



HAL
open science

Le tenseur d'inertie comme descripteur morphologique - Application à l'agrégation de petites particules

Frédéric Gruy

► **To cite this version:**

Frédéric Gruy. Le tenseur d'inertie comme descripteur morphologique - Application à l'agrégation de petites particules. STPMF 2015 colloque joint Sciences et Technologie des Poudres (STP) / Poudres Matériaux Frittés (PMF), l'Institut Jean Lamour (IJL UMR 7198) ;; Laboratoire d' Études des des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3 UMR 7239); Laboratoire d'Ingénierie des Biomolécules (LIBio EA 4367); Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP UMR 7274), Apr 2015, Nancy, France. pp.4.2-1 à 4.2-7. hal-02171106

HAL Id: hal-02171106

<https://hal.science/hal-02171106v1>

Submitted on 24 Aug 2022

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.

Le tenseur d'inertie comme descripteur morphologique Application à l'agrégation de petites particules

GRUY Frédéric

Ecole Nationale Supérieure des Mines, 158 Cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne, Cedex 2

Résumé

La précipitation conduit souvent à des particules dotées d'une morphologie complexe, car se présentant sous forme d'agrégats. La modélisation de l'agrégation repose sur la description de l'acte élémentaire de collision entre deux particules, primaires ou agrégats. La constante cinétique correspondante, appelée noyau d'agrégation, doit tenir compte des aspects physico-chimiques, hydrodynamiques et morphologiques de l'agrégation. Nous proposons dans ce papier l'introduction du tenseur d'inertie, comme descripteur morphologique. Pour illustrer et évaluer cette idée, la dynamique de l'agrégation sous cisaillement, qui est le principal mécanisme d'agrégation en réacteur agité, sera étudiée. Ce travail sera limité à l'étude du phénomène à deux dimensions d'espace.

Mots-clés : agrégation, tenseur d'inertie, descripteur morphologique

1. Introduction

L'agrégation de particules dans une suspension est un phénomène dont l'étape élémentaire est la collision binaire entre deux particules, primaires ou agrégats. L'agrégat est un objet ramifié constitué de particules primaires, souvent considérées identiques. La description classique d'un agrégat repose sur la théorie fractale : un agrégat est caractérisé par le rayon de la particule primaire sphérique, le nombre de particules primaires et la dimension fractale. La dimension fractale est un nombre compris entre 1 et 3, le plus souvent déterminé à partir de simulations portant sur l'agrégation de particules primaires se rencontrant suivant un mécanisme collisionnel donné ou expérimentalement par la méthode SAXS. Si l'hypothèse fractale a rencontré un grand succès pour décrire la dynamique de l'agrégation, il n'est pas sûr que la dimension fractale soit le seul ou l'unique paramètre morphologique pertinent. La relation entre sa valeur et la nature du processus collisionnel n'est pas non plus évidente.

Parmi les propriétés des objets que les différents auteurs ont essayé de caractériser, il y a la porosité, l'anisotropie et l'orientation. Le tenseur d'inertie semble un candidat intéressant pour décrire ces propriétés géométriques. Torres et al. (1991) ont, par exemple, réalisé des simulations de l'agrégation 3D sous cisaillement, ont mesuré la dimension fractale des agrégats ($D_f=1.83$) et ont constaté leur asymétrie. Mieux, ils ont calculé le tenseur d'inertie (normalisé par le carré du rayon de giration) de leurs agrégats simulés ($N < 4100$) et ont constaté que l'ellipsoïde équivalent avait ses longueurs principales dans le rapport 1/1.6/3.1 et cela indépendamment du mécanisme de collision (cisaillement, élongation, Brownien).

Plus précisément, deux tenseurs peuvent être définis : le tenseur d'inertie et le tenseur de gyration. Le premier fait intervenir les masses et les distances, le deuxième uniquement les distances. Si l'objet est constitué d'un matériau homogène, les deux sont proportionnels et contiennent la même information morphologique.

