

湍动剪切微米尺度粒子凝并 TEMOM 模型研究¹⁾于明州^{*,†,2)} 江 影^{*} 张 凯^{*}^{*}(中国计量学院, 杭州 310018)[†](卡尔斯鲁厄理工学院化工系, 卡尔斯鲁厄 76131, 德国)

摘要 湍动流场中剪切凝并是导致微纳米尺度颗粒系统非稳定性的主要机理. 耦合相应的湍流计算模型, Smoluchowski 平均场理论可以有效地解决该颗粒系统的时空演化问题. 把泰勒展开矩方法 (TEMOM) 应用于微纳米尺度颗粒剪切碰撞问题, 重点研究湍动剪切条件下, Smoluchowski 方程在矩方法框架内的封闭问题, 并进一步分析计算精度与展开阶数的关系. 结果表明, 所提部分四阶泰勒展开矩方法模型能以较高精度对微纳米尺度湍动剪切凝并问题进行理论分析, 且证实微纳米尺度颗粒系统在湍动剪切凝并机理控制下存在拟自保持分布状态特性.

关键词 湍动, 矩方法, 泰勒展开, 凝并

中图分类号: O359 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2011)03-0447-06

引 言

在湍动流场中, 微纳米尺度颗粒动力学特征量的演化特征及其过程决定微纳米流体多相流的宏观特性. 深入了解该现象发生的内部机理及其物理本质, 有助于进一步展开燃烧法微纳米颗粒合成、大气气溶胶的合成转变、人呼吸道颗粒沉积等方面的研究^[1]. 众多的研究结果显示, 微米尺度以下颗粒系统存在热不稳定性特征, 主要原因为颗粒布朗运动导致的颗粒间的相互碰撞粘结. 但是, 这种现象只是对 $1\mu\text{m}$ 量级以下颗粒系统有效. 对于大于该尺度颗粒系统, 布朗运动的影响明显减小. 尤其是在湍动流场中, 湍流微尺度 ($\lambda_k = (\nu^3/\varepsilon_d)^{1/4}$) 范围内速度间的剪切同样导致颗粒系统产生不稳定性特征. 湍动剪切对 $1\sim 10\mu\text{m}$ 颗粒系统将产生较大的影响, 其结果是颗粒系统平均粒径及其尺度谱分布的改变. 这种现象广泛存在于工业气溶胶及大气环境中. 但是, 截止目前, 针对该现象的研究较少.

Smoluchowski 平均场理论可以有效地解决微纳米尺度颗粒系统演化问题. 该理论的核心是通过构建以颗粒尺度为内坐标的颗粒数目守恒方程 (population balance equation, PBE) 追踪颗粒数目随时间

的演化规律. 但是, 该方程为一强非线性微积分方程, 针对实际问题, 不存在解析解. 为此, 研究者不得不采用数值计算的方法对该问题进行处理. 目前常用的数值求解方法为矩方法^[2]、分区方法^[3]和 Monte Carlo 方法^[4]. 在保证精度的情况下, 矩方法能够以极高的计算效率给出所关注的物理量. 事实上, 在采用矩的处理方式使 PBE 方程转变为矩方程的过程中, 仍存在一个难点问题, 即矩方程难以自动封闭^[2]. 截至目前, 已有对数正态分布矩方法^[5]、积分矩方法 (quadrature method of moments, QMOM)^[6]、 p 阶多项式矩方法^[7]和 interpolative 矩方法^[8]对该问题作了较为巧妙的解决. 泰勒展开矩方法是最近提出的一种用以封闭矩方程的新方法^[9]. 在与已有矩方法的对比中, 泰勒展开矩方法能够在保证数值计算精度的情况下, 具备较高的计算效率以及简洁的数学形式, 且该方法与积分矩方法类似, 不需对颗粒尺度谱进行预先假设. 目前, 泰勒展开矩方法已被成功地应用于积聚体纳米颗粒系统的研究^[10-11], 并被用以求解汽车尾气二次颗粒污染物合成机理的研究^[12]. 本文进一步将该方法应用于湍动剪切颗粒凝并问题.

湍动驱动凝并发生于湍流微尺度范围内.

2010-02-24 收到第 1 稿, 2011-01-30 收到修改稿.

