



HAL
open science

MODELISATION DISCRETE DE L'AGGLOMERATION DES FINES MINERALES EN SUSPENSION

A Kimbonguila, S Rémond

► **To cite this version:**

A Kimbonguila, S Rémond. MODELISATION DISCRETE DE L'AGGLOMERATION DES FINES MINERALES EN SUSPENSION. Douzième édition des Journées scientifiques du Regroupement francophone pour la recherche et la formation sur le béton (RF)2B, Université du Luxembourg, Jul 2011, Luxembourg, Luxembourg. pp.93-102. hal-01095738

HAL Id: hal-01095738

<https://hal.science/hal-01095738>

Submitted on 18 Dec 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

MODELISATION DISCRETE DE L'AGGLOMERATION DES FINES MINERALES EN SUSPENSION

A. Kimbonguila^{a,b}, S. Rémond^{a,b}

^aUniversité Lille Nord de France, F-59000 Lille, France

^bLGCgE, EMDouai, MPE-GCE, F-59508 Douai, Cedex

adolphe.kimbonguila@mines-douai.fr; sebastien.remond@mines-douai.fr

RESUME

La demande en eau des fines est une caractéristique importante pour la formulation des coulis, mortiers et bétons. Cette demande en eau dépend étroitement de l'agglomération des fines en suspension qui piège une partie de l'eau libre. Dans cette étude, une formulation aux éléments discrets (DEM) (Cundall, et Strack, 1979) est utilisée afin d'étudier la fragmentation des agglomérats lors d'un cisaillement et de caractériser, à l'équilibre, la compacité de ces agglomérats. Le modèle permet la prise en compte des forces de contact, des forces de Van der Waals et des forces électrostatiques. Les forces hydrodynamiques sont pour le moment décrites à partir de la force de Stokes. La restructuration des agglomérats en fonction du gradient de vitesse appliqué est étudiée. Les résultats montrent que la taille et la dimension fractale des agglomérats varient avec le gradient de vitesse.

Mots clés : DEM, agglomérat, dimension fractale, fines, cisaillement.

1. INTRODUCTION

La valorisation des fines dans les bétons constitue un enjeu majeur pour la fabrication de matériaux de construction compatibles avec les exigences du développement durable. Toutefois, l'augmentation de la quantité de particules fines dans un béton accroît la demande en eau pour le maintien de son ouvrabilité ce qui représente un frein à leur valorisation dans les bétons. L'influence des différents paramètres (surface spécifique, compacité, morphologie, composition minéralogique des particules, composition de la solution interstitielle, etc.) sur la demande en eau des fines doit ainsi être maîtrisée afin de pouvoir adapter les méthodes de formulation actuelles aux bétons contenant des volumes importants de fines.

L'objectif de ce travail est d'étudier la microstructure des suspensions de fines de manière à relier leur demande en eau aux caractéristiques physico-chimiques des particules qui les composent. Un modèle numérique aux éléments discrets permettant de simuler le comportement d'assemblages granulaires non browniens et non colloïdaux constitués de fines particules viscoélastiques rugueuses de forme sphérique interagissant dans un milieu sec ou saturé a été développé. Les interactions pris en compte dans ce modèle peuvent être de nature répulsive ou attractive et d'origine mécanique, hydrodynamique et physico-chimique. Nous étudions l'évolution d'agglomérats de particules sphériques générés par un mécanisme CCA (Cluster-Cluster Aggregation) de diamètre 1 μ m dans une suspension soumise à différents gradients de vitesse. La taille et le nombre d'agglomérats formés, la dimension fractale et la compacité moyenne des agglomérats sont étudiés au cours du temps et à l'équilibre.

2. PRESENTATION DU MODELE AUX ELEMENTS DISCRETS

2.1 Forces agissants sur les agglomérats

2.1.1 Forces de contact entre particules

Le modèle pour la prise en compte des forces de contact et du roulement utilisé dans cette étude est similaire à celui présenté par Yang et al. (Yang et al. 2000) et déjà utilisé dans une précédente étude sur la percolation des fines particules dans un milieu poreux (Rémond, 2010).

Les composantes normale élastique et dissipative de la force de contact de j sur i sont données par l'Equation 1.1 (Johnson, 1985, Brilliantov, 1996) :

$$\vec{F}_{n,ij} = - \left[\frac{2}{3} \bar{E} \sqrt{\bar{R}} \delta_n^{3/2} + \gamma_n \bar{E} (\bar{R} \delta_n)^{1/2} \dot{\delta}_n \right] \vec{n}_{ij} \quad (1.1)$$

où δ_n et $\dot{\delta}_n$ sont respectivement le recouvrement et la vitesse normale relative, $\bar{R} = a_i a_j / (a_i + a_j)$ représente le rayon effectif, γ_n le coefficient d'amortissement normal $\bar{E} = E/2(1 - \nu^2)$, E , ν et $\vec{n}_{ij} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i) / |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$ sont respectivement le module d'Young, le coefficient de Poisson du matériau et le vecteur normal unitaire au point de contact avec \vec{r}_i , \vec{r}_j respectivement, les vecteurs positions des particules i et j .

