

黏性泥沙絮凝沉降的数值研究*

王 龙 李家春[†] 周济福

(中国科学院力学研究所, 环境力学重点实验室, 北京 100190)

(2009 年 6 月 29 日收到; 2009 年 8 月 27 日收到修改稿)

盐度等因素对泥沙絮凝沉降的影响是本文的研究目的. 考虑了泥沙颗粒在水中的多体相互作用, 以及颗粒间的 XDLVO 势. 分析了盐度、泥沙浓度、Hamaker 常数、水合作用对泥沙絮凝沉降的影响. 获得的泥沙絮凝沉降速度的拟合公式与计算和试验相符, 对于工程实际有重要参考意义.

关键词: 絮凝沉降, 多体作用, 斯托克斯动力学, XDLVO

PACC: 4785 4755K

1. 引 言

泥沙沉降在泥沙输运过程中是一个重要的环节. 在河口水域, 由于盐、淡水交汇处有强电解质的海水, 使得从上游带来的细小黏性泥沙, 往往以絮凝的形态出现而加速了泥沙沉降作用, 这常常导致航道淤积. 这使得黏性泥沙表现出不同于粗颗粒泥沙的沉降特性. 研究泥沙絮凝机理和沉降特性, 对于海岸工程、航道输运等具有重要意义^[1,2].

泥沙絮凝机理是以胶体稳定性理论为基础. 由于泥沙颗粒表面的物理化学特性, 海水中的盐离子, 往往会吸附在泥沙颗粒表面, 这会形成所谓的双电层结构, 颗粒间存在静电排斥作用. 另一方面, 胶体颗粒间存在的 van der Waals 力, 吸引颗粒相互靠近. 这两种作用力的共同作用, 构成胶体稳定性的 DLVO 理论.

泥沙胶粒的大小一般为微米量级, 而采用小角度 X 射线测定的二氧化硅干凝胶的大小为几个或几十纳米^[3], 这种在尺寸上的量级差异使得泥沙胶粒的表面物理化学性质不大相同. 这种尺寸差异还表现为胶体的动力学的不同. 对于纳米量级的胶粒, 其凝聚属于布朗凝聚^[4], 流体作用至多涉及二体作用, 而对于微米量级的颗粒, 流体的多体作用更为重要^[5].

尽管 DLVO 理论可以解释胶体聚集现象, 然而

由于理论为了便于处理, 采用了某些假设, 使得 DLVO 理论的应用限于低盐度、低电势的情况. 在 DLVO 理论中, 一个没有考虑的重要因素, 是水合离子. 在颗粒表面附近, 水介质不能看作无结构的介质. 由于水分子的极性, 与离子结合, 形成水合离子. 当颗粒靠近时, 由于水合离子的存在, 导致额外的排斥力. Pashley 和 Israelachvili^[6]在实验中发现, 只有在 NaCl 浓度小于 10^{-4} mol/L, 距离较大时, DLVO 理论才与实验数据符合. 当浓度大于 10^{-4} mol/L, 距离较小时, 出现额外的排斥力. Manciu 等人^[7]研究表明当 NaCl 浓度较低时, 双电层排斥是主要的. 当电解质浓度增加时, 双电层排斥减弱. 当浓度较高时, 表面的离子对增加, 引起水合排斥成为主要排斥力. 当水合排斥比较大时, 胶体颗粒即使在高浓度电解液中仍然保持稳定; 如果水合排斥较弱, 只有在低浓度时, 胶体系统才能保持稳定; 在中等水合排斥的情况下, 胶体系统的稳定性依赖于颗粒大小以及 van der Waals 的大小. 对于较小颗粒, 聚集主要发生在主势阱, 而对于较大颗粒, 聚集主要发生在第二势阱.

Yotsumoto 和 Yoon^[8]在研究金红石颗粒的稳定性中, 考虑了水合作用, 使用经验公式表示这一排斥势,

$$V_h = \frac{a}{2} \{ C_1 D_1 \exp(-h/D_1) + C_2 D_2 \exp(-h/D_2) \}, \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 10932012, 10572144)和知识创新计划(批准号: KJCX-SW-L08)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: jcli05@imech.ac.cn

这里 C_1, C_2 是水合强度因子, D_1, D_2 是水合尺度因子, a 是颗粒大小, h 是颗粒间最小距离. 在传统的 DLVO 基础上, 考虑水合作用, 构成了扩展的 DLVO 理论 (eXtended DLVO). Wu^[9] 等通过对各种矿物颗粒的悬浮液稳定性研究, 发现 XDLVO 理论比 DLVO 理论更为精确. Benitez 等^[10] 应用 XDLVO 理论研究 pH 和离子强度对浊度的影响. Liu 等^[11] 应用 XDLVO 研究乳胶的稳定性.

除了颗粒间的势作用, 颗粒运动还要考虑其在介质中的受力, 这涉及颗粒的多体运动. 对于非常稀释的泥沙悬浮液, 颗粒间的作用主要是二体相互作用, 悬浮液的宏观性质可以按照体积浓度, 做小参数展开. 对于胶体颗粒, 即使整体泥沙浓度不高, 局部泥沙浓度由于聚集, 会有较高的浓度. 在较高浓度下, 由于多体作用的复杂性, 颗粒运动还无法解析确定. 目前, 只有在空间规则排列的颗粒阵列, 才有一些精确结果. 虽然从原则上讲, 直接从流体的 Navier-Stokes 方程出发, 可以获得泥沙颗粒的瞬时速度和位置, 但是复杂的计算, 限制了其应用. 这样, 在合适的计算复杂度和计算量的前提下, 寻求一种能够准确计算颗粒多体作用的方法, 对于从颗粒运动角度出发, 研究絮凝现象, 是十分重要的.

