

Modèle hybride multi-échelles pour les écoulements granulaires immergés

M. Constant¹, F. Dubois², J. Lambrechts¹,
V. Legat¹

¹ UCL, Université catholique de Louvain, {vincent.legat,jonathan.lambrechts,matthieu.constant}@uclouvain.be

² UM, Université de Montpellier, frederic.dubois@umontpellier.fr

Résumé — Les écoulements granulaires immergés font l'objet d'un grand nombre de recherches. Nous présentons un nouveau modèle numérique, pour simuler les mélanges fluide-grains, basé sur une approche hybride multi-échelles. Les mouvements de la phase solide sont résolus à l'échelle des grains par une méthode dynamique des contacts, tandis que l'écoulement du fluide est déduit d'un modèle continu du mélange à une échelle plus grossière. Des simulations illustratives pour la chute d'un nuage de grains viendront compléter les développements théoriques.

Mots clés — mécanique granulaire, modélisation mathématique, simulation.

1 Introduction

On rencontre des applications mettant en œuvre des écoulements granulaires immergés dans de nombreux domaines de notre vie quotidienne. Cette appellation désigne les mélanges de grains solides en mouvement dans un fluide. Ils sont présents en génie civil (ciments, bétons...) et en géologie (avalanches, coulées pyroclastiques, mouvements de sédiments sous-marins...) mais également dans les industries pharmaceutiques, cosmétiques et chimiques (dentifrices, engrais...) ou dans le secteur agroalimentaire.

De nombreux modèles physiques et méthodes numériques ont été développés pour prédire l'évolution d'écoulements granulaires immergés [23, 9]. Ces différents modèles peuvent être séparés en fonction de l'échelle à laquelle l'écoulement est calculé. À grande échelle, les grains peuvent être introduits de façon implicite en considérant le milieu comme un mélange décrit par un modèle non-newtonien [19, 17] ou bien par l'intermédiaire d'une force de friction bien choisie [7]. Cette force est utilisée comme relation de fermeture dans les équations de la quantité de mouvement et dépend largement du problème étudié [15, 16]. À plus petite échelle, les méthodes directes considèrent les deux phases de façon distinctes. Les mouvements du fluides sont calculés de façon eulérienne, tandis que les mouvements des grains sont résolus par une approche lagrangienne. Numériquement, cela se réalise, par exemple, en recréant un maillage sur la partie fluide, à chaque déplacement des grains [8]. D'autres approches utilisent une méthode de pénalité ou sont basées sur l'emploi de multiplicateurs de Lagrange pour éviter les créations successives d'un maillage [18, 5].

Les méthodes aux éléments discrets (DEM) sont souvent utilisées pour décrire les trajectoires des grains de façon lagrangienne dans des écoulements granulaires secs, c'est-à-dire des écoulements où la présence du fluide interstitiel est négligée. Parmi ces DEM, on retrouve les méthodes de collision [12] qui résolvent les contacts de façon séquentielle. Elles ne sont pas applicables aux écoulements granulaires denses en raison du nombre de chocs par unité de temps. D'autres méthodes résolvent tous les contacts qui se produisent durant un pas de temps donné et nécessitent une résolution globale des chocs. Elles peuvent être différenciées par la représentation des grains et les caractéristiques des contacts. Le modèle des *sphères déformables* [3] autorise une légère déformation des grains ou une interpénétration de laquelle sont déduites les forces élastiques, plastiques et de friction entre les grains. À l'inverse, le modèle des *sphères rigides* [10] interdit toute déformation des grains.

Dans cet article, nous présentons un modèle hybride multi-échelles. Ce modèle est un compromis entre les méthodes directes et les méthodes à plus grande échelle basées sur la mécanique des milieux continus. D'une part, les mouvements et les contacts des grains sont résolus, à l'échelle des grains, par une approche discrète en utilisant une DEM. D'autre part, l'écoulement du fluide est déduit d'un mélange

homogène, entre le fluide et les grains, résolu à une échelle plus grossière. Cela permet un formidable gain de temps, en comparaison avec les méthodes directes, tout en représentant habilement la physique des grains. La section 2 de ce document sera consacrée à l'explication des équations du modèle tandis que la section 3 donnera un exemple d'utilisation du modèle en deux dimensions pour en décrire les performances.