La composante tangentielle de la force de contact exercée sur i par la particule j est calculée à partir de la théorie de Mindlin et Deresiewicz (Mindlin et Deresiewicz, 1953, Langston, 1995) (Equation 1.2).

$$\vec{F}_{t,ij} = -\mu_s |\vec{F}_{n,ij}| \left[1 - \left(1 - \frac{\min(|\vec{\delta}_t|, \delta_{max})}{\delta_{max}} \right)^{3/2} \right] \frac{\vec{\delta}_t}{|\vec{\delta}_t|}, \quad |\vec{\delta}_t| \leq \delta_{max} \quad (1.2)$$

où $\vec{\delta}_t$ est le vecteur déplacement tangential cumulé (tenant compte de l'histoire du chargement), δ_{max} est le déplacement tangential maximal définissant le seuil de plasticité (Equation 1.3) (Langston, 1994) et μ_s le coefficient de frottement particule-particule ou particule-parois. L'Equation 1.2 se réduit naturellement au critère de Coulomb lorsque le déplacement tangential cumulé atteint la valeur maximale δ_{max} .

$$\delta_{max} = \mu_s \left(\frac{2 - \nu}{2(1 - \nu)} \right) \delta_n \quad (1.3)$$

Les forces de contact étant calculées au point de contact plutôt qu'au centre de masse de la particule, elles génèrent un couple entraînant la rotation de la particule. Généralement, ce couple est le résultat de deux contributions asymétriques (contribution de la composante tangentielle et contribution de la composante normale, généralement appelé couple de frottement de roulement).

La prise en compte des moments dus aux forces tangentielles et au roulement est donnée par l'Equation 1.4 :

$$\vec{M}_{ij} = a_i \left(\vec{n}_{ij} \wedge \vec{F}_{t,ij} - \mu_r |\vec{F}_{n,ij}| \frac{\vec{\omega}_i}{|\vec{\omega}_i|} \right) \quad (1.4)$$

où μ_r est le coefficient de roulement.

2.1.2 Forces physico-chimiques

Les forces attractives (forces de Van de Waals) et répulsives (forces électrostatiques) sont calculées à partir de la théorie classique DLVO et permettent ainsi de tenir compte de l'influence de la composition interstitielle de la solution et de la nature minéralogique des particules sur l'agglomération. La distance d'application de ces forces est théoriquement infinie mais leur intensité décroît très rapidement avec l'augmentation de la distance de séparation des particules. Dans le modèle, ces forces sont donc calculées pour des distances de séparation inférieures à $h_{max}=100$ nm.

Les forces de van der Waals

Les forces de van der Waals sont calculées à partir de l'approximation de Hamaker (Hamaker, 1937, Israelachvili, 1991) qui considère que les interactions sont purement additives. Cette formulation cause un problème de singularité lorsque la distance de séparation est nulle. Néanmoins, cette

formule (Equation 1.5) est bien applicable puisqu'en réalité, les surfaces ne sont pas lisses et ne peuvent s'approcher à des distances inférieures à h_{\min} . Dans le modèle, cette singularité est traitée en plafonnant la force de Van der Waals à la valeur calculée pour une distance $h_{\min}=1$ nm.

$$\vec{F}_{ik}^{vdw} = \frac{H_a \bar{R}}{6h_{ij}^2} \vec{n}_{ij} \quad (1.5)$$

où H_a est la constante de Hamaker des deux particules i et j en interaction dans l'eau à une température de 25°C, h_{ij} est la distance¹ séparant les surfaces des particules i et j . La constante de Hamaker utilisée dans cette étude est non-retardée, c'est-à-dire qu'elle ne dépend pas de la distance de séparation des particules.

Forces de répulsion électrostatique

Les forces de répulsion électrostatiques sont décrites à partir de la théorie de la double couche initialement développée pour étudier les suspensions colloïdales qui sont souvent constituées de particules avec des surfaces chargées (Hunter, 1987, Russell, 1989). La force de répulsion électrostatique \vec{F}_{ij}^e est obtenue à partir de l'Equation 1.6.

$$\vec{F}_{ij}^e = -4\pi\epsilon_r\epsilon_0\psi^2\kappa \left(\frac{a_i a_j}{a_i + a_j} \right) \frac{e^{-\kappa h_{ij}}}{1 + e^{-\kappa h_{ij}}} \vec{n}_{ij} \quad (1.6)$$

où ϵ_r , ϵ_0 , ψ , κ sont respectivement la permittivité relative, la permittivité du vide, la charge de surface et l'inverse de l'épaisseur de la double couche (paramètre de Debye).

