

多尺度颗粒动力学对水煤浆流动特性的混合模拟研究

俞 时¹, 李 晓^{1,2}, 褚睿智^{1,2}, 吴国光^{1,2}, 孟献梁^{1,2}, 苗真勇^{1,2}

(1. 中国矿业大学 化工学院, 江苏 徐州 221116; 2. 中国矿业大学 炼焦煤资源绿色开发国家重点实验室, 江苏 徐州 221116)

摘要: 煤粉的粒径分布和级配方式, 对水煤浆的流动特性、稳定性影响显著. 为克服水煤浆中煤粒粒径跨越多个数量级带来的尺度问题, 依照煤粒的布朗运动在工业生产的时间尺度上是否可被忽略, 将煤粒分为小粒径颗粒(“扩散主导”)与大粒径颗粒(“沉降主导”), 并使用随机旋转动力学-分子动力学(SRD-MD)耦合模拟方法探究小粒径颗粒的动力学, 使用斯托克斯动力学模拟大粒径颗粒在流体中的运动. 计算结果表明: SRD-MD 耦合模拟方法对双分散球形固体颗粒悬浮液表观黏度随固体颗粒体积分数变化规律的预测, 符合已有研究中玻璃颗粒悬浮液的试验结果. 应用该 SRD-MD 耦合模拟方法模拟典型的三峰级配水煤浆体系中细浆颗粒与超细浆颗粒, 并将其模拟计算结果与已有研究中玻璃颗粒悬浮液试验结果(悬浮液表观黏度与固体颗粒体积分数的关系)的拟合曲线相结合, 能够预测三峰级配水煤浆的表观黏度, 且该预测较为符合试验结果. 当使用斯托克斯动力学模拟三峰级配水煤浆中粗浆颗粒在重力场中的沉降时, 可以获得大粒径颗粒群的动态结构, 且大粒径颗粒的下降距离表明斯托克斯动力学能够以较少的计算资源模拟工业尺度下粗浆煤粒的沉降过程.

关键词: 水煤浆; 流动特性; 多尺度模拟; 颗粒动力学

中图分类号: TD 313 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-1964(2025)03-0698-13

Study of the fluidity of coal-water slurry by multi-scale hybrid particle dynamics simulations

YU Shi¹, LI Xiao^{1,2}, CHU Ruizhi^{1,2}, WU Guoguang^{1,2}, MENG Xianliang^{1,2}, MIAO Zhenyong^{1,2}

(1. School of Chemical Engineering, China University of Mining and Technology, Xuzhou, Jiangsu 221116, China;
2. State Key Laboratory of Coking Coal Resources Green Exploitation, China University of Mining and Technology, Xuzhou, Jiangsu 221116, China)

Abstract: The coal particles' size distribution largely affects the fluidity and stability of coal-water slurry (CWS). To overcome the scale problem due to the wide coal particle size distribution, coal particles were divided into two categories based on whether the Brownian motions of the particles were negligible. Small particles (“diffusion dominated”) were simulated by SRD-MD coupled method, while large particles (“sedimentation dominated”) were simulated by

收稿日期: 2024-10-17 修回日期: 2024-12-23 DOI: 10.13247/j.cnki.jcumt.2024.04.91

基金项目: 国家自然科学基金项目(52274276, 52274277)

通信作者: 俞 时(1987—), 男, 湖北省武汉市人, 讲师, 工学博士, 从事分子模拟, 多尺度模拟计算方面的研究.

E-mail: 5804@cumt.edu.cn Tel: 18252119142

引用格式: 俞 时, 李 晓, 褚睿智, 等. 多尺度颗粒动力学对水煤浆流动特性的混合模拟研究[J]. 中国矿业大学学报, 2025, 54(3): 698-710.

YU Shi, LI Xiao, CHU Ruizhi, et al. Study of the fluidity of coal-water slurry by multi-scale hybrid particle dynamics simulations[J]. Journal of China University of Mining & Technology, 2025, 54(3): 698-710.