2 Un modèle hybride multi-échelles

Le modèle que nous présentons est basé sur le fondement de la mécanique des milieux continus : l'hypothèse de séparation des échelles. Les équations de l'écoulement du fluide entre les grains sont obtenues à partir d'une représentation du mélange à une échelle bien plus grande que celle des grains. Les équations de Navier-Stokes sont moyennées sur des sous-ensembles élémentaires du domaine représentés schématiquement à la Figure 1. Ces sous-ensembles élémentaires sont composés d'un volume fluide Ω_f et d'un volume solide Ω_p . La taille des grains doit être négligeable par rapport à la taille de ces sous-ensembles. Les équations déduites de ce processus de moyenne sont résolues par la méthode des éléments finis sur un maillage recouvrant l'intégralité du mélange.

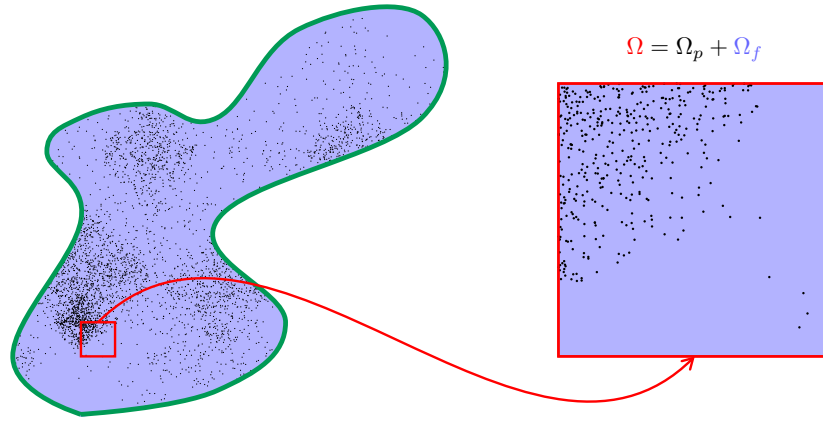


FIGURE 1 – Représentation du domaine

Les équations de Navier-Stokes moyennées sur un sous-ensemble élémentaire pour l'écoulement d'un fluide sont :

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \rho \underline{v} \right) d\Omega = 0 \quad (1a)$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} \left(\frac{\partial \rho \underline{v}}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho \underline{v} \underline{v}) \right) d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} \left(\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \rho \underline{g} \right) d\Omega \quad (1b)$$

où ρ est la densité du fluide, $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes, \underline{v} est le vecteur vitesse et \underline{g} est la gravité. Définissons l'opérateur de moyenne sur le volume de la phase fluide d'un sous-ensemble élémentaire :

$$\langle \underline{v} \rangle_f = \frac{1}{\Omega_f} \int_{\Omega_f} \underline{v} d\Omega \quad (2)$$

ainsi que la fraction volumique occupée par le fluide, appelée la porosité, dans ce sous-ensemble élémentaire :

$$\phi = \frac{\Omega_f}{\Omega}$$

L'opérateur de moyenne sur le volume du solide est tout à fait analogue à la notation (2) en utilisant l'indice p . On peut également définir les moyennes sur les volumes de chaque phase pour d'autres quantités, comme la pression. En décomposant les inconnues en une partie moyenne augmentée d'une perturbation dont la moyenne est nulle :

$$\underline{v} = \langle v \rangle_f + \underline{v}'$$

et en utilisant les théorèmes de moyenne décrits par Whitaker [21, 22], les équations moyennes de Navier-Stokes (1) deviennent :

$$0 = \nabla \cdot \left[\phi \langle v \rangle_f + (1 - \phi) \langle v \rangle_p \right] \quad (3)$$