Soit un ensemble de N points de coordonnées x_k, y_k, z_k ou $x_{k,1}, x_{k,2}, x_{k,3}$ et de masse unité dans un espace à 3 dimensions et un référentiel dont l'origine est le centre de masse, le tenseur d'inertie est défini par l'expression :

$$I = \sum_{k=1}^N \begin{bmatrix} y_k^2 + z_k^2 & -x_k y_k & -x_k z_k \\ & x_k^2 + z_k^2 & -y_k z_k \\ & & x_k^2 + y_k^2 \end{bmatrix} \quad (1)$$

Dans sa formulation continue, la composante i,j du tenseur s'écrit :

$$I_{i,j} = \int_{[V]} \left(-x_i x_j + \delta_{ij} x^2 \right) dV \quad (2)$$

La diagonalisation de $\underline{\underline{I}}$ conduit à :

$$\underline{\underline{D_I}} = \begin{bmatrix} R_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & R_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & R_3^2 \end{bmatrix} \text{ avec } R_1 < R_2 < R_3 \quad (3)$$

R_1^2, R_2^2, R_3^2 sont les moments d'inertie principaux (divisés par la masse de l'objet)

On en déduit les définitions du rayon de gyration et du facteur d'anisotropie :

$$R_g^2 = R_1^2 + R_2^2 + R_3^2 \quad (4)$$

$$A_{ij} = R_i^2 / R_j^2 \quad (5)$$

Pranami et al. (2010) construisent une population d'agrégats par simulation et montrent que la dimension fractale D_f n'est pas le seul paramètre pertinent et que l'on doit considérer aussi les (deux) facteurs d'anisotropie A_{31} et A_{21} . Les distributions des deux facteurs d'anisotropie sont très voisines et indépendantes du nombre de particules primaires dans l'agrégat. Cela laisse à penser qu'un sphéroïde, plutôt qu'un ellipsoïde, peut suffire à décrire un objet ramifié anisotrope. Pranami indique cependant qu'il existe une corrélation (qualitative) entre la dimension fractale des objets et la distribution d'anisotropie. Quand D_f augmente, le facteur d'anisotropie moyen diminue.

Le tenseur d'inertie et la masse totale sont donc des candidats intéressants pour décrire un objet. En particulier, si l'orientation de l'objet n'est pas requise, il suffit de connaître les 3 valeurs propres du tenseur d'inertie et la masse (ou le volume de matière) de l'objet. On peut en déduire une porosité définie à partir du rayon de gyration et un facteur d'anisotropie.

Partant de cette idée, nous allons nous intéresser à la collision et l'agrégation de deux objets et donc à l'évolution concomitante des paramètres morphologiques ainsi définis.

Le contexte physique est le suivant :

- collision et agrégation de deux objets qui sont, eux-mêmes, des agrégats ; on parlera d'acte élémentaire d'agrégation
- la collision est due au mouvement relatif des objets dans un certain type d'écoulement.

2. Variation du tenseur d'inertie lors de la collision entre deux particules

Considérons deux objets de tenseurs d'inertie $\underline{\underline{I}}^{(1)}$ et $\underline{\underline{I}}^{(2)}$, chacun est évalué par rapport à son propre centre de masse C_i . Le tenseur d'inertie évalué par rapport à un autre point C_i' (vecteur bipoint correspondant est $\vec{a} = \overline{C_i' C_i}$) est alors tel que (Landau et Lifshitz, 1969) :

$$I_{kl}^{(i)'} = I_{kl}^{(i)} + M \left(\vec{a}^2 \delta_{kl} - a_k a_l \right) \quad i=1,2 \quad (6)$$

Un calcul élémentaire montre que le tenseur d'inertie de l'objet issu de la collision de 2 objets plus petits et dont les centres de masse sont séparés par le vecteur $\vec{a} = \overline{C_1 C_2}$ obéit à l'équation :

$$I_{kl}^{(1+2)} = I_{kl}^{(1)} + I_{kl}^{(2)} + \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \left(\vec{a}^2 \delta_{kl} - a_k a_l \right) \quad (7)$$

