

计算机模拟技术在絮体分形成长研究中的应用

谭万春¹, 王云波², 李冬梅³, 金同轨⁴

(1. 长沙理工大学化学与环境工程系, 湖南 长沙 410076;

2. 长沙理工大学河海工程学院, 湖南 长沙 410076;

3. 广东工业大学建设学院, 广东 广州 510643;

4. 西安建筑科技大学环境与市政工程学院, 陕西 西安 710055)

摘要: 颗粒聚集形成絮体是水处理混凝过程中的中心现象, 絮体的结构、行为和性能与混凝效果密切相关。计算机模拟为研究颗粒聚集过程提供了一条新的途径, 而分形理论则提供了新的理论观念。本文对絮体的分形结构模型、絮体成长过程的计算机模拟方法和模拟结果的分析方法进行了系统的介绍, 以期推动此项技术的应用研究。

关键词: 计算机模拟技术; 絮体结构模型; 分形维数

中图分类号: TP39; TU991.22

文献标识码: A

文章编号: 1000-3770(2005)01-0016-04

颗粒聚集形成絮体和集团是水处理混凝过程中的中心现象, 成为研究的重点。絮体的结构、行为和性能与混凝效果密切相关。尽管混凝技术的应用在固液分离实践中是最为古老的工艺, 但实际操作过程中常常出现松散不易沉降或易于破碎的絮体。获得密度大、沉降性能好的絮体仍是混凝工艺的目标, 而这是由絮凝机理和絮体成长过程决定的。由于试验和检测手段的制约, 在传统混凝理论成熟之后, 这方面的研究未有显著进展。

随着计算机技术和分形理论^[1]的不断发展, 计算机模拟为研究颗粒聚集过程提供了一条新的途径, 而分形理论则提供了新的理论框架。计算机模拟技术的应用可以突破试验手段的限制, 根据需要方便地对絮凝过程的参数进行控制和调整, 如: 颗粒扩散系数、粘附几率、粘附位置等, 并能迅速地得到絮体的大小、密度、分形维数等性能参数, 对模拟结果进行整理和评价, 而这些在实际混凝试验中是无法或较难做到的。国外许多学者较早就已将计算机模拟技术应用于颗粒聚集过程的研究, 而在国内还鲜有报道。本文对絮体的分形结构模型、模拟方法及模拟结果分析方法进行了论述。

1 絮体的分形结构模型

混凝过程中絮体的形成往往具有分形特征, 絮体在混凝研究中的重要地位激发了大量对絮体分形结构模型的研究, 逐渐建立了多个不同的模型, 主要的基本模型有: Vold 模型、Sutherland 模型和 Witten-Sander 模型。

1.1 Vold 模型

Vold 模型^[2,3]是通过计算机模拟提出的最早的模型, 此模型具有 3 层结构: 初始颗粒、絮体和絮体聚集体。该絮体结构由一中心核与一群向外延展的触须形成的粗糙表面构成, 絮体的形成是由初始颗粒按线性路径随机运动叠加而成, 颗粒在与成长中的絮体的最初接触点粘附而并入集团, 不允许内部重组过程。而絮体的进一步聚集就形成了第三层次的聚集体结构, 从而导致快速沉降和肉眼可见的悬浮颗粒的形成。通过分析絮体的结构特征, 发现絮体密度是由中心向外逐渐降低的, 并由此推导出絮体密度随粒径变化的经验公式。Vold 的模拟工作得出的最重要的结果是在与絮体重心距离小于 l 的空间内颗粒的数量 $N(l) \sim l^{2.33}$, 其中 $N(l)$ 小于絮体中颗粒总数的 40%~60%。

1.2 Sutherland 模型

Sutherland^[4]对 Vold 模型中颗粒聚集过程的随

机性提出了批评,指出 Vold 的模拟没有实现颗粒在随机方向和随机位置的粘附。他认为絮体成长的主要机理不在于单独颗粒的碰撞而在于包含有不同数目颗粒的簇团之间的碰撞聚集,这看起来更符合逻辑。因为事实上初始颗粒的碰撞只是在较小的簇形成期间显得十分重要。与 Vold 模型相比, Sutherland 模型^[25]形成更为多孔疏松的结构,具有较低的密度。随着絮体尺寸的增加,其密度降低而孔隙度也随着增加,絮体成长过程中内部重组也将发生。经过改进, Sutherland 得出 $N(l) \sim l^{2.78}$,他对此解释说随着絮体尺寸的增大,絮体中心的孔隙度逐渐达到定值,约为 0.83。Sutherland 还指出,在二维模拟(每个絮体包含 500 个颗粒)中: $N(l) \sim l^{2.0}$ 。

