas disponible dans la littérature. Dans ce cas, la distribution sous forme exponentiels $n(v) = ve^{-v}$ est utilisée comme condition initiale et la distribution de particules fille est comme donnée par [120]. Nous avons ajouté un aspect différent tels que $\beta(v/v')$ n'est plus indépendante du volume de particules fille et est donnée par [120].

$$\beta(v/v') = \frac{pv^m(v', v)^{m+(m+1)(p-2)}(m + (m + 1)(p - 2))}{v^{pm+p-1}m!(m + (p - 1)(m - 2))!}.$$

(4.38)

Dans cette équation p contrôle le nombre de fragments par événement de rupture et m est responsable de la forme de la distribution fille.

Pour ($p = 2; m = 0$), l'équation (4.38) est réduite à une rupture binaire et uniforme, où les fréquences de rupture ont été utilisées. Tous les termes obtenus de la série par les deux méthodes sont simples et la déduction du terme générale comme une addition fermée donne une forme analytique fermée pour la solution pour ce cas particulier. Pour le cas où la solution analytique n'est pas disponible, la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique, fournissent une bonne interprétation. Les solutions numériques sont calculées en utilisant les paramètres $p = 2, m = 1$. Dans cet exemple, nous utilisons la troncation de la série jusqu'à l'ordre cinq pour confirmer la validité de l'équation. Cependant, il n'est pas facile de trouver le terme général de la série en raison de la complexité des termes polynômiaux. Le logiciel Mathematica a été utilisé pour établir le nombre maximum possible des termes.

Implémentation de ces méthodes a montré aux des résultats fiables et que seulement peu de termes sont nécessaires pour converger à la solution exacte, où ces termes devraient suivre les sommations données en (3.60) et (3.8), où, pour des problèmes concrets, une solution approximative d'un degré d'exactitude raisonnable peut être obtenue.

En outre, on le souligne que ces méthodes considérées n'ont pas besoin d'être limitées pour exiger des solutions; elles peuvent inclure les solutions approximatives qui sont trouvées très facilement à l'aide du code informatique écrit à l'aide de Mathematica.

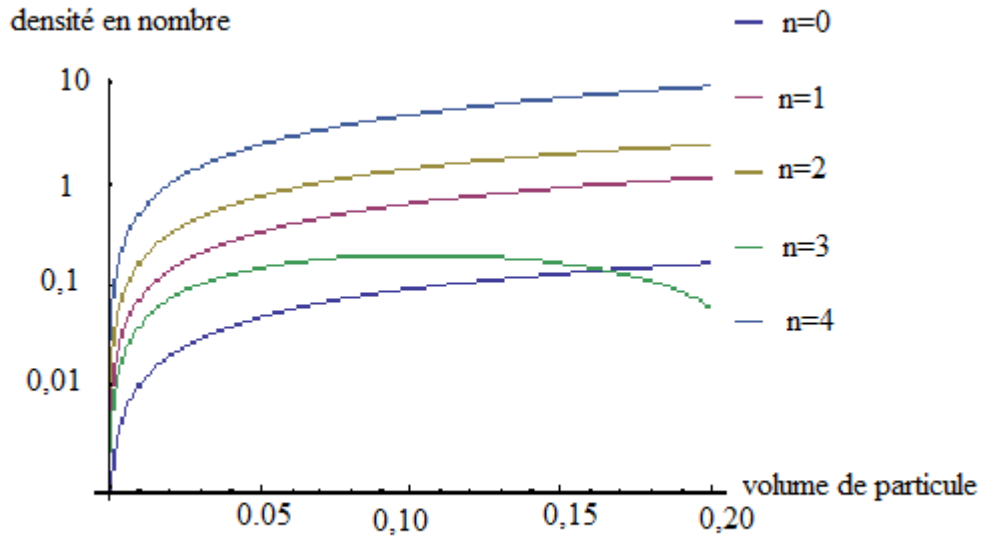


Figure 4.3. L'effet de troncature de série sur la fonction de densité en nombre pour la rupture de particule dans le système batch avec $\Gamma(v) = v$ et $b(v/v') = 12(v' - v)/v^3$ une condition initiale exponentielle

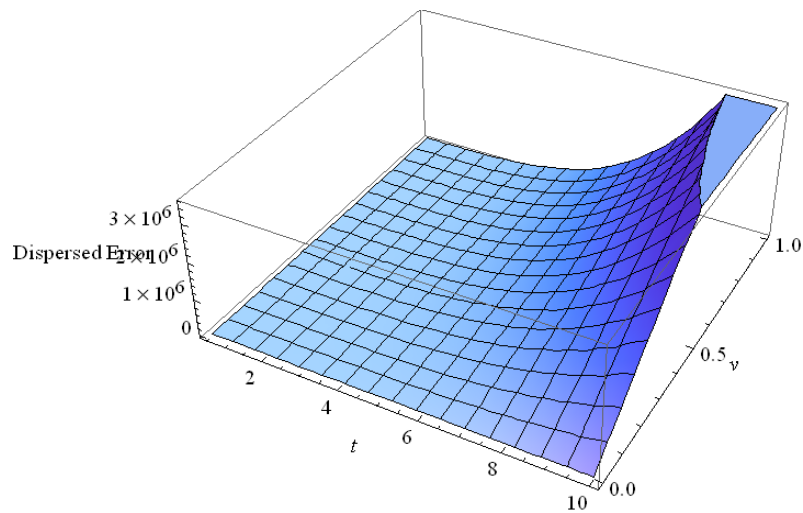


Figure 4.4. Erreur de troncature relative dispersée

$$\varepsilon(t, v) = |u_4 - u_3|$$

4.3. Rupture de particule dans les systèmes continus

Pour la solution de la rupture de particules dans les systèmes continus, le problème de trouver les solutions analytiques générales devient plus difficile. Cependant, nous présentons deux cas spécifiques dans ce travail selon la distribution de particules d'alimentation.

4.3.1. Distribution exponentielle de particules d'alimentation avec une fréquence de rupture linéaire

4.3.1.1. Implémentation de la méthode d'Adomian

Dans ce cas, la condition initiale est supposée égale à zéro, $\beta(v, v') = 2/v'$, $\Gamma(v') = v'$ et la distribution de l'alimentation est donnée par:

$$n^{feed}(v) = ve^{-v}. \quad (4.39)$$

Pour résoudre l'équation de bilan de population de particules nous récrivons l'équation (3.67) comme suit:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{n^{feed}(v)}{\tau} + \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right). \quad (4.40)$$

Dans ce cas les opérateurs sont définis par :

$$L = \frac{\partial}{\partial t}.$$

Et l'inverse :

$$L^{-1} = \int_0^t (.) dt.$$

L'application de l'opérateur inverse à (4.40) donne :

$$n(v, t) = \frac{n^{feed}(v)}{\tau} t + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right) \right) dt. \quad (4.41)$$

La solution par la méthode de décomposition d'Adomian est calculée par le schéma suivant la méthode d'Adomian:

$$n_0 = atve^{-v} \quad (4.42)$$

Avec :

$$a = \frac{1}{\tau}. \quad (4.43)$$

$$n_{m+1} = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n_m(v, t) (\Gamma(v) + a) \right) dt \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.44)$$

A partir de ce schéma nous calculons les termes de la solution périodiquement comme suit:

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2} ae^{-v} t^2 (-2 + (-2 + a)v + v^2). \quad (4.45)$$

$$n_2(v, t) = -\frac{1}{6} ae^{-v} t^3 (4 - 2v + a^2 v - 4v^2 + v^3 + 2a(-2 - 2v + v^2)). \quad (4.46)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24} ae^{-v} t^4 (a + v) (12 + a^2 v - 6v^2 + v^3 + 2a(-3 - 3v + v^2)). \quad (4.47)$$

$$n_4(v, t) = -\frac{1}{120}ae^{-v}t^5(a+v)^2(24+4v+a^2v-8v^2+v^3+2a(-4-4v+v^2)). \quad (4.48)$$

Maintenant le terme général peut être déduit comme suit :

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^m}{(m+1)!} \left(ae^{-v}t^{(m+1)}(a+v)^{m-2} \left(2(m-1)+2(m-1)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + (-2+a^2-(m-1)+(m-1)^2)v + (-2-2(m-1))v^2 + v^3 \right. \right. \\ \left. \left. + 2a(-m-mv+v^2) \right) \right). \quad (4.49)$$

Par combinaison de tous ces termes, la forme générale suivante est obtenue comme suit:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m+1)!} \left(ae^{-v}t^{(m+1)}(a+v)^{m-2} \left(2(m-1)+2(m-1)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + (-2+a^2-(m-1)+(m-1)^2)v + (-2-2(m-1))v^2 + v^3 \right. \right. \\ \left. \left. + 2a(-m-mv+v^2) \right) \right). \quad (4.50)$$

Par conséquent, la solution exacte est donnée par:

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{a(4+2a+4v+2av+a^2v+2av^2+2v^2+v^3)}{(a+v)^3} \right. \\ \left. + \frac{1}{(a+v)^3} \left(ae^{-t(a+v)}(-4-2a-4at-2a^2t-2a^2t^2-4v-2av \right. \right. \\ \left. \left. - a^2v-4tv-6atv-2a^2tv-4at^2v-a^2t^2v-2v^2-2av^2 \right. \right. \\ \left. \left. - 4atv^2-2t^2v^2-2at^2v^2-v^3-2tv^3-t^2v^3) \right) \right). \quad (4.51)$$

4.3.1.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique

$$\begin{aligned}
 hp = (1 - p) & \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \frac{\partial n_0(v, t)}{\partial t} \right) \\
 & + p \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - an^{feed}(v) - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' \right. \\
 & \left. - (\Gamma(v) + a)n(v, t) \right).
 \end{aligned}
 \tag{4.52}$$

Pour appliquer la méthode de perturbation homotopique, nous n'admettons que la solution de l'équation. (4.52) peut être écrite comme une série entière en p comme suit :

$$n(v, t) = n_0(v, t) + pn_1(v, t) + p^2n_2(v, t) + p^3n_3(v, t) + \dots
 \tag{4.53}$$

Selon l'équation (3.66) l'approximation initiale est:

$$n_0 = ate^{-v}.
 \tag{4.54}$$

La substitution des équations (4.53) et (4.54) dans l'équation (4.52) et leur réarrangement basé sur des puissances en p -termes, nous donne:

$$\frac{\partial n_1(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' + (\Gamma(v) + a)n_0(v, t) = 0.
 \tag{4.55}$$

$$\frac{\partial n_2(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_1(v', t) dv' + (\Gamma(v) + a)n_1(v, t) = 0.
 \tag{4.56}$$

$$\frac{\partial n_3(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n_2(v', t) dv' + (\Gamma(v) + a) n_2(v, t) = 0. \quad (4.57)$$

En résolvant les équations (4.55) – (4.57), nous obtenons :

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2} a e^{-v} t^2 (-2 + (-2 + a)v + v^2). \quad (4.58)$$

$$n_2(v, t) = -\frac{1}{6} a e^{-v} t^3 (4 - 2v + a^2 v + 4v^2 + v^3 + 2a(-2 - 2v + v^2)). \quad (4.59)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24} a e^{-v} t^4 (a + v) (12 + a^2 v - 6v^2 + v^3 + 2a(-3 + av + v^2)). \quad (4.60)$$

De cette manière, le reste des composants peut être obtenu comme la méthode de décomposition d'Adomain. La solution générale peut être obtenue par l'induction mathématique qui révélait être :

$$\begin{aligned} n(v, t) = e^{-v} & \left(\frac{a(4 + 2a + 4v + 2av + a^2 v + 2av^2 + 2v^2 + v^3)}{(a + v)^3} \right. \\ & + \frac{1}{(a + v)^3} \left(a e^{-t(a+v)} (-4 - 2a - 4at - 2a^2 t - 2a^2 t^2 - 4v - 2av \right. \\ & - a^2 v - 4tv - 6atv - 2a^2 tv - 4at^2 v - a^2 t^2 v - 2v^2 - 2av^2 \\ & \left. \left. - 4atv^2 - 2t^2 v^2 - 2at^2 v^2 - v^3 - 2tv^3 - t^2 v^3) \right) \right). \end{aligned} \quad (4.61)$$

On peut voir que si l'itération converge suivant les deux méthodes elle converge vers la même solution exacte.