2.1.3 Forces hydrodynamiques

Il est difficile voire impossible d'évaluer rigoureusement la force de traînée agissant sur les particules en raison de la structure complexe des agglomérats. En première approximation, la force de traînée sur les particules primaires de l'agglomérat est souvent calculée à partir de la relation de Stokes applicable dans le cas d'une particule sphérique en écoulement uniforme dans un fluide newtonien de viscosité η (Higashitani et Limura, 1998, Zeidan et al. 2007, Limura et al. 2009, Becker et al. 2009, Becker et al. 2010, Eggersdorfer et al. 2010). Mais elle surestime certainement la force de traînée parce que seule une particule de l'agglomérat est exposée à l'écoulement dans la plupart des cas.

$$\vec{F}_i^h = -6\pi a_i \eta (\vec{V}_i - \vec{U}) \quad (1.7)$$

où \vec{U} est la vitesse du fluide et η sa viscosité.

Le moment de traînée dû à la vorticit  du fluide $\vec{\Omega} = 1/2\vec{\nabla} \wedge \vec{U}$ est donn  par la relation (1.8) :

$$\vec{M}_i^h = -8\pi a_i^3 \eta (\vec{\omega}_i - \vec{\Omega}) \quad (1.8)$$

En g n ral, cette approximation de Stokes reste valable pour la majorit  des syst mes de particules en suspension dilu es dans l'eau sauf dans le cas o  la concentration des mati res en suspension pourrait modifier sensiblement la viscosit  du m lange suite   un cisaillement.

¹ $h_{ij} = |\vec{x}_j - \vec{x}_i| - (a_i + a_j)$ si $h_{ij} > h_0$, sinon $h_{ij} = h_0$.

2.2 Equations du mouvement

La seconde loi de Newton est utilisée pour décrire individuellement le mouvement en translation et en rotation de chaque particule (Equations 1.9 et 1.10). Ces équations sont ensuite résolues numériquement à l'aide d'un schéma d'Euler explicite.

$$m_i \frac{d\vec{V}_i}{dt} = \vec{F}_i^h + \frac{4}{3}\pi a_i^3 (\rho_i - \rho_f) \vec{g} + \sum_{j=1}^{nc_i} \vec{F}_{ij}^c + \sum_{k=1}^{k_i} (\vec{F}_{ik}^v + \vec{F}_{ik}^e) \quad (1.9)$$

$$I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \vec{M}_i^h + \sum_{j=1}^{nc} \vec{M}_{ij} \quad (1.10)$$

où \vec{V}_i et $\vec{\omega}_i$ sont respectivement les vecteurs vitesses translation et rotation de la particule i , \vec{F}_{ij}^c , \vec{M}_{ij} et \vec{M}_i^h sont respectivement les vecteurs force de contact (exercé par la particule j sur la particule i), le moment des forces tangentielles et le moment dû à la résistance du fluide. \vec{F}_{ik}^v et \vec{F}_{ik}^e sont les vecteurs forces, respectivement de van der Waals et de répulsion électrostatique. \vec{F}_i^h est le vecteur force hydrodynamique. m_i , I_i , ρ_i et ρ_f , décrivent respectivement la masse, le moment d'inertie, les masses volumiques de la particule et du fluide environnant. Le terme $\frac{4}{3}\pi a_i^3 (\rho_i - \rho_f) \vec{g}$ englobe les forces volumiques.

3. SIMULATIONS NUMERIQUES

3.1 Principe et paramètres de simulation

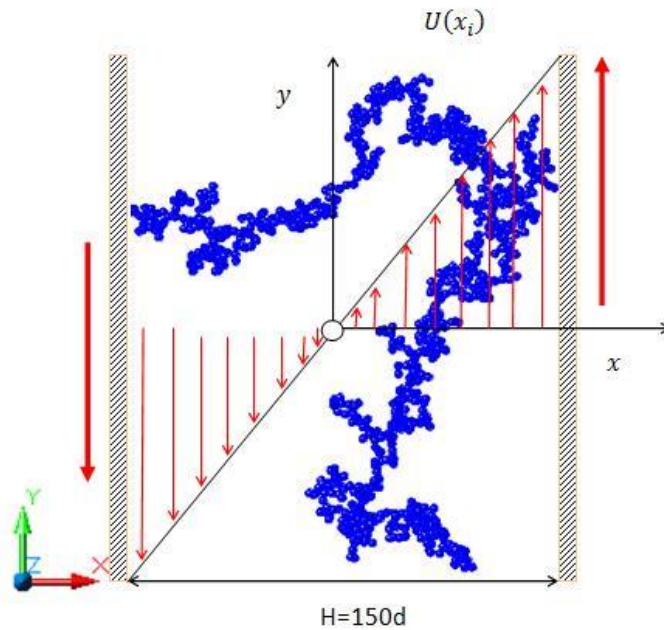


Figure 1 Illustration du principe des simulations et des conditions de cisaillement.