$$0 = \rho \frac{\partial (\phi \langle v \rangle_f)}{\partial t} + \rho \underline{\nabla} \cdot (\phi \langle v \rangle_f \langle v \rangle_f) + \phi \underline{\nabla} \langle p \rangle_f - \mu \nabla^2 (\phi \langle v \rangle_f) + \mu \frac{\underline{\nabla} (\phi \langle v \rangle_f) \cdot \underline{\nabla} \phi}{\phi} - \mu \langle v \rangle_f \frac{\underline{\nabla} \phi \cdot \underline{\nabla} \phi}{\phi} - \underbrace{\phi \rho \underline{g} - \mu \underline{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{\Omega} \int_s \underline{n} v \, ds \right) + \rho \underline{\nabla} \cdot (\phi \langle v' v' \rangle_f) - \frac{\mu}{\Omega} \int_s \underline{n} \cdot \underline{\nabla} v' \, ds + \frac{1}{\Omega} \int_s \underline{n} p' \, ds}_E \quad (4)$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide, \underline{n} est la normale sortante de l'interface s entre les phases solide et fluide.

La notation utilisée pour synthétiser les termes de l'équation (4) n'est pas anodine. On peut simplifier la résolution en paramétrant ces termes de sorte qu'on les remplace par une force représentant l'interaction entre le fluide et tous les grains présents dans le volume représentatif. À l'échelle des grains, la force d'interaction s'exerçant entre un grain i et le fluide est :

$$\underline{F}_i = -V_{p_i} \underline{\nabla} \langle p \rangle_f - \underline{D}_i + \underline{g} V_{p_i} \frac{\rho_{p_i} - \rho}{\rho_{p_i}}$$

où \underline{D}_i représente la force de traînée, V_{p_i} est le volume du grain i et ρ_{p_i} est sa densité. Le gradient de pression assure la cohérence avec les équations du fluide. Il n'existe pas de formule exacte pour décrire la force de traînée. Dans la littérature, on trouve un grand nombre de formulations en fonction du problème étudié. Cette force est, cependant, influencée par des facteurs facilement identifiables comme la vitesse relative entre le grain et le fluide ou la géométrie du grains. Di Felice et Rotondi [6] présentent une formulation pour la force de traînée agissant sur un grain au sein d'un système mélangeant un fluide avec un grand nombre de grain de même dimension :

$$\underline{D}_i = f(\phi) C_d(\text{Re}_{p_i}) \frac{A_{p_i} \rho}{2} \left| \underline{v}_{p_i} - \langle v \rangle_f \right| \left(\underline{v}_{p_i} - \langle v \rangle_f \right) \quad (5)$$

où A_{p_i} est l'aire du grain i projeté sur un plan perpendiculaire au mouvement du grain et Re_{p_i} est le nombre de Reynolds du grain :

$$\text{Re}_{p_i} = 2r\rho \left| \underline{v}_{p_i} - \langle v \rangle_f \right| \phi \mu^{-1}$$

La fonction $f(\phi)$ est utilisée pour tenir compte de l'influence de la concentration en grains dans le fluide sur la force de traînée subie par un seul grain. Wen et Yu [20] ont réalisé une étude sur une large gamme d'échantillons de grains en suspension pour déterminer cette fonction. Ils ont découvert que l'influence des grains voisins sur l'intensité de la force de traînée pouvait être représentée par une formule commode :

$$f(\phi) = \phi^{-1.8}$$

Enfin, le terme $C_d(\text{Re}_{p_i})$ est le coefficient de traînée. Ce coefficient peut expliquer à lui seul le grand nombre de formules disponibles pour la force de traînée. Une déclinaison importante d'expressions sont disponibles pour ce coefficient. Dans la suite, nous utiliserons l'expression établie par Dallavalle et al. [4] :

$$C_d(\text{Re}_{p_i}) = \left(0.63 + \frac{4.8}{\text{Re}_{p_i}^{0.5}} \right)^2$$

Les contacts de la phase solide sont résolus à l'échelle des grains par une dynamique des contacts discrète basée sur les DEM. La méthode utilisée correspond à un modèle de sphères rigides associé à une loi de contact inélastique. À chaque pas de temps, on calcule la vitesse et la pression du fluide par la méthode des éléments finis. On peut alors calculer la force d'interaction entre les phases solide et liquide. L'interpolation de la force, depuis les nœuds du maillage vers les positions des grains et inversement, s'effectue à l'aide de fonctions de forme linéaire lagrangiennes associées à une matrice de masse. La seconde loi de Newton nous permet alors d'obtenir les nouvelles vitesses et positions des grains sans tenir compte des contacts éventuels au cours du pas de temps considéré. Tous les contacts négligés au cours du pas de temps sont résolus à posteriori par une méthode itérative. Il ne s'agit pas de vérifier toutes les paires de grains possibles. On vérifie uniquement les paires de grains qui étaient, au début du pas de temps, à une distance suffisamment petite pour qu'un contact puisse se produire.