La figure suivante montre la fonction de densité en nombre à l'état stationnaire prédite par les séries de solutions par la méthode de perturbation homotopique et la méthode d'Adomain, qui sont parfaitement identiques.

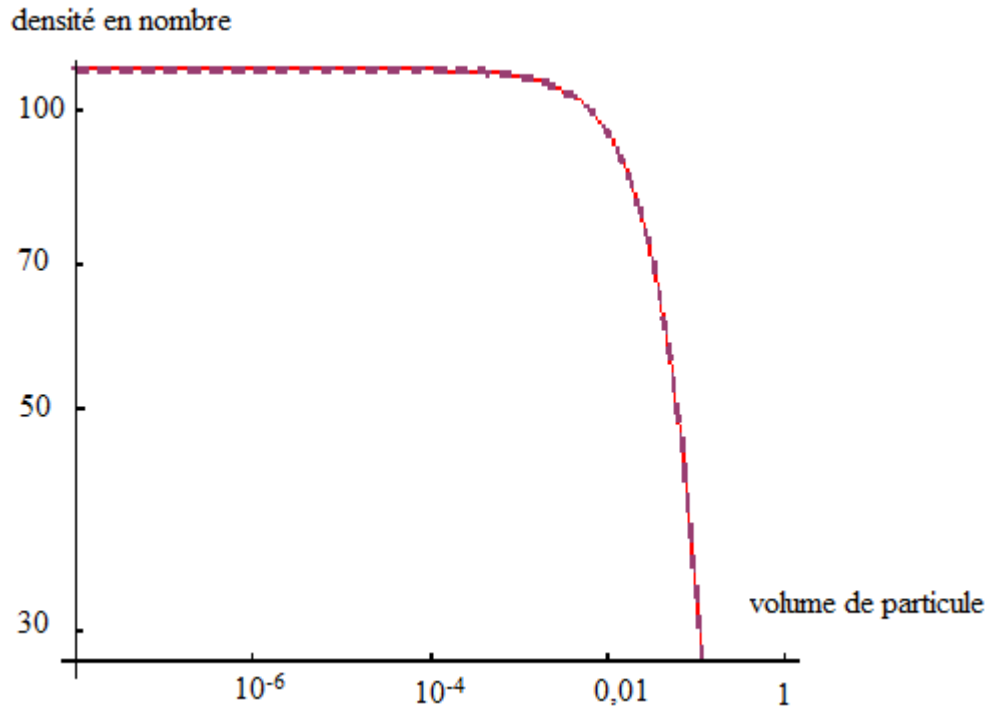


Figure 4.5. fonction densité en nombre pour la rupture de particule dans un système continu avec $\Gamma(v) = v$ et $\beta(v/v') = 1/v$, rupture binaire, $a = 5$, Et une distribution d'alimentation exponentielle. La ligne continue est la solution par la méthode de décomposition d'Adomain et la ligne pointillée est la solution par la méthode de perturbation homotopique

4.3.2. Distribution d'alimentation de particules exponentielle avec la fréquence de rupture quadratique

Dans ce cas, la condition initiale est supposée égale à zéro, la distribution d'alimentation est exponentielle comme dans le cas précédent et $\beta(v, v') = 2/v'$, $\Gamma(v') = v'^2$.

4.3.2.1. Implémentation de la méthode d'Adomian

Nous considérons le modèle suivant avec $n^{feed}(v) = ve^{-v}$

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = an^{feed}(v) + \int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t)(\Gamma(v) + a). \quad (4.62)$$

En appliquant la méthode d'Adomian, on obtient la forme générale suivante :

$$n(v, t) = an^{feed}(v)t + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t)(\Gamma(v) + a) \right) dt. \quad (4.63)$$

Par conséquent, le schéma de récursions d'Adomian est donné par:

$$n_0 = atve^{-v}. \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned} n_m(v, t) = & an^{feed}(v)t \\ & + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n_m(v', t) dv' - n_m(v, t)(\Gamma(v) + a) \right) dt, \\ & m = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4.65)$$

Les autres termes sont obtenus périodiquement comme suit:

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2}ae^{-v}t^2(-4 + (-4 + a)v - 2v^2 + v^3); \quad (4.66)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6}ae^{-v}t^3(a + v^2)(-8 + (-8 + a)v - 4v^2 + v^3); \quad (4.67)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24}ae^{-v}t^4(a + v^2)^2(-12 + (-12 + a)v - 6v^2 + v^3); \quad (4.68)$$

$$n_4(v, t) = -\frac{1}{120}ae^{-v}t^5(a+v^2)^3(-16 + (-16+a)v - 8v^2 + v^3). \quad (4.69)$$

Le terme général peut être déduit comme suit:

$$n_m(v, t) = (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} ae^{-v}(-4m + (-4m+a)v - 2mv^2 + v^3)(a+v^3)^{m-1}. \quad (4.70)$$

En se basant sur ce terme générale, la solution analytique exacte est donnée par :

$$\begin{aligned} n(v, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} ae^{-v}(-4m + (4m+a)v - 2mv^2 + v^3)(a+v^2)^{m-1}. \\ &= e^{-v} \left(\frac{a(4 + 4v + av + 2v^2 + v^3)}{(a+v^2)^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{ae^{-t(a+v^2)}(-4 - 4at - 4v - av - 4atv - 2v^2 - 4tv^2 - 2atv^2 - v^3 - 4tv^4)}{(a+v^2)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.71)$$

4.3.2.2. Implémentation de la méthode de perturbation homotopique

Nous commençons par le terme initial comme dans les cas précédents

$$n_0 = atve^{-v}. \quad (4.72)$$

La substitution des équations (4.53) et (4.72) dans l'équation (4.59) et réarrangement basé sur des puissances en p -termes, nous donne:

$$\frac{\partial n_1(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' - (\Gamma(v) + a)n_0(v, t) = 0. \quad (4.73)$$

$$\frac{\partial n_2(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_1(v', t) dv' - (\Gamma(v) + a)n_1(v, t) = 0. \quad (4.74)$$

$$\frac{\partial n_3(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_2(v', t) dv' - (\Gamma(v) + a)n_2(v, t) = 0. \quad (4.75)$$

En résolvant les équations (4.73) – (4.75), nous obtenons :

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2} a e^{-v} t^2 (-4 + (-4 + a)v - 2v^2 + v^3); \quad (4.76)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6} a e^{-v} t^3 (a + v^2) (-8 + (-8 + a)v - 4v^2 + v^3); \quad (4.77)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24} a e^{-v} t^4 (a + v^2)^2 (-12 + (-12 + a)v - 6v^2 + v^3); \quad (4.78)$$

$$n_4(v, t) = -\frac{1}{120} a e^{-v} t^5 (a + v^2)^3 (-16 + (-16 + a)v - 8v^2 + v^3). \quad (4.79)$$

De la même manière, le reste des termes peut être obtenu comme dans le cas de la méthode d'Adomian.

La solution analytique exacte peut être déduite comme dans les cas précédent comme suit :

$$\begin{aligned} n(v, t) &= e^{-v} \left(\frac{a(4 + 4v + av + 2v^2 + v^3)}{(a + v^2)^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{ae^{-t(a+v^2)}(-4 - 4at - 4v - av - 4atv - 2v^2 - 4tv^2 - 2atv^2 - v^3 - 4tv^4)}{(a + v^2)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.80)$$

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 la discrétisation numérique, qui ont détériorés la représentation des autres techniques sont complètement absents dans ces méthodes actuelles.

La figure 4.6 montre la fonction de densité en nombre à l'état stationnaire prédite par les séries de solutions par les méthodes : la méthode de décomposition d'Adomain et la méthode de perturbation homotopique, qui donnent les mêmes résultats.

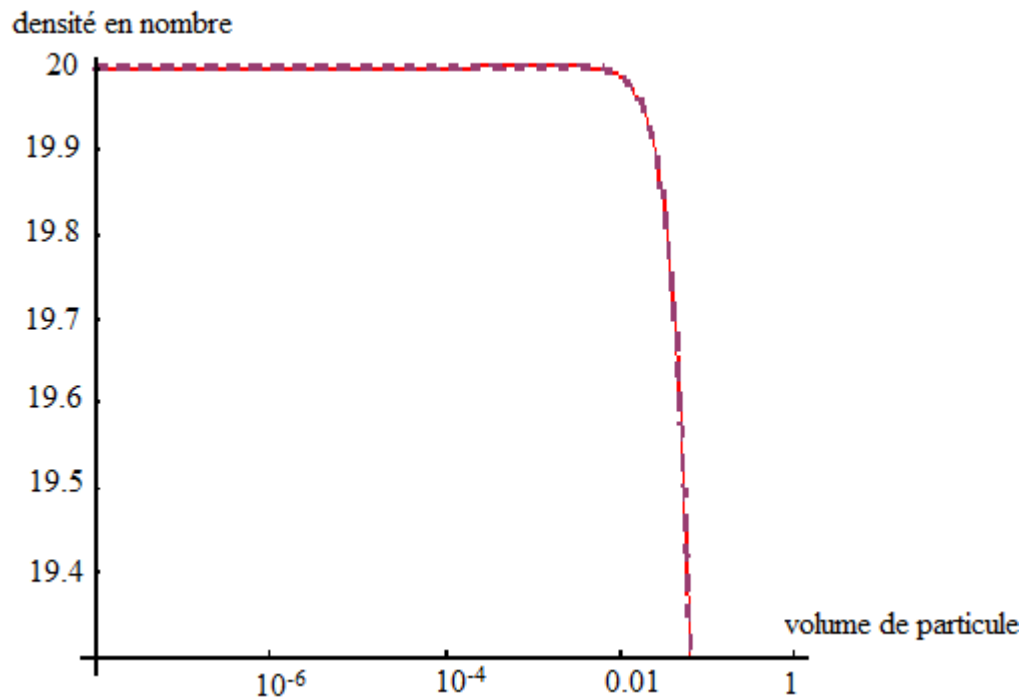


Figure 4.6. fonction densité en nombre pour la rupture de particule dans un système continu avec $\Gamma(v) = v^2$ et $\beta(v/v') = 1/v$, rupture binaire, $a = 5$, Et une distribution d'alimentation exponentielle. La ligne continue est la solution par la méthode de décomposition d'Adomain et la ligne pointillée est la solution par la méthode de perturbation homotopique



CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, les méthodes de décomposition d'Adomian et de perturbation homotopique ont été appliquées avec succès pour trouver les solutions exactes d'une forme spécifique de l'équation de bilan de population pour des systèmes de flux continus et discontinus pour la rupture de particules dans un réacteur agité. Ces solutions exactes sont comparées aux solutions analytiques disponibles et les uns avec les autres quand la solution analytique n'est pas disponible. Tous les exemples prouvent que les résultats de la méthode d'Adomian sont en accord total avec ceux de la méthode de perturbation homotopique.