Initialement, un seul agglomérat constitué de 1024 particules primaires de taille $1\mu\text{m}$ est placé au centre de la cellule de cisaillement de dimension $150d \times 150d \times 150d$ (fraction volumique solide $\phi_0 \approx 1,59 \times 10^{-4}$), confiné entre deux plaques parallèles de longueur infinie séparées d'une distance H sur lesquelles on impose une vitesse constante au cours du temps, égale et opposée afin de reproduire numériquement une expérience de cisaillement de Couette (Figure 1).

Le profil de vitesse du fluide est linéaire, la vitesse initiale des particules est fixée en fonction de la vitesse d'écoulement au centre de la particule. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées dans la direction de l'écoulement.

L'agglomérat est immergé dans un fluide newtonien incompressible, contenant 0,176 M de NaOH, soumis à un écoulement de cisaillement simple. Seize taux de cisaillement sont étudiés $1 \leq \dot{\gamma}(1/s) \leq 10^5$ afin de rechercher un taux de cisaillement minimal permettant de casser un agglomérat et un taux de cisaillement maximal responsable de la dispersion complète de l'agglomérat. L'exploitation des simulations est faite en comptant le nombre moyen de particules par agglomérat et le nombre d'agglomérats en fonction du temps.

Les principaux paramètres utilisés dans cette étude sont regroupés dans le tableau 1.

Tableau 1 Résumé des principaux paramètres de simulation

Dénomination	valeurs	Unité
Paramètres Matériau et micromécaniques		
Matériau étudié : Billes de verre microniques		
Diamètre des particules (d)	10^{-6}	m
Masse volumique ρ (particules, parois)	2500	kg/m ³
Module d'Young du matériau E	10^7	Pa
Coefficient de Poisson ν	0,29	-
Coefficient de frottement de glissement μ_s	0,3	-
Coefficient de frottement de roulement μ_r	0,002	-
Coefficient d'amortissement normal γ	0,00002	-
Physico-chimiques		
Constante de Hamaker H_a	10^{-20}	J
Distance minimale de coupure h_0	1	nm
Concentration de la solution interstitielle NaOH	0,176	mol/litre
Epaisseur de la double couche κ^{-1}	0,73	nm
Charge de surface $\psi \approx \zeta$ (potentiel zêta)	25	mV
Hydrodynamique		
Densité du fluide ρ_f	1000	kg/m ³
Viscosité du fluide η	0,001	Pa.s
Taux de cisaillement $\dot{\gamma}$	$1-10^5$	s ⁻¹
Température de la solution	25°C	298,5K
Nombre de Reynold ($R_e = \frac{\rho V d}{\eta} = 4\rho_i \dot{\gamma} a_i^2 / \eta$)	$(2,5 \times 10^{-6} - 0,25)$	
Autre paramètre de simulation		
Pas de temps simulation	10^{-10}	s

3.2 Génération du système initial

La technique de génération du système initial utilisée dans cette étude a été proposée par Botet et al. (Botet, 1984). Le principe consiste à construire un agglomérat tridimensionnel contenant $n_p = 2^k$ particules primaires à l'aide d'un mécanisme de croissance appelé CCA (Cluster-Cluster Aggregation). Le nombre de particules primaires n_p constituant l'agglomérat est fixé au départ, on commence par construire indépendamment $\frac{n_p}{2}$ agglomérats de deux particules primaires, ensuite ces agglomérats de 2 particules diffusent dans l'espace de simulation pour construire des agglomérats de 4 particules, la procédure est reproduite jusqu'à obtenir un agglomérat contenant 2^k particules primaires retenues par les forces de cohésion de type de van der Waals. L'agglomérat construit est fractal et obéit à la relation (1.11).

$$n_p = k_f \left(\frac{R_g}{a} \right)^{D_f} \quad (1.11)$$

R_g est le rayon de giration, D_f la dimension fractale et k_f le facteur de structure. Cette procédure nous a permis de générer un agglomérat de 1024 particules primaires avec une dimension fractale $D_f = 1,78$, déterminée par régression linéaire à partir de la relation 1.10, ce résultat est en bon accord avec la dimension fractale obtenue numériquement par Eggersdorfer et al. (Eggersdorfer, 2010), $D_f = 1,79 \mp 0,03$ calculée par la fonction de corrélation densité-densité (Teixeira et al. 1986) et expérimentalement par Meakin (Meakin, 1999), $D_f = 1,78$.