Au contact, le vecteur $\vec{a} = \overline{C_1 C_2}$ est tel que les deux ellipsoïdes équivalents (on appellera ellipsoïde équivalent, l'ellipsoïde réel ayant le même tenseur d'inertie diagonalisé que l'objet) des objets entrant en collision soient tangents, chacun ayant son orientation notée \vec{p}_i (figure 1). L'hypothèse du contact n'est

pas trivial : l'ellipsoïde équivalent à un objet n'est pas synonyme d'ellipsoïde rempli de matière. Cette hypothèse représente une première approche qui sera discutée plus tard.

L'ellipsoïde équivalent sera obtenu à partir de la diagonalisation du tenseur $\underline{\underline{I}}^{(1+2)}$; la matrice correspondante sera notée $\underline{\underline{D}}_I^{(1+2)}$.

L'ellipsoïde équivalent de demi-axes (a_1, a_2, a_3) est tel que :

$$a_i^2 = \frac{5}{2} (R_j^2 + R_k^2 - R_i^2) \quad i \neq j \neq k \quad (8)$$

On appellera $\underline{\underline{D}}_E$ la matrice diagonale d'éléments $a_i^2 (i=1,2,3)$.

L'acte élémentaire d'agrégation obéira à la séquence suivante :

$$\begin{aligned} & - \underline{\underline{D}}_E^{(i)} \rightarrow \underline{\underline{D}}_I^{(i)} \xrightarrow{\bar{p}_i} \underline{\underline{I}}^{(i)} && \text{avec} \\ & i=1,2 \\ & - \underline{\underline{I}}^{(1)} + \underline{\underline{I}}^{(2)} \rightarrow \underline{\underline{I}}^{(1+2)} \\ & - \underline{\underline{I}}^{(1+2)} \rightarrow \underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} \rightarrow \underline{\underline{D}}_E^{(1+2)} \end{aligned}$$

