

---

# **Modeling and Computation of Nanoparticles in Fluid Flows**

## **(RTO-EN-AVT-169)**

### **Executive Summary**

These Lecture Series proceedings are especially dedicated to the numerous topics arising when researchers have to predict numerically the behaviour of nanoparticles in a fluid. Beside an isolated nano object, the keyword of nanoparticle has to be understood more generally as including also agglomerate of nanoparticles, of nano-tubes and/or related complex structures.

As a matter of fact, numerous questions arise when the formation and the path of such objects have to be numerically predicted. Already concerning the methodology, the researchers have to select a Lagrangian or an Eulerian framework for the models development. The applicability of some of these models may be questionable when the diameter of the nanoparticles is comparable to the local molecular mean free path. In other words, it may be crucial to choose between a continuous and a non-continuous approach.

These two important issues are presented in the proceedings together with many others such as a detailed introduction to the Method of Moments with Interpolative Closure (MOMIC). It is shown how this method may be combined with the Dynamic Monte Carlo (DMC) technique allowing the study of nanoparticles aggregation. MOMIC, DMC and atomistic modeling allow also studying the particle formation from its nucleation including the particle surface growth.

These Lecture Series proceedings also include a complete description of the multi-fluid formulation extracted from the Kinetic theory with details on different models such as the one describing coalescence. The transport, deposition and removal of charged nanoparticles are also investigated together with a full detailed presentation of the static and the dynamic electrorheology approach. The sintering process of nanoparticles is presented in the frame of stochastic particle method and applied to the soot formation. The transport properties of plasma flows are reviewed in order to better understand the nanoparticle synthesis from a plasma reactor. This approach uses an efficient quench in order to condense the chemical species in a cloud of nanoparticle nucleus.

All these advanced models, methods and techniques are presented and detailed by a panel of distinguished authors worldly recognized for their contributions in numerical models for nanoparticles in fluids.

# **Modélisation et calcul des nanoparticules dans la circulation des fluides**

## **(RTO-EN-AVT-169)**

### **Synthèse**

Ces minutes du cycle de conférences sont spécialement consacrés aux nombreux sujets de discussion qui apparaissent lorsque les chercheurs doivent prédire numériquement le comportement des nanoparticules dans un liquide. Au-delà du nano-objet isolé, le mot clé de nanoparticule doit aussi être compris plus généralement comme incluant des agglomérats de nanoparticules, de nanotubes et/ou les structures complexes associées.

En fait, de nombreuses questions surgissent lorsqu'il s'agit de faire une prédiction numérique sur la formation et le parcours de tels objets. En ce qui concerne déjà la méthodologie, les chercheurs doivent choisir entre une structure de Lagrange et une structure d'Euler pour le développement des modèles. L'applicabilité de certains de ces modèles peut être discutable quand le diamètre des nanoparticules est comparable à la trajectoire libre moléculaire locale moyenne. En d'autres termes, il peut être crucial de choisir entre une approche continue ou discontinue.

Ces deux importantes questions sont présentées dans les comptes-rendus entre d'autres nombreuses questions comme l'introduction détaillée de la Méthode des Moments avec Fermeture par Interpolation (MOMIC). On démontre comment cette méthode peut être combinée avec la technique Dynamic Monte Carlo permettant l'étude de l'agrégation des nanoparticules. Le MOMIC, le DMC et la modélisation atomistique permettent aussi d'étudier la formation des particules à partir de leur noyau en incluant le développement de la surface de la particule.

Ces comptes-rendus du cycle de conférences contiennent aussi une description complète de la formulation multi fluides extraite de la théorie cinétique avec des détails sur différents modèles comme celui qui décrit la coalescence. Le transport, le dépôt et l'élimination des nanoparticules chargées sont aussi étudiés avec une présentation détaillée complète de l'approche électro-rhéologique statique et dynamique. Le processus de frittage des nanoparticules est présenté dans le cadre de la méthode stochastique des particules et appliqué à l'encrassement. Les propriétés du transport par flux de plasma sont étudiées pour avoir une meilleure compréhension de la synthèse des nanoparticules à partir d'un réacteur à plasma. Cette approche utilise un refroidissement brusque de façon à condenser les substances chimiques dans un nuage de noyaux de nanoparticules.

Tous ces modèles, ces méthodes et ces techniques évolués sont présentés et détaillés par un ensemble d'auteurs réputés reconnus mondialement pour leur contribution dans les modèles numériques sur les nanoparticules dans les fluides.