1.3 Witten-Sander 模型

Vold 模型和 Sutherland 模型中,颗粒和簇团的运动都是按线性路径进行的,并没有包括布朗运动的影响,这显然与事实不符。Witten 和 Sander 模型^[6]对此作了修正,他们以一个处于模拟网格原点的单独颗粒作为种子开始,第二个颗粒在距离原点足够远的地方加入,而后在网格上作随机行走直至达到与种子颗粒相邻的位置,并相互粘附成为一个成长中的集团。然后第三个颗粒在一个随机位置加入并作随机行走,直至并入成长中的集团,此步骤不断重复形成足够大的絮体。Witten-Sander 模型以一个种子颗粒开始并只有一个生长点,对实际絮凝过程的模拟显得有些不足,此后又对 Witten-Sander 模型进行了改进,考虑了颗粒浓度和多个生长点的影响。

2 模拟方法

对絮体成长过程的模拟必然涉及到絮体分形结构动力学生长模型。随着对分形生长过程的研究逐步深入,提出了各种动力学生长模型,主要可分为三类^[7]:有限扩散凝聚模型(DLA)、弹射模型(BA)和反应控制凝聚模型(RLA),每一类模型又分为单体凝聚和集团凝聚。Vold 和 Sutherland 模型属于 BA 模型,而 Witten-Sander 模型则属于 DLA 模型。对絮体成长过程的模拟要根据实际情况选用适合的动力学模型和结构模型进行。而具体的模拟方法则有两种:网格模拟和非网格模拟。两种方法的不同之处在于所采用的模拟框架不同,得到的絮体形态有所区别。前者得到的絮体中颗粒为四方形(二维模拟)或立方体(三维模拟),絮体的圆滑度稍差;后者得到的絮体中颗粒为圆形(二维模拟)或球体(三维模拟),絮体圆