颗粒计算中最主要的困难是多尺度问题. 对于流动而言, 尺度大小为米的量级, 而对于颗粒之间的势相互作用, 作用尺度往往是微米、亚微米这个量级. 这么大的尺度分离, 使得不存在一种单独的方法, 能够覆盖所有涉及的尺度. 常用的方法是将流体运动和颗粒运动分开来做, 在不同的尺度上采用拉格朗日方法或欧拉方法来计算^[12]. Vincent^[13] 用边界元的方法模拟了一对非球形颗粒的沉降. Sherwood^[14] 采用布朗动力学, 研究了二维圆盘颗粒的运动. 然而, 对于布朗动力学而言, 颗粒间流体相互作用, 要么忽略, 要么用二体作用代替. Glendinning 和 Russel^[15] 曾经用二体叠加的方式研究了沉降和扩散现象. 对于在浓度不是太小的情况下, 二体叠加会导致错误的沉降和负的扩散系数. 张等^[16] 考虑了流体相互作用的二体和三体贡献, 研究了短时间的粒子的自扩散系数. Feng 等^[17] 采用有限元方法计算了非定常的颗粒运动. 近来, Nguyen 等^[18] 应用 LBM 研究了颗粒悬浮. Boek^[19] 使用 DPD 方法研究了胶体悬浮.

以上各种计算方法, 要么在宏观尺度上求解流场, 要么在介观尺度模拟流动. 对于宏观求解流体

运动, 求解偏微分方程并不容易, 此外, 由于颗粒的运动, 需要不断的更新计算网格, 比如有限元那样, 程序比较复杂; 对于 LBM 或 DPD 之类拟颗粒方法, 或多或少的都存在一些非物理的因素. 对于 LBM, 需要证明和 NS 方程的等价性; 由于 LBM 对速度也离散以及规则网格不能精确描述颗粒外形, 导致不能完全保证质量守恒, 颗粒受力出现脉动^[20]. DPD 方法是一种类似分子团运动的动力学拟颗粒模拟方法. 在 DPD 中, 需要引入耗散力和随机力, 这些都有一定的人为性; 由于拟粒子的离散本质, 在物面, DPD 方法会出现粒子数目脉动, 边界需要特殊处理^[21]. 最重要的是, 拟粒子方法放弃了粒子周围流体连续性的假定, 采用离散系统的计算方法, 往往需要很长的计算时间.

由于泥沙颗粒的大小为微米量级, 泥沙颗粒的沉速为毫米/秒量级, 颗粒雷诺数远小于 1. 这样, 颗粒引起的流动可以用 Stokes 方程描述^[22]. 在此基础上, Brady 等人^[23] 发展了一种称为斯托克斯动力学 (Stokesian dynamics, SD) 的计算方法, 将颗粒与流场的作用, 分为远场作用和近场作用. 在远场, 用扰动反射的方式, 考虑多体作用, 而在近场, 采用二体叠加, 进行润滑力修正. 这种方法主要缺点是在计算远场作用时, 涉及矩阵的求逆运算, 计算量为 $O(N^3)$, 限制了其进一步应用. Sierou 和 Brady^[24] 提出了加速的斯托克斯动力学 (accelerated stokesian dynamics, ASD) 方法, 通过使用迭代方法和 particle-mesh-Ewald 技术, 将计算量减为 $O(N \log N)$. Wang 等^[5] 采用无参数可解性 ASD 方法, 避免了 ASD 中的可调参数, 模拟了粗颗粒沉降, 和已有结果能很好吻合, 并且具有同样的精度和计算量.

以往对泥沙絮凝的研究侧重于试验, 通过改变盐度等因素, 测得泥沙沉降速度, 对絮凝的微观机理了解不够. 另一方面, 由于泥沙颗粒运动涉及复杂的多体作用和物理化学特性, 从计算手段研究絮凝沉降的工作较少. Stokesian dynamics 主要应用于粗颗粒, 没有考虑颗粒间势力的影响. Yang 等^[25] 用离散元方法研究了颗粒沉降问题, 考虑了 DLVO 势力. 然而在他们的模拟中, 由于颗粒浓度太低, 盐度对泥沙沉降没有明显的影响. 此外, 在他们的研究中, 颗粒受到的阻力采用单颗粒的 Stokes 阻力, 这种合理性值得推敲. 张等^[26] 用 LBM 模拟絮团沉降. 然而他们在计算过程中, 絮团在计算中保持不变, 也没有考虑势力的作用, 因而无法考虑盐度等因素的

影响.在本文中,首先介绍了采用 XDLVO 理论作为颗粒间的物理化学作用的物理模型,对颗粒的流体多体作用,引入了无参数可解性 ASD 方法.在此基础上,考虑颗粒间的流体相互作用以及颗粒间的势作用,获得颗粒瞬时速度和位置,得到絮团运动演化的过程.最后,给出了盐度、势参数对絮团沉降速度影响的结果.

2. 物理模型与计算方法

2.1. 颗粒间物理化学作用

泥沙颗粒表面往往具有负电势.水中的反离子被颗粒表面吸引,同时又受到扩散作用,会形成双电层结构.对于球形颗粒,常电荷密度情况下,双电层排斥势为

$$V_r = -2\pi a \varepsilon \psi^2 \ln(1 - e^{-\kappa h}), \quad (2)$$

这里, ε 是水的介电常数, a 是颗粒半径, ψ 是表面电势,常用 Stern 电势代替, κ^{-1} 是 Debye 长度, h 是颗粒间最小距离. van der Waals 吸引势 V_a 可以表示为

$$V_a = -\frac{aA}{12h} f(p), \quad (3)$$

这里, A 是 Hamaker 常数, $f(p)$ 延迟因子,表达式为

$$f(p) = \begin{cases} \frac{1}{1 + 1.77p}, & p < 1, \\ \frac{2.45}{5p} - \frac{2.17}{15p^2} + \frac{0.59}{35p^3}, & p > 1, \end{cases} \quad (4)$$

这里 $p = 2\pi h/\lambda$, λ 是 London 波长,通常取 $0.1 \mu\text{m}$.

由于 DLVO 理论的限制,只有在颗粒间距离较大才能成立.当颗粒距离很近时,水分子结构的影响必须考虑.此时,由于颗粒表面的水合的离子,会产生额外的排斥势. Israelachvili^[27] 建议如下的表达式:

$$V_h = \pi \frac{a}{\kappa} C \exp(-h/D), \quad (5)$$

这里 C 和 D 分别是水合强度因子和水合尺度因子.