La méthode de décomposition d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique ont beaucoup d'avantages une fois comparés aux solutions exactes et peuvent être présentés pour surmonter les difficultés surgissant dans les calculs des solutions précises à l'aide des méthodes classiques. L'avantage ici est que les calculs sont plus simples et plus directs. Après la littérature éditée, les résultats prouvent que la méthode de décomposition d'Adomian et la méthode de perturbation homotopique sont des outils mathématiques puissants pour résoudre des équations intégrales-différentielles -partielles, et, peuvent donc être largement appliqués en science et à des problèmes de l'ingénierie.



BIBLIOGRAPHIE

REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] D. Ramkrishna, The status of population balances, *Rev. Chem. Eng.* 3 49-95 1985.
- [2] M. Kostoglou, A. J. Karabelas, Evaluation of zero order methods for simulating particle coagulation, *J. Colloidal Interface Sci.* 613: 420-431, 1994.
- [3] S. Kumar, D. Ramkrishna, On the solution of population balance equations by discretization – I. A fixed pivot technique, *Chem. Eng. Sci.* 51(a):1311-1332, 1996.
- [4] S. Kumar, D. Ramkrishna, On the solution of population balance equations by discretization-II. A moving pivot technique, *Chem. Eng. Sci.* 51(b): 1333–1342, 1996.
- [5] S. Kumar, D. Ramkrishna, On the Solution of Population Balance Equations by Discretization-III. Nucleation, Growth and Aggregation of Particles, *Chem. Eng. Sci.* 52: 4659-4679, 1997.

[6] M. Attarakih, Integral formulation of the population balance equation: Application to particulate systems with particle growth. *Computers & Chemical Engineering*, 48: 1-13, 2013.

[7] F. P Santos, I.Senocak, J. L. Favero, P. L. C. Lage, Solution of the population balance equation using parallel adaptive cubature on GPUS. *Computers & Chemical Engineering*, 55: 61-70, 2013.

[8] A. Hasseine, A. Bellagoun, H.J. Bart, Analytical solution of the droplet breakup equation by the Adomian decomposition method, *Appl. Math. Comput.* 218: 2249–2258, 2011.

[9] G. Adomian, *Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method*, Kluwer Academic, Dordrecht, 1994.

[10] G. Adomian, R. Rach, On linear and nonlinear integro-differential equations, *J. Math. Anal. Appl.* 113: 199-201, 1986.

[11] A.M. Wazwaz, *Partial Differential Equations and Solitary Waves Theory*, Higher Education Press, Beijing, and Springer, Berlin, 2009.

[12] J.H. He, Homotopy perturbation technique, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 178: 257–262, 1999.

[13] J.H. He, A coupling method of homotopy technique and perturbation technique for nonlinear problems, *Int J. Non-Linear Mech.* 35(1): 37–43, 2000.

[14] M. El-Shahed, Application of He's homotopy perturbation method to Volterra's integro-differential equation, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.* 6 (2): 163–168, 2005.

[15] J.H. He, The homotopy perturbation method for nonlinear oscillators with discontinuities, *Appl. Math. Comput.* 151: 287–292, 2004.

[16] J.H. He, Homotopy perturbation method for bifurcation of nonlinear problems, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.* 6 (2): 207–208, 2005.

[17] J.H. He, Periodic solutions and bifurcations of delay-differential equations, *Phys. Lett. A* 374 (4–6) :228–230, 2005.

[18] J.H. He, Application of homotopy perturbation method to nonlinear wave equations, *Chaos Solitons Fractals* 26 (3): 695–700, 2005.

[19] J.H. He, Homotopy perturbation method for solving boundary value problems, *Phys. Lett. A* 350 (1–2): 87–88, 2006.

[20] Z. Odibat, S. Momani, Modified homotopy perturbation method: application to quadratic Riccati differential equation of fractional order, *Chaos Solitons Fractals*, 36: 167–174, 2008.

[21] J.H. He, Homotopy perturbation method: a new nonlinear analytic technique, *Appl. Math. Comput.* 135: 73–79, 2003.

[22] J.H. He, Comparison of homotopy perturbation method and homotopy analysis method, *Appl. Math. Comput.* 156: 527–539, 2004.

[23] M. Dehghan, F. Shakeri, The use of the decomposition procedure of Adomian for solving a delay differential equation arising in electrodynamics, *Phys. Scr.* 78: 1–11, 2008.

[24] M. Dehghan, R. Salehi, The use of variational iteration method and Adomian decomposition method to solve the Eikonal equation and its application in the reconstruction problem, *Int. J. Numer. Methods Biomedical. Eng.* 27: 524-540, 2011.

[25] M. Dehghan, J. M. Heris, A. Saadatmandi, Application of semi-analytic methods for the Fitzhugh-Nagumo equation, which models the transmission of nerve impulses, *Math. Methods Appl. Sci.* 33 :1384–1398, 2010.

[26] M. Dehghan, M. Shakourifar, A. Hamidi, The solution of linear and nonlinear systems of Volterra functional equations using Adomian-Pade technique, *Chaos Solitons Fractals*, 39 :2509–2521, 2009.

[27] M. Dehghan, A. Hamidi, M. Shakourifar, The solution of coupled Burgers equations using Adomian-Pade technique, *Appl. Math. Comput.* 189: 1034–1047, 2007.

[28] M. Dehghan, R. Salehi, Solution of a nonlinear time-delay model in biology via semi-analytical approaches, *Comput. Phys. Commun.* 181: 1255–1265, 2010.

[29] A. Siddiqui, R. Mahmood, Q. Ghori, Thin film flow of a third grade fluid on moving a belt by He's homotopy perturbation method, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.* 7 (1): 7–14, 2006.

[30] A. Siddiqui, M. Ahmed, Q. Ghori, Couette and Poiseuille flows for non-Newtonian fluids, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.* 7 (1):15–26, 2006.

[31] S. Abbasbandy, Homotopy perturbation method for quadratic Riccati differential equation and comparison with Adomian's decomposition method, *Appl. Math. Comput.* 172: 485–490, 2006.

[32] S. Abbasbandy, Numerical solutions of the integral equations: Homotopy perturbation method and Adomian's decomposition method, *Appl. Math. Comput.* 173 : 493–500, 2006.

[33] J .Villermaux, Génie de la réaction chimique, Conception et fonctionnement des réacteurs, Lavoisier, Paris, p : 448, 1993.

[34] J. Klein, et al, Cristallisation industrielle : Aspects pratiques, Techniques de l'ingénieur, *Traité Génie des Procédés*, J-2788-1 / J-2788-31, 1991.

[35] P. Marchal, Génie de la cristallisation, application à l'acide adipique. Thèse de doctorat, INP Lorraine, p : 244, 1989.

[36] T. J. Libelle, Modèles de connaissance de la cristallisation de troisième jet en sucrerie de cannes Expérimentations et simulations. Thèse de doctorat, Université de la Reunion, 2007.

[37] D. Ramkrishna, The status of population balances, *Reviews in Chem. Eng.*, 3 (1) : 49-95, 1985.

[38] D. Ilievski M, J. Hounslow. Agglomeration during precipitations: II. Mechanism deduction from tracer data. *AIChE Journal*, 41:525-,535, 1995.

[39] R.H. Perry and D.W. Green, editors. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. McGraw-Hill, New York, USA, 7th edition, 1997.

[40] H.M. Hulburt, S. Katz. Some problems in particle technology. A statistical mechanical formulation. *Chemical Engineering Science*, 19: 555-578, 1964.

[41] M.J. Hounslow, R.L. Ryall, V.R. Marshall. A discretized population balance for nucleation, growth and aggregation. *AIChE Journal*, 38:1821-1832, 1988.

[42] J.D. Litster, D.J. Smit, M.J. Hounslow, Adjustable discretized population balance for growth and aggregation. *AIChE Journal*, 41:591-603, 1995.

[43] E. Wynn, Improved accuracy and convergence of discretized population balance of Lister et al. *AIChE Journal*, 42:2084-2086, 1996.

[44] S. Kumar , D. Ramkrishna. On the solution of population balance equations by discretization - I. A fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science*, 51:1311-1332, 1996.

[45] S. Kumar, D. Ramkrishna. On the solution of population balance equations by discretization-II A moving pivot technique. *Chemical Engineering Science* , 51:1333-1342, 1996.

[46] F. Filbet, P. Laurencot. Numerical simulation of the Smoluchowski coagulation equation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25: 20-28, 2004.

[47] J. Makino, T. Fukushige, Y. Funato, E. Kokubo. On the mass distribution of planetesimals in the early runaway stage. *New Astronomy*,3:411,417, 1998.

[48] R.M. Ziff. New solution to the fragmentation equation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24:2821- 2828, 1991.

[49] R.M. Ziff and E.D. McGrady. The kinetics of cluster fragmentation and depolymerization. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 18:3027-3037, 1985.

[50] P.B. Bubovskii, V.A. Galkin, and I.W. Stewart. Exact solutions for the coagulation fragmentation equations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 25:4737-4744, 1992.

[51] M.H. Lee. On the validity of the coagulation equation and the nature of runaway growth. *Icarus*, 143:74- 86, 2000.

[52] B.K. Mishra. Monte Carlo simulation of particle breakage process during grinding. *Powder Technology*, 110:246-252, 2000.

[53] R.C. Everson, D. Eyre, Q.P. Campbell. Spline method for solving continuous batch grinding and similarity equations. *Computers and Chemical Engineering*, 21:1433-1440, 1997.

[54] M. Kostoglou, A.J. Karabelas. An assessment of low-order methods for solving the breakage equation. *Powder Technology*, 127:116-127, 2002.

[55] J.C. Barrett, J.S. Jheeta. Improving the accuracy of the moments method for solving the aerosol general dynamic equation. *Journal of Aerosol Science*, 27:1135-1142, 1996.

[56] M. Vanni. Approximate population balance equations for aggregation-breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 221:143-160, 2002.

[57] P.J. Hill, K.M. Ng. New discretization procedure for the breakage equation. *AIChE Journal*, 41:1204-1216, 1995.

[58] M. Vanni. Discretization procedure for the breakage equation. *AIChE Journal*, 45: 916-919, 1999.

[59] M.J. Hounslow, J.M.K. Pearson, and T. Instone. Tracer studies of high shear granulation: II. Population balance modelling. *AIChE Journal*, 47:1984-1999, 2001.

[60] H.S. Tan, A.D. Salman, M.J. Hounslow. Kinetics of fluidised bed melt granulation IV. Selecting the breakage model. *Powder Technology*, 143-144:65-83, 2004.

[61] W. Hundsdorfer , J.G. Verwer. Numerical solution of time-dependent advection diffusion-reaction equations. Springer-Verlag New York, USA, 1st edition, 2003.

[62] R.J. LeVeque. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1st edition, 2002.

[63] M.Sc. Jitendra Kumar Numerical approximations of population balance equations in particulate systems finit method.

[64] J.M., Jin The finite élément method in electromagnetics , New York Wiley, 1993.

[65] A.C Cangellaaris., Time-domain finite methods for electromagnetic wave propagation and scattering IEEE Transactions on magnetics, vol. 27, n°5: 3780-3785, 1991.

