

平面射流中纳米粒子积聚的矩方法

于明州, 林建忠, 陈丽华

(浙江大学 力学系, 流体传动及控制国家重点实验室, 杭州 310027)

(本刊编委林建忠来稿)

摘要: 应用大涡模拟方法求解平面湍射流场, 矩方法求解纳米粒子的一般动力学方程. 通过对每种情况 3 000 个时间步的平均, 得到了 Schmidt 数和 Damkohler 数对纳米粒子动力学特性的影响. 结果发现, 当气体参数不变时, Schmidt 数的变化只对直径小于 1 nm 的颗粒数密度的分布产生影响. 直径小的颗粒其颗粒数密度沿流动方向下降迅速, 而具有大 Schmidt 数的颗粒, 沿横向的分布较窄. 较小的颗粒容易发生积聚和扩散, 并且体积增长较快, 因而颗粒多分散性较为明显. 小的颗粒积聚时间尺度能增强颗粒的碰撞和积聚频率, 导致颗粒尺寸迅速增大. Damkohler 数越大, 颗粒的多分散也越明显.

关键词: 纳米粒子; 积聚; 平面射流; 矩方法; 大涡模拟

中图分类号: O359 **文献标识码:** A

引 言

对湍动流场中纳米颗粒动力学特性的研究, 在工业生产和生物医学领域具有重要的现实意义. 具体领域包括燃烧法生成纳米颗粒、汽车尾气颗粒物排放预测和核反应堆安全分析等^[1]. 深入了解纳米颗粒在湍动条件下的基本物理特征, 有助于更有效地预测和控制颗粒在流场中的形成、成长和传输过程. 研究发现, Brown 运动引起的颗粒积聚在颗粒动力学特性的变化过程中占支配地位, 并且存在于颗粒变化的整个过程^[2]. 目前, 湍动流场中纳米颗粒动力学特性的研究已成为人们关注的焦点. 由于颗粒积聚现象在颗粒演化过程中的普遍性和特殊性, 对颗粒积聚现象的研究也逐渐成为焦点中的核心问题^[2-4].

大约在 90 年前, Smoluchowski^[5] 首先提出了颗粒积聚过程的动力学基本理论框架. 在他的经典著作中, 采用了一组微分方程(粒子一般动力学方程, PGDE) 来描述与粒子积聚相关的数量守恒性. 当假设颗粒的碰撞频率系数与颗粒尺寸无关时, 便容易获得所有颗粒数密度方程的精确解析解. 但是, 对于微粒系统而言, 这种一般的解析解并不存在, 而 Smoluchowski 的解不能直观地揭示颗粒分布的特性^[6]. 为了解决这一难题, 矩方法由此产生^[7-8], 并在后来的应用中得到了极大发展^[9-13]. 迄今为止, 矩方法主要用于研究零维空间的时间问题, 如颗粒

收稿日期: 2005-11-01; 修订日期: 2007-07-16

基金项目: 科技部重大基础研究前期研究专项资助项目(2005CCA06900)

作者简介: 于明州(1979), 男, 山东济宁人, 博士生;

林建忠(联系人, Tel: + 86-571-87952882; Fax: + 86-571-87951464; E-mail: jzlin@sfp.zju.edu.cn).

自身内在积聚、破碎、浓缩和结晶等^[14-15];或者用于研究层流和稳定流场中颗粒尺寸的变化^[16-17]。然而,包含纳米颗粒的湍流场有着广泛的应用,如超纯材料的微粒火焰合成、核反应堆的安全分析及其大气中雾、云的演化预测。在这种情况下,忽视详细的流场变化而模拟颗粒,便不能满足实际的需要。因此,为了掌握实际流场中纳米颗粒运动的物理本质,有必要将先进的数值计算技术如直接数值模拟(DNS)或大涡模拟方法(LES)和矩方法(MM)结合起来。

DNS和MM的结合可以揭示流场、颗粒特性及其颗粒间碰撞之间的关系^[18]。但是,当流场 Re 数较大时,为了分辨所有尺度的流体运动,该方法要求计算网格点数为 $Re^{9/4}$ 的量级,这将导致极大的计算量以至于不可操作。而在综合了Reynolds平均数值模拟(RANS)和DNS方法优点的基础上,LES能够直接模拟大尺度的流场运动,对小尺度的运动则用湍流模式。就作者所知,这种将MM与LES结合的方法用于对纳米颗粒积聚的研究尚未见报道。