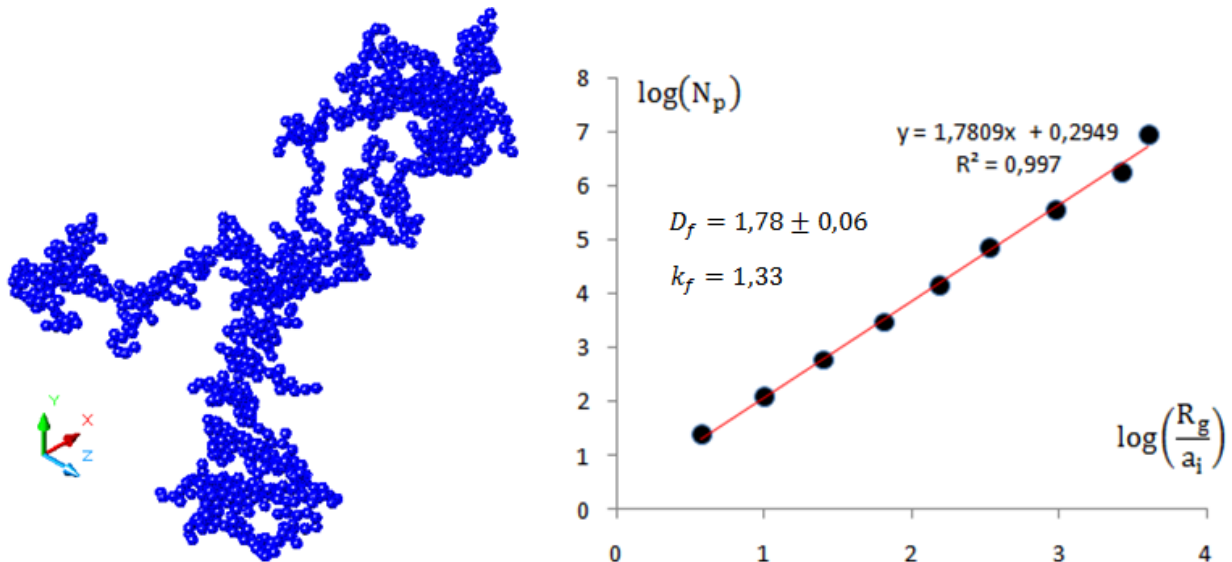


Figure 2 Agglomérat fractal de 1024 particules primaires généré par CCA et calcul des caractéristiques fractales.

3.3 Résultats et discussions

La Figure 3 présente les évolutions du nombre d'agglomérats et du nombre moyen de particules primaires par agglomérat en fonction du temps pour différentes valeurs du gradient de vitesse supérieures à 750 s^{-1} . On observe tout d'abord que le gradient de vitesse influence fortement la rupture des agglomérats. Plus le gradient de vitesse est élevé, plus le nombre de fragments obtenus augmente et plus la taille de ces fragments diminue.

On observe également que le nombre et la taille des agglomérats se stabilise progressivement au cours du cisaillement pour atteindre un état stationnaire. Les simulations réalisées n'ont pas permis d'atteindre totalement cet état stationnaire pour les gradients de vitesse les plus faibles (750 et 1000 s^{-1} sur la figure 3). Néanmoins, nos simulations montrent que cet état est atteint pour les différents gradients de vitesse simulés (supérieurs à 1000 s^{-1}) au bout d'un temps caractéristique tel que $t\dot{\gamma} \approx 10$ ($\dot{\gamma} > 10^3 \text{ s}^{-1}$), ce qui est en bon accord avec les temps caractéristiques donnés dans la littérature pour des suspensions diluées (Eggersdorfer, 2010).

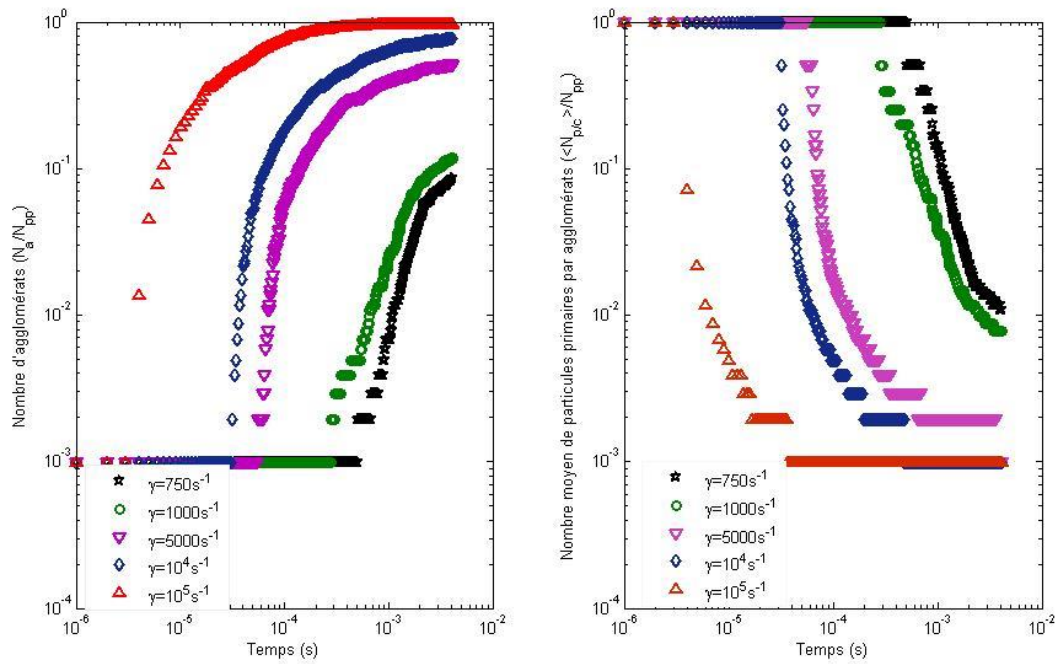


Figure 3 Evolution temporelle du nombre d'agglomérats (à gauche) et du nombre moyen de particules primaires par agglomérat (à droite) en fonction du tau de cisaillement.