[66] P. Bonnet, Résolution des équations de Maxwell instationnaires et harmoniques par une technique de volumes finis, application a des problèmes de compatibilité électromagnétique, 2000.

[67] K.S.Yee, Numerical solution of initial boundary-value problems involving Maxwell's équations in isotropic média , IEEE Trans. Antennas Propagat, 14:302-307,1966.

[68] E.K.Miller., Time-domain modeling in electromagnetics, Journal of electromagnetics waves and applications, vol. 8, N°9-10: 1125-1172, 1994.

[69] A. Alexiadis, M.Vanni, P. Gardin, Extension of the method of moments and application to a typical agglomeration problem, *Journal of colloid and Interface science* (1): 106, 2004.

[70] R.B Diemer, J.H. Oston. A moment methodology for coagulation and breakage problem : part 2- moment models and distribution reconstruction, *Chemical engineering science* 57 (12): 2211, 2002.

[71] M.Frenklach, S.J.Harris, Aerosol dynamics modeling using the method of moments, *Journal of colloid and Interface science* 118(1): 252-261, 1987.

[72] Mc.Graw, Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments, *aerosol science and technology* 27, 1997.

[73] R.G Gordon., Error bounds in equilibrium statistical mechanics, *Journal Mathematical Physics*, 9: 655-672. 1968,

[74] D.L. Marchisio, J.T. Piktorna, R.O. Fox, R.D. Vigil, A. Barresi A Quadrature Method of Moments for Population Balance Equations, *AIChE Journal*, 49 (5): 1266-1276, 2003.

[75] D.L.Marchisio, J.T.Piktorna, R.D.Vigil, R.O.Fox, Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes, *Journal of Colloid and Interface Science*, 258: 322-334, 2003.

[76] D.L.Marchisio, R.D.Vigil, R.O.Fox R, Implementation of the quadrature method of moments in CFP codes for aggregation-breakage problems, *Chemical Engineering Science*, 58: 3337-3351, 2003.

[77] J.C Barret, N.A Webb, A comparison of some approximate methods for solving the aerosol general dynamic equation, *Journal of Aerosol science*, 29: 31-39, 1998.

[78] H.Zhao, C. Zheng, M. Xu ,Multi-Monte Carlo method for particle coagulation: description and validation, *Applied Mathematics and Computation*, 167, 1383-1399, 2005.

[79] H.G. Brittain, Particle-Size Distribution, Part I: Representations of Particle Shape, Size, and Distribution, *Pharmaceutical Technology*, 25(12): 38-45, 2001.

[80] F.E. Kruis, A. Maisels, H. Fissan, Direct Simulation Monte Carlo Method for Particle Coagulation and Aggregation, *AIChE Journal*, 46 (9), 1735-1742., (2000).

[81] M. Tourbin, Caractérisation et comportement de suspensions concentrées de nanoparticules sous écoulement : application aux processus d'agrégation et de rupture, thèse de doctorat, l'institut national polytechnique de Toulouse, 2006.

[82] K.W. Lee ,T. Matsoukas Simultaneous coagulation and break-up using constant-N Monte Carlo, *Powder Technology*, 110: 82-89, 2000.

[83] Y. Lin, K. Lee, T. Matsoukas , Solution of the population balance equation using constantnumber Monte Carlo, *Chem. Eng. Sci.*, 57: 2241-2252, 2002.

[84] S. Kumar, D.Ramkrishna ., On the solution of population balance equations by discretization I. A fixed pivot technique, *Chemical Engineering Science*, 51(8): 1311-1332. 1996.

[85] J.H. He, Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Comput. Meth. ApplMechEng.* 68: 167–57, 1998.

[86] J.H. He, Approximate solution of nonlinear differential equations with convolution product nonlinearities, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 167: 69–73, 1998.

[87] F. Geng, A modified variational iteration method for solving Riccati differential Equations, *Comput. Math. Appl.* 60: 1868–1872, 2010.

[88] A. Hasseine, Z. Barhoum, M. Attarakih, H.-J. Bart, Analytical solutions of the particle breakage equation by the Adomian decomposition and the variational iteration methods, *Advanced Powder Technology* 26: 105–112, 2015.

[89] J.H.He, The homotopy perturbation method for nonlinear oscillators with discontinuities, *Applied Mathematics and Computation*, 151: 287-292, 2004.

[90] A.M. Siddiqui, R.Mahmood, , Q.K Ghori,, Thin film flow of a third grade fluid on a moving belt by Hes homotopy perturbation method, *Internat J. Nonlinear Sci. Numer. Simul*, 7(1): 714, 2006.

[91] S.Abbasbandy, Iterated Hes homotopy perturbation method for quadratic Riccati differential equation, *Appl. Math. Comput*, 175: 581-589, 2006.

[92] J. D. D. Ganji, A.Sadighi, , Application of He's Homotopy prturbation Method to Non linear Coupled Systems of Reaction diffusion Equations, *International Journal of Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 7(4): 411-418, 2006.

[93] M. Rafei, D. D. Ganji, Explicit Solutions of Helmholtz Equation and Fifthorder Kdv Equation using Homotopy perturbation Method, *Int. J. Nonl. Sci. and Num. Simu.*, 7(3): 321-328, 2006.

[94] D. D. Ganji, A. Rajabi, Assessment of homotopy perturbation and perturbation methods in heat radiation equations, *Internat. Comm. Heat Mass Transfer*, 33: 391-400, 2006.

[95] J.H.He, Application of homotopy perturbation method to nonlinear wave equations, *Chaos, Solitons and Fractals*, 26(3): 695-700, 2005.

[96] J.H.He, Homotopy perturbation method for solving boundary value problems, *Physics Letter A*, 350(12): 87-88, 2006.

[97] H.Khaleghi, D.D.Ganji, A.Sadighi,, Application of variational iteration and Homotopy- perturbation methods to nonlinear heat transfer equations with variable coefficients, *Numerical Heat Transfer, Part A*, 52(1): 25-42, 2007.

[98] J.H.He, New interpretation of Homotopy perturbation method. *Int. J. Mod. Phys. B*, 20(18): 2561-2568, 2006.

[99] A. Sadighi, D.D. Ganji, Solution of the generalized nonlinear Bossiness equation using homotopy perturbation and variational iteration methods, *International Journal of Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 8(3): 435-444, 2007.

[100] D.D. Ganji, A. Sadighi, Application of homotopy perturbation and variational iteration methods to nonlinear heat transfer and porous media equations, *Journal of Computational and Applied mathematics*, 207: 24-34, 2007.

[101] J.H.He, Homotopy perturbation technique. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 178: 257-262, 1999.

[102] J.H.He, A coupling method of homotopy technique and a perturbation technique for non-linear problems. *Int. J. Non-Linear Mech.* 35: 37-43, 2000.

[103] J.H.He: Homotopy perturbation method: a new nonlinear analytical technique. *Appl. Math. Comput.* 135: 73-79, 2003.

[104] J.H.He. Comparison of homotopy method and homotopy analysis method. *Appl. Math. Comput.* 156: 527-539, 2004.

[105] M. Ghasemi a,b, M. Tavassoli Kajani c, E. Babolian a, Application of He's homotopy perturbation method to nonlinear integro-differential equations, *Applied Mathematics and Computation* 188: 538–548, 2007.

[106] N.H. Sweilam, M.M. Khader, Variational iteration method for one dimensional nonlinear thermoelasticity. *Chaos Soliton Fract*, 32: 145-149, 2007.

[107] G. Adomian, *Nonlinear Stochastic Systems Theory and Applications to Physics*, Kluwer, 1989.

[108] F. Olga, Š. Zdeněk, Adomian decomposition method for certain singular initial value problems, *Journal of Applied Mathematics* (3), 2010.

[109] A.H.H. Oda, A. Qatrany, F.L. Hassan, Modified algorithm to compute Adomian's polynomial for solving non-linear systems of partial differential equations, *Int. J. Contemp. Math. Sciences*5: 2505-2521 ,2010.

[110] A.M. Wazwaz, A reliable technique for solving linear and nonlinear Schrodinger equations by Adomian decomposition method, *Bulletin of the Institute of Mathematics Academia Sinica*, 29, 2001.

[111] A. Fakharian, M.T.H. Beheshti, Solving linear and nonlinear optimal control problem using modified Adomian decomposition method, *Journal of Computer and Robotics*, 1:1-8, 2008.

[112] A.S.J. AL-Saif, T.A.K. Hattim, Variational iteration method for solving some models of nonlinear partial differential equations, *Int. J. Pure Appl. Sci. Technol.*, 4(1): 30-40, 2011.

[113] M.G. Porshokouhi, B. Ghanbari, B. Rahimi, Numerical solution for non-linear Fredholm integral equations by Newton–Kantorovich method and comparison with HPM and ADM, *Int. J. Pure Appl. Sci. Technol.*, 3(1) : 44-49, 2011.

[114] S.Senouci, Etude du transfert de matière dans les procédés de séparation en utilisant le modèle de bilan de population des gouttes, Mémoire de magister, université de biskra, 2012.

[115] K. Abbaoui, Y.Cherruault, Convergence of Adomian's method applied to differential equations, *Comput. Math. Appl.* 28: 103–109, 1994.

[116]K. Abbaoui, Y. Cherruault, New ideas for proving convergence of decomposition methods, *Comput. Math. Appl.* 29: 103–108, 1995.

[117] Y. Cherruault, G. Adomian, Decomposition method: a new proof of convergence, *Math. Comput. Model.* 18: 103–106, 1993.

[118] R.M. Ziff, E.D. Mc Grady, Kinetics of polymer degradation, *Macromolecules* 19: 2513–2519, 1986.

[119] J.D. Lister, D.J. Smit, M.J. Hounslow, Adjustable discretized population balance for growth and aggregation. *A.I.Ch.E. Journal*, 41: 591–603, 1995.

[120] M. Sommer, F. Stenger, W. Peukert, N.J. Wagner, Agglomeration and breakage of nanoparticles in stirred media mills- a comparison of different methods and models, *Chem. Eng. Sci.* 61: 135–148, 2006.

Abdelmalek Hasseine^{1,2}
Samra Senouci^{1,2}
Menwer Attarakih³
Hand-Jörg Bart⁴

Two Analytical Approaches for Solution of Population Balance Equations: Particle Breakage Process

¹University of Biskra, Laboratory LAR-GHYDE, Biskra, Algeria.

²University of Biskra, Department of Chemical Engineering, Biskra, Algeria.

³The University of Jordan, Faculty of Engineering and Technology, Chemical Engineering Dept., Amman, Jordan.

⁴Kaiserslautern University, Chair of Separation Science and Technology, Center for Mathematical Modeling, Kaiserslautern, Germany.

Various particulate systems were modeled by the population balance equation (PBE). However, only few cases of analytical solutions for the breakage process do exist, with most solutions being valid for the batch stirred vessel. The analytical solutions of the PBE for particulate processes under the influence of particle breakage in batch and continuous processes were investigated. Such solutions are obtained from the integro-differential PBE governing the particle size distribution density function by two analytical approaches: the Adomian decomposition method (ADM) and the homotopy perturbation method (HPM). ADM generates an infinite series which converges uniformly to the exact solution of the problem, while HPM transforms a difficult problem into a simple one which can be easily handled. The results indicate that the two methods can avoid numerical stability problems which often characterize general numerical techniques in this area.