滑度较好。两种絮体的典型形状分别见图 1^[8]和图 2^[8]。

2.1 网格模拟

网格模拟是在一个具有周期边界条件的网格平面(二维情况)或立方体网格空间(三维情况)进行。

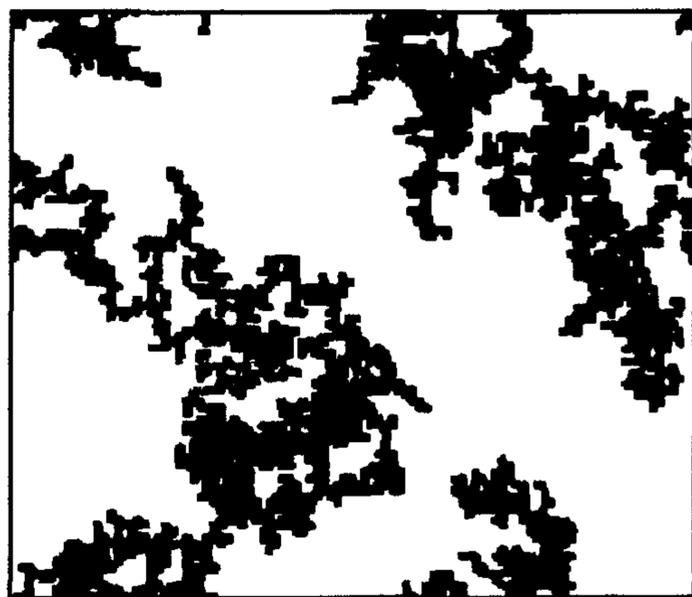


图1 网格模拟絮体

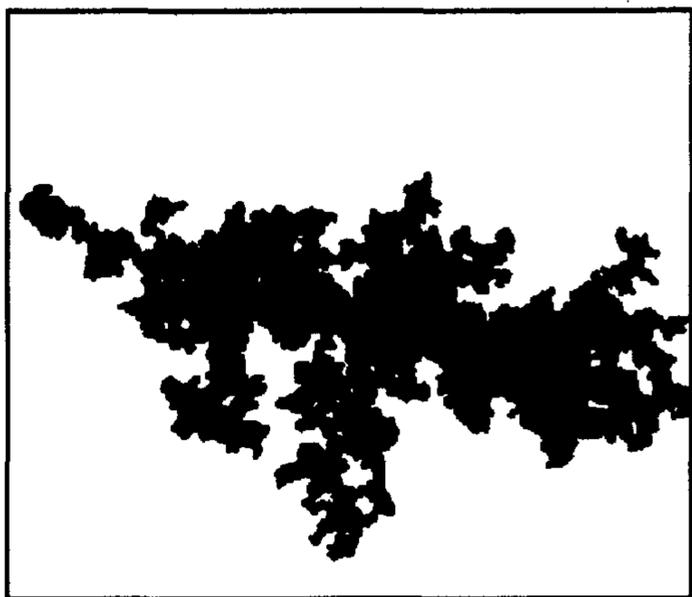


图2 非网格模拟絮体

所谓周期边界是指当颗粒在运动过程中溢出网格边界时,则由对称的地方重新进入。以 BA 模型的集团凝聚为例,开始时网格的 N 个位置被随机占用代表 N 个颗粒,但要避免一个位置重复占用,相邻位置的颗粒认为是属于一个集团。模拟时随机选择一些集团(包括单个颗粒)向一个随机选定的方向($\pm x, \pm y, \pm z$)运动,直到它们在相邻位置与其它集团接触或根据周期边界条件回到初始位置。如果与其它集团接触,则合并形成一个大的集团;如果没有发生接触而回到初始位置,则将它移动到刚才所经过路线上随机选定的一个位置。这个过程重复很多次,直至在网络空间中只剩一个集团或网络结构。

对于其它模型,原理都是相同的,不同的是模拟的起始情况、模拟中颗粒或集团的运动方式及扩散

系数、粘附几率以及粘附位置等。

2.2 非网格模拟

非网格模拟是在一个连续的有限空间内进行,与网格模拟以格子长度为单位度量不同,非网格模拟是以颗粒粒径为单位来度量的,各个颗粒或基团的位置由其质心决定。仍以 BA 模型的集团凝聚为例,开始时将 N 个颗粒随机放入,避免重复,相邻的颗粒认为属于同一个集团。模拟时随机选定两个集团,让它们向一个随机方向转动一个欧拉角度,然后在所有能使两个集团的质心足够近、接触几率不为零的路径中随机选定一条路径,让两个集团相对运动。如果两个集团发生接触,则在首先接触的位置刚性粘接成为一个更大的集团;如果没有发生接触,则随机选择另一条路径进行。以上步骤重复进行,直到形成一个包含 N 个颗粒的单个集团。对于确定两个集团的接触点,Paul Meakin^[8]发现应用矢量分析比几何分析更加方便有效。

3 模拟结果分析方法

分形理论对分析具有自相似性或统计自相似性的结构几何特征是非常方便和有价值的。模拟得到的絮体具有统计自相似性,是典型的分形体,因此,可利用分形理论对絮体进行几何分析。分形体最重要的参数是分形维数,絮体的分形维数与絮体的性能、结构密切相关。以下就模拟絮体的分形维数计算方法作一介绍。

对于欧几里德空间中的密实物体,其几何参数与欧几里德维数 d 存在许多关系,如:

$$R_g \sim M^{1/d} \quad (1)$$

$$M(l) \sim l^d \quad (2)$$

$$P \sim M^{2/d} \quad (3)$$

其中:

R_g —回转半径;

M —质量或体积;

$M(l)$ —与物体中心距离小于 l 的空间内包含的质量;

P —物体在二维平面的投影面积。

对于分形体来说,也相应地存在着类似的关系,只是分形维数代替了欧几里德维数,即:

$$R_g \sim M^{1/D} \quad (4)$$

$$M(l) \sim l^D \quad (5)$$

$$P \sim M^{2/D}, D \geq 2 \text{ 或 } P \sim M, D \leq 2, \quad (6)$$

分形维数可由其中任何一个关系式求出,如通

过测量回转半径 R_g 和质量 M ,利用(4)式求得。一旦 D 确定后,其它关系式中的分形维数也即确定。

描述自相似物体还有一个非常重要的函数是密度相关函数 $C(r)$,它的函数式如下:

$$C(r) = N^{-1} \sum_r \rho(r) \rho(r+r') \quad (7)$$

其中: N 为絮体所含颗粒总数目, r 两颗粒之间的距离,密度 $\rho(r)$ 在颗粒占用的点取值为 1,在没有颗粒占用的点取值为 0。

Witten 和 Sander^[6]发现 $C(r)$ 具有指数形式: $C(r) \sim r^{-\alpha}$,其中 r 的适用范围是大于数个网格或颗粒粒径长度并明显小于整个絮体的尺寸。 α 与分形维数 D_α 的关系为 $D_\alpha = d - \alpha$, d 为絮体所处空间的欧几里德维数。因此,我们可利用 $C(r)$ 和 r 的双对数坐标曲线精确地计算出斜率 α ,从而得到絮体的分形维数 D_α 。

4 结 语

本文通过对絮体的分形结构模型、絮体成长过程的计算机模拟方法和模拟结果的分析方法的系统论述,表明计算机模拟技术将会成为絮体研究中的重要手段和方法,有着很好的应用前景,同时也会使研究者对水处理过程絮体形成的研究予以新的关注,推动其进一步的发展。

参考文献:

- [1] B B Mandelbrot. Fractals: form, chance and dimension [M]. Freeman, San Francisco, 1977.
- [2] 王东升, 汤鸿霄. 分形理论在混凝研究中的应用与展望[J]. 工业水处理, 2001, 21(7): 16-19.
- [3] Vold M J. Computer simulation of floc formation in a colloidal suspension[J]. J. Colloid Sci. 1963, 18: 684-695.
- [4] Sutherland D N. Comments on Vold's simulation of floc formation [J]. JC & IS, 1966, 22: 300-303.
- [5] Sutherland D N. Theoretical model of floc structure [J]. JC & IS, 1967, 25: 373-380.
- [6] T A Witten, L M Sander. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon [J]. Phys. Rev. Lett., 1981, 47: 1400-1403.
- [7] 张济忠. 分形[M]. 北京: 清华大学出版社, 1995.
- [8] Meakin P. Computer simulation of trajectories: results from three-dimensional simulations and a comparison with aggregates formed using brownian trajectories [J]. J. Colloid Interface Sci., 1984, 102(2): 505-512.
- [9] Meakin P. Diffusion-limited aggregation in three dimensions: results from a new cluster-cluster aggregation model [J]. J. Colloid

- Interface Sci.,1984,102(2):491-504.
- [10] Meakin P. Diffusion-controlled cluster formation in two, three, and four dimensions [J]. Physical Review A, 1983, 27: 604-607.
- [11] Dale W Schaefer, James E Martin, Pierre Wiltzius, David S Cannell. Fractal geometry of colloidal aggregates [J]. Physical Rev. Lett., 1984, 52(26): 2371-2374.
- [12] Meakin P. Diffusion-controlled cluster Physical Review A, 1983, 27(3): 1495-1507.
- [13] Meakin P. Formation of fractal clusters and networks by irreversible aggregated aggregation [J]. Physical Review Lett., 1983, 51(13): 1119-1122.

APPLICATION OF COMPUTER SIMULATION TO THE STUDY OF FRACTAL GROWTH OF FLCOS

Tan Wan-chun¹, Wang Yun-bo², Li Dong-mei³, Jin Tong-gui⁴

(1. School of Chem. & Envi. Engineering, Changsha University of Science & Technology, Changsha 410076, China;

2. School of River & Sea. Engineering, Changsha University of Science & Technology, Changsha 410076, China;

3. School of Construction, Guangdong Technology University, Guangzhou 510643, China;

4. School of Envir. & Muni. Engineering, Xi'an University of Architecture & Technology, Xi'an 710055, China)

Abstract: The main phenomenon of coagulation is that particles aggregate to form flocs. The structure, behavior and performance of flocs are closely related to the effect of coagulation. Computer simulation provides a new way for study of the aggregation of particles while the fractal theory provides new idea. This paper systemically introduces the fractal structure models, computer simulations and analysis methods of flocs in order to promote application of this technique.

Keywords: computer simulation technique; floc structure model; fractal dimension

(上接第6页)

- [5] 朱长乐, 蔡邦肖. 基于渗透汽化膜过程的集成过程 [J]. 水处理技术, 2000, 26(4): 194-198.
- [6] 张志诚译著主编. 膜手册: 第三部分 渗透汽化 [M], 蔡邦肖译. 北京: 海洋出版社, 1997. 91-141.
- [7] Richard W Baker. Membrane Technology and Applications [M]. New York: McGraw-Hill, 2000. 354-369.
- [8] S P Nunes and K -V Peinemann. Membrane Technology in the Chemical Industry [M]. New York: WILEY-VCH, 2001. 159-170.
- [9] 时钧, 袁权, 高从塔主编. 膜技术手册: 第12章 渗透汽化 (M), 蒋维钧编. 北京: 化学工业出版社, 2001年. 605-617.
- [10] Sulzer Chemtech Membrane Systems, Achema [C]. Frankfurt, Germany: 19-24 May, 2003.

INDUSTRIAL STATE-OF-THE-ART OF ORGANIC (WATER) MIXTURE SEPARATION OVERSEAS

Cai Bang-xiao¹, Zhang Jin-feng²

(1. Institute of Membrane Science and Engineering, Zhejiang Gongshang University. Food Security Key Lab of Zhejiang Province. 149 Jiaogong Road, Hangzhou 310035, China;

2. The Center of Water Treatment Technology, SOA, 50 Wenhua Road, Hangzhou 310012, China)

Abstract: The membrane techniques of pervaporation (PV) and vapour permeate (VP) have been extensively applied to separation of organic/water mixture, organic/organic mixture. This paper reviews the industrial state-of-the-art of PV/VP in Europe and the USA. and discusses emphatically the patent applications, current supplies, application fields and typical engineering of PV/VP membranes, modules, units and separation processes. On the basis of information of the USA Patents and the literatures, the advance, economy and future prospects of PV/VP are analysed.