Stokesian dynamics. Our SRD-MD simulation results (e. g., the effects of the particles volume fraction on the apparent viscosities) of bi-dispersed spherical particles agree with previous experimental results of glass particles suspension. And the application of the SRD-MD simulation technique to the “three peak fractal grading coal water slurry” demonstrates that SRD-MD simulation in combination with previous experimental results of glass particles suspension (apparent viscosity versus volume fraction of solid particles) can predict the viscosity of that specific CWS with small error. And our Stokesian dynamics simulation results of large particles reveal the dynamical structure of particles during sedimentation in gravity field, which also shows that the sedimentation of CWS for industry time scale can be simulated by Stokesian dynamics with limited computational cost. Therefore, this hybrid simulations framework can bridge the gap between micro-structures of coal particles and macro-scale properties of coal-water slurry.

Key words: coal water slurry; fluidity; multi-scale simulations; particle dynamics

水煤浆作为一种煤基液态清洁燃料,在能源领域以及作为气化原料转化为合成气以生产各类化学品方面获得了诸多应用^[1-2].水煤浆性能的提升,尤其是其浓度和流变特性的提高,将有效改善水煤浆的气化效率并降低气化的比煤耗与比氧耗^[3-4].颗粒大小^[5]、添加剂性能^[6-9]与制浆工艺(如级配方式)^[10-13]等因素均能显著影响水煤浆性能.为从机理上深入探究影响水煤浆性能的因素,并对工业生产作出指导,各类成浆试验结果常被用作与分子动力学(MD)模拟计算结果进行对比^[9,14].

然而,微观结构与宏观性质间的尺度鸿沟始终制约该类理论研究对工业生产实践的进一步指导.例如分子动力学模拟常见的的时间尺度(μs)及空间尺度(μm)^[14]与实际工业生产所关注的时间尺度(10^4 s)及空间尺度(m)分别相差10个和6个数量级.分子模拟尽管能保留煤颗粒表面性质、添加剂化学结构等微观信息,却难于将其依照统计力学的方法就工业尺度的问题给出预测.因此,采用不同层次的粗粒化方法对水煤浆体系进行多尺度模拟以加快计算速度,不但有利于根据添加剂性质、水煤浆粒度分布、级配方式等对水煤浆性能进行预测,亦有助于在水煤浆性能与分子模拟间建立定量关联.本文将使用2类不同的模拟方法对水煤浆这类由固体颗粒与水组成的两相流体进行模拟计算,着重探究固体颗粒浓度、颗粒粒度分布与流体动力相互作用(HI)对其流动特性的影响.

水煤浆中煤粒的动力学过程有颗粒间的碰撞、扩散、沉降这3类.此3种动力学过程的快慢与相互影响决定了水煤浆的力学特性与稳定性.以往研究表明,悬浮液表观黏度主要由悬浮液中固体颗粒的体积分数 ϕ 决定^[15],因为 ϕ 决定了颗粒

间的平均间距,进而决定了颗粒间的碰撞频率.球形固体颗粒对悬浮液表观黏度影响的最初结果由爱因斯坦于1906年给出^[16],表达式为

$$\eta^* = \left(1 + \frac{5}{2}\phi\right)\eta, \quad (1)$$

式中: η^* 为表观黏度; ϕ 为球形固体颗粒的体积分数; η 为溶剂(牛顿流体)的黏度.此公式(1)仅适用于单颗粒作用主导下的低浓度的情形.

悬浮液中固体颗粒的扩散速率可以通过扩散特征时间 t_d 表征^[17]:

$$t_d = \frac{2a^2}{D}, \quad (2)$$

式中: t_d 为颗粒因扩散在某一维度上移动的距离等于颗粒直径时所需的平均时间; a 为球形颗粒的半径; D 为球形颗粒的扩散系数.而扩散系数 D 又可由1905年爱因斯坦在斯托克斯定律($F = -6\pi\eta aU$, U 为颗粒的速度)^[18]的基础上提出的用于描述球形颗粒布朗运动的斯托克斯-爱因斯坦公式^[19]求得:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}, \quad (3)$$

式中: k_B 为玻尔兹曼常数; T 为温度.使用颗粒动力学方法对悬浮液进行模拟时,可以通过测量系统中颗粒的扩散系数并依照式(3)拟合得到该悬浮液的表观黏度.