1) 浙江省自然科学基金 (Y7080394, Y6090406), 国家自然科学基金 (10632070, 10802083, 10902105) 和德国洪堡访问学者基金 (1136169) 资助项目.

2) E-mail: yumingzhou1738@yahoo.com.cn

Saffman 和 Turner^[13] 最早对该问题进行研究, 并提出相应的凝并计算模型. 研究显示, 湍动驱动凝并可分为加速、沉降和剪切 3 种机理. 由于该模型只能应用于理想零惯性系统, 该工作受到后来研究者的质疑^[14-15], 但是, Saffman 和 Turner 的碰撞率表达式仍被众多的研究者所采纳^[1,16]. 本文仍采用 Saffman 和 Turner 的凝并模型, 并局限于湍动剪切凝并问题的研究. 本文仅限于从数学形式, 把布朗凝并问题推广到湍动凝并问题, 即在构建颗粒尺度谱通用动力学方程过程中, 把布朗凝并碰撞函数更换为湍动凝并碰撞函数. 由于 Saffman 和 Turner 碰撞函数仍为大多数研究者所接受的模型, 因此, 由此模型而衍生的泰勒展开矩方法湍动模型, 可以用以描述颗粒系统动力学演变问题. 本文所发展模型适用于颗粒粒径小于 Kolmogorov microscale, 零惯性颗粒系统.

1 理论推导

在经典 Smoluchowski 平均场理论中, Smoluchowski 首先给出了多分散系统中颗粒数浓度在颗粒凝并过程中的数学表达式. 但是, 该表达式是以离散的形式给出. 1928, Muller 在 Smoluchowski 工作的基础上, 给出了该问题的微积分形式^[1]

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v_1, v - v_1) n(v_1, t) n(v - v_1, t) dv_1 - n(v, t) \int_0^\infty \beta(v_1, v) n(v_1, t) dv_1 \quad (1)$$

式中, $n(v, t)$ 为时刻 t 体积为 v 的颗粒数浓度, $\beta(v_1, v)$ 为体积为 v 和 v_1 两种颗粒的碰撞频率. 矩方法思想的核心是, 把微积分形式的方程 (1) 转换成微分形式的矩方程. 为此, 方程 (1) 各项需乘以 v^k , 并对 v 积分, 即得各阶矩随时间的变化

$$\frac{dm_k}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty [(v + v_1)^k - v^k - v_1^k] \beta(v, v_1) n(v, t) n(v_1, t) dv dv_1 \quad (2)$$

其中

$$m_k = \int_0^\infty v^k n(v) dv \quad (3)$$

在 Stokes-Einstein 扩散理论框架内, 颗粒间复杂的碰撞率 $\beta(v_1, v)$ 会使得方程 (2) 难以自动封闭. 事实上, 针对离散系统矩方法的研究, 重点和难点都集中在对封闭问题的处理上. 本文泰勒展开矩方法基于泰勒展开技术.

基于各向同性湍流理论, 湍流微尺度范围内 ($< \lambda_k$), 湍流均方根速度梯度为

$$\sqrt{\left(\frac{\partial u_\ell}{\partial x_m}\right)^2} = \left(\frac{2\varepsilon_d}{15\nu}\right)^{1/2} \quad (4)$$

其中, ℓ 和 m 表示直角坐标系坐标, ε_d 为湍动耗散率, ν 为动力学黏度. 在此情况下, 所得湍动剪切碰撞率为^[1]

$$\beta(v, v_1) = \left(\frac{3}{10\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon_d}{\nu}\right)^{1/2} (v^{1/3} + v_1^{1/3})^3 \quad (5)$$

当方程 (5) 代入方程 (2) 时, 可得

$$\begin{aligned} \frac{dm_k}{dt} &= \frac{1}{2} \left(\frac{3}{10\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon_d}{\nu}\right)^{1/2} \cdot \\ &\int_0^\infty \int_0^\infty [(v + v_1)^k - v^k - v_1^k] (v^{1/3} + v_1^{1/3})^3 \cdot \\ &n(v, t) n(v_1, t) dv dv_1 \end{aligned} \quad (6)$$