因此,本文首次应用LES与MM方法数值模拟平面射流中纳米颗粒的积聚,主要探讨Schmidt数和Damkohler数对纳米粒子动力学特性的影响。

1 控制方程

1.1 气流场

令 x 、 y 分别为流向、横向坐标。根据射流喷嘴宽度 D ,喷嘴处流体速度 U_0 和流体动力粘度定义的Reynolds数为 $Re = DU_0/\nu$ 。

滤波后的连续性方程与动量方程为

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{u}_i}{x_j} + T_{ij} \right), \quad (2)$$

其中 \bar{u}_i 、 p 分别为滤波后的速度与压力; i, j 取1, 2分别与 x, y 方向对应; T_{ij} 为亚网格Reynolds应力张量^[19]:

$$T_{ij} = 2 \nu_t \bar{S}_{ij} + \frac{1}{3} T_{ll} \delta_{ij}, \quad (3)$$

式中

$$\begin{cases} \bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right), & \nu_t = (C_s)^2 |S|, \\ |S| = \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x_2} \right)^{1/2}, & |S| = (2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{1/2}, \end{cases} \quad (4)$$

其中 C_s 为Smagorinsky常数, x_i ($i = 1, 2$)为 i 方向网格尺度; ν_t 可通过动力亚网格尺度模型求得^[20]。本模型试验网格尺度定义为^[20]

$$\nu_t = \left(\frac{\Delta x_1 \Delta x_2}{2} \right)^{1/2}, \quad C_s = 2 \quad (5)$$

1.2 颗粒相

分别定义 V_k 和 $n_k(\mathbf{x}, t)$ 为颗粒的体积与颗粒数分布函数,则 $n_k(\mathbf{x}, t) dV_k$ 表示在时刻 t 体积介于 \mathbf{x} 到 $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ 范围内的颗粒数目。矩方法用来给出颗粒分布^[21]:

$$M_k = \int_0^\infty V_k^k n_k(\mathbf{x}, t) dV_k, \quad (6)$$

式中 M_k 是颗粒分布的 k 阶矩。颗粒尺寸分布采用对数正态分布^[22]:

$$n(\rho, t) = \frac{N_p}{3 \ln g \sqrt{2}} \exp\left[-\frac{\ln^2(\rho / \rho_g)}{18 \ln^2 g}\right] \frac{1}{\rho}, \quad (7)$$

其中 N_p 为总的颗粒数密度, ρ_g 和 σ_g 分别为颗粒几何平均体积和几何标准方差^[16]:

$$\rho_g = \frac{M_1^2}{M_0^{3/2} M_2^{1/2}}, \quad \ln^2 \sigma_g = \frac{1}{9} \ln\left[\frac{M_0 M_2}{M_1^2}\right] \quad (8)$$

纳米颗粒的输运由颗粒一般动力学方程描述, 该方程能反映纳米颗粒在各种物理化学作用下的动力学特性, 本文研究只涉及颗粒的积聚. 由于本文所考虑的颗粒直径远小于气体分子平均自由程, 所以积聚项采用自由分子模式. 这样, 用 U_0 、 D 、 D/U_0 和 k 阶矩参考值 $(M_k)_0$ 对积聚作用下颗粒分布的 k 阶矩运输方程无量纲化后, 可得^[11]:

$$\frac{M_k}{t} + (u M_k) = \frac{C_M^{2/9-2k/3}}{S_{CM} Re} M_{k-2/3} + M_k, \quad (9)$$

式中 u 为气流速度; $C_M = (M_0)_0 (M_2)_0 / (M_1)_0^2$ 为一常数, 表征颗粒多分散性指标, 对单分散性颗粒其值为 1^[11]; Re 为 Reynolds 数; $S_{CM} = U_0 / (D^{2/3} / \rho_g^{2/3})$ 是矩 Schmidt 数, 其中 ρ_g 为流体动力粘度, D 是在自由分子模式下依赖于颗粒尺寸的颗粒扩散系数^[13]:

$$D = \frac{(3/4)^{1/3} k_B T}{2^{2/3} c (1 + \rho_g / 8)}, \quad (10)$$

式中 k_B 为 Boltzmann 常数, T 为流体温度, c 为平均热流速度, ρ_g 则表示调整系数.