Keywords: Adomian decomposition method, Homotopy perturbation method, Particle breakage process, Population balance equation

Received: December 16, 2014; *revised:* May 29, 2015; *accepted:* May 29, 2015

DOI: 10.1002/ceat.201400769

1 Introduction

The population balance equation (PBE) is successfully used to model the complex behavior of particulate systems in various engineering fields such as atmospheric physics, precipitation, crystallization, pharmaceutical production, aerosol formation, colloid chemistry, biology etc. [1]. Generally, these processes involve simultaneous nucleation, growth, aggregation, and breakage of particles.

Several numerical techniques, such as the method of weighted residuals, method of moments, orthogonal collocation, collocation on finite elements, and pivot techniques, were proposed in the literature and are reviewed in [1–7]. In [1], a comprehensive review, the available numerical methods for solving the PBE are discussed up to the mid-eighties. In a series of papers, Kumar and Ramkrishna [2–4] presented critical reviews on the previous numerical techniques for solving the PBE up to the mid-nineties. These authors uncovered the problem of internal consistency using direct discretization methods based on finite difference schemes. In this regard, they introduced the fixed and moving pivot methods to overcome this problem. Recently, Santos et al. [7] used the dual quadrature method of generalized moments (DuQMoGeM) to solve the

PBE with only moments' distribution which were recovered using parallelized algorithms to reduce the computational time. On the other hand, Attarakih [6] introduced the cumulative quadrature method of moments (CQMOM) to overcome the distribution reconstruction which is lost using the application of the DuQMoGeM.

The present analytical approach makes use of the properties of the PBE. This method is free of the crucial problems of numerical discretization and stability that often characterize common numerical techniques in this area. The proposed approach is widely used in applied sciences and engineering to solve problems involving differential, integral, integro-differential, differential delay, and systems of such equations [8–32]. The work in this huge body of literature can be categorized into three main streams: solution methods using homotopy methods [14–22, 29–31], Adomian methods [8, 23, 24, 26, 27, 32], and diverse applications of these methods to physics (solitary waves theory [10]), biology (modeling of the transmission of nerve impulses [25, 28]), and fluid flow problems (Poiseuille flows for non-Newtonian fluids [30]).

The Adomian decomposition method (ADM) has been applied to a wide class of functional equations [9, 10] by scientists and engineers since the beginning of the 1980s. Adomian gives the solution as an infinite series which usually converges to a closed solution.

The limitation of such an approach is its dependency on the particle breakage kernels, and hence, each problem is to be treated independently. In spite of this, these methods still pro-

Correspondence: Dr. Abdelmalek Hasseine (hasseine@yahoo.fr), University of Biskra, Laboratory LAR-GHYDE, Biskra 07000, Algeria.

vide in many cases analytical solutions, which are useful for simplified system analysis and bench-type problems for testing numerical techniques.

The homotopy perturbation method (HPM), proposed first by He [12, 13], for solving differential and integral equations (linear and nonlinear) has been the subject of extensive analytical and numerical studies. The method, which is a coupling of the traditional perturbation method and homotopy in topology, deforms continuously to a simple problem which is easily solved.

The essence of these methods is to obtain the approximate solution in a series form, which rapidly converges on the basis of the Adomian decomposition and homotopy perturbation method techniques. In this work, these solutions are presented for several cases, which include batch and continuous systems for the particle breakage process using both methods. The proposed approaches are conceptually and computationally simple and can be easily handled.

Recently, the Adomian decomposition technique has been applied for solving PBEs for batch and continuous flow particulate processes [8]. The objective of this paper is to apply new techniques, i.e., the ADM and HPM for solving the dynamic PBEs with new assumed conditions.

The paper is organized as follows: In Sect. 2.1 the theory of PBE to model particle interactions in a continuous-flow system is presented. In Sects. 2.2 and 2.3 the Adomian and homotopy methods are introduced and applied to the general PBE for continuous flow of particulate systems. In Sect. 3, different test cases are presented to illustrate the efficiency of both applied analytical methods, while Sect. 4 is devoted to the final conclusions on the proposed solution methods of the PBE, namely, Adomian and homotopy methods.

2 Theory

2.1 Population Balance Equation

In this work, the following general PBE is considered [33–37]:

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

In this equation, it is assumed that at any instant of time (t) the particle number density function $n(v, t)$ ¹⁾ depends only on time and one internal coordinate, which is the particle volume (v). The velocity G along this internal coordinate is then a particle growth velocity $G = d(v)/dt$ due to pressure variation, mass transfer, etc. The overall input flow determines the residence time τ of the dispersion. Thus, assuming a perfect mixer, where the outlet particle volume distribution is always identical to the distribution inside of the vessel, $n(v, t)$, the resulting particle entry and exit frequencies become $\frac{1}{\tau} n^{\text{feed}}(v, t)$ and $\frac{1}{\tau} n(v, t)$, respectively.

The source term $\varphi(v, t)$ represents the contribution to $n(v, t)$ due to the change in the number of particles because of particle breakage, aggregation, and nucleation [38–42]:

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

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

2.2 The Adomian Decomposition Method (ADM)

The ADM [9, 10] is based on the search for a solution in the form of a series and on decomposing the nonlinear operator into a series in which the terms are calculated recursively using the Adomian polynomials. This technique has demonstrated many advantages over the classical techniques [9]. It will be applied to find the solution of the integro-differential population balance equation satisfying the boundary conditions appropriate to the specific model. Consider the linear integro-differential equation:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{\tau} (n^{\text{feed}}(v, t) - n(v, t)) + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n \\ & \times (v', t)dv' - \Gamma(v)n(v, t) \end{aligned} \quad (3)$$

Let $L_t = \frac{\partial}{\partial t}$ and $L_v = \frac{\partial}{\partial v}$, then Eq. (3) is written as:

$$\begin{aligned} L_t n = & \frac{1}{\tau} (n^{\text{feed}}(v, t) - n(v, t)) + \int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n \\ & \times (v', t)dv' - \Gamma(v)n(v, t) \end{aligned} \quad (4)$$

Using the integral operator $L_t^{-1} = \int_0^t (\cdot) dt$ the above equation is further simplified to:

$$\begin{aligned} L_t^{-1} L_t n = & L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - \Gamma(v)n(v, t) \right) \\ & + L_t^{-1} \left(\frac{1}{\tau} (n^{\text{feed}}(v, t) - n(v, t)) \right) \end{aligned} \quad (5)$$

1) List of symbols at the end of the paper.

The last equation is put now in the standard form suitable to the Adomian method:

$$n = n(0) + L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \right) + L_t^{-1} \left(\frac{1}{\tau} (n^{\text{feed}}(v, t) - n(v, t)) \right) \quad (6)$$

The decomposition technique consists of representing the solution of Eq. (3) as a series

$$n = \sum_{i=0}^{\infty} n_i \quad (7)$$

and by assuming time-independent particle breakage kernels, finally for particle breakage in a batch system the following series form is found:

$$\sum_{i=0}^{\infty} n_i = n(0) + L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') \sum_{i=0}^{\infty} n_i dv' - \Gamma(v) \sum_{i=0}^{\infty} n_i \right) \quad (8)$$

Since n_0 is defined by the initial condition $n(0, v)$, now one can write:

$$n_1 = L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_0 dv' - \Gamma(v) n_0 \right) \quad (9)$$

$$n_2 = L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_1 dv' - \Gamma(v) n_1 \right) \quad (10)$$

where the above sequence can be generalized to:

$$n_{m+1} = L_t^{-1} \left(\int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_m dv' - \Gamma(v) n_m \right) \quad (11)$$

Now, with the n_m 's determined, the solution n was constructed as follows:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \varphi_m = n \quad (12)$$

where

$$\varphi_m = \sum_{i=0}^{m-1} n_i \quad (13)$$

Note that the convergence proof of this technique was formally proven and justified in [43–45].

2.3 Analysis of He's Homotopy Perturbation Method

The principles of the HPM and its applicability to various kinds of differential equations are given in [14–19]. Let consider the following nonlinear differential equation:

$$L(u) + N(u) = f(r), r \in \Omega \quad (14)$$

with boundary conditions

$$B(u, \partial u / \partial n) = 0, r \in \Gamma \quad (15)$$

where L is a linear operator while N is a nonlinear operator, B is a boundary operator, Γ is the boundary of the domain Ω and $f(r)$ is a known analytic function.

He's homotopy perturbation technique [12–22] defines homotopy as:

$$v(r, p) : \Omega \times [0; 1] \rightarrow \mathfrak{R}, \text{ which satisfies}$$

$$H(v; p) = (1 - p)[l(v) - l(u_0)] + p[l(v) + N(v) - f(r)] = 0 \quad (16)$$

or it can be written in an equivalent form:

$$H(v, p) = l(v) - l(u_0) + p[l(u_0) + p[N(v) - f(r)]] = 0 \quad (17)$$

In the above equations, $r \in \Omega$ and $p \in [0, 1]$ are embedding parameters and u_0 is an initial approximation which satisfies the boundary conditions. From Eqs. (16) and (17), it follows:

$$H(v, 0) = l(v) - l(u_0) = 0, \quad (18)$$

$$H(v, 1) = l(v) + N(v) - f(r) = 0 \quad (19)$$

The changing process of p from zero to unity is just that of $v(r, p)$ from u_0 to $u(r)$. In topology, this is called deformation; $l(v) - l(u_0)$ and $l(v) + N(v) - f(r)$ are homotopic. The basic assumption is that the solution of Eqs. (16) and (17) can be expressed as a power series in p :

$$v = v_0 + p v_1 + p^2 v_2 + \dots \quad (20)$$

Therefore, the approximate solution of Eq. (14) can be readily obtained as:

$$u = \lim_{p \rightarrow 1} v = v_0 + v_1 + v_2 + \dots \quad (21)$$

The convergence of the series (21) was proven in [12, 32].

3 Illustrative Tests

Although the Adomian decomposition and the homotopy perturbation methods for the solution of particle breakage in batch and continuous processes are applied in this work, they are generally applicable for any set of functions. However, it is desirable to check thoroughly the current results by demonstrating the effectiveness of these proposed two semi-analytical methods.

3.1 Particle Breakage in Batch Systems

In all the following case studies, the PBEs are tested by comparing the ADM results with those obtained by the HPM.

3.1.1 Breakage with a Uniform Daughter Particle Distribution and $\Gamma(v) = v$

3.1.1.1 Implementation of ADM

In this section, it is described how to use the ADM for the breakage equation. Now, consider the initial value problem in the batch system:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v) n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \quad (22)$$

The initial condition is the Dirac delta function.