令 $\tau = \left(\frac{3}{10\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon_d}{\nu}\right)^{1/2} t$, 则方程 (6) 可表示为

$$\frac{dm_k}{d\tau} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty [(v + v_1)^k - v^k - v_1^k] \cdot (v^{1/3} + v_1^{1/3})^3 n(v, t) n(v_1, t) dv dv_1 \quad (7)$$

方程 (7) 可以进一步表示为

$$\left. \begin{aligned} \frac{dm_0}{dt} &= -\frac{1}{2} \cdot \\ &\int_0^\infty \int_0^\infty (v + 3v^{2/3}v_1^{1/3} + 3v^{1/3}v_1^{2/3}) \cdot \\ &n(v, t) n(v_1, t) dv dv_1 \\ \frac{dm_1}{d\tau} &= 0 \\ \frac{dm_2}{d\tau} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (2v^2v_1 + 6v^{5/3}v_1^{4/3} + \\ &6v^{4/3}v_1^{5/3} + 2vv_1^2) n(v, t) n(v_1, t) dv dv_1 \\ \frac{dm_3}{d\tau} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (3v^3v_1 + 9v^{8/3}v_1^{4/3} + \\ &9v^{7/3}v_1^{5/3} + 6v^2v_1^2 + 9v^{5/3}v_1^{7/3} + \\ &9v^{4/3}v_1^{8/3} + 3vv_1^3) n(v, t) n(v_1, t) dv dv_1 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

通过在方程 (8) 中引入方程 (3), 可以把尺度谱分布

空间转换到矩量空间

$$\left. \begin{aligned} \frac{dm_0}{d\tau} &= -\frac{1}{2}(m_1m_0 + 3m_{2/3}m_{1/3} + 3m_{2/3}m_{1/3}) \\ \frac{dm_1}{d\tau} &= 0 \\ \frac{dm_2}{d\tau} &= \frac{1}{2}(2m_2m_1 + 6m_{5/3}m_{4/3} + \\ &\quad 6m_{4/3}m_{5/3} + 2m_1m_2) \\ \frac{dm_3}{d\tau} &= \frac{1}{2}(3m_3m_1 + 9m_{8/3}m_{4/3} + \\ &\quad 9m_{7/3}m_{5/3} + 6m_2m_2 + \\ &\quad 9m_{5/3}m_{7/3} + 9m_{4/3}m_{8/3} + 3m_1m_3) \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

很明显, 在矩方程 (9) 中, 存在非整数矩量, 如 $m_{1/3}$. 因此, 方程组 (9) 难以封闭. 为此, 采用文献 [9] 的处理方式, 引入针对非整数矩量的泰勒展开矩方法表达式, 三阶表达式为

$$\begin{aligned} m_k &= \left(\frac{u^{k-2}k^2}{2} - \frac{u^{k-2}k}{2} \right) m_2 + \\ &\quad (-u^{k-1}k^2 + 2u^{k-1}k) m_1 + \\ &\quad \left(u^k + \frac{u^k k^2}{2} - \frac{3u^k k}{2} \right) m_0 \end{aligned} \quad (10)$$

四阶表达式为

$$\begin{aligned} m_k &= u^{k-3} \left(\frac{1}{6}k^3 - \frac{1}{2}k^2 + \frac{1}{3}k \right) m_3 + \\ &\quad u^{k-2} \left(-\frac{1}{2}k^3 + 2k^2 - \frac{3}{2}k \right) m_2 + \\ &\quad u^{k-1} \left(\frac{1}{2}k^3 - \frac{5}{2}k^2 + 3k \right) m_1 + \\ &\quad u^k \left(-\frac{1}{6}k^3 + k^2 - \frac{11}{6}k + 1 \right) m_0 \end{aligned} \quad (11)$$

其中, u 为泰勒展开中心点. 在本文的研究中, u 应为一表征颗粒体积大小的物理量, 在模型中, 对此物理量选用颗粒系统平均体积 (m_1/m_0), 即 [9]

$$u = m_1/m_0 \quad (12)$$

在本文的研究中, 采用 3 种方式对方程组 (9) 进行封闭: (1) 方程组各阶矩方法采用方程 (11) 进行封闭, 即完全四阶泰勒展开矩方法模型; (2) 方程组中 0 阶矩量方程采用方程 (11) 封闭, 其余采用方程 (10) 封闭, 即部分四阶泰勒展开矩方法模型; (3) 方程组中各阶矩量方程由方程 (10) 封闭. 由这 3 种处理方式得到的模型依次为 TEMOM4(1), TEMOM4(2) 和 TEMOM(3).