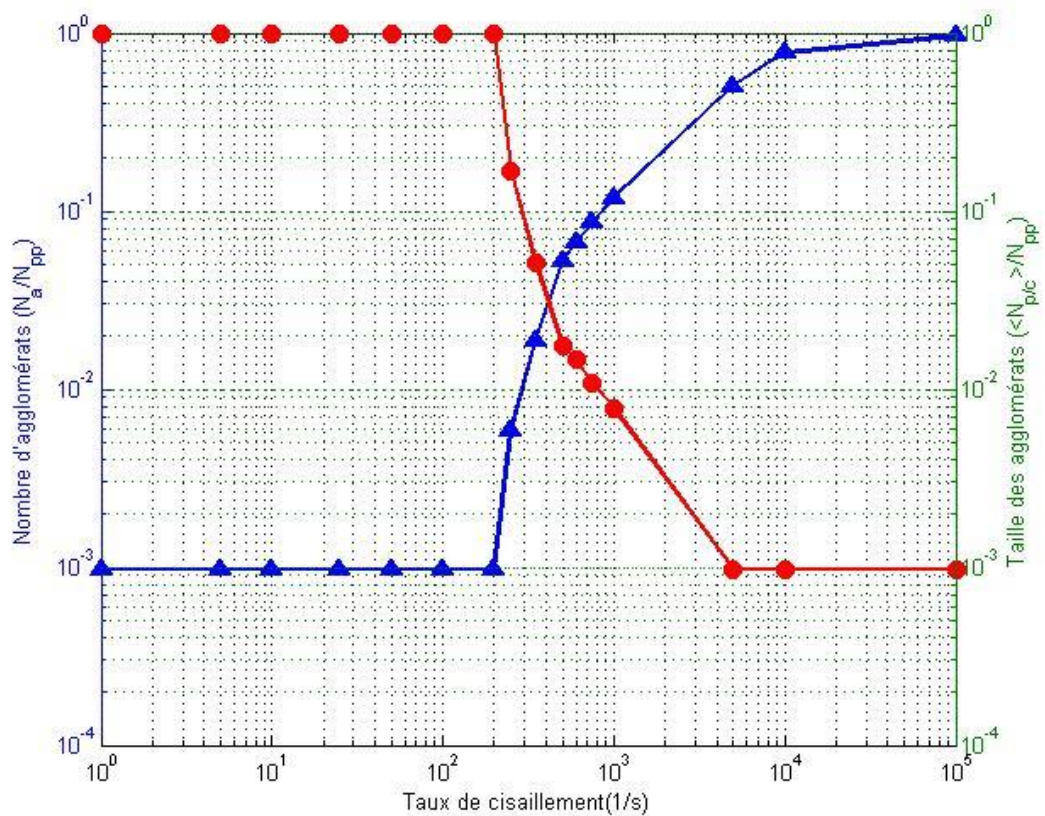


Figure 4 : Nombre et taille des agglomérats en fonction du taux de cisaillement à l'état stationnaire.

Le nombre et la taille d'agglomérats à l'équilibre dépendent étroitement du taux de cisaillement appliqué. La figure 4 montre les variations du nombre d'agglomérats et du nombre moyen de particule primaire par agglomérat en fonction des taux de cisaillement appliqués une fois que l'état stationnaire a été atteint. Pour un gradient de vitesse inférieur à 250 s^{-1} , il n'y a pas de rupture de l'agglomérat, ce dernier se déforme au cours du cisaillement mais sa dimension fractale varie assez peu (elle est de 1.76 en fin de simulation) ce qui suggère que l'agglomérat se restructure très peu au cours du cisaillement. Un fort gradient de vitesse conduit à la dispersion totale et rapide de la suspension.

La figure 5 présente une vue du système cisailé à l'état d'équilibre pour un taux de cisaillement de 1000 s^{-1} . L'agglomérat initial a été décomposé en 121 agglomérats de taille plus petite et de morphologies différentes. Les agglomérats obtenus à l'état d'équilibre sont fractals de dimension fractale comprise entre 1 et 2,03 avec une moyenne de l'ordre de 1,53. Cette baisse de dimension fractale moyenne est due à la prédominance des petits agrégats souvent linaires et dont la dimension fractale est égale à l'unité. Globalement, aux forts gradients de vitesse, les agglomérats sont constitués d'un faible nombre de particules qui ont tendance à s'aligner dans la direction de l'écoulement.