这样,颗粒间总的作用势为

$$V_i = V_a + V_r + V_h. \quad (6)$$

2.2. 颗粒间多体相互作用

对于小雷诺数运动而言,流动可以用 Stokes 流描述.由于 Stokes 方程是线性的,可以将颗粒速度和

颗粒受到的流场力用迁移矩阵联系起来,即

$$M \cdot F = U, \quad (7)$$

这里 U 表示颗粒速度, F 是力矢量.另一方面,可以用阻力矩阵将力和速度联系起来,

$$R \cdot U = F. \quad (8)$$

通过 Rotne-Prager 张量可以构造出 M 矩阵.不过,采用这种方式构造的 M 矩阵,仅考虑了二体作用,只适应于稀释的悬浮液.在较高浓度情况下, Glendinning 和 Russel^[15] 以这种方式研究了沉降和扩散.他们发现此时会出现错误的沉降速度和负的扩散系数. Durlofsky^[28] 在研究中发现,如果对以二体方式构造的 M 求逆,就可以表示颗粒间的多体作用.这种性质是与反射法紧密联系的.

颗粒 m 在 x 产生的扰动场为

$$u(x) = -\frac{1}{8\pi\mu} \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \times J(x - x_m) \cdot F_m + \dots, \quad (9)$$

这里 μ 是黏性系数, a 是颗粒半径, F_m 是颗粒受到的流体作用力, $J(r)$ 是 Oseen 张量

$$J(r) = \frac{1}{r} \left(\delta_{ij} + \frac{x_i x_j}{r^2} \right). \quad (10)$$

如果知道了扰动速度,那么在流场中运动的颗粒 n ,受到的流体的作用力可以用 Faxen 公式表示

$$F_n = -6\pi\mu a \left[U_n - \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) u'_n \right], \quad (11)$$

这里 u'_n 是由颗粒 m 在颗粒 n 处引起的扰动场速度.可以看出,对于单一颗粒,不存在其他颗粒的扰动场,上式就是 Stokes 公式.同样,颗粒 n 受到流场的作用力 F_n 也会以同样的方式诱导出颗粒 m 的作用力 F_m .每次诱导过程,称为一次反射.这个过程无限次重复,直至达到平衡.这就是反射法的主要过程.通过这个过程,可以将多个颗粒间的多体作用完全考虑.

这个过程可以用矩阵形式表达为^[29]

$$F^{(i)} = -6\pi\mu a [U - \bar{M} \cdot F^{(i-1)}], \quad (12)$$

这里

$$(\bar{M})_{mn} = (1 - \delta_{mn}) \frac{1}{8\pi\mu} \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right)^2 J(x_m - x_n).$$

矢量 U, F 分别代表所有的颗粒速度和力.

方程(12)是迭代形式,与它等价的直接方程为

$$(I + M_{\text{ref}}) \cdot F = I_B \cdot U. \quad (13)$$

这里 $I_B = -6\pi\mu a I$, $M_{\text{ref}} = 6\pi\mu a \bar{M}$.可以看出(13)式其实就是迁移方程(7).因此,求解迁移矩阵或者说迁移矩阵求逆,其实等价于反射方法.

在近场,由于忽略了高阶奇点,需要进行润滑力修正,这可以用矩阵 R_{lub} 表示. 这样,颗粒运动方程可以写为

$$[R_{lub} + (I + M_{ref})^{-1} \cdot I_B] \cdot U = -F^c, \quad (14)$$

这里 F^c 是作用在颗粒上的非流体作用力,包括重力和势力. 上式中的项

$$-6\pi\mu a(I + M_{ref})^{-1} \cdot U \quad (15)$$

表示远场力 F_{ff} . 在我们的计算中,采用远场力作为变量,而不是用速度,这样做可以避免方程(14)左端的求逆运算以及由此引出的可调参数,并且能保持方程两端的一致性^[5]. 最终颗粒运动方程为

$$R_{lub} \cdot I_B^{-1} \cdot (I + M_{ref}) \cdot F_{ff} + F_{ff} = -F^c, \quad (16)$$

一旦远场力求得,应用 Faxen 公式就可以获得颗粒速度. 为了求解方程(16),这里采用了 GMRES (generalized minimum residual) 方法. 在 GMRES 方法中,其中重要的一步是快速计算反射矩阵和力矢量相乘,这里采用了 particle-mesh-Ewald 技术^[24].

3. 结果与讨论

3.1. 盐度对泥沙絮团沉降的影响

作为方法验证,这里首先计算了非黏性颗粒的沉降与泥沙浓度的关系. 本文的沉降速度都用单颗粒的 Stokes 速度无量纲化. 图 1 给出了颗粒阵列的沉降情况. 对于这种阵列沉降,Zick 和 Homay^[30]给出了精确解. 对于体积比小于 20%,我们的结果与精确解相当符合,体积比大于此值,计算结果大于精确解. 这主要是由于忽略了高阶奇点的原因. 图 2 给出了随机沉降的结果. 在随机沉降的情况下,颗粒随机布置,然后计算各个颗粒的速度,通过求平均得到整体沉降速度. 对于小于 20% 的体积浓度,计算结果与 Richardson-Zaki 经验公式 $(1 - \phi)^n$ 比较,结果也相当符合. 关于图 1,图 2 和更多细节,请参看文献[5].

在盐度对絮团沉速影响的计算中,我们采用 DLCA 模型表示最初的絮团,颗粒半径为 $2 \mu\text{m}$,颗粒密度为 2650 kg/m^3 ,泥沙浓度为 6.624 kg/m^3 . 电解质为 1-1 型. Hamaker 常数 $A = 4 \times 10^{-20} \text{ J}$, $\lambda = 0.1 \mu\text{m}$. 对于水合作用,取 $C = 10 \text{ mJ/m}^2$, $D = 1 \text{ nm}$.