方程(9)中的源项 M_k 表示由于颗粒间相互作用导致的 Brown 积聚的贡献, 可以表示为^[22]

$$M_k = Da C_M^{k^2/2} \rho_g^{k+1/6} \left[C_M \frac{M_0 M_2}{M_1^2} \right]^{k^2/4 + k/12} \left[\left[C_M \frac{M_0 M_2}{M_1^2} \right]^{25/72} + 2 \left[C_M \frac{M_0 M_2}{M_1^2} \right]^{5/72} + \left[C_M \frac{M_0 M_2}{M_1^2} \right]^{1/72} \right], \quad (11)$$

其中 k 在前三阶矩中表示为

$$\begin{cases} 0 = -0.633 - 0.092 \frac{2}{g} + 0.022 \frac{3}{g}, \\ 1 = 0, \quad 2 = 0.78 + \frac{2}{g} - 0.428 \frac{2}{g} + 0.058 \frac{3}{g}, \end{cases} \quad (12)$$

方程(11)中 Damkohler 数 Da 表示对流时间尺度与颗粒积聚时间尺度的比值, 可用来唯一刻画流动中 Brown 积聚导致的颗粒增长, 其表达式为:

$$Da = \frac{DA_1 (\rho_g^{1/6})_0 (M_0)_0}{U_0} = \frac{D}{U_0} \frac{A_1}{(\rho_g^{5/6})_0}, \quad (13)$$

式中 A_1 为初始颗粒容积分数, $(M_0)_0$ 可以通过把 $(M_k)_0$ 代入方程(8)中求得. A_1 是不依赖于颗粒尺寸的颗粒碰撞频率函数的系数, 表示为

$$A_1 = (3/4)^{1/6} (6 k_B T / \rho_p)^{1/2}, \quad (14)$$

其中 ρ_p 为颗粒密度.

方程(9)中 k 为非整数时, k 阶矩表示为^[22]

$$M_k = M_0 \rho_g^k \exp\left[\frac{9}{2} k^2 \ln^2 g\right] \quad (15)$$

当颗粒积聚发生时, 对应于零阶矩的颗粒数密度将减少, 正比于一阶矩的颗粒总质量保持

不变, 而由二阶矩表示的颗粒多分散性将增加 因此, 本文通过求解方程(9)来获得零阶、一阶和二阶矩

2 计算结果与讨论

2.1 计算参数

图1为平面射流示意图, 其中 x 和 y 分别表示流向和纵向方向 射流进口宽度 $D = 5 \text{ mm}$, 进口速度 $U_0 = 6 \text{ m/s}$, 进口湍流强度为 1% 数值模拟时选取 $X = Y = 20D \sim 40D$ 区域进行计算 出口和横向静止边界采用充分发展条件 根据 $Re = DU_0/\nu$ 定义的流场 Reynolds 数为 2000 为避免数值不稳定性, Smagorinsky 常数 C_s 限制在 0 到 0.3 之间 计算中滤波尺寸和试验滤波尺寸分别等于和大于相应的网格尺寸 对方程(2)和方程(9)离散时, 非稳态项采用二阶精度 Crank-Nicolson 格式, 对流项则采用 QUICK 格式 所有的时间变量用 $T = t/(D/U_0)$ 无量纲化, 时间步长固定为 $\Delta t = 0.024$ 流场为等温气流场, 温度 $T = 293 \text{ K}$ 本文所有研究对象, 纳米颗粒在入口处均一分布 研究 Schmidt 数的影响时, 喷嘴出口处的颗粒直径分别为 0.1 nm 、 0.5 nm 、 1.0 nm 、 1.5 nm , 相应初始颗粒容积率分别为 $1/6 \times 10^{-30}$ 、 $1/48 \times 10^{-27}$ 、 $1/6 \times 10^{-27}$ 和 $3.375/6 \times 10^{-27}$; 研究 Damkohler 数影响时, 初始颗粒直径为 1 nm 由于颗粒初始为单分散性分布, 因此颗粒初始分布的标准方差为 $\sigma_g = 1.0$

2.2 Schmidt 数的影响

平面射流中纳米粒子分布的演化, 一般可认为是气流场对颗粒的输运、Brown 运动作用下的颗粒扩散及其颗粒积聚共同作用的结果 Schmidt 数 Sc_M 表示气体分子扩散与颗粒扩散之比 当气流场参数固定时, Sc_M 数唯一地由颗粒直径 d_p 表示 初始颗粒直径、颗粒体积分数、初始颗粒体积、颗粒 Schmidt 数、各阶参