2 计算方法和计算条件

本章所涉及程序计算均在 Pentium 4 机器上进行, 计算机内存为 2G. 对于常微分方程组的求解, 采用的方法是固定时间步的四阶精度 Runge-Kutta 方法. 在 QMOM 模型的执行过程中, 矩阵特征值和特征向量的求取采用 Jacobi 方法. 对于所有模型的计算, 时间步取同一值, 即 0.001. 这样小的时间步能保证所有模型计算能正常进行, 不会发生发散现象. 所有程序均用 C 语言编写并在 Microsoft Visual C++ 6.0 编译器上执行.

为进行定量分析, 需对不同数学方程进行无量纲处理. 本节继续沿用文献 [10] 的研究方法, 定义计算初始条件满足对数正态分布假设, 即 k 阶矩方程采用以下方式处理

$$m_k = M_k m_{k_0} \quad (13)$$

其中, $m_{k_0} = N_0 v_{g_0}^k \chi^{k^2}$, $\chi = e^{w_g^2/2}$, $w_g = 3 \ln \sigma_{g_0}$. N_0 和 σ_{g_0} 分别表示初始颗粒数浓度及颗粒尺度分布几何平均偏差, v_{g_0} 为颗粒几何平均体积.

本文计算, 气相温度为 300 K, 环境大气压为 1.013×10^5 Pa. 此种情况, 连续介质动力学黏性为 1.850772×10^{-5} Pa·s, 气体分子平均自由程为 68.41 nm.

3 结果与讨论

3.1 模型验证

图 1 为 4 种计算模型所得颗粒数浓度随时间变化曲线. 4 种模型所指为, 3-point 积分 QMOM3 模型, 三阶泰勒展开矩方法模型 TEMOM3, 完全四阶泰勒展开矩方法模型 TEMOM4(1), 以及部分四阶泰勒展开矩方法模型 TEMOM4(2). 计算初始条件为, $\sigma_{g_0} = 0$, 计算初始各阶矩均为 1. 在颗粒系统演化前期 ($\tau < 0.1$), 4 种模型所得计算结果相同, 不存在明显的差别. 随着时间的发展 ($\tau > 0.1$), TEMOM3 模型所得结果与参考模型 QMOM3 之间的差别逐渐明显, 计算过程中出现不平滑现象. 这里需要指出, QMOM3 为 3-point 高斯积分 QMOM 模型. 对于模型 TEMOM4(1) 及 TEMOM4(2), 所得结果与 QMOM3 基本接近, 尤其是在系统演化前期, 所得结果与 QMOM3 相同. 因此, 无论 TEMOM4(1) 还是 TEMOM4(2), 均能给出合理的计算结果. 有必要指出, 相对于参考模型 QMOM3, 该两种模型计算结果在系统演化后期偏小.

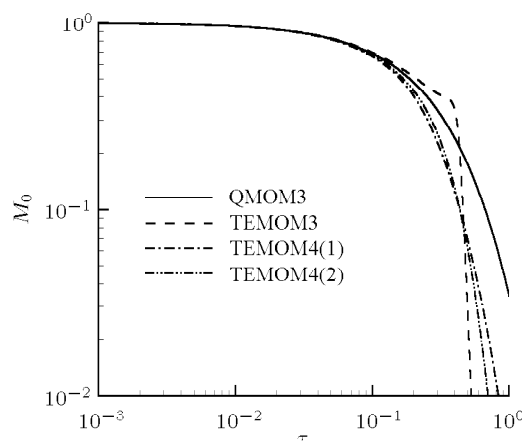


图 1 颗粒数浓度随时间的变化曲线

Fig.1 The evolution of particle number concentration with time

平均颗粒直径是研究颗粒系统动力学特性的重要特征量之一. 根据本文模型所得第 1 以及第 2 阶矩量, 可以得到平均颗粒直径表达式

$$d_p = \left(\frac{6m_1}{\pi m_0} \right)^{1/3} \quad (14)$$

图 2 为不同计算模型所得颗粒直径随时间的变化曲线. 本文计算不涉及结晶成核及浓缩等过程, 因此, 平均颗粒直径的变化对应于系统颗粒数浓度的变化. 与图 1 类似, 相对于 TEMOM3, 图 2 中 TEMOM4(1) 及 TEMOM4(2) 的计算结果更接近于参考模型 QMOM3.