Brownian 运动的影响可以用 Peclet 数 $Pe = U_0 a / D_f$ 来衡量. U_0 是颗粒沉降速度, a 是半径, D_f 是扩散系数. U_0 可以用 $6\pi\mu a U_0 = mg$ 估算,扩散系

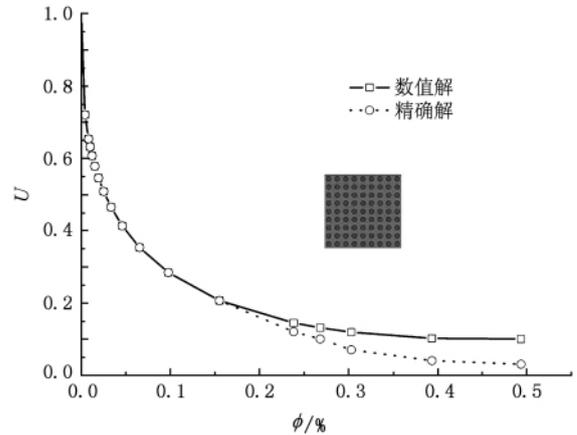


图 1 颗粒阵列沉降: 无量纲沉速与颗粒体积浓度关系

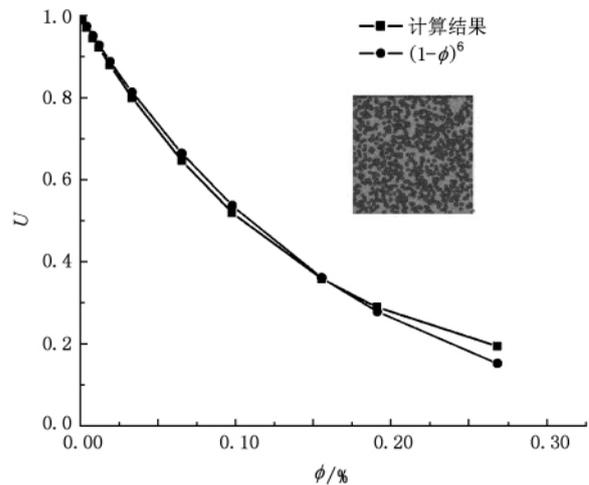


图 2 随机沉降: 无量纲沉速与颗粒体积浓度关系

数满足 Einstein-Smoluchowski 关系 $6\pi\mu a D_f = k_B T$, k_B 是 Boltzmann 常数, T 是绝对温度. 这样 Peclet 数就可以写为

$$Pe = \frac{mga}{k_B T}. \quad (17)$$

因为 mga 正比于 a^4 , Brownian 运动的影响随着颗粒半径的增加急速减小. 对于大小为 $4 \mu\text{m}$ 的颗粒, Pe 大约是 400. 对于絮团而言, Brownian 运动的影响更为减小, 所以 Brownian 运动在本文中不予考虑.

盐度的作用主要体现在改变 Debye 长度, 其表达式为

$$\kappa^{-1} = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{2IeF}},$$

这里 $F = 9.648456 \times 10^4 \text{ C/mol}$ 是法拉第常数, $I = \frac{1}{2} \sum c_i z_i^2$ 是离子强度, c_i 是摩尔浓度, z_i 是化合价.

Debye 长度,主要影响双电层势.

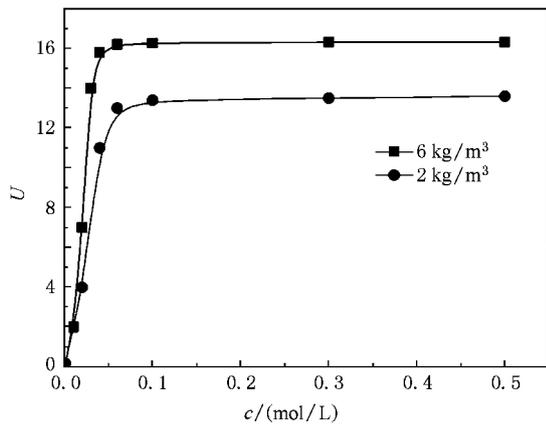


图3 无量纲沉降速度与电解质浓度的关系(当电解质浓度大于 0.1 mol/L, 沉速趋于稳定值)

图 3 给出了在两种泥沙浓度情况下(2 kg/m³, 6 kg/m³), 沉降速度与盐度的关系. 可以看出, 当盐度增加时, 沉速增加很快, 当盐度达到 0.1 mol/L 时, 沉速基本稳定. 由于盐度主要是影响 Debye 长度, 图 4 给出了盐度和 Debye 长度的关系. 可以看出, 当盐度增加时, 双电层被压缩, Debye 长度减小. 对于较高盐度, Debye 长度变化很小. 这意味着存在某个盐度值, 大于此盐度值, 由于 Debye 长度几乎不变, 导致沉降速度也几乎不变.

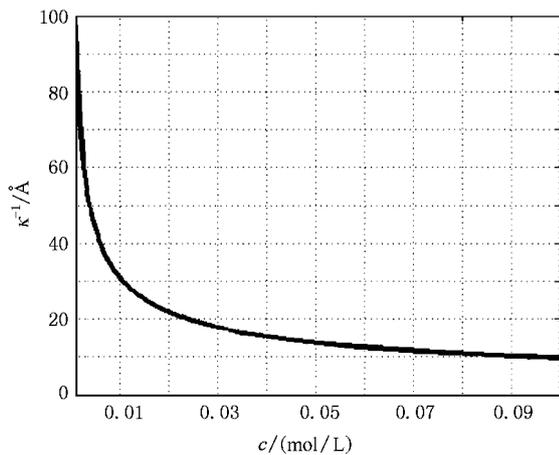


图4 德拜长度 L_D 与电解质浓度 c 关系, $T=300$ K. 电解质浓度增加, 德拜长度减小. 较大浓度时, 德拜长度变化不明显

在工程实际中, 往往用盐度 s 表示溶液含盐量, 即 1 kg 盐水中含盐多少 g. 0.1 mol/L 的氯化钠溶液相当于千分之六的盐度. 从图 3 中可以看出, 最大沉速与盐度无关, 因而可以将最大沉速与盐度分离开

来. 因此, 我们这里提出以下的盐度-沉速拟合公式

$$\frac{U}{U_{\max}} = 1 - e^{-(s/s_m)^n}, \quad (18)$$

这里, U_{\max} 是最大沉降速度, s 是盐度, s_m, n 是需要拟合的参数. 对于这里计算的两种情况(6 kg/m³, 2 kg/m³), 得到如下的拟合公式:

$$\frac{U}{U_{\max}} = 1 - e^{-(s/1.445)^{2.697}}, 1 - e^{-(s/1.915)^{1.951}}. \quad (19)$$

图 5 反映了拟合结果, 可以看出, 整体情况是相当符合的.