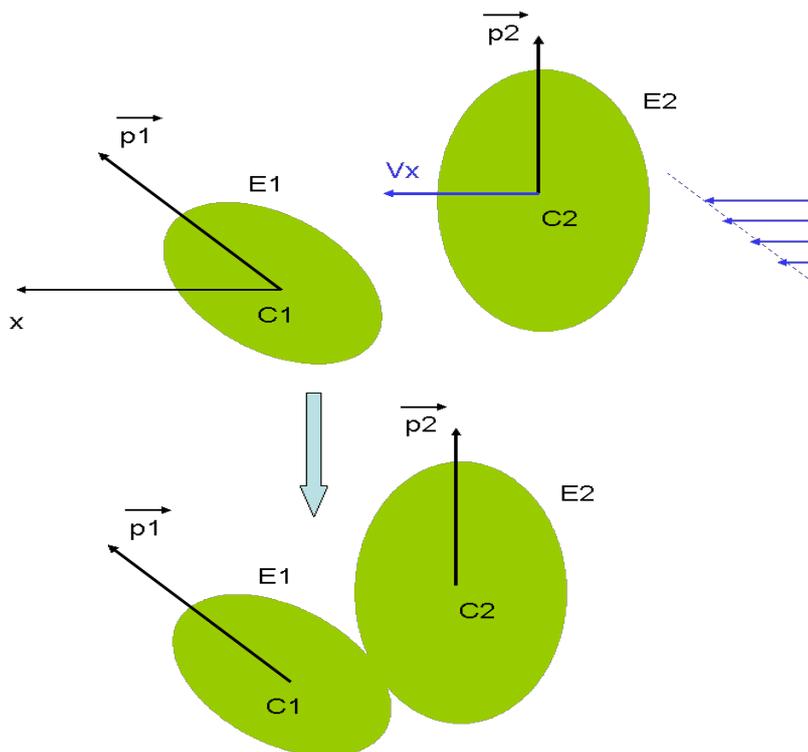


Figure 1. agrégation sous cisaillement ; collision

En pratique, l'agrégation met en jeu un très grand nombre de particules, un sous-ensemble étant une population de mêmes caractéristiques morphologiques, mais d'orientations différentes, c.-à-d. ayant une distribution d'orientation. Ainsi, l'acte élémentaire d'agrégation entre deux objets de paramètres morphologiques différents fera apparaître une moyenne sur toutes les orientations possibles des deux objets $\langle D_{kl}^{(1+2)} \rangle_{(p1,p2)}$. Les moyennes $\langle \rangle_{p_i}$ sont faites sur les orientations. La moyenne est réalisée sur

$\underline{\underline{D}}_I^{(1+2)}$. Les orientations des deux objets sont supposées indépendantes l'une de l'autre, ce qui exclue, pour l'instant, l'éventuelle prise en compte de la résistance hydrodynamique, c-à-d de force et moment hydrodynamiques additionnels apparaissant quand 2 objets s'approchent l'un de l'autre. La distribution d'orientation d'une particule dépend de sa forme et du champ d'écoulement dans lequel elle se trouve.

Quant à la position relative des centres de masse lors de l'impact $\vec{a} = \overrightarrow{C_1 C_2}$, elle dépend, de façon imbriquée, des orientations des deux objets, mais aussi de la position relative des centres de masse, laquelle est fortement liée au mécanisme d'agrégation. Finalement, le tenseur d'inertie de l'agrégat résultant de la collision de deux agrégats plus petits est :

$$\underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} = \left\langle \left\langle \underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} \right\rangle_{(C1,C2)} \right\rangle_{(p1,p2)} \quad (9)$$

Si on considère les deux principaux mécanismes d'agrégation (l'un a pour origine le mouvement Brownien des deux objets, l'autre la vitesse relative des deux objets dans un écoulement cisaillé), chacun est caractérisé par une constante cinétique ou noyau. En terme purement géométrique :

- deux objets ont la même probabilité d'entrer en contact quelque soit leur position relative dans le cas de l'agrégation Brownienne.
- deux objets ont une probabilité d'entrer en collision d'autant plus grande qu'ils sont décalés dans le cas de l'agrégation en écoulement cisaillé. Une collision frontale est peu probable.

De façon formelle, ceci peut s'écrire :

$$\underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} = \left\langle \left\langle \underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} \right\rangle_{(C1,C2)} \right\rangle_{(p1,p2)} = \left\langle \int_{\Sigma(p1,p2)} \underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} dk_{12} \right\rangle_{(p1,p2)} / K_{12} \quad (10)$$

K_{12} est le noyau habituel. dk_{12} est la contribution au noyau d'une zone d'interception ou de collision des deux objets. Le noyau prend ici tout son sens de probabilité. L'intégrale se fait sur l'ensemble $\Sigma(p1, p2)$ des zones d'interception. On a bien sûr la relation :

$$\left\langle \int_{\Sigma(p1,p2)} dk_{12} \right\rangle_{(p1,p2)} = K_{12} \quad (11)$$

Nous allons illustrer cette approche à propos de l'agrégation en écoulement cisaillé, qui est le principal mécanisme de collision pour les particules micrométriques.

3. Application au cas de l'agrégation sous cisaillement

On considère un écoulement cisaillé dans un espace tridimensionnel (figure 1) : le système d'axes est choisi tel que le vecteur vitesse du fluide est $(v_x, v_y, v_z) = (\dot{\gamma}y, 0, 0)$

3.1 Collision de deux ellipsoïdes dans un champ cisaillé

En s'inspirant du calcul effectué pour des sphères, l'expression suivante est à évaluer :

$$\underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} = \left\langle \int_{Ym(p1,p2)}^{YM(p1,p2)} \int_{Zm(y,p1,p2)}^{ZM(y,p1,p2)} \underline{\underline{D}}_I^{(1+2)} \dot{\gamma} y dy dz \right\rangle_{(p1,p2)} / K_{12} \quad (12)$$