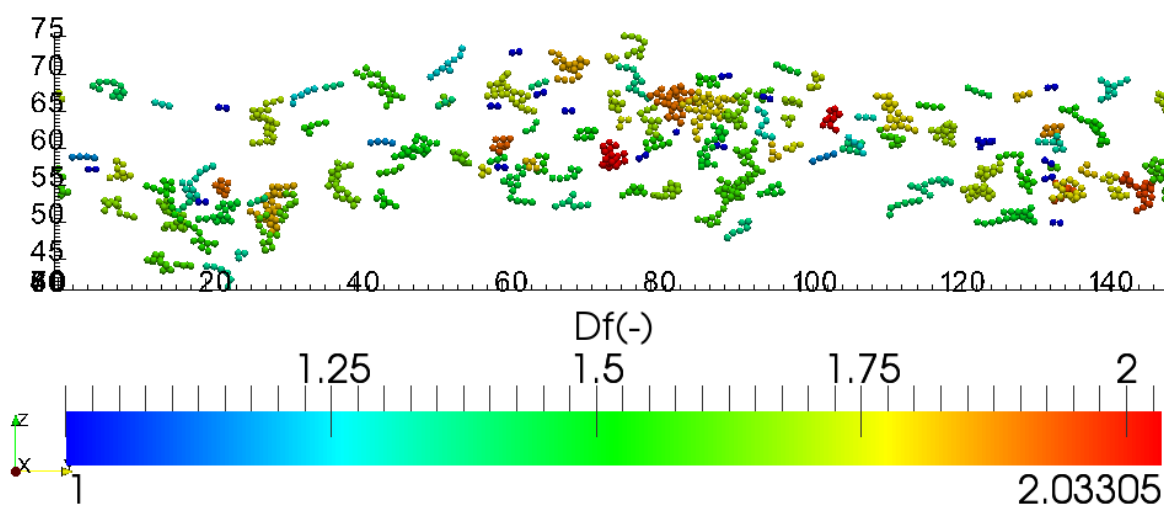


Figure 5 : Agglomérats formés à l'état d'équilibre, après un cisaillement à $\dot{\gamma} = 1000 \text{ s}^{-1}$.

Aux gradients de vitesses plus faibles, la structure des agglomérats est plus complexe, ils contiennent un nombre de particules plus élevé avec des embranchements et une structure lâche. Ce résultat diffère de celui obtenu par Eggersdorfer sur des suspensions de particules de $0.5 \mu\text{m}$ de diamètre dans lesquelles seule la force de Van der Waals était prise en compte. Pour ces suspensions, le cisaillement conduit généralement à la formation d'agglomérats compacts de dimension fractale supérieure à 2 (Eggersdorfer, 2010). Nous pensons que les forces électrostatiques prises en compte dans nos simulations et calculées pour une solution interstitielle contenant $0,176 \text{M}$ de NaOH sont responsables de cette modification de structure. Une étude plus systématique de l'influence de la composition de la solution interstitielle (influence du pH et de la nature des espèces chimiques en solution) est en cours.

En traçant la taille moyenne des agglomérats à l'équilibre $\langle n_p \rangle$ en fonction de la contrainte de cisaillement hydrodynamique $\dot{\gamma}\eta$ pour des taux de cisaillements conduisant à la rupture de l'agglomérat, on obtient une loi de puissance donnée par l'Equation 1.11, cependant la situation est différente pour de faibles taux de cisaillement pour lesquels l'agglomérat ne casse pas.

$$\langle n_p \rangle = K(\dot{\gamma}\eta)^{-q} \quad (1.12)$$

où η est la viscosité du fluide, K une constante proportionnelle à la force de cohésion, q un exposant caractéristique de la rupture des agglomérats estimé ici à 0,822. Cette valeur est tout à fait comparable avec les résultats de la littérature obtenus numériquement (Eggersdorfer et al. 2010, Higashitani et al et Harada et al. 2006) et expérimentalement (Sonntag et Russel, 1986).

4. CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Une modélisation discrète a été développée afin de simuler le cisaillement d'un agglomérat dans un écoulement de Couette. Ce modèle tient compte des forces de contact normales et tangentielles entre les particules, des forces de Van der Waals, des forces électrostatiques et de la force de Stokes. Il permet d'étudier l'évolution de la taille et de la structure des agglomérats de particules minérales en suspension sous l'effet d'un gradient de vitesse.

Les premières simulations réalisées sur un agglomérat initial composé de 1024 particules de diamètre $1\mu\text{m}$ montrent tout d'abord que le système converge vers un état stationnaire au cours du cisaillement. L'obtention de cet état est d'autant plus rapide que la vitesse de cisaillement est élevée. Pour des gradients de vitesse inférieurs à 250 s^{-1} , il n'a pas été possible de rompre l'agglomérat. La taille des agglomérats à l'équilibre dépend étroitement du gradient de vitesse appliqué, plus le gradient est élevé, plus le nombre de particules primaires par agglomérat diminue. Une loi puissance entre la taille des agglomérats et la contrainte de cisaillement hydrodynamique permet de décrire correctement cette dépendance. L'exposant obtenu, caractérisant la fragmentation des agglomérats au cours du cisaillement, est en très bonne adéquation avec les observations expérimentales et les résultats numériques obtenus dans la littérature.