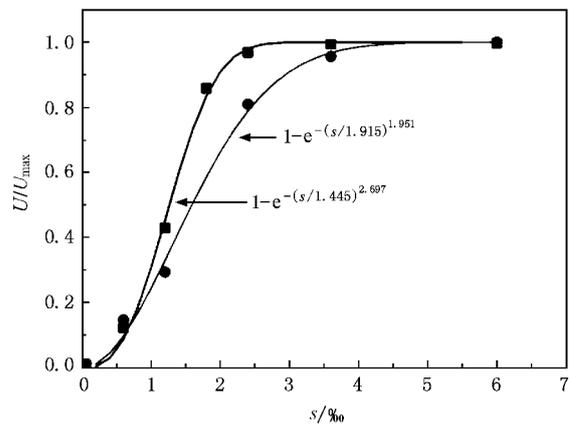


图5 盐度沉降的公式拟合. 横轴是盐度, 纵轴是无量纲沉速. 实线是拟合曲线, 实心圆表示泥沙浓度为 2 kg/m³, 实心方表示泥沙浓度为 6 kg/m³

这里还把拟合公式与大港淤泥絮团沉降的试验数据^[31]进行比较. 图 6 中的 F_a 表示絮凝因子, 表示絮团沉速与基本颗粒沉速之比. 采用这里的拟合公式, 此时絮凝因子可以写为

$$F_a = F_{\max} (1 - e^{-(s/s_m)^n}). \quad (20)$$

图 6 拟合的结果为

$$F_a = 146(1 - e^{-(s/10.84)^{0.868}}), 2a = 2 \mu\text{m}, \quad (21)$$

$$F_a = 258(1 - e^{-(s/9.479)^{0.789}}), 2a = 1.35 \mu\text{m}, \quad (22)$$

$$F_a = 700(1 - e^{-(s/6.471)^{0.576}}), 2a = 0.55 \mu\text{m}. \quad (23)$$

可以看出, 拟合结果与试验结果还是比较吻合, 且参数 n, s_m 是随着粒径减小而减小. 越细的颗粒, 受盐度影响越大, 因而临界盐度就越小, 这导致 s_m 减小. 当 $s/s_m < 1$, 参数 n 越小, 表示沉速随盐度的变化较大. 当 $s/s_m > 1$, 小的参数 n , 说明沉降速度的变化随着盐度的增加而减小.

较大盐度情况下, 最大沉速与盐度无关, 因而这里将盐度单独分离出来, 将其他因素对于沉降速度的影响归于对最大沉速的影响. 通过拟合公式表明了这种合理性. 影响沉速的因素除了盐度外, 还

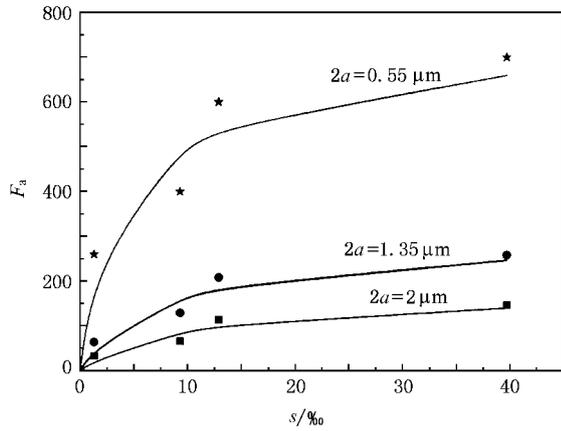


图 6 拟合公式与大港淤泥絮团沉降的试验数据比较. 横轴为盐度, 纵轴是絮凝因子. 泥沙浓度为 $4-5 \text{ kg/m}^3$. 实线表示拟合曲线, 三种符号表示试验数据

包括泥沙浓度、水合等其他因素, 下面再讨论这些因素对沉速的影响.

3.2. 泥沙浓度的影响

泥沙浓度对沉降的影响反映在图 7. 该图反映了盐度为 $c = 0.1 \text{ mol/L}$ 时, 不同泥沙浓度下的沉降速度. 从图可以看出, 泥沙浓度较小时, 随着泥沙浓度的增加, 沉降速度增加很快. 在泥沙浓度达到 5 kg/m^3 左右时, 沉速达到最大值, 其后, 随着浓度增加, 沉速减小. 泥沙颗粒沉降, 由于聚集成团, 一方面整个絮团以整体形式下降, 增加沉速, 另一方面由于絮团的体积增加, 引起的回流 (back flow) 作用也会增加, 这会减小絮团沉速. 这二者的共同作用, 使得泥沙沉降表现出先增加后减小的特点.

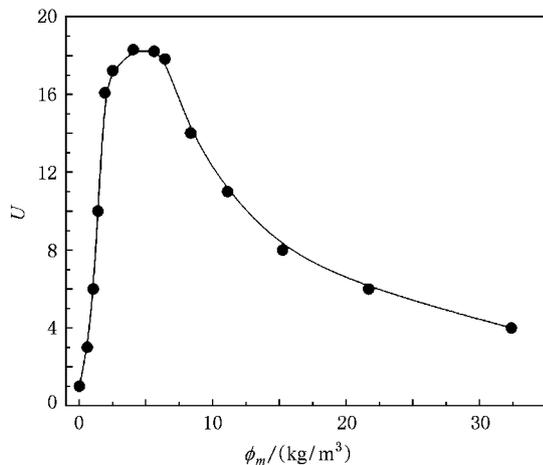


图 7 含沙量对絮凝沉降的影响

3.3. 水合作用的影响

水合作用的大小由水合强度因子 C 和水合尺度因子 D 决定. 图 8 和图 9 给出了水合强度因子 C 和水合尺度因子 D 对势阱深度和势阱位置的影响. 势阱深度深, 絮团不易破碎, 而势阱位置确定了絮团的松散程度. 这里及后文, 势阱深度用 mga 无量纲化, 势阱位置用颗粒半径 a 无量纲化.