3 Dynamique d'un nuage de grains

Depuis les recherches théoriques menées par Brinkman [2], en 1947, sur l'écoulement du fluide interstitiel au sein d'un nuage de grains immergés, de nombreuses expériences ont vu le jour pour tenter de comprendre les mécanismes régissant les observations microscopiques et macroscopiques de ce problème. Dans les années 70, Adachi et al. [1] étudient de façon expérimentale et numérique la vitesse de chute et les formes successives d'un tel nuage tombant dans un fluide visqueux. Ils ont observé sur plusieurs expériences que l'évolution d'un nuage de grains suivait un processus fixé même si des variations ont été observées en fonction, notamment, de la température du nuage. Cette évolution était également influencée par la concentration en grains au sein du nuage ou encore par la viscosité du fluide.

Immédiatement après avoir été injecté dans le fluide, le nuage de grains entame sa chute, laissant dans son sillage une trainée de grains parvenus à s'échapper de la masse initialement compacte. Ces grains percent le volume fermé constitué par le nuage et forment une queue à l'arrière du mouvement, tandis que la partie inférieure du nuage prend une forme hémisphérique [13]. Vingt ans après les expériences d'Adachi et al., Nitsche et Batchelor [14] ont réalisé des simulations numériques afin de mieux comprendre cette fuite de grains. Ils ont suivi les trajectoires des particules à l'intérieur du nuage. Le mouvement des grains à l'intérieur du nuage est chaotique. Une erreur, en début de simulation, grandit exponentiellement tout au long du temps d'exécution, ce qui les a empêchés d'effectuer un grand nombre de tests sur toutes les trajectoires de particules. En se concentrant sur des temps de simulation réduits, ils ont montré que les grains étaient soumis à deux types de mouvements : un mouvement circulaire produit par un champ de vitesse toroïdal à l'intérieur du nuage et un mouvement aléatoire provenant d'interactions hydrodynamiques. À l'intérieur du nuage les grains sont entraînés par des lignes de courant fermées. Il revient donc aux mouvements aléatoires d'emmener certains grains en dehors du nuage où les trajectoires ne sont plus fermées.

En poursuivant sa chute, le nuage entraîne le fluide, provoquant un champ de vitesse circulant qui aplatit le nuage pour lui donner la forme d'un champignon. La queue finit par se détacher et le nuage prend la forme d'un tore [13]. Cette évolution peut être facilement montrée grâce à l'augmentation du rayon horizontal du nuage. Quantitativement, il est difficile de représenter cette transition vers un tore en accord avec des expériences. Néanmoins, les simulations réalisées par Metzger et al. [13] montrent un accord qualitatif avec leurs expériences et tendent à confirmer cette évolution du rayon du nuage ainsi qu'une diminution de sa vitesse de chute après sa transformation en tore. À cet instant, un grand nombre de particules se sont échappées du nuage, évitant fortement sa partie centrale. Les lignes de courant restent cependant fermées et le fluide environnant ne traverse pas le nuage en raison de la forte surpression agissant à la pointe du mouvement. Cette surpression finit par former un anneau sous le tore permettant au fluide de traverser le nuage. Le tore devient instable et se divise. Le fluide passant au centre du nuage possède une vitesse dirigée dans la direction opposée de la vitesse initiale du tore ce qui provoque une nouvelle circulation des morceaux de nuage qui pourront reproduire le même procédé s'ils contiennent suffisamment de grains. Metzger et al. [13] expliquent également que pour des nuages moins