La structure des agglomérats obtenus, notamment pour des gradients de vitesse élevés, est en revanche assez différente de certains résultats de la littérature. Les agglomérats sont en effet souvent composés de particules qui s'alignent dans la direction de l'écoulement avec une dimension fractale proche de l'unité. La prise en compte des forces électrostatiques dans notre étude, contrairement aux travaux cités, est sans doute responsable de ces différences. Une campagne de simulations numériques plus systématique est en cours afin d'étudier précisément l'influence de la composition chimique de la solution interstitielle (pH et nature des espèces chimiques en solution) sur la structure des agglomérats à l'équilibre.

5. REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUE

- Becker, V., Schlauch, E., Behr, M., Briesen, H. (2009), Restructuring of colloidal aggregates in shear flows and limitations of the free-draining approximation, *Journal of Colloid and Interface Science*, 339(2): 362-372.
- Becker, V. and Briesen, H. (2010), A master curve for the onset of shear induced restructuring of fractal colloidal aggregates, *Journal of Colloid and Interface Science*, 346(1): 32-36.
- Botet, R., Jullien, R. and Kolb, M. (1984), *J. Phys. A: Math. Gen.* 17 : L75.
- Brillianton, N.V., Pöschel, T. (1998). *Euro physics Letters*, 42:511–516.
- Brilliantov, N. V., Spahn, F., Hertzsch, J.M. and Pöschel, T. (1996), *Physical Review E* 53:5382
- Cundall, P.A., Strack, O.D.L., (1979), *Geotechnique*, 29:47–65.
- Eggersdorfer, L., Kadeau, D., Herrmann, H.J., S.E. Pratsinis (2010). *Journal of Colloid and Interface Science*, 342:261-268.
- Hamaker, H.C., (1937). The London–van der Waals attraction between spherical particles. *Physica (Amsterdam)* 4:1058–1072.
- Harada, S., Tanaka, R., Nogami, H. Sawada, M. (2006), Dependence of fragmentation behavior of colloidal aggregates on their fractal structure. *J. Colloid Interface Sci.*, 301: 123-129.
- Harada, S., Tanaka, H., Nogami, M; Sawada, Asakura, K. (2007), *Colloid Surf A-Physicochem. Eng. Asp.* 302:396-402.
- Hertz, H., (1882). Über die Berührung fester elastischer Körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 92:156–171.
- Higashitani, K., Limura, K., Sanda, H. (2001), Simulation of deformation and breakup of large aggregates in flows of viscous fluids. *Chem. Eng. Sci.* 56: 2927-2938.
- Israelachvili, (1991), *Intermolecular and Surface Forces* (second ed.), Academic Press, London
- Johnson, K. L. (1985), Contact Mechanics, *Cambridge University Press*, Cambridge, 1985.
- Langston, P.A., Tuzun, U., Heyes, D. M. (1995), Discrete element simulation of granular flow in 2D and 3D hoppers: dependence of discharge rate and wall stress on particle interactions. *Chemical Engineering Science*, 50 : 967-987.
- Limura, K., Watanabe, S., Suzuki, M., Hirota, M., Higashitani, K. (2009), Simulation of entrainment of agglomerates from plate surfaces by shear flows. *Chemical Engineering Science*, 64:1455-1461.

- Meakin, P. I. Majid, J., Havlin, S. and Stanley, H.E.(1984), *J. Phys. A: Math. Gen.*, 17:L975J.
- Meakin, P.(1999), *J. Sol-Gel Sci. Technol.*, 15 : 97.
- Teixeira, J. In: H.E. Stanley and N. Ostrowsky(1986), Editors, *On Growth and Form – Fractal and Non-Fractal Patterns in Physics*, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute, Martinus Nijhoff, Boston .
- Mindlin, R.D., Deresiewicz, H., (1953). Elastic spheres in contact under varying oblique forces. *Journal of Applied Mechanics*, 20:327–344.
- Remond, S. (2010), DEM simulation of small particles clogging in the packing of large beads, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(21), 4485-4496.
- Selomulya, C., (2001), The effect of shear on flocculation and floc size/ structure, PhD thesis, University of New South Wales, Australia.
- Sonntag, R.C., Russel, W. B.(1986), *Journal Colloid Interface Science*, 113:399
- Yang, R.Y., Zou, R.P., Yu, A.B., (2000). Computer simulation of the packing of fine particles. *Physical Review E*, 62:3900–3908.
- Zeidan, M., (2006), Colloidal aggregation with application to soot mediated lubricating fluids: a multi-level simulation approach, PhD thesis, University of Leeds, UK.