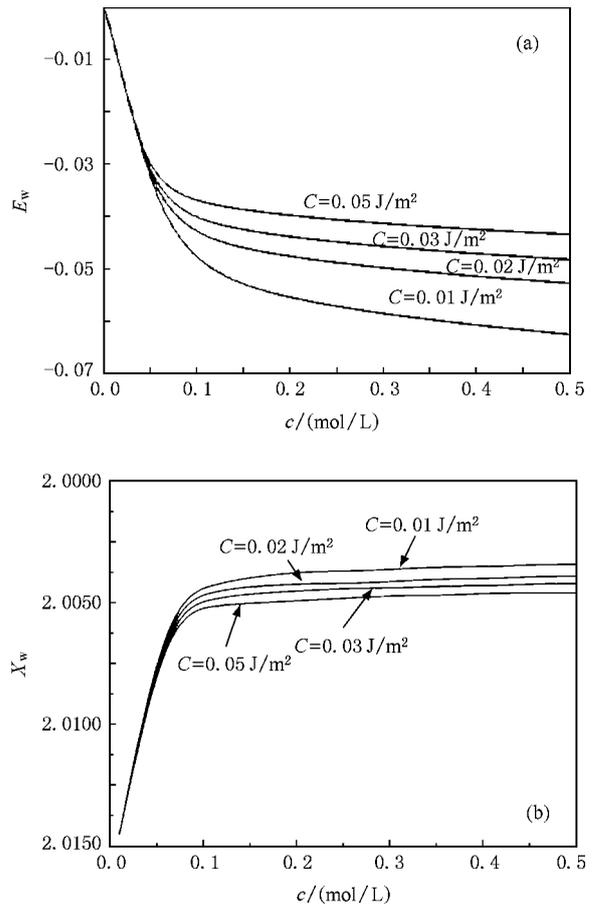


图 8 不同盐度下, 水合强度因子 C 对 XDLVO 势阱的影响 (a) 势阱深度随盐度的变化; (b) 势阱位置随盐度的变化

图 8 表明, 当水合强度由 10 mJ/m^2 增加到 50 mJ/m^2 , 可以看出势阱深度明显减小. 不过, 势阱位置变化没有那么明显. 水合尺度因子对势深度和势阱位置影响很明显. 图 9 表明, 当水合尺度增加, 势阱深度减小, 势阱位置增大. 对于不同的同价离子, 比如 K^+ , Na^+ 离子, 对絮凝沉降速度的影响不一样, 这用传统的 DLVO 理论是无法解释的. 如果从 XDLVO 理论来看, 这是由于它们的水合强度、尺度因子不一样, 那么泥沙颗粒聚集程度也不一样, 这

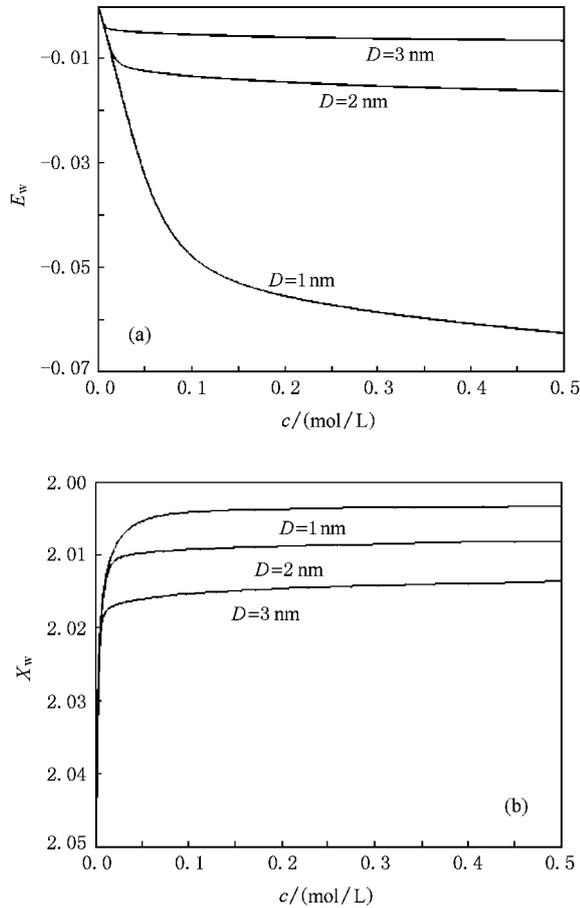


图9 不同盐度下,水合尺度因子 D 对 XDLVO 势阱的影响 (a) 势阱深度随盐度的变化; (b) 势阱位置随盐度的变化

样就会导致沉降速度不一样.