Avec

$$K_{12} = \left\langle \int_{Ym(p1,p2)}^{YM(p1,p2)} \int_{Zm(y,p1,p2)}^{ZM(y,p1,p2)} \dot{\gamma} y dy dz \right\rangle_{(p1,p2)} \quad (13)$$

Zm, ZM, Ym, YM représentent les bornes d'intégration, valeurs au-delà desquelles il n'y a pas de collision (intersection nulle des enveloppes géométriques des particules qui entrent en collision). En première

approximation, la distribution d'orientation d'une particule isolée dans un champ de cisaillement n'est pas loin d'être uniforme.

Pour estimer la difficulté du calcul, nous étudierons le problème bidimensionnel : la collision dans le plan de deux ellipses soumis à un champ cisailé plan.

3.2 Collision de deux ellipses dans un champ cisailé plan

Le plan de travail est noté (x,y).

Les expressions suivantes sont donc à évaluer :

$$\underline{\underline{D_I^{(1+2)}}} = \left\langle \int_{Ym(p1,p2)}^{YM(p1,p2)} \underline{\underline{D_I^{(1+2)}}} \dot{\gamma} y dy \right\rangle_{(p1,p2)} / K_{12} \quad (14)$$

Avec

$$K_{12} = \left\langle \int_{Ym(p1,p2)}^{YM(p1,p2)} \dot{\gamma} y dy \right\rangle_{(p1,p2)} \quad (15)$$

L'algorithme de calcul est donc le suivant :

- système d'axes tel que $(v_x, v_y) = (\dot{\gamma} y, 0)$; vecteurs directeurs des deux ellipses $\overline{p_1}, \overline{p_2}$ fixés ; centre de l'ellipse 1 à l'origine ; centre de l'ellipse 2 avec composante y fixée
- calcul des coordonnées du point de collision (intersection) entre les deux ellipses
- déduction des coordonnées du vecteur \overline{a} (entre les centres des deux ellipses)
- calcul de $\underline{\underline{I^{(1+2)}}}$, $\underline{\underline{D_I^{(1+2)}}}$ et K_{12}
- moyenne sur les orientations et les positions relatives des deux ellipses.

L'acte d'agrégation est donc caractérisé par :

$$(M_1, D_{11}^{(1)}, D_{22}^{(1)}) + (M_2, D_{11}^{(2)}, D_{22}^{(2)}) \rightarrow (M_1 + M_2, D_{11}^{(1+2)}, D_{22}^{(1+2)})$$

Où

$$(M_1, \lambda^{(1)}, \varepsilon^{(1)}) + (M_2, \lambda^{(2)}, \varepsilon^{(2)}) \rightarrow (M_1 + M_2, \lambda^{(1+2)}, \varepsilon^{(1+2)})$$

Où λ et ε sont l'élongation et la porosité de l'objet.

Nous avons construit un code de calcul Matlab, calculant pour un couple de deux ellipses réelles (autrement dit, équivalentes) K_{12} et $D_{11}^{(1+2)}, D_{22}^{(1+2)}$. Rappelons que chaque ellipse est associée à une matrice d'inertie (diagonale). On en déduit l'ellipse équivalente.

4. Simulations et résultats

Connaissant la description quantitative de l'acte élémentaire d'agrégation, nous souhaitons simuler une dynamique complète d'agrégation. Tous les actes d'agrégation sont envisagés (ex : (3)+(6)→(9)). On part d'une suspension monodisperse (disque de rayon 1 et de densité 1) et on la laisse s'agréger en appliquant une méthode de Monte-Carlo : on part d'une population de 500 particules primaires ; deux particules sont prises au hasard suivant une loi de probabilité compatible avec l'ensemble des valeurs du noyau d'agrégation pour chaque paire ; l'agrégat formé remplace l'une des deux particules initiales, tandis que la deuxième est remplacée par une particule tirée au hasard parmi les autres. La population d'agrégats se construit petit à petit, le nombre total de particules (particules primaires et agrégats) restant constant. L'intervalle de temps entre chaque collision est inversement proportionnel au cisaillement.