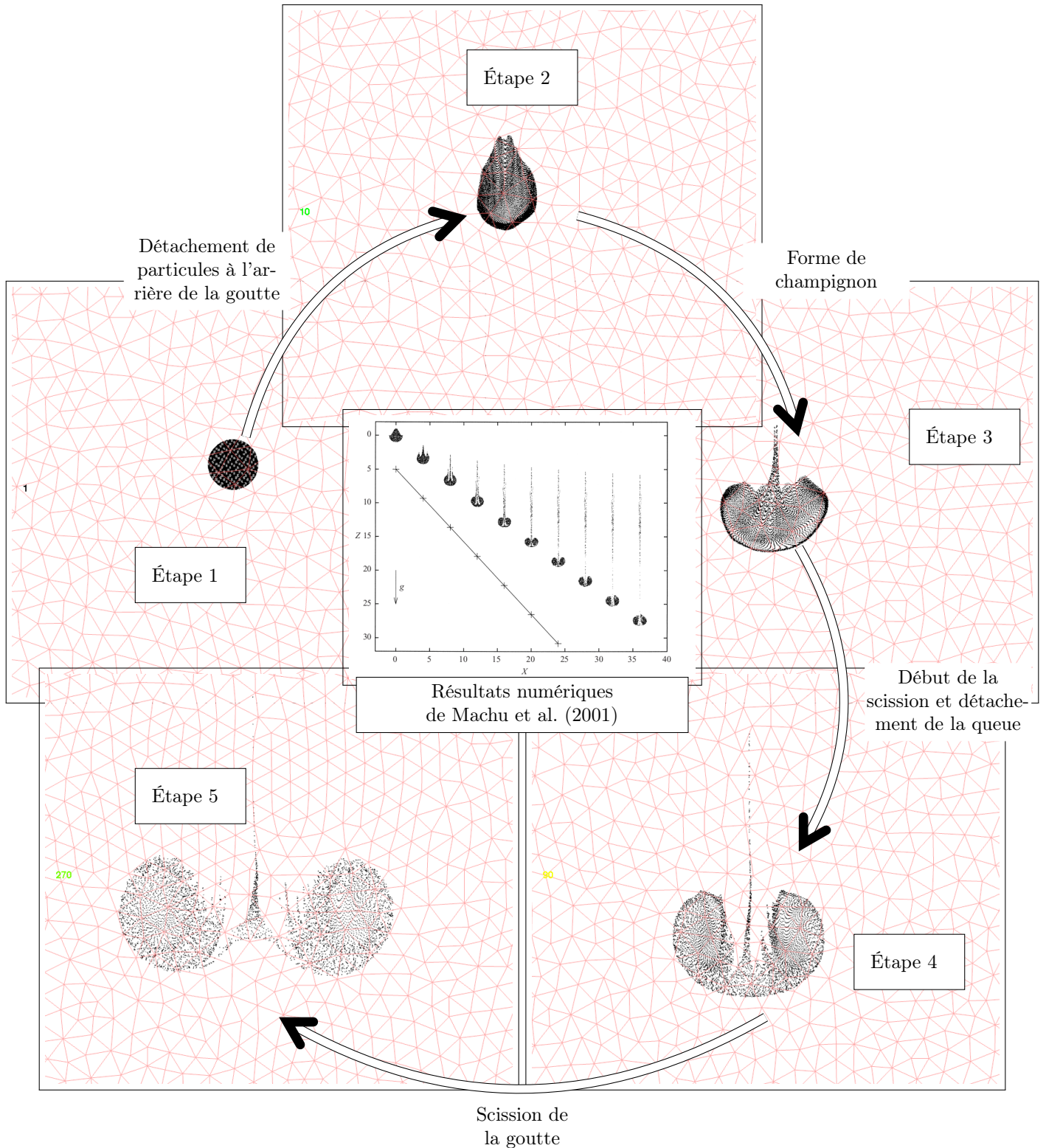


FIGURE 2 – Évolution d'un nuage de grains de verre au cours de sa chute dans de la glycérine

bien garnis les grains se détachent de façon continue à l'arrière du mouvement en formant une queue, jusqu'à ce que le nuage ne contienne plus suffisamment de grains pour conserver une forme sphérique. Le nuage s'étend et finit par se désagréger.