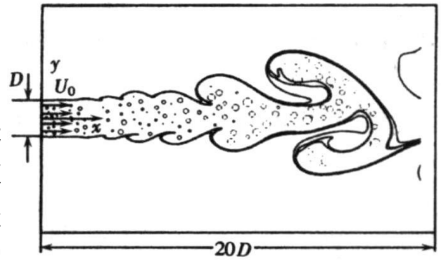
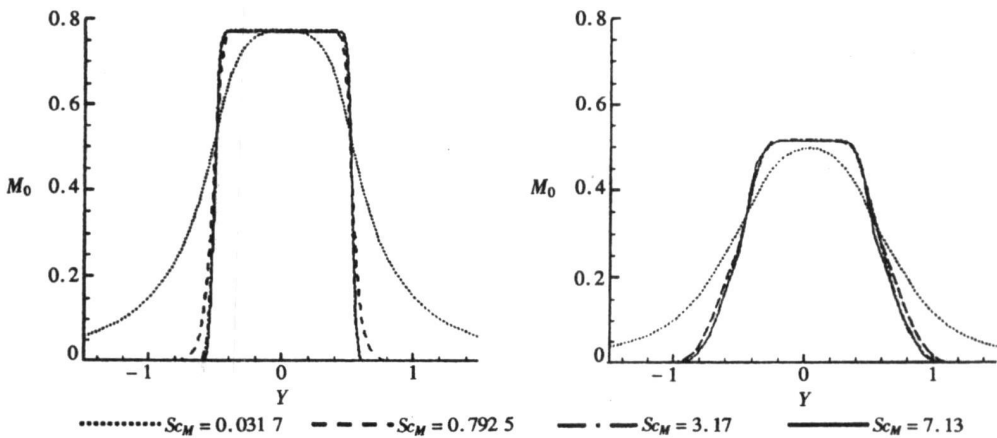


图1 流场结构示意图



(a) $x = 1$

(b) $x = 3$

图2 不同 Sc_M 数下时间平均的零阶距 M_0 沿横向的变化

考矩以及常数 C_M 如表1所示

表 1 颗粒直径 d_p 、初始颗粒体积分数、初始颗粒体积 g_0 、颗粒 Schmidt 数 Sc_M 、各阶参考矩 $(M_0)_0$ 、 $(M_1)_0$ 、 $(M_2)_0$ 和常数 C_M

d_p / nm	g_0 / m^3	Sc_M	$(M_0)_0$	$(M_1)_0$	$(M_2)_0$	C_M	
0.1	$1.80 \cdot 10^{-13.5}$	$1/6 \cdot 10^{-30}$	0.031 7	$3.44 \cdot 10^{6.5}$	$1.8 \cdot 10^{-13.5}$	$9.43 \cdot 10^{-44.5}$	1.00
0.5	$3.18 \cdot 10^{-12}$	$1/48 \cdot 10^{-27}$	0.792 5	$4.86 \cdot 10^{16}$	$3.18 \cdot 10^{-12}$	$2.08 \cdot 10^{-40}$	1.00
1.0	$1.80 \cdot 10^{-11}$	$1/6 \cdot 10^{-27}$	3.17	$3.44 \cdot 10^{16}$	$1.8 \cdot 10^{-11}$	$9.13 \cdot 10^{-39}$	1.00
1.5	$5.00 \cdot 10^{-11}$	$3.375/6 \cdot 10^{-27}$	7.13	$2.83 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{-11}$	$8.84 \cdot 10^{-38}$	1.00

当颗粒发生碰撞和积聚时, 颗粒的数密度减少, 这可以通过图 2 所示的零阶矩 M_0 的分布予以量化。图 2 中当 $Sc_M = 0.0317, 0.7925$ 和 3.17 时, M_0 分布的差异是明显的, 而 $Sc_M = 3.17$ 和 7.13 时, 差异则可以忽略。这说明当气流场固定, 只有当颗粒的直径小于 1 nm 时, Sc_M 的变化才对纳米粒子的数密度分布产生影响。而当微粒直径大于 1 nm 时, Brown 运动造成的颗粒扩散的作用可以忽略, 此时颗粒的分布主要由气体的运输所控制。当 $Sc_M < 3.17$ 时, 增加 Sc_M 将导致 M_0 在射流区增加, 而在外区则减少, 这是由于小颗粒具有较强的扩散。对比图 2(a) 和图 2(b) 可知, 在 $Sc_M = 0.0317$ 的情况下, M_0 在射流中线处的减小要明显于其它 Schmidt 数的情况, 表明对小