Les résultats suivants ont été obtenus :

- On examine tout d'abord la relation entre la porosité des agrégats et leur contenu (nombre N) en particules primaires. L'usage veut que la fraction volumique (ici surfacique) en solide soit préférée à la porosité, sachant que la relation entre les deux est : $\varepsilon + \phi = 1$. Une loi de puissance

est alors observée $\phi = 1.1N^{-0.53}$, la même à différents temps. Cette expression est, d'habitude, la signature d'une population d'agrégats fractals, la notion de fractalité étant prise dans son acceptation la plus large : on a alors $\phi = S^{2/Df} N^{(Df-2)/Df}$ (si l'agrégat fractal est caractérisé par $a_N / a_1 = (N / S)^{1/Df}$, a_N est une dimension de l'agrégat, S une constante). Nous déduisons de nos simulations que la dimension fractale est proche de 1.31.

- Nous avons calculé les distributions d'élongation à différents temps. Celle-ci est ici définie comme le rapport du demi-grand axe au demi-petit axe de l'ellipse équivalente. La figure 2 représente ces distributions. On constate que l'élongation est distribuée sur l'intervalle [1.3-2.25]. Ce dernier résultat est à rapprocher de celui (figure 3 dans la publication citée) de Pranami et al. (2010). On remarque aussi qu'un état asymptotique est atteint très tôt ($t < 20$).

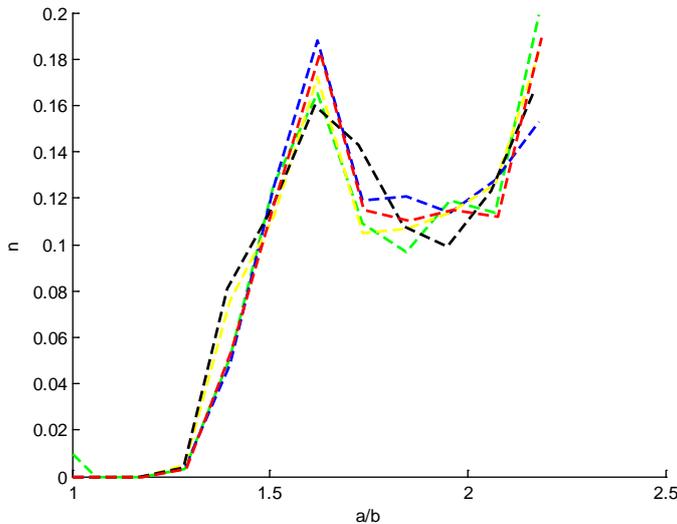


Figure 2 : distribution en élongation (rapport a/b des deux demi-axes) ; de gauche à droite : vert t=26.8, bleu t=201.5, jaune t=550, noir t=1500, rouge t=11100.

L'agrégation sous cisaillement est une forme d'agrégation balistique, même si cette affirmation est contestée par Elimelech et al. (1995). Nous ferons, malgré tout, appel à la littérature correspondante. A partir d'arguments dimensionnels simples, Hentschel (1984) trouve $Df=1.375$ et indique que le rapport (d'anisotropie) des 2 plus grands rayons de giration principaux est égal à 2. Meakin (1985) a réalisé des simulations cluster-cluster en 2D balistique : la valeur de la dimension fractale est 1.50 (Df augmente avec la taille et est plus proche de 1.55 quand $100 < N < 10^4$). Il est possible que la différence entre les valeurs publiées de dimension fractale et les nôtres soit due à la non prise en compte de l'interpénétration des ellipses équivalentes, qui sont poreuses. Nous proposons donc la correction suivante :