D'autres expériences ont tenté de démontrer les différents facteurs influençant cette évolution. C'est ainsi que Machu et al [11] ont simulé les formes successives, en cours de chute, de nuages aux formes initiales bien différentes. Ils ont également expérimenté l'interaction de deux nuages tombant l'un derrière l'autre et décrit leur évolution.

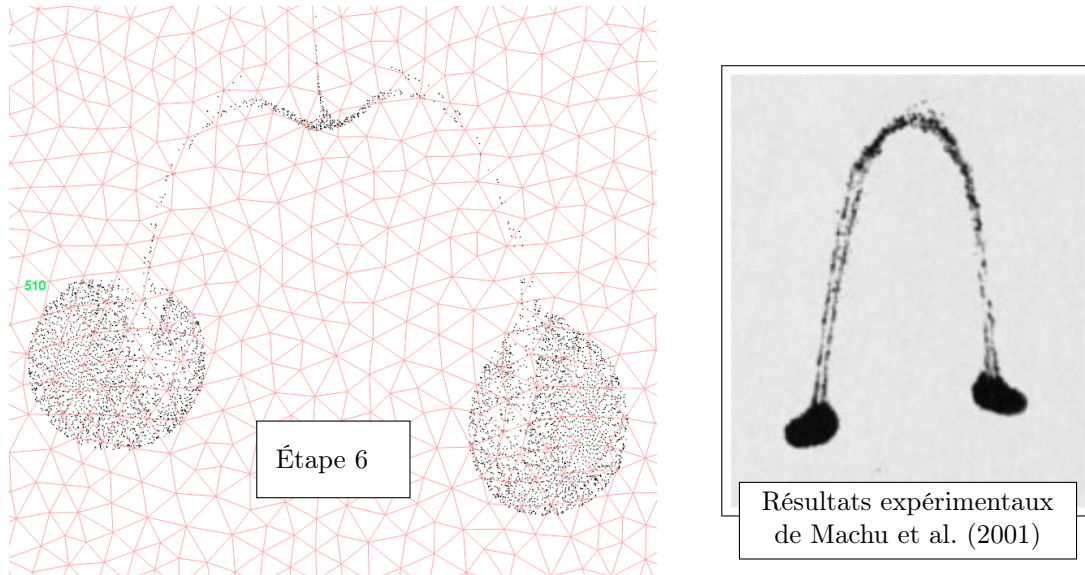


FIGURE 3 – Division du nuage

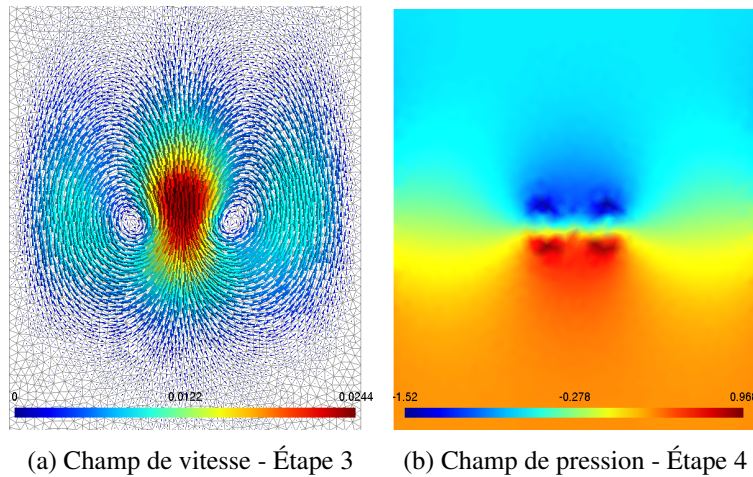


FIGURE 4 – Champ de vitesse et de pression à différents instants

Avec notre modèle, nous avons réalisé, en deux dimensions, l'expérience du nuage de grains présentée par Machu et al. [11]. Nos simulations mettent en œuvre un nuage de grains de verre ($\rho_p = 2400[kg/m^3]$, $r = 12.5[\mu m]$) tombant dans de la glycérine ($\rho = 1200[kg/m^3]$, $\mu = 0.12[Pa \cdot s]$). La Figure 2 présente les différentes formes du nuage au cours de sa chute en comparaison avec les images réalisées par Machu et al. [11]. L'étape 1 montre le nuage de forme circulaire dans sa condition initiale. Au cours des étapes 2 et 3, on observe le détachement de grains à l'arrière du mouvement, jusqu'à la formation d'un champignon. La queue observée est moins importante que celle présentée par Machu et al. [11] mais notre nuage en deux dimensions est composé d'un nombre très inférieur de grains. Le champ de vitesse correspondant présente un profil en ailes de papillon (Figure 4a), en accord avec l'idée d'une recirculation toroïdale des lignes de courant présentée dans les expériences en trois dimensions. À l'étape 4, les grains composant la queue du nuage, n'étant plus entraînés par la masse compacte, ralentissent et se laissent distancer en formant une traînée éparse derrière le nuage. On observe également à cet instant, que le point de surpression présent à l'avant du mouvement se divise en deux (Figure 4b). Cette étape correspond dans la description de Metzger et al. [13], à la formation d'un anneau de pression permettant au fluide de traverser la goutte dans la région centrale. L'étape 5 correspond au début de la scission du nuage. Le fluide traverse la région centrale, enlevant le noyau des particules pour diviser le nuage en deux nouvelles masses circulaires de grains. Cette simulation constituant la première étape de validation du modèle tend à démontrer son efficacité de façon qualitative. Des résultats ultérieurs viendront compléter la description de cette expérience en cherchant des similitudes quantitatives. Nous avons également