In the following, this problem is solved by the ADM. First, integrating Eq. (22) with respect to t leads to:

$$n(v, t) = n(v, 0) + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \right) dt \quad (23)$$

It is assumed that the solution of Eq. (22) has the form of the Adomian decomposition series:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) \quad (24)$$

where the solution components $n_m(v, t)$ are determined by the following Adomian recursion scheme:

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v - b) \quad (25)$$

$$n_1(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' - \Gamma(v) n_0(v, t) \right) dt = t(-v\delta(v - b) + 2\theta(b - v)) \quad (26)$$

Similarly, one can compute

$$n_2(v, t), n_3(v, t), \dots, n_m(v, t) \quad (27)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 (v^2 \delta(v - b) + 2(b - 3v)\theta(b - v)) \quad (28)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{6} t^3 v (v^2 \delta(v - b) + 6(b - 2v)\theta(b - v)) \quad (29)$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{24} t^4 v^2 (v^2 \delta(v - b) + 4(3b - 5v)\theta(b - v)) \quad (30)$$

In general, $n_m(v, t)$ is the solution of:

$$n_m(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n_{m-1}(v', t) dv' - \Gamma(v) n_{m-1}(v, t) \right) dt \quad (31)$$

Finally, the general term is calculated as:

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^{m+1}}{(m+1)!} t^{m+1} v^{m-1} (v^2 \delta(v - b) + (bm + bm^2 - 2v - 3mv - m^2 v)\theta(b - v) + t(-v\delta(v - b) + 2\theta(b - v)) + \delta(v - b)) \quad (32)$$

Therefore,

$$n(v, t) = \sum_{m=1}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv} (\delta(v - b) + \theta(b - v)(2t + t^2(b - v))) \quad (33)$$

3.1.1.2 Implementation of HPM

In order to solve Eq. (22) by HPM, the following homotopy has to be constructed:

$$hp_1 = (1 - p) \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \frac{\partial n_0(v, t)}{\partial t} \right) + p \times \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' + \Gamma(v) n(v, t) \right) \quad (34)$$

It can be assumed that the solution of Eq. (34) can be written as a power series in p as follows:

$$n(v, t) = n_0(v, t) + pn_1(v, t) + p^2 n_2(v, t) + p^3 n_3(v, t) + \dots \quad (35)$$

According to the Dirac delta function, the initial approximation is:

$$n_0(v, t) = \delta(v - b) \quad (36)$$

Substituting Eqs. (35) and (36) into Eq. (34) and rearranging based on powers of p -terms leads to:

$$\frac{\partial n_1(v, t)}{\partial t} - \int_v^{+\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' + \Gamma(v) n_0(v, t) = 0 \quad (37)$$

$$\frac{\partial n_2(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_1(v', t) dv' + \Gamma(v) n_1(v, t) = 0 \quad (38)$$

$$\frac{\partial n_3(v, t)}{\partial t} - \int_v^\infty \beta(v/v') \Gamma(v') n_2(v', t) dv' + \Gamma(v) n_2(v, t) = 0 \quad (39)$$

Solving Eqs. (37)–(39), it follows:

$$n_1(v, t) = t(-v\delta(v-b) + 2\theta(b-v)) \quad (40)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 (v^2 \delta(v-b) + 2(b-3v)\theta(b-v)) \quad (41)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{6} t^3 v (v^2 \delta(v-b) + 6(b-2v)\theta(b-v)) \quad (42)$$

and so on. In this manner, the rest of the components can be obtained. According to HPM, it can be written:

$$n(x, t) = \sum n_m(x, t), m = 0, 1, 2, \dots \quad (43)$$

and then

$$\begin{aligned} n_m(v, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{(m+1)!} t^{m+1} v^{m-1} (v^2 \delta(v-b) \\ &+ (bm + bm^2 - 2v - 3mv - vm^2)\theta(b-v)) \\ &+ t(-v\delta(v-b) + 2\theta(b-v)) + \delta(v-b) \\ &= e^{-tv} (\delta(v-b) + \theta(b-v)(2t + t^2(b-v))) \end{aligned} \quad (44)$$

One can see that if the iteration converges for the two methods then it converges to the exact solution as reported in [46].

Fig. 1 shows the number density at steady state as predicted using the ADM and HPM series solutions, which are very close to the exact one [46].

3.1.2 Breakage with a Uniform Daughter Particle Distribution and $\Gamma(v) = v^2$

In this case, the rate of particle breakage is proportional to the square of its volume. The first few terms are computed with the same algorithm, which was used in Case 1.

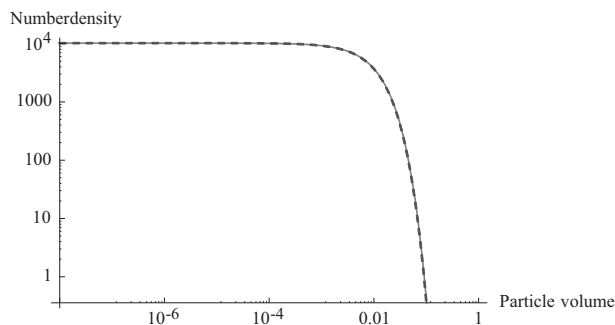


Figure 1. Particle breakage in a batch system with a uniform daughter particle distribution, Dirac function as an initial condition and $\Gamma(v) = v$ as compared to the analytical solution [35]. Solid line: ADM and HPM; dashed line: exact solution.

3.1.2.1 Implementation of ADM

The initial condition is:

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v-b) \quad (45)$$

$$n_1(v, t) = n(v, 0) = \delta(v-v_f) \quad (46)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 v^2 (v^2 \delta(v-b) - 4b\theta(b-v)) \quad (47)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{6} t^3 v^4 (v^2 \delta(v-b) - 6b\theta(b-v)) \quad (48)$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{24} t^4 v^6 (v^2 \delta(v-b) - 8b\theta(b-v)) \quad (49)$$

The general term is:

$$n_m(v, t) = (-1)^m \frac{t^m v^{2(m-1)} (v^2 \delta(v-b) - 2mb\theta(b-v))}{m!} \quad (50)$$

Now, the general solution can be written as:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv^2} (\delta(v-b) + 2bt\theta(b-v)) \quad (51)$$

3.1.2.2 Implementation of HPM

Using the same initial condition (Eq. (45)), the HPM is initiated as follows:

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = \delta(v-v_f) \quad (52)$$

$$n_1(v, t) = t(-v^2 \delta(v-b) + 2b\theta(b-v)) \quad (53)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{2} t^2 v^2 (v^2 \delta(v-b) - 4b\theta(b-v)) \quad (54)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{6} t^3 v^4 (v^2 \delta(v-b) - 6b\theta(b-v)) \quad (55)$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{24} t^4 v^6 (v^2 \delta(v-b) - 8b\theta(b-v)) \quad (56)$$

The general solution can now be written in closed form which is essentially the same as that obtained by ADM:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) = e^{-tv^2} (\delta(v-b) + 2bt\theta(b-v)) \quad (57)$$

Fig. 2 presents the number density function at steady state as predicted using the ADM and the HPM series solutions, which are very close to the exact one [46].

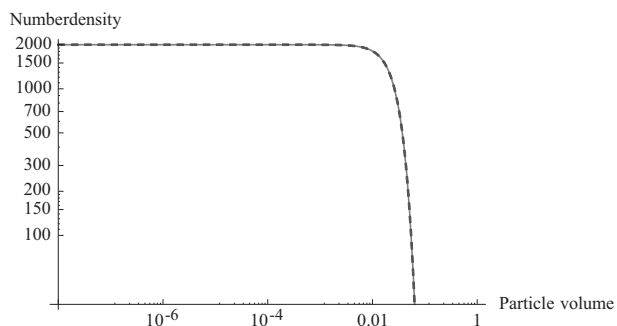


Figure 2. Particle breakage in a batch system with a uniform daughter particle distribution, Dirac function as an initial condition, and $\Gamma(v) = v^2$ as compared to the analytical solution [35]. Solid line: ADM and HPM; dashed line: exact solution.

3.1.3 Physically Relevant Breakage Problems

The main aim of this case is to compare the solution given by the ADM and HPM methods with a physically relevant problem where an analytical solution is not available in the literature.

In this case, the exponential distribution $n(v) = ve^{-v}$ as an initial condition is used and the daughter particle distribution is as given by [47]. One different aspect was added such that $\beta(v/v')$ is no longer independent of the daughter particle volume and is given by [47]:

$$\beta(v/v') = \frac{pv^m(v' - v)^{m+(m+1)(p-2)}(m + (m+1)(p-1))!}{v'^{pm+p-1}m!(m + (p-1)(m-2))!} \quad (58)$$

In this equation, p governs the number of fragments per breakage event and m is responsible for the shape of the daughter distribution.

For ($p=2, m=0$), Eq. (58) is reduced to the uniform binary breakage, where the breakage frequencies $G(v) = v$ 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 a closed analytical form for the solution for this particular case.

For the case where the analytical solution is not available, the decomposition Adomian and the homotopy perturbation methods provide a good interpretation. The numerical solutions are computed using the parameters $p=2, m=1$.

In this example, the truncation of the series up to order five is used to confirm the validity of the equation. However, it is not easy to find the general term of the series because of the complexity of the polynomial terms. The Mathematica software was employed to build the maximum possible number of terms.

The rearrangement of the terms of the series could give a general term, but the convergence of the series to a closed analytical form is not evident. Fig. 3 shows the evolution of the number density function at $t = 0.5$ for different values of n , while Fig. 4 indicates the relative error using successive solution approximations.

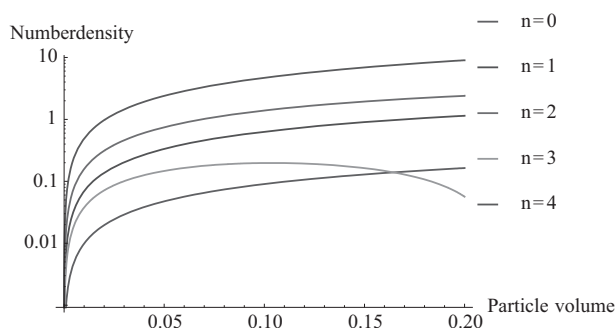


Figure 3. Effect of series truncation on the number density function for particle breakage in a batch system with $\Gamma(v) = v, \beta(v/v') = 12(v-v)/v^3$, and an exponential initial condition.

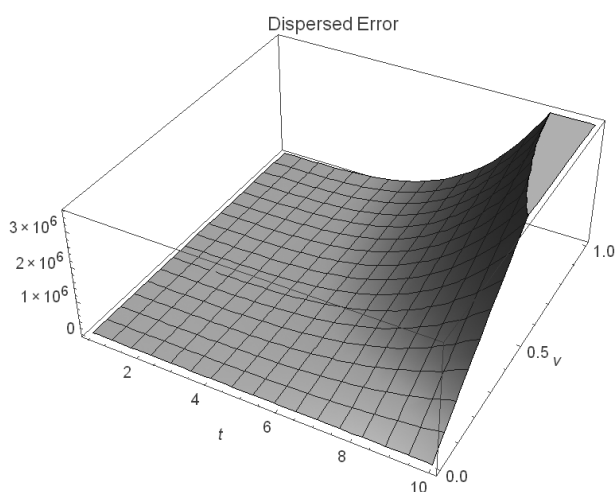


Figure 4. Dispersed relative truncation error $\varepsilon(t, v) = |u_4 - u_3|$.

The implementation of these methods provided reliable results in that few terms are needed that may converge to the exact solution, where these terms should follow the summations given in Eqs. (7) and (20), or, for concrete problems, an approximate solution of a reasonable degree of accuracy can be obtained. In addition, it is emphasized that these methods need not be limited to exact solutions; they can include approximate solutions which are found very easily by using the computer code written in Mathematica.

3.2 Particle Breakage in Continuous Systems

For the solution of particle breakage in continuous systems, the problem of finding general analytic solutions becomes more difficult. However, two specific cases depending on the feed particle distribution are presented in this work.