图 10 给出了水合作用对絮团沉速的影响. 在图 10(a) 中, 水合强度因子 C 分别是 10, 20, 30 mJ/m^2 , 可以看出, 随着水合强度因子 C 的增大, 絮团沉速减小很少. 图 10(b) 表明了水合尺度因子 D 对沉速的影响. 当 D 由 1 nm 变化到 2, 3 nm 时, 沉速几乎减小了一半. 这说明, 离子的水合半径对沉降的影响

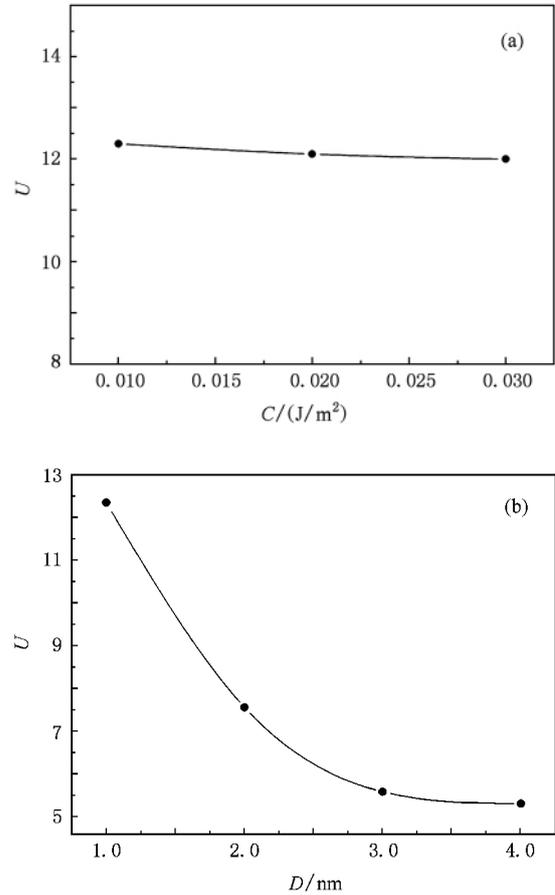


图 10 水合作用对絮凝沉速的影响 (a) 水合强度因子 C 对絮凝沉速的影响; (b) 水合尺度因子 D 对絮凝沉速的影响

更为明显.

3.4. Hamaker 常数的影响

泥沙颗粒间的相互吸引力(范德华力), 是形成絮凝的最主要因素. 与范德华力相关的主要参数是 Hamaker 常数, 表 1 给出了泥沙中主要成分, 这些成分的 Hamaker 常数范围在 10^{-19} — 10^{-21} J 之间.

表 1 泥沙中的一些主要成分^[32]

正长石	KAlSi_3O_8	斜长石	$\text{NaSi}_3\text{O}_8, \text{CaAl}_2\text{Si}_3\text{O}_8$
白云母	$\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	黑云母	$\text{K}_2(\text{Mg, Fe})_6(\text{Si}_3\text{Al})_8\text{O}_{20}(\text{OH})_4$
方解石	CaCO_3	高岭土	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$
赤铁矿	Fe_2O_3	辉石	$\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2, (\text{Mg, Fe, Al})\text{SiO}_3$

图 11 反映了 Hamaker 常数对势阱深度和势阱位置的影响. 对于 Hamaker 常数而言, 量级从 10^{-21} — 10^{-19} J, 势阱的位置和深度的变化均比较明显. 对于较低的 Hamaker 数, 盐度几乎不影响势阱深度. 小的 Hamaker 数, 意味着颗粒间黏性较弱, 絮

凝不易形成, 因而盐度作用较小. 当 Hamaker 数增加到 $10^{-20}, 10^{-19}$ J, 势阱深度增加很多. 这意味着泥沙颗粒更易聚集在一起. 当 Hamaker 常数逐渐减小时, 吸引力减小, 颗粒间的束缚减弱, 形成的絮团容易散开, 导致沉降速度减小, 这反映在图 12. 在图

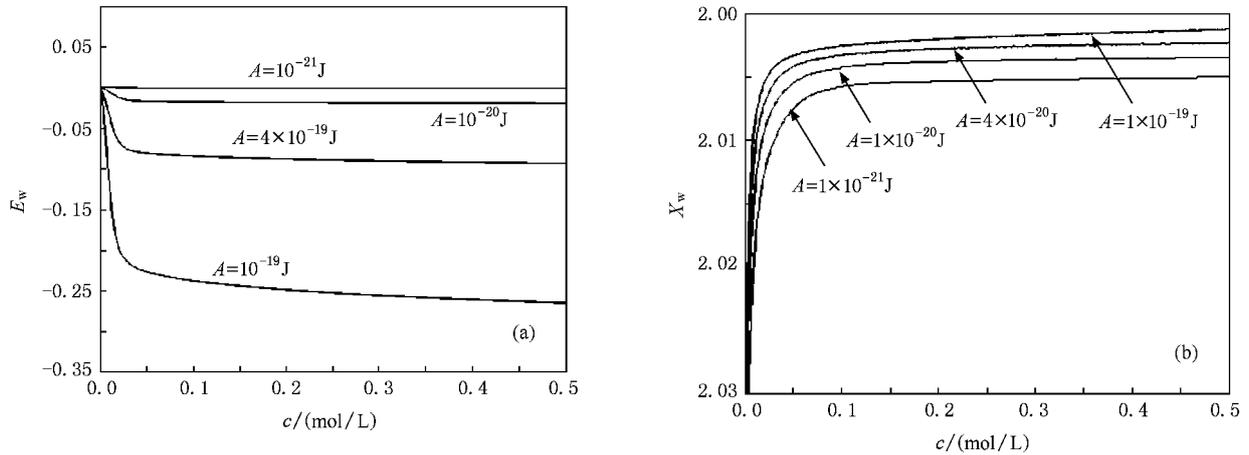


图 11 Hamaker 常数对 XDLVO 势阱的影响 (a) 势阱深度随盐度的变化; (b) 势阱位置随盐度的变化

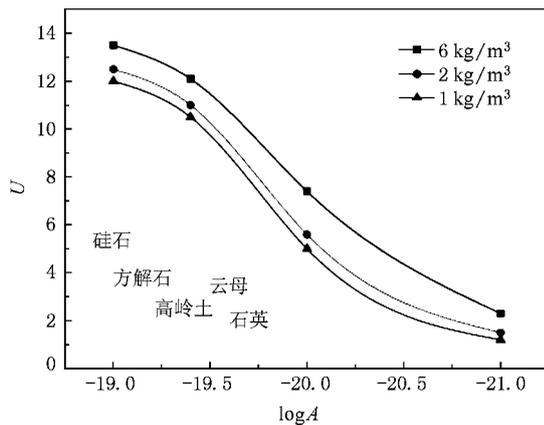


图 12 沉降速度与 Hamaker 常数 A 的关系 (当 $A = 10^{-21}$ J, 沉降与粗颗粒类似. 图中还给出了不同矿物的 Hamaker 常数范围)

12 中, 随着 Hamaker 常数的减小, 沉降也很快减小, 当 Hamaker 常数为 10^{-21} J 时, 沉降速度几乎就是离散颗粒的沉降, 这说明此时颗粒无法在水中形成絮团体.