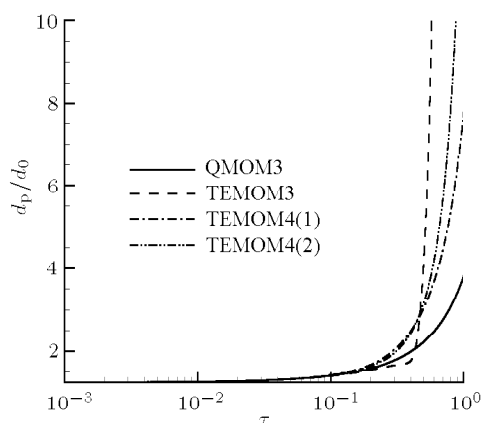


图 2 无量纲颗粒直径随时间的变化曲线

Fig.2 The evolution of dimensionless particle diameter with time

系统几何平均偏差是表征颗粒系统颗粒尺度谱分布大小的特征量. 该特征量常被研究者用以研究颗粒系统自保持性或者凝结特性. 由于本文研究对

象初始分布为对数正态分布, 因此, 几何平均偏差可以采用以下公式进行计算

$$\ln^2 \sigma_g = \frac{1}{9} \ln \left(\frac{m_0 m_2}{m_1^2} \right) \quad (15)$$

图 3 所示为 4 种不同计算模型所得几何平均偏差随时间的变化曲线. 本文所研究碰撞核 homogeneity 数为 1, 理论上颗粒尺度谱分布应是呈增大趋势, 即几何平均偏差持续增加, 但是增加速度逐渐减缓 [16]. 图 3 中 QMOM3, TEMOM3 及 TEMOM4(2) 均体现这一性质. 但是, TEMOM4(1) 在演化后期, 出现几何平均偏差减小的趋势, 与理论结果不符. 因此, 模型 TEMOM4(1) 虽能用以描述颗粒数浓度及其颗粒直径的变化, 但是无法用以颗粒尺度谱特征量的研究. 相对于 TEMOM3, 模型 TEMOM4(2) 的计算结果更接近于参考模型 QMOM3, 只是在接近于 \$\tau = 1\$ 附近有稍微偏差. 综合图 1~图 3, 在泰勒展开矩方法模型框架内, 模型 TEMOM4(2) 计算为湍动凝并问题理想模型.

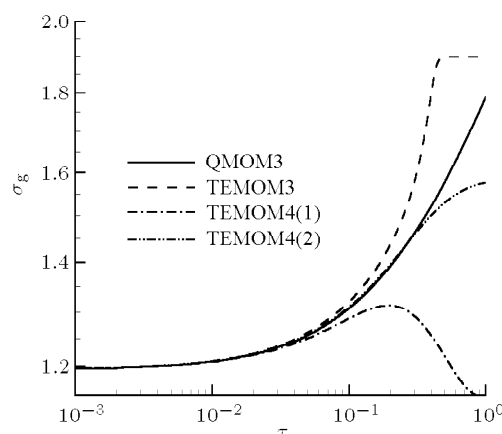


图 3 颗粒尺度分布几何平均偏差随时间的变化曲线

Fig.3 The evolution of geometric standard deviation of particle size distribution with time

3.2 颗粒尺度谱初始分布状态对颗粒系统演化的影响

研究者对纳米尺度颗粒动力学特性进行广泛的研究, 并已对颗粒初始尺度谱分布对系统演化的影响有了充分的认识. 对于湍动凝并占主导的微米尺度颗粒系统, 相关的研究较少见到. 此处, 采用本文所推导的 TEMOM4(2) 模型对该问题进行研究, 重点研究系统初始状态对颗粒数浓度及颗粒尺度分布偏差的影响.