3.2.1 Exponential Feed Particle Distribution with Linear Breakage Frequency

3.2.1.1 Implementation of the Adomian Method

In this case, the initial condition is assumed zero, $\beta(v/v') = 2/v'$, $\Gamma(v') = v'$, and the feed distribution is given by:

$$n^{\text{feed}}(v) = v e^{-v} \quad (59)$$

To solve this particle population balance equation, Eq. (1) is rewritten as:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{n^{\text{feed}}(v)}{\tau} + \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right) \quad (60)$$

In this case, the operators are defined as $L = \frac{\partial}{\partial t}$ and the inverse $L^{-1} = \int_0^t (\cdot) dt$

Applying the inverse operator to Eq. (60) gives:

$$n(v, t) = \frac{n^{\text{feed}}(v)}{\tau} t + \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right) \right) dt \quad (61)$$

The solution by the ADM is calculated by the following Adomian recursion scheme:

$$n_0 = a t v e^{-v} \quad \text{with} \quad a = \frac{1}{\tau} \quad (62)$$

$$n_{m+1} = \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n_m(v', t) dv' - n_m(v, t) (\Gamma(v) + a) \right) dt, m = 0, 1, 2, \dots \quad (63)$$

From this scheme, the solution components are calculated recursively as follows:

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2} a e^{-v} t^2 (-2 + (-2 + a)v + v^2) \quad (64)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6} a e^{-v} t^3 (4 - 2v + a^2 v - 4v^2 + v^3 + 2a(-2 - 2v + v^2)) \quad (65)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24} a e^{-v} t^4 (a + v) \times (12 + a^2 v - 6v^2 + v^3 + 2a(-3 - 3v + v^2)) \quad (66)$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{120} a e^{-v} t^5 (a + v)^2 (24 + 4v + a^2 v - 8v^2 + v^3 + 2a(-4 - 4v + v^2)) \quad (67)$$

The general term can be now deduced as:

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^m}{(m+1)!} \left(a e^{-v} t^{(m+1)} (a + v)^{m-2} (2(m-1) + 2(m-1)^2 + (-2 + a^2 - (m-1) + (m-1)^2)v + (-2 - 2(m-1))v^2 + v^3 + 2a(-m - mv + v^2)) \right) \quad (68)$$

By combining all of these components together, the following general form is obtained:

$$n(v, t) = \frac{(-1)^m}{(m+1)!} \sum_{m=0}^{\infty} \left(a e^{-v} t^{(m+1)} (a + v)^{m-2} \left(\begin{array}{l} 2(m-1) + 2(m-1)^2 + \\ (-2 + a^2 - (m-1) + (m-1)^2)v \\ + (-2 - 2(m-1))v^2 + v^3 + 2a(-m - mv + v^2) \end{array} \right) \right) \quad (69)$$

Therefore, the exact solution is given by:

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{a(4 + 2a + 4v + 2av + a^2 v + 2av^2 + 2v^2 + v^3)}{(a + v)^3} + \frac{1}{(a + v)^3} \left(a e^{-t(a+v)} \left(\begin{array}{l} -4 - 2a - 4at - 2a^2 t - 2a^2 t^2 \\ -4v - 2av - a^2 v - 4tv - 6atv \\ -2a^2 tv - 4at^2 v - a^2 t^2 v - 2v^2 \\ -2av^2 - 4tv^2 - 4atv^2 - 2t^2 v^2 \\ -2at^2 v^2 - v^3 - 2tv^3 - t^2 v^3 \end{array} \right) \right) \right) \quad (70)$$

3.2.1.2 Implementation of the HPM

$$hp = (1 - p) \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \frac{\partial n_0(v, t)}{\partial t} \right) + p \left(\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - a n^{\text{feed}}(v) - \int_v^{\infty} \beta(v/v') \Gamma(v') n(v', t) dv' + (\Gamma(v) + a) n(v, t) \right) \quad (71)$$

To apply the HPM, it is assumed that the solution of Eq. (71) can be written as a power series in p as follows:

$$n(v, t) = n_0(v, t) + pn_1(v, t) + p^2n_2(v, t) + p^3n_3(v, t) + \dots \quad (72)$$

According to Eq. (13) the initial approximation is:

$$n_0 = atve^{-v} \quad (73)$$

Substituting Eqs. (72) and (73) into Eq. (71) and rearranging based on powers of p -terms, it follows:

$$\frac{\partial n_1(v, t)}{\partial t} - \int_v^{+\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n_0(v', t)dv' + (\Gamma(v) + a)n_0(v, t) = 0 \quad (74)$$

$$\frac{\partial n_2(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n_1(v', t)dv' + (\Gamma(v) + a)n_1(v, t) = 0 \quad (75)$$

$$\frac{\partial n_3(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n_2(v', t)dv' + (\Gamma(v) + a)n_2(v, t) = 0 \quad (76)$$

By solving Eqs. (74)–(76), one obtains:

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2}ae^{-v}t^2(-2 + (-2 + a)v + v^2) \quad (77)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6}ae^{-v}t^3(4 - 2v + a^2v - 4v^2 + v^3 + 2a(-2 - 2v + v^2)) \quad (78)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24}ae^{-v}t^4(a + v) \times (12 + a^2v - 6v^2 + v^3 + 2a(-3 - 3v + v^2)) \quad (79)$$

In this manner, the rest of the components can be obtained as the ADM method. The general solution can be calculated by mathematical induction which was found to be:

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{a(4+2a+4v+2av+a^2v+2av^2+2v^2+v^3)}{(a+v)^3} + \frac{1}{(a+v)^3} \left(\begin{matrix} -4 - 2a - 4at - 2a^2t - 2a^2t^2 - 4v \\ -2av - a^2v - 4tv - 6atv \\ ae^{-t(a+v)} \begin{pmatrix} -2a^2tv - 4at^2v - a^2t^2v - 2v^2 \\ -2av^2 - 4tv^2 - 4atv^2 - 2t^2v^2 \\ -2at^2v^2 - v^3 - 2tv^3 - t^2v^3 \end{pmatrix} \end{matrix} \right) \right) \quad (80)$$

One can see that if the iteration converges using the two methods, then it will converge to the same exact solution.

Fig. 5 shows the number density function at steady state as predicted using the ADM and HPM series solutions, which are in fact the same.

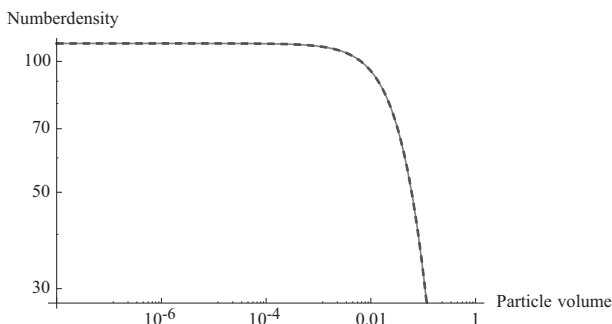


Figure 5. Number density function for particle breakage in a continuous system with $\Gamma(v) = v$ and $\beta(v/v') = 1/v'$, binary break-up, $a = 5$, and an exponential feed distribution. Solid line: ADM; dashed line: HPM.

3.2.2 Exponential Feed Particle Distribution with Quadratic Breakage Frequency

In this case, the initial condition is assumed zero, the feed distribution is exponential as in the previous case, and $\beta(v, v') = \frac{2}{v'}$, $\Gamma(v') = v'^2$

3.2.2.1 Implementation of the Adomian Method

The following model with $n^{\text{feed}}(v) = ve^{-v}$ is considered:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = an^{\text{feed}}(v) + \int_v^{\infty} \beta(v, v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - n(v, t)(\Gamma(v) + a) \quad (81)$$

By applying ADM, one gets the following general form:

$$n(v, t) = an^{\text{feed}}(v)t + \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - n(v, t)(\Gamma(v) + a) \right) dt \quad (82)$$

Accordingly, the Adomian recursion scheme is given by:

$$n_0 = atve^{-v} \quad (83)$$

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v')\Gamma(v')n_m(v', t)dv' - n_m(v, t)(\Gamma(v) + a) \right) dt, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (84)$$

The other terms are found recursively as follows:

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2}ae^{-v}t^2(-4 + (-4 + a)v - 2v^2 + v^3) \quad (85)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6}ae^{-v}t^3(a + v^2) \times (-8 + (-8 + a)v - 4v^2 + v^3) \quad (86)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24}ae^{-v}t^4(a + v^2)^2(-12 + (-12 + a)v - 6v^2 + v^3) \quad (87)$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{120}ae^{-v}t^5(a + v^2)^3(-16 + (-16 + a)v - 8v^2 + v^3) \quad (88)$$

The general term can be deduced as:

$$n_m(v, t) = (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} ae^{-v} (-4m + (-4m + a)v - 2mv^2 + v^3)(a + v^2)^{m-1} \quad (89)$$

Based on this, the closed analytical solution is given by:

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} ae^{-v} (-4m + (-4m + a)v - 2mv^2 + v^3)(a + v^2)^{m-1} = e^{-v} \left(\frac{a(4 + 4v + av + 2v^2 + v^3)}{(a + v^2)^2} + \frac{ae^{-t(a+v^2)} \left(\frac{-4 - 4at - 4v - av - 4atv - 2v^2 - 4tv^2 - 2atv^2 - v^3 - 4tv^3 - 2tv^4}{(a + v^2)^2} \right)}{(a + v^2)^2} \right) \quad (90)$$

3.2.2.2 Implementation of HPM

One starts by the initial term as in the previous cases as:

$$n_0 = atve^{-v} \quad (91)$$

Substituting Eqs. (72) and (91) into Eq. (71) and rearranging based on powers of p -terms, it follows:

$$\frac{\partial n_1(v, t)}{\partial t} - \int_v^{+\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n_0(v', t)dv' + (\Gamma(v) + a)n_0(v, t) = 0 \quad (92)$$

$$\frac{\partial n_2(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n_1(v', t)dv' + (\Gamma(v) + a)n_1(v, t) = 0 \quad (93)$$

$$\frac{\partial n_3(v, t)}{\partial t} - \int_v^{\infty} \beta(v/v')\Gamma(v')n_2(v', t)dv' + (\Gamma(v) + a)n_2(v, t) = 0 \quad (94)$$

By solving Eqs. (92)–(94), one obtains:

$$n_1(v, t) = -\frac{1}{2}ae^{-v}t^2(-4 + (-4 + a)v - 2v^2 + v^3) \quad (95)$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{6}ae^{-v}t^3(a + v^2) \times (-8 + (-8 + a)v - 4v^2 + v^3) \quad (96)$$

$$n_3(v, t) = -\frac{1}{24}ae^{-v}t^4(a + v^2)^2(-12 + (-12 + a)v - 6v^2 + v^3) \quad (97)$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{120}ae^{-v}t^5(a + v^2)^3(-16 + (-16 + a)v - 8v^2 + v^3) \quad (98)$$

Following this manner, the rest of the components can be determined as in the case of the Adomian method.

The final closed analytical solution can be deduced as in the previous cases and was found to be:

$$n(v, t) = e^{-v} \left(\frac{a(4 + 4v + av + 2v^2 + v^3)}{(a + v^2)^2} + \frac{ae^{-t(a+v^2)} \left(\frac{-4 - 4at - 4v - av - 4atv - 2v^2 - 4tv^2 - 2atv^2 - v^3 - 4tv^3 - 2tv^4}{(a + v^2)^2} \right)}{(a + v^2)^2} \right) \quad (99)$$

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 methods.

Fig. 6 shows the number density function at steady state as predicted using the ADM and HPM series solutions, which give the same results.

4 Conclusions

The Adomian decomposition (ADM) and homotopy perturbation methods (HPM) have been successfully applied to find the exact solutions of a specific form of the PBE for batch and continuous flow systems for particle breakage in stirred vessels. These exact solutions are compared with the available analytical solutions and with each other when the analytical solution is not available. All the examples show that the results of the ADM are in exact agreement with those of the HPM.