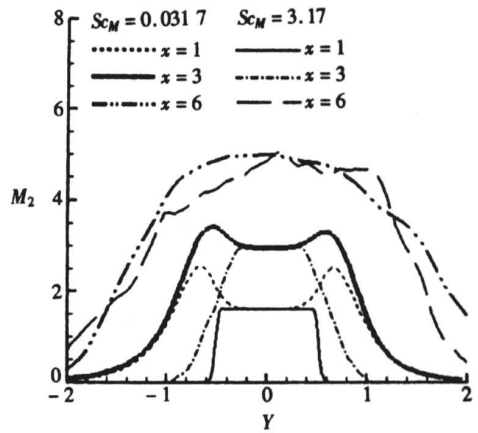


图 3 不同 Sc_M 数和不同轴向位置处时间平均的二阶矩 M_2 沿横向的变化

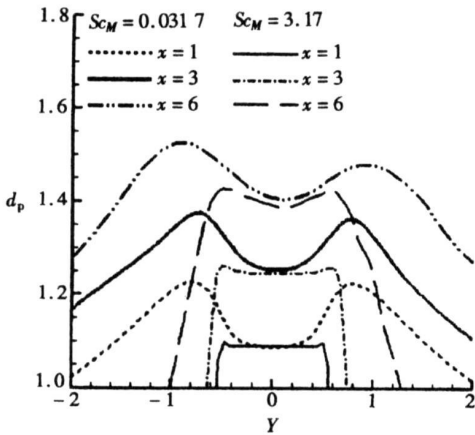


图 4 不同 Sc_M 数下时间平均的颗粒直径 d_p 沿横向的变化

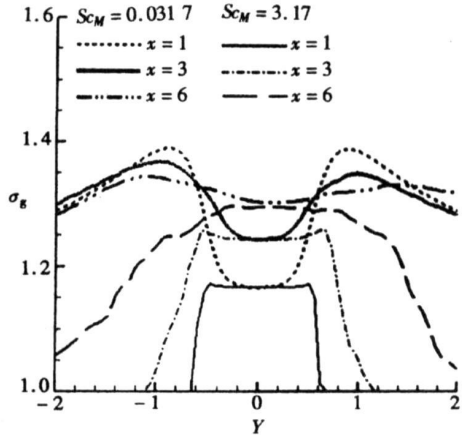


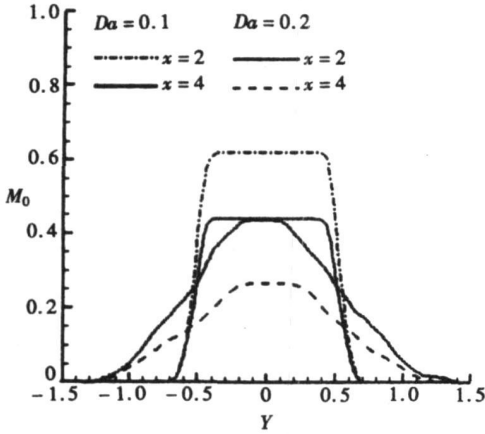
图 5 不同 Sc_M 数下时间平均几何标准方差 σ_g 沿横向的变化

颗粒而言, 颗粒的数密度沿流动方向很快地减少沿横向的分布范围越小

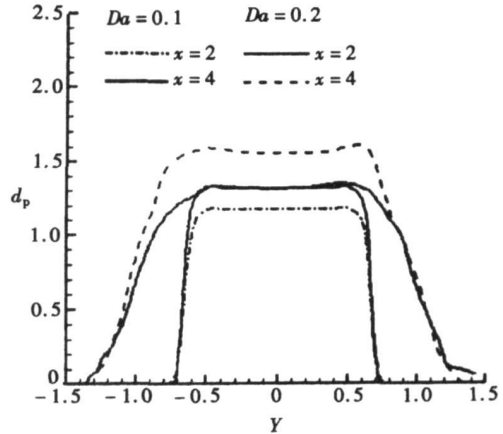
此外, M_0 的分布说明, 越大 Sc_M 数的颗粒

初始单分散性的颗粒进入射流场后, 随着流场的发展将由于积聚而产生新的具有不同尺寸的大颗粒, 这将导致二阶矩 M_2 发生相应变化。在 $Sc_M = 0.0317$ 和 3.17 情况下, 时间平均