L'ellipse équivalente est constituée d'un cœur impénétrable et d'une enveloppe très poreuse. Le contact entre deux ellipses se fait au niveau des deux cœurs. Différents auteurs ont évalué la longueur de pénétration d'un agrégat (voir, par exemple, Veerapaneni et al. (1996)). Ils s'accordent pour trouver que $L = 2\sqrt{\kappa}$ où κ est la perméabilité de l'objet. La perméabilité (d'un milieu constitué de cylindres parallèles et identiques) sera calculée suivant Sangani et Acrivos (1982). La distance inter-centres est ainsi réduite à cause de l'inter-pénétrabilité des agrégats suivant :

$$(C_1 C_2) = (C_1 C_2)_0 - a(\sqrt{\kappa_1} + \sqrt{\kappa_2}) \quad (16)$$

a est un coefficient multiplicatif, que l'on attend proche de 2.

Des simulations ont été réalisées avec une distance inter-centres corrigée. Différentes valeurs de a ont été testées. Dans tous les cas, la fraction surfacique est une fonction puissance du nombre de particules primaires. La fonction $\phi(N)$ présente deux branches dépendant du nombre de particules primaires dans

l'agrégat. Pour $a=2$, les agrégats les plus petits ($N < 400$) ont une dimension fractale égale à 1.42, les plus grands ont une dimension fractale égale à 1.33. Il doit être rappelé que, en pratique, les agrégats formés dans un écoulement cisailé ont en général un faible nombre de particules primaires ($N \ll 1000$).

5. Conclusion

Le tenseur d'inertie d'une particule est une grandeur riche en information. Nous avons montré que son utilisation pour l'étude de l'agrégation d'une population de particules était possible et que son application à l'agrégation de disques dans un espace plan conduisait à des résultats proches de la littérature. Ces premiers résultats nous encouragent à étendre cette approche, d'une part, à l'agrégation Brownienne dans un espace plan, et d'autre part, à l'agrégation sous cisaillement dans un espace tridimensionnel.

Références

- Elimelech M., J. Gregory, X. Jia, R. Williams, 1995, Particle deposition & aggregation, Butterworth-Heinemann
Hentschel H.G.E., 1984, The structure and fractal dimension of cluster-cluster aggregates, in Kinetics of aggregation and gelation edited by F. Family and D.P. Landau, North-Holland
Meakin P., 1985, Off lattice simulations of cluster-cluster aggregation in dimensions 2-6, Physics letters, 107A, 269-272
Landau L. et E. Lifchitz, 1969, Mécanique, Editions MIR, Moscou
Pranami G., M.H. Lamm, R.D. Vigil, 2010, Molecular dynamics simulation of fractal aggregate diffusion, Physical Review E82, 051402
Sangani A.S., A. Acrivos, 1982, Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer, Int. J. Multiphase Flow, 8, 193-206
Torres F.E., W.B. Russel, W.R. Schowalter, 1991, Simulations of coagulation in viscous flows, J. of colloid and Interface Science 145, 51-73
Veerapaneni S., M.R. Wiesner, 1996, Hydrodynamics of fractal aggregates with radially varying permeability, J. of colloid and Interface Science 177, 45-57
-

Inertia tensor as internal variable for population balance modelling

Application to aggregation

GRUY Frédéric

Ecole Nationale Supérieure des Mines, 158 Cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne, Cedex 2

Abstract

Morphological descriptors of particles are required for describing all the features of the suspension dynamics. In this paper, the inertia tensor is considered and evaluated for the modelling of aggregation. An equivalent ellipsoid to the aggregate is defined from the tensor. A general expression for the inertia tensor of the aggregate resulting from the collision of two aggregates is presented. In this framework, the collision event becomes the collision between two equivalent ellipsoids and leads to a larger ellipsoid. As an example, the shear aggregation of a set of disks in a two-dimensional space is simulated using simultaneously this modelling of the collision event and Monte-Carlo simulations for all the collisions. Physical properties of the cluster population as, for instance, the distribution of the elongation factor at different times are presented.

Keywords: aggregation, inertia tensor, particle morphology