réalisé les simulations présentant deux nuages de grains tombant l'un derrière l'autre dans de la glycérine et observé que leurs évolutions correspondaient aux résultats expérimentaux de Machu et al. [11]. Les différences existant entre nos simulations et les expériences pouvant être imputées à la perte d'une dimension et des effets la caractérisant.

4 Conclusion

Nous avons développé un modèle hybride multi-échelles pour la représentation d'écoulements granulaires immergés. Ce modèle représente les interactions entre les grains solides pour une méthode aux éléments discrets. Les contacts sont calculés à partir d'un modèle de sphères rigides et d'une loi de choc inélastique. Résolue à plus grande échelle, la dynamique du fluide est déduite d'un modèle continu du mélange à une échelle bien plus grande que celle des grains. Les équations de Navier-Stokes sont moyennées sur un volume représentatif et résolues par la méthode des éléments finis. Ce modèle permet de représenter des écoulements granulaires immergés à densité variable avec un temps de calcul fortement réduit puisque le fluide est résolu à une échelle plus grossière. En revanche, la représentation des grains est faite de façon plus précise que les modèles continus, permettant la représentation d'écoulements granulaires dans des géométries complexes.

La jonction entre les deux échelles de résolution est réalisée par l'intermédiaire d'une force d'interaction entre le fluide et les grains. Cette force est insérée dans l'équation de la quantité de mouvement pour paramétrer différents termes de perturbation et d'interaction apparus au cours du processus de moyenne. La force d'interaction est la résultante de plusieurs forces dont la force de traînée, déterminée de façon empirique. Cette force se retrouve au cœur du processus de modélisation et influence fortement les résultats. La loi de Rotondi et Di Felice néglige certains aspects importants des écoulements comme la diversité des particules utilisées dans de nombreuses expériences. Il est, en effet, souvent impossible de garantir l'utilisation de particules parfaitement identiques. Utiliser des particules dont le rayon suivrait une certaine distribution statistique semble alors nécessaire pour obtenir des résultats très précis. Une formule plus précise pour la force de traînée devra être envisagée pour représenter les interactions entre particules de différentes tailles.