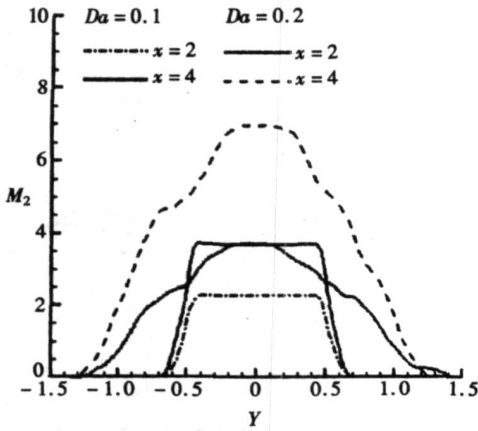
的 M_2 沿横向的变化如图 3 所示, $Sc_M = 0.0317$ 对应的是气流场对颗粒的影响与颗粒的自身扩散相当的情况; 而 $Sc_M = 3.17$ 则表示气流场对颗粒分布的影响占主导地位。两种 Sc_M 情况下, 随着流场的发展, M_2 在整个流场增加。尽管在射流主干区, $Sc_M = 0.0317$ 和 3.17 所对应 M_2 的差异可以忽略, 但在主干区的外围, $Sc_M = 0.0317$ 情况下的 M_2 值明显大于 $Sc_M = 3.17$ 的情形。对于 $Sc_M = 0.0317$, M_2 的峰值出现在射流区和外区的界面, 这是因为剪切层的卷起所致。然而, 这种现象在 $Sc_M = 3.17$ 的情况下并没有出现。以上分析说明较小的颗粒具有较明显的多分散性。在 $x = 6$ 位置处, 两种 Sc_M 数情况下的 M_2 分布曲线基本一致, 并且在中线附近达到最大值, 这是颗粒的积聚、扩散和气流相运输的综合结果。



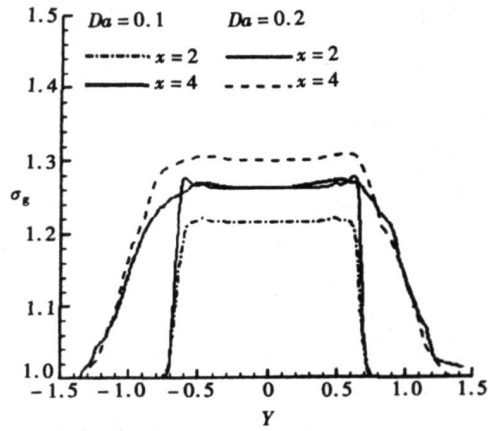
(a) M_0



(b) d_p



(c) M_2



(d) σ_g

图 6 不同 Da 数和轴向位置处时间平均 M_0 , M_2 , d_p 和 σ_g 沿横向的变化

图 4 与图 5 分别表示不同 Sc_M 数下时间平均的颗粒直径 d_p 、颗粒分布几何标准方差 σ_g 沿横向的变化。由图可见, 随着流场的发展, d_p 和 σ_g 在射流区增加, 然而对 $Sc_M = 0.0317$ 的情况而言, 不同轴向位置处的 σ_g 在远离射流中心的区域极为相近, 且在射流与外区界面处的最大值不断减小, 这一特征与 $Sc_M = 3.17$ 的情形不同。比较 $Sc_M = 0.0317$ 和 3.17 的结果可知, 较大 Sc_M 数的颗粒其增长速度较慢、扩散较弱且在射流主干区附近颗粒分布范围较窄。由于

小颗粒较容易发生积聚和扩散,所以颗粒增大较快,这使得颗粒尺寸在射流周围有较大的分布范围。但是,在射流核心区, $Sc_M = 0.0317$ 和 3.17 情况下 d_p 和 σ_g 的差别可以忽略。以上表明, Sc_M 数的变化对射流核心区内颗粒的增长及其尺寸分布几乎没有影响。对比图 4 与图 5 可知,在 $Sc_M = 3.17$ 的情况下,整个流场内的 σ_g 随着 d_p 的增加而增加,而对于 $Sc_M = 0.0317$ 的情况,这种关系只在射流核心区才存在。