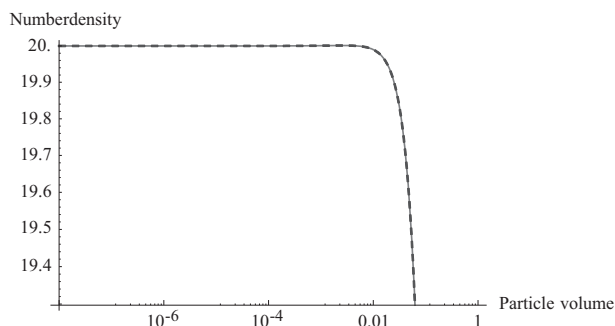


Figure 6. Number density function for particle breakage in a continuous system with $\Gamma(v) = v^2$ and $\beta(v/v') = 1/v$, binary break-up, $\alpha = 5$, and an exponential feed distribution. Solid line: ADM; dashed line: HPM.

The ADM and HPM have many advantages when compared to the exact solutions and can be introduced to overcome the difficulties arising in the calculations of the exact solutions by using the classical methods. The advantage here is that the calculations are simpler and more straightforward.

Following the published literature, the results demonstrate that ADM and HPM are powerful mathematical tools for solving integro-partial differential equations, and therefore can be widely applied in science and engineering problems.

Acknowledgment

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

The authors have declared no conflict of interest.

Symbols used

$n_m(v,t)$	$[L^{-6}]$	solution components
$n(v,t)dv$	$[L^{-3}]$	number of particles in size range v to $v + dv$ at time t
$S(v)$	$[L^{-6}T^{-1}]$	rate of nucleation of particles of size v
v, v'	$[L^3]$	particle volumes

Greek letters

$\beta(v/v')dv$	$[-]$	fractional number of particles formed in the size range v to $v + dv$ formed upon breakage of particle of volume v'
$\Gamma(v')$	$[T^{-1}]$	number of particles in the size range v to $v + dv$ disappearing per unit time by breakage
$\omega(v,v')$	$[L^3T^{-1}]$	aggregation frequency between two particles of volumes v and v'
$\theta(v)$	$[-]$	Heaviside theta function

Abbreviations

ADM	Adomian decomposition method
CQMOM	cumulative quadrature method of moments
DuQMoGeM	dual quadrature method of generalized moments
HPM	homotopy perturbation method
PBE	population balance equation

References

- [1] D. Ramkrishna, *Rev. Chem. Eng.* **1985**, 3, 49–95.
- [2] M. Kostoglou, A. J. Karabelas, *J. Colloid. Interface Sci.* **1994**, 613, 420–431.
- [3] S. Kumar, D. Ramkrishna, *Chem. Eng. Sci.* **1996a**, 51, 1311–1332.
- [4] S. Kumar, D. Ramkrishna, *Chem. Eng. Sci.* **1996b**, 51, 1333–1342.
- [5] S. Kumar, D. Ramkrishna, *Chem. Eng. Sci.* **1997**, 52, 4659–4679.
- [6] M. Attarakih, *Comput. Chem. Eng.* **2013**, 48, 1–13.
- [7] F. P. Santos, I. Senocak, J. L. Favero, P. L. C. Lage, *Comput. Chem. Eng.* **2013**, 55, 61–70.
- [8] A. Housseine, A. Bellagoun, H.-J. Bart, *Appl. Math. Comput.* **2011**, 218, 2249–2258.
- [9] G. Adomian, *Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method*, Kluwer Academic, Dordrecht **1994**.
- [10] G. Adomian, R. Rach, *J. Math. Anal. Appl.* **1986**, 113, 199–201.
- [11] A. M. Wazwaz, *Partial Differential Equations and Solitary Waves Theory*, Higher Education Press, Beijing, and Springer, Berlin **2009**.
- [12] J. H. He, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **1999**, 178, 257–262.
- [13] J. H. He, *Int. J. Non-Linear Mech.* **2000**, 35 (1), 37–43.
- [14] M. El-Shahed, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **2005**, 6 (2), 163–168.
- [15] J. H. He, *Appl. Math. Comput.* **2004**, 151, 287–292.
- [16] J. H. He, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **2005**, 6 (2), 207–208.
- [17] J. H. He, *Phys. Lett. A* **2005**, 374 (4–6), 228–230.
- [18] J. H. He, *Chaos Solitons Fractals* **2005**, 26 (3), 695–700.
- [19] J. H. He, *Phys. Lett. A* **2006**, 350 (1–2), 87–88.
- [20] Z. Odibat, S. Momani, *Chaos Solitons Fractals* **2008**, 36, 167–174.
- [21] J. H. He, *Appl. Math. Comput.* **2003**, 135, 73–79.
- [22] J. H. He, *Appl. Math. Comput.* **2004**, 156, 527–539.
- [23] M. Dehghan, F. Shakeri, *Phys. Scr.* **2008**, 78, 1–11.
- [24] M. Dehghan, R. Salehi, *Int. J. Numer. Methods Biomedical. Eng.* **2011**, 27, 524–540.
- [25] M. Dehghan, J. M. Heris, A. Saadatmandi, *Math. Methods Appl. Sci.* **2010**, 33, 1384–1398.
- [26] M. Dehghan, M. Shakourifar, A. Hamidi, *Chaos Solitons Fractals* **2009**, 39, 2509–2521.
- [27] M. Dehghan, A. Hamidi, M. Shakourifar, *Appl. Math. Comput.* **2007**, 189, 1034–1047.
- [28] M. Dehghan, R. Salehi, *Comput. Phys. Commun.* **2010**, 181, 1255–1265.
- [29] A. Siddiqui, R. Mahmood, Q. Ghori, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **2006**, 7 (1), 7–14.

- [30] A. Siddiqui, M. Ahmed, Q. Ghori, *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **2006**, 7 (1), 15–26.
- [31] S. Abbasbandy, *Appl. Math. Comput.* **2006**, 172, 485–490.
- [32] S. Abbasbandy, *Appl. Math. Comput.* **2006**, 173, 493–500.
- [33] J. P. Barone, W. Furth, S. Loynaz, *Can. J. Chem. Eng.* **1980**, 58, 137–138.
- [34] A. D. Randolph, M. A. Larson, *Theory of Particulate Processes*, 2nd ed., Academic Press, New York **1988**.
- [35] J. D. Lister, D. J. Smit, M. J. Hounslow, *AIChE J.* **1995**, 41, 591–603.
- [36] D. Ramkrishna, *Population Balances*, Academic Press, San Diego, CA **2000**.
- [37] L. M. Ribeiro, P. F. R. Regueiras, M. M. L. Guimaraes, C. M. C. Madureira, J. J. C. Cruz-Pintu, *Comput. Chem. Eng.* **1995**, 19, 333–344.
- [38] K. J. Valentas, A. R. Amundson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **1996**, 5, 533–542.
- [39] K. J. Valentas, O. Bilois, A. R. Amundson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **1966**, 5, 271–279.
- [40] S. Kumar, R. Kumar, K. S. Gandhi, *Chem. Eng. Sci.* **1993**, 48, 2025–2038.
- [41] S. Kumar, D. Ramkrishna, *Chem. Eng. Sci.* **1996a**, 51, 1311–1332.
- [42] W. Podgorska, J. Baldyga, *Chem. Eng. Sci.* **2001**, 56, 741–746.
- [43] K. Abbaoui, Y. Cherruault, *Comput. Math. Appl.* **1994**, 28, 103–109.
- [44] K. Abbaoui, Y. Cherruault, *Comput. Math. Appl.* **1995**, 29, 103–108.
- [45] Y. Cherruault, G. Adomian, *Math. Comput. Model.* **1993**, 18, 103–106.
- [46] R. M. Ziff, E. D. McGrady, *J. Phys. A: Math. Gen.* **1985**, 18, 3027–3037.
- [47] M. Sommer, F. Stenger, W. Peukert, N. J. Wagner, *Chem. Eng. Sci.* **2006**, 61, 135–148.

Résumé

L'équation de bilan de population a été utilisée pour modéliser une variété de systèmes particuliers. Cependant, quelques cas de solutions analytiques pour le processus de rupture existent, où la plupart de ces solutions sont pour le réacteur agité discontinu. Les solutions analytiques de l'EBP pour des processus particuliers sous l'influence de la rupture de particules dans les processus discontinu et continu sont étudiées. Les solutions analytiques sont obtenues à partir de l'équation intégral-différentielle de bilan de population régissant la fonction de densité de distribution en tailles des particules par deux approches analytiques. Le premier est la méthode de décomposition d'Adomian (MDA) et le second est la méthode de perturbation homotopique (MPH) MDA produit une série infinie qui converge uniformément à la solution exacte du problème, alors que le MPH convertit un problème difficile en problème simple, qui peut être facilement manipulé. Les résultats obtenus indiquent que les deux méthodes évitent les problèmes de stabilité numériques qui caractérise souvent les techniques numériques générales dans ce domaine.

Mots-clé : Equation de bilan de population (EBP), méthode de décomposition d'Adomian (MDA), méthode de perturbation homotopique (MPH), rupture.

Abstract

The population balance equation (PBE) has been used to model variety of particulate systems. However, few cases of analytical solutions for the breakage process exist, where most of these solutions are for the batch stirred vessel. The analytical solutions of the PBE for particulate processes under the influence of particle breakage in batch and continuous processes are studied. Analytic solutions are obtained from the integro-differential population balance equation governing the particle size distribution density function by two analytical approaches. The first one is the Adomian Decomposition Method (ADM) and the second one is the Homotopy Perturbation Method (HPM). ADM generates an infinite series which converges uniformly to the exact solution of the problem, while the HPM converts a difficult problem into a simple one, which can be easily handled. The results obtained indicate that the two methods avoid numerical stability problems that often characterizes general numerical techniques in this area.

Key words: population balance equation, the Adomian decomposition method, homotopy perturbation, breakage.

ملخص

تستخدم معادلة التوازن السكاني من أجل محاكاة عدة ميادين مختلفة، غير أن بعض الحالات من الحلول التحليلية في عملية تمزق الجسيمات موجودة، حيث أن أغلبية هذه الحلول هي من أجل مفاعل خلاط منقطع. لقد درست الحلول التحليلية لمعادلة التوازن السكاني من أجل العمليات الجزئية تحت تأثير كسر الجزيئات في المفاعلات المنقطعة والمتواصلة. الحلول لمعادلة التوازن السكاني تمثل دالة كثافة توزيع حجم integro-différentielle التحليلية وجدت إنطلاقاً من المعادلة الجزئية بالإعتماد على طريقتين تحليليتين :

طريقة لأولى طريقة التحلل لAdomian

و طريقة الثانية طريقة الاضطراب ل He.

تنتج سلسلة لامنتهية تتقارب بانتظام سوية إلى الحل الصحيح للمسألة طريقة التحلل

طريقة التحلل تنتج سلسلة لامنتهية تتقارب بانتظام سوية إلى الحل الصحيح للمسألة، حينئذ تحول طريقة الاضطراب مسألة عسيرة إلى مسألة بسيطة والتي يمكن أن تعالج بسهولة.

النتائج المتحصل عليها توضح أن كلتا الطريقتين تتجنب مشاكل الإستقرار العددي والتي تميز في الغالب التقنيات العددية في هذا المجال

الكلمات المفتاحية: معادلة التوازن السكانية طريقة التحلل لAdomian . طريقة الاضطراب ل He تمزق الجسيمات