本文研究对象颗粒尺度谱初始状态均为对数正态分布. 初始几何平均分布偏差 \$\sigma_{g0}\$ 分别为 1.0, 1.2

和 1.4. 图 4 所示为不同颗粒初始分布状态下颗粒数浓度随时间的变化曲线. 该图显示, 颗粒数浓度在较大初始几何平均偏差情况下有较大的下降率, 表明初始颗粒系统尺度分布越分散, 系统凝并率越高. 事实上, 在针对由布朗运动主导的纳米尺度系统的研究中^[9], 初始颗粒尺度谱分布对系统颗粒数目的变化有同样的影响结果.

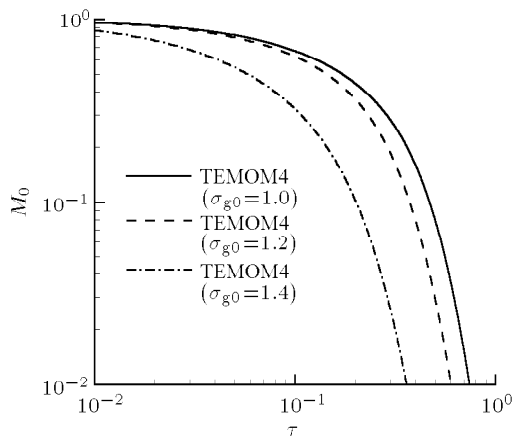


图 4 TEMOM4(2) 所得颗粒数浓度随时间的变化曲线

Fig.4 The relationship between the particle number concentration and the time from TEMOM4(2)

图 5 所示为不同初始状态下颗粒系统几何平均偏差随时间的变化曲线. 3 种情况均显示, 几何平均偏差在整个计算过程中表现为增大趋势, 但是在后期增大趋势减缓并趋近于渐近值, 表明该系统存在拟自保持特征. 但是, 不同初始分布情况下的最终渐近值不同, 这与纳米颗粒系统自保持性有较大的区别. 该研究结果与 Ernst 和 Pratsinis^[16] 及 Park 等^[17] 采用分区方法及解析方法所得结果相同.

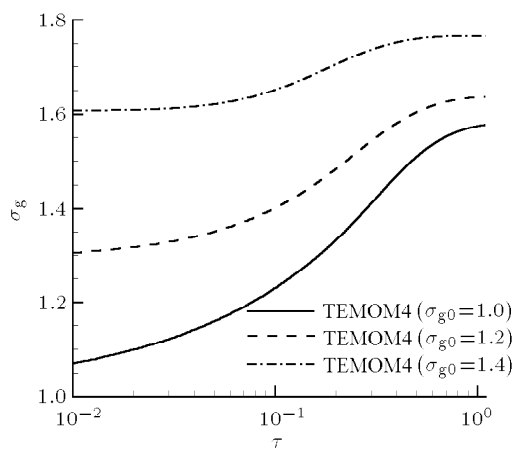


图 5 TEMOM4(2) 所得几何平均偏差随时间的变化曲线

Fig.5 The relationship of geometric standard deviation and time from TEMOM4(2)

这表明, 对于湍动凝并占主导的微米颗粒系统, 在随时间演化过程中, 颗粒尺度谱分布并不是无限制的增大, 而是与纳米颗粒系统类似, 尺度谱分布最终会达到某一个渐近值. 图 5 显示, 初始颗粒系统几何平均偏差越大, 系统达到该渐近值所需时间越短. 因此, 颗粒系统颗粒尺度初始分布越不均匀, 系统越容易达到稳定状态.

4 结 论

应用泰勒展开技术, 对湍动剪切驱动颗粒系统凝并 PBE 矩转换方程进行封闭, 得到三阶泰勒展开矩方法模型, 完全四阶泰勒展开矩方法模型及其部分四阶泰勒展开矩方法模型. 通过与积分矩方法计算结果对比, 部分四阶泰勒展开矩方法模型给出更为合理的计算结果. 湍动剪切凝并系统可以达到拟自保持状态, 且系统颗粒动力学特征量演化与初始颗粒尺度谱分布有关.