2.3 Damkohler 数的影响

Damkohler 数 Da 与长度尺度 D 、独立于颗粒尺寸的颗粒碰撞频率 A_1 、颗粒体积分数 ϕ 、速度尺度 U_0 及其初始颗粒尺寸 g_0 有关。当 Sc_M 数取 3.17 、颗粒直径取 1 nm 时,初始颗粒体积 g_0 为 $1/6 \cdot 10^{-27}$ 。本文选择 Damkohler 数为 0.1 和 0.2 两种情况,探讨 Damkohler 数 Da 对纳米颗粒分布的影响。Damkohler 数、初始颗粒体积分数、各阶参考矩和常数 C_M 如表 2 所示。

表 2 Damkohler 数 Da 、初始颗粒体积分数 ϕ 、各阶参考矩 $(M_0)_0$ 、 $(M_1)_0$ 、 $(M_2)_0$ 和常数 C_M

Da/nm	ϕ	$(M_0)_0$	$(M_1)_0$	$(M_2)_0$	C_M
0.1	$1.80 \cdot 10^{-11}$	$3.44 \cdot 10^{16}$	$1.8 \cdot 10^{-11}$	$9.43 \cdot 10^{-39}$	1.00
0.2	$3.60 \cdot 10^{-11}$	$6.88 \cdot 10^{16}$	$3.6 \cdot 10^{-11}$	$1.89 \cdot 10^{-38}$	1.00

图 6 所示为在 $x = 2$ 和 $x = 4$ 处,时间平均的颗粒数密度 M_0 、多分散性 M_2 、颗粒直径 d_p 和几何标准方差 σ_g 沿横向的分布。随着射流的发展,颗粒由于 Brown 运动而碰撞和积聚,这导致了颗粒数密度的减少和颗粒尺度的增长。图 6(a) 显示,随着 Da 数的增加, M_0 的梯度沿流动方向增加,表明短的积聚时间尺度将促进颗粒的碰撞和积聚,而频繁的碰撞和积聚将导致颗粒直径的很快增加。图 6(b) 说明在射流区域, $Da = 0.2$ 的颗粒尺寸比 $Da = 0.1$ 的情形大。图 6(c) 表明,随着 Da 和轴向距离的增加,全流场的 M_2 也增加,说明 Da 数越大,颗粒的多分散性越明显。如图 5(d) 所示,类似于颗粒的直径分布,大的 Da 数对应于大的几何标准方差,即宽的颗粒尺寸分布。

3 结 论

本文用大涡模拟方法模拟了平面射流中纳米颗粒的积聚与增长,颗粒场用矩方法来近似纳米颗粒的一般动力学方程。文中在保持 Reynolds 数不变的情况下,对 4 种不同 Schmidt 数和两种不同 Damkohler 数的情况进行了模拟。基于 3 000 个时间步的时间平均所得的结果用于揭示 Schmidt 数和 Damkohler 数对纳米颗粒分布的影响。

结果表明,对固定的气相参数而言,只有颗粒直径小于 1 nm 时, Schmidt 数的变化才会对纳米颗粒的数密度分布产生影响。当颗粒直径大于 1 nm 时,颗粒的分布主要由气流场的输运所控制。较小颗粒的粒子数密度沿流动方向很快地减少,具有较大 Schmidt 数的颗粒沿横向的分布范围较窄。较小颗粒容易发生积聚和扩散,因而增长较快且有较明显的颗粒多分散性,这使得颗粒在射流两侧形成较宽的尺寸分布。在射流核心区, Schmidt 数的变化对颗粒的增长及其尺寸分布几乎没有影响。较小的颗粒积聚时间尺度能增强颗粒的碰撞和积聚,导致颗粒尺寸的增大。Damkohler 数越大,颗粒的多分散性就越明显。

[参 考 文 献]