Les premiers résultats réalisés en deux dimensions montrent la qualité du modèle et l'accord qualitatif avec les expériences nous permet d'espérer, à l'avenir, des résultats très précis. Nos simulations se présentent comme une coupe des expériences tridimensionnelles par un plan passant par le centre du nuage. On ne retrouve pas dès lors exactement le comportement souhaité puisque de nombreux effets tridimensionnels sont négligés, tels les effets axisymétriques. Cependant, les formes successives du nuage nous permettent une validation primaire de l'approche multi-échelles puisqu'elle permet de caractériser l'interaction entre le fluide et les grains. L'évolution du nuage étant expliquée par le champ de vitesse toroïdal et la surpression à l'avant du nuage, il est important que l'action du fluide sur le nuage soit représentée de façon précise. La possibilité de réaliser des simulations représentant de façon très précise la physique des grains tout en obtenant une bonne représentation des champs de vitesse et de pression du fluide permettra de développer de nombreuses applications.

Références bibliographiques

- [1] K. Adachi, S. Kiriya, N. Yoshioka. *The behavior of a swarm of particles moving in a viscous fluid*. Chemical Engineering Science, 733 :115–121, 1978.
- [2] H. C. Brinkman. *A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles*. Applied Science Research, A1 :27–34, 1947.
- [3] P. A. Cundall, O. D. L. Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies*. Géotechnique, 29(1) :47–65, 1979.
- [4] J. M. DallaValle, A. Klemin. *Micromeritics : the technology of the particles*. Pitman Publishing Corporation, 1943.
- [5] S. L. Dance, M. R. Maxey. *Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow*. Journal of Computational Physics, 189(1) :212–238, 2003.

- [6] R. Di Felice, M. Rotondi. *Fluid-particle Drag Force in Binary-solid Suspensions*. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 10, 2012.
- [7] D. Gidaspow. *Multiphase Flow and Fluidization : Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Academic Press, 2012.
- [8] H. H. Hu. *Direct simulation of flows of solid-liquid mixture*. International Journal of Multiphase Flow, 22(2) :335–352, 1996.
- [9] E. Izard. *Modélisation numérique des écoulements granulaires denses immergés dans un fluide*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2014.
- [10] M. Jean. *The non-smooth contact dynamics method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 177(3–4) :235–257, 1999.
- [11] G. Machu, W. Meile, L. C. Nitsche, U. Schafflinger. *Coalescence, torus formation and break-up of sedimenting clouds : experiments and computer simulations*. Journal of Fluid Mechanics, 447 :299–336, 2001.
- [12] S. McNamara, W. R. Young. *Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium*. Physics of Fluids A : Fluid Dynamics, 4(3) :496–504, 1992.
- [13] B. Metzger, M. Nicolas, E. Guazzelli. *Falling clouds of particles in viscous fluids*. Journal of Fluid Mechanics, 580 :283–301, 2007.
- [14] J. M. Nitsche, G K Batchelor. *Break-up of a falling cloud containing dispersed particles*. Journal of Fluid Mechanics, 340 :161–175, 1997.
- [15] M. Ouriemi, P. Aussillous, E. Guazzelli. *Sediment dynamics. part 1. bed-load transport by laminar shearing flows*. Journal of Fluid Mechanics, 636 :295, 2009.
- [16] M. Pailha, O. Pouliquen. *A two-phase flow description of the initiation of underwater granular avalanches*. Journal of Fluid Mechanics, 633 :115, 2009.
- [17] M. Pastor, M. Quecedo, E. González, M. Herreros, J. Merodo, P. Mira. *Simple approximation to bottom friction for bingham fluid depth integrated models*. Journal of Hydraulic Engineering, 130(2) :149–155, 2004.
- [18] C. S. Peskin. *The immersed boundary method*. Acta Numerica, 11 :479–517, 2002.
- [19] S. A. Rzedkiewicz, C. Mariotti, P. Heinrich. *Modelling of submarine landslides and generated water waves*. Physics and Chemistry of the Earth, 21(1–2) :1–12, 1996.
- [20] C Y Wen, H Y Yu. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*. Mechanics of fluidization, 62 :100–111, 1966.
- [21] S. Whitaker. *A simple geometrical derivation of the spatial averaging theorem*. Chemical Engineering Education, 1985.
- [22] S. Whitaker. *Flow in Porous Media I : A theoretical Derivation of Darcy's Law*. Transport in porous media, 1(1) :3–25, 1986.
- [23] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang, A. B. Yu. *Discrete particle simulation of particulate system : theoretical developments*. Chemical Engineering Science, 62(13) :3378–3396, 2007.