参 考 文 献

- 1 Friedlander SK. Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior. New York: Wiley Press, 2000
- 2 Yu MZ, Lin JZ, Chen LH, et al. Large eddy simulation of a planar jet flow with nanoparticle coagulation. *Acta Mechanica Sinica*, 2006, 22(4): 293-300
- 3 Gelbard F, Seinfeld JH. Simulation of multicomponent aerosol dynamics. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1980, 78(2): 485-501
- 4 Wells CG, Kraft M. Direct simulation and mass flow stochastic algorithms to solve a sintering-coagulation equation. *Monte Carlo Methods and Applications*, 2005, 11(2): 175-198
- 5 Lee KW, Chen H, Gieseke JA. Log-normally preserving size distribution for Brownian coagulation in the free-molecule regime. *Aerosol Science and Technology*, 1984, 3(1): 53-62
- 6 McGraw R. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology*, 1997, 27(2): 255-265
- 7 Barrett JC, Jheeta JS. Improving the accuracy of the moments method for solving the aerosol general dynamic equation. *Journal of Aerosol Science*, 1996, 27(8): 1135-1142
- 8 Frenklach M. Method of moments with interpolative closure. *Chemical Engineering and Science*, 2002, 57(12): 2229-2239
- 9 Yu MZ, Lin JZ, Chan TL. A new moment method for solving the coagulation equation for particles in Brownian motion. *Aerosol Science and Technology*, 2008, 42(9): 705-713
- 10 Yu MZ, Lin JZ. Taylor-expansion moment method for agglomerate coagulation due to Brownian motion in the entire size regime. *Journal of Aerosol Science*, 2009, 40(6): 549-562

- 11 Yu MZ, Lin JZ. Solution of the agglomerate Brownian coagulation using Taylor-expansion moment method. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2009, 336(1): 142-149
- 12 Yu MZ, Lin JZ, Chan TL. Numerical simulation for nucleated vehicle exhaust particulate matters via the TEMOM/LES method. *International Journal of Modern Physics C*, 2009, 20(3): 399-421
- 13 Saffman PG, Turner JS. On the collision of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1956, 1(1): 16-30
- 14 Reade WC, Collins LR. Effect of preferential concentration on turbulent collision rates. *Physics of Fluids*, 2000, 12(10): 2530-2540
- 15 Abrahamson J. Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. *Chemical Engineering and Science*, 1975, 30(11): 1371-1379
- 16 Ernst FO, Pratsinis SE. Self-preservation and gelation during turbulence-induced coagulation. *Journal of Aerosol Science*, 2006, 37(2): 123-142
- 17 Park SH, Kruis FE, Lee KW, et al. Evolution of particle size distribution due to turbulent and Brownian coagulation. *Aerosol Science and Technology*, 2002, 36(4): 419-432

(责任编辑: 刘希国)

THE STUDY ON MICRO-SCALE PARTICLE COAGULATION DUE TO TURBULENT SHEAR MECHANISM USING TEMOM MODEL ¹⁾

Yu Mingzhou^{*,†,2)} Jiang Ying^{*} Zhang Kai^{*}

^{*}(China Jiliang University, Hangzhou 310018, China)

[†](Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe 76131, Germany)

Abstract The coagulation due to turbulent shear is the main mechanism leading to the instability of micro- and nanoparticle-laden multiphase flows. The Smoluchowski mean-field theory is considered to be a good selection for solving this problem since it can be coupled to some turbulent models. In this study, the Taylor-expansion method of moments (TEMOM) is first applied in micro- and nanoparticle coagulation due to turbulent shear mechanism in which the closure of Smoluchowski equation as well as the relationship between the numerical accuracy and the order of Taylor series expansion are emphatically investigated. The result show the partial 4-order Taylor expansion method of moments can be applied to analyze the problem involving micro- and nanoparticle turbulent shear coagulation with high accuracy, and the pseudo self-preserving size distribution is found in micro- and nanoparticle-laden multiphase systems dominated by turbulent shear mechanism.

Key words turbulence, the method of moments, Taylor-expansion, coagulation

Received 24 February 2010, revised 30 January 2011.

1) The project supported by the Natural Science Foundation of Zhejiang Province (Y7080394, Y6090406), the National Natural Science Foundation of China (10632070, 10802083, 10902105) and the Alexander von Humboldt Foundation (1136169).

2) E-mail: yumingzhou1738@yahoo.com.cn