- [1] Yu M Z, Lin J Z, Chen L H. Large eddy simulation of a planar jet flow with nanoparticle coagulation [J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2006, **22**(4): 293-300.
- [2] Miller S E, Garrick S C. Nanoparticle coagulation in a planar jet [J]. *Aerosol Sci Technol*, 2004, **38**(1): 79-89.
- [3] Garrick S C, Lehtinen K E J, Zachariah M R. Nanoparticle coagulation via a Navier-Stokes/ nodal methodology: evolution of the particle field [J]. *J Aerosol Sci*, 2006, **37**(5): 555-576.
- [4] Lin J Z, Chan T L, Liu S, et al. Effects of coherent structures on nanoparticle coagulation and dispersion in a round jet [J]. *Internat J Nonlinear Sci Numer Simul*, 2007, **8**(1): 45-54.
- [5] Smoluchowski V. Versuch einer mathematischen theorie der Koagulationskinetik kollider losungen [J]. *Z Phys Chem*, 1917, **92**: 129-168.
- [6] Frenklach M. Dynamics of discrete distribution for smoluchowski coagulation model [J]. *J Colloid Interface Sci*, 1985, **108**(1): 237-242.
- [7] Hulbert H M, Katz S. Some problems in particle technology: a statistical mechanical formulation [J]. *Chem Eng Sci*, 1964, **19**(8): 555-574.
- [8] Smith E J, Jordan L M. Mathematical and graphical interpretation of the lognormal law for particle size distribution analysis [J]. *J Colloid Interface Sci*, 1964, **19**(6): 549-559.
- [9] Frenklach M, Harris S J. Aerosol dynamics modeling using the method of moments [J]. *J Colloid Interface Sci*, 1987, **118**(11): 252-261.
- [10] Friedlander S K. Dynamics of aerosol formation by chemical reaction [J]. *Ann NY Acad Sci*, 1983, **404**(1): 354-364.
- [11] Pratsinis S E. Simultaneous nucleation, condensation, and coagulation in aerosol reactor [J]. *J Colloid Interface Sci*, 1988, **124**(2): 416-417.
- [12] McGraw R. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments [J]. *Aerosol Sci Technol*, 1997, **27**(2): 255-265.
- [13] Settumba N, Garrick S C. Direct numerical simulation of nanoparticle coagulation in a temporal mixing layer via a moment method [J]. *J Aerosol Sci*, 2003, **34**(1): 149-167.
- [14] Talukdar S S, Swihart M T. Aerosol dynamics modeling of silicon nanoparticle formation during silane pyrolysis: a comparison of three solution methods [J]. *J Aerosol Sci*, 2004, **35**(7): 889-908.
- [15] Diemer R B, Olson J H. A moment methodology for coagulation and breakage problems: Part I-analytical solution of the steady-state population balance [J]. *Chem Eng Sci*, 2002, **57**(12): 2193-2209.
- [16] Pratsinis S E, Kim K S. Particle coagulation, diffusion and thermophoresis in laminar tube flows [J]. *J Aerosol Sci*, 1989, **20**(1): 101-111.
- [17] Pyykonen J, Jokiniemi J. Computational fluid dynamics based sectional aerosol modeling schemes [J]. *J Aerosol Sci*, 2000, **31**(5): 531-550.
- [18] Terry D A, McGraw R, Rangel R H. Method of moments solution for a laminar flow aerosol reactor model [J]. *Aerosol Sci Technol*, 2001, **34**(4): 353-362.
- [19] Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equation [J]. *Mon Weather Rev*, 1963, **91**(3): 99-164.
- [20] Lilly D K. A proposed modification of the Germano subgrid scale closure method [J]. *Phys Fluids A*, 1992, **4**(3): 633-635.
- [21] Friedlander S K. *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior* [M]. New York, N Y: Wiley, 1977.

- [22] Suh S M, Zachariah M R, Girshick S L. Modeling particle formation during low-pressure silane oxidation: Detailed chemical kinetics and aerosol dynamics[J]. *J Vac Sci Technol A*, 2001, 19(3): 940-951.

Nanoparticle Coagulation in a Planar Jet via Moment Method

YU Ming-zhou, LIN Jian-zhong, CHEN Li-hua

(Department of Mechanics, State Key Laboratory of Fluid Power Transmission and Control, Zhejiang University, Hangzhou 310027, P. R. China)

Abstract: Large eddy simulations of nanoparticle coagulation in an incompressible planar jet were performed. The particle is described using a moment method to approximate the particle general dynamics equations. The time-averaged results based on 3 000 time steps for every case were obtained to explore the influence of the Schmidt number and the Damkohler number on the nanoparticle dynamics. The results show that the changes of Schmidt number have the influence on the number concentration of nanoparticles only when the particle diameter is less than 1 nm for the fixed gas parameters. The number concentration of particles for small particles decreases more rapidly along the flow direction, and the nanoparticles with larger Schmidt number have a narrower distribution along the transverse direction. The smaller nanoparticles coagulate and disperse easily, grow rapidly hence show a stronger polydispersity. The smaller coagulation time scale can enhance the particle collision and coagulation. Frequent collision and coagulation bring a great increase in particle size. The larger the Damkohler number, the higher the particle polydispersity.

Key words: nanoparticle; coagulation; planar jet; moment method; large eddy simulation