4. 结 论

本文利用计算手段, 考虑了泥沙颗粒之间的 XDLVO 势作用力以及多体相互作用, 对泥沙絮凝机理以及沉降性质进行了研究. 随着盐度的增加, 泥沙絮凝沉速增加, 直至到最大沉降速度. 由于最大沉速与盐度无关, 可将絮凝沉速表示为盐度和最大沉速的函数. 在此基础上, 本文提出了一种沉速拟合公式, 能与计算和试验结果符合. 由于盐度的影响, 泥沙颗粒聚集, 形成絮团沉降, 沉速远大于粗颗粒沉降速度. 本文还研究了泥沙浓度、水合作用、Hamaker 常数对最大沉速的影响. 当泥沙浓度增加时, 沉速增加至某个最大值, 当继续增加泥沙浓度时, 沉速下降. 水合作用中, 水合尺度对沉速的影响远大于水合强度的影响. Hamaker 常数是决定絮凝的主要因素, 当 Hamaker 常数降至 10^{-21} J 时, 黏性颗粒沉降与粗颗粒沉降类似. 本文采用的计算方法, 还可以进一步应用于在动水情况下的絮凝沉降研究.

- [1] Li J C, Zhou J F 2006 *Proceeding of 11th Asian Congress of Fluid Mech* Kuala Lumpur, Malaysia, May 22—25, 2006 p85
- [2] Zhou J F, Li J C 2005 *J. Waterw. Port Coast. Ocean Eng.* **131** 25
- [3] Li Z H, Sun J H, Wu D, Sun Y H, Liu Y, Sheng W J, Dong B Z 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1312 (in Chinese)
- [4] Yu F, Lin J Z 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4547
- [5] Wang L, Li J, Zhou J 2009 *Acta Mech. Sin.* **25** 303
- [6] Pashley R M, Israelachvili J N 1984 *J. Colloid Interface Sci.* **97** 446
- [7] Manciu M, Ruckenstein E 2001 *LANGMUIR* **17** 7061
- [8] Yotsumoto H, Yoon R H 1993 *J. Colloid Interface Sci.* **157** 426
- [9] Wu W, Giese R F, van Oss C J 1999 *Colloids Surf. B* **14** 47
- [10] Benitez E I, Genovese D B, Lozano J E 2007 *Food Hydrocolloids* **21** 100
- [11] Liu X R, Qiu G Z, Hu Y H, Yang J H, Jin M L 2004 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **14** 582
- [12] van der Hoef M A, van Sint Annaland M, Deen N G, Kuipers J A M 2008 *Ann. Rev. Fluid Mech.* **40** 47
- [13] Vincent J, Phan-Thien N, Tran-Cong T 1991 *J. Rheol.* **35** 1
- [14] Sherwood J D 1992 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **43** 195
- [15] Glendinning A B, Russel W B 1982 *J. Colloid Interface Sci.* **89** 124

- [16] Zhang H Y , Gerhard N , Ma H R 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1810 (in Chinese)
- [17] Feng J , Joseph D D 1995 *J. Fluid Mech.* **303** 83
- [18] Nguyen N Q , Ladd A J C 2005 *J. Fluid Mech.* **525** 73
- [19] Boek E S , Coveney P V , Lekkerkerker H N W , van der Schoot P 1997 *Phys. Rev. E* **55** 3124
- [20] Lallemand P , Luo L S 2003 *J. Comput. Phys.* **184** 406
- [21] Altenhoff A M , Walther J H , Koumoutsakos P 2007 *J. Chem. Phys.* **225** 1125
- [22] Yan Z Y 2002 *Theory of Low Reynolds Number Flow* (Beijing: Peking University Press)
- [23] Brady J F , Bossis G 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 5141
- [24] Sierou A , John F B 2001 *J. Fluid Mech.* **448** 115
- [25] Yang C Y , Ding Y , York D , Broeckx W 2008 *Particuology* **6** 38
- [26] Zhang J F , Zhang Q H , Lin L 2006 *J. Hydraulic Eng.* **37** 1253
- [27] Israelachvili J N 1997 *Intermolecular and Surface Forces* (New York: Academic Press)
- [28] Durlinsky L , Brady J F , Bossis G 1987 *J. Fluid Mech.* **180** 21
- [29] Ichiki K , Brady J F 2001 *Phys. Fluids* **13** 350
- [30] Zick A , Homsy G M 1982 *J. Fluid Mech.* **115** 13
- [31] Zhao J L [泥沙絮凝的动力学研究 2007 *Post - doctoral report* (北京: 中科院力学所)]
- [32] Chien N , Wan Z H 1999 *Mechanics of sediment transport* ASCE Reston , Va

Numerical study of flocculation settling of cohesive sediment^{*}

Wang Long Li Jia-Chun[†] Zhou Ji-Fu

(Key Laboratory of Environmental Mechanics , Institute of Mechanics , Chinese Academy of Science , Beijing 100190 , China)

(Received 29 July 2009; revised manuscript received 27 August 2009)

Abstract

The effects of salinity and other factors on flocculation settling are investigated in this paper. The many-body hydrodynamic interactions and XDLVO potential between sediment particles are taken into consideration. The effects of salinity , sediment concentration , Hamaker constant and hydration on settling speed are analyzed. The obtained fitting formula for flocculation settling speed accords with computational and experimental results and is of referential importance.

Keywords: flocculation settling , many-body interactions , Stokesian dynamics , XDLVO

PACC: 4785 A755K

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10932012 , 10572144) and Knowledge Innovation Program (Grant No. KJCX-SW-L08).

[†] Corresponding author. E-mail: jcli05@imech.ac.cn