类似地,沉降速率可由沉降特征时间 t_s 表征^[17]:

$$t_s = \frac{9\nu}{ag\left(\frac{\rho_m}{\rho_w} - 1\right)}, \quad (4)$$

式中: t_s 为颗粒因沉降移动的距离等于颗粒直径时所需的平均时间; ν 为介质的运动黏度; g 为重力加速度; ρ_m 、 ρ_w 分别为固体颗粒(如煤粒)和介质

(如水)的密度, Péclet 数(下称 Pe)作为表征体系中对流速率与扩散速率比值的无量纲数,可由 t_d/t_s 计算得到^[17].

而为了探究颗粒间碰撞、扩散、沉降间复杂的相互影响,并进而探寻不同形状、浓度、表面性质的固体颗粒对悬浮液流动特性的动态影响,多种颗粒动力学及场模拟方法被应用于悬浮液的动力学模拟^[20-24]. 由于数学上的复杂性,早期对悬浮液性质的理论研究往往局限于低浓度和雷诺数(Re)接近零的情况(单颗粒或双颗粒间作用主导,多体作用可忽略^[25]). 但实际的高浓度水煤浆中,多体流体动力相互作用 HI(即颗粒对流体流场扰动对其他某固体颗粒的影响,依 $1/r$ 衰减、不收敛, r 为两颗粒间距)与润滑力(来源于分隔互相接近的固体颗粒表面上的薄层液膜)是不能被忽略的^[25]. 文献[26]在布朗动力学(BD)中使用 Rotne-Prager 张量近似表示流体动力相互作用 HI. 而文献[27]指出该张量表示 HI 仅适于低浓度情形,并提出能在较小雷诺数($Re < 1$)时,并且不考虑扩散的情况下,较为精确地处理多体相互作用与润滑力的斯托克斯动力学方法(SD),适用于模拟高浓度水煤浆颗粒的沉降过程中的颗粒动力学. 但 SD 需进行大型矩阵对角化,算法复杂度较高.

为提升颗粒动力学在模拟流体时的计算速度,文献[28]提出了随机旋转动力学(SRD)方法. 其将模拟盒子划分为较小的立方体格子,在每个格子中放置粗粒化的液体粒子(以下称为 SRD 颗粒),并通过随机旋转每个格子中的 SRD 颗粒的相对速度来模拟颗粒的碰撞(见图 1 中该方法示意图). 利用 SRD 颗粒模拟液体并使用分子动力学方法模拟固体颗粒(SRD-MD 耦合模拟),可较快地模拟高浓度的悬浮液^[29],甚至高分子溶液^[30]. SRD-MD 耦合模拟在 $Pe < 20$ 时计算结果较准确^[17],适用于水煤浆中“扩散主导”的较小颗粒的动力学模拟. 但目前使用 SRD-MD 耦合模拟对双分散颗粒体系进行模拟的系统性研究,特别是与试验的比较,仍较为缺乏.

工业实践中,三峰级配制水煤浆技术有较多的应用^[31],能够显著地提高水煤浆的浓度,典型的三峰级配水煤浆体系为粗浆粒径 $100 \sim 150 \mu\text{m}$,细浆粒径 $20 \sim 30 \mu\text{m}$,超细浆粒径 $4 \sim 8 \mu\text{m}$ ^[32]. 根据式(2),容易得到粒径 $20 \mu\text{m}$ 的球形颗粒的扩散特征时间约为 136 min ,粒径为 $4 \mu\text{m}$ 的球形颗粒的特征时间约为 65 s ,均小于工业生产的时间尺度. 但细浆与超细浆体系的 Pe 值的确定还需要煤粒

密度的测试数据. 对于三峰级配中的粗浆颗粒,特征时间约为 280 h ,对于工业生产来说,其布朗运动完全可以忽略($Pe = \infty$).

如图 1 所示,针对三峰级配水煤浆体系,本文使用 SRD-MD 耦合模拟方法研究“扩散主导”的小粒径颗粒,而使用 SD 对大粒径颗粒(“沉降主导”)的沉降过程进行了模拟研究. 尝试使用多尺度颗粒动力学混合模拟框架在水煤浆关键参数(粒径分布(如大、小颗粒的粒径比 r_R)、颗粒密度、 ϕ)和流变特性等(如表观黏度、沉降速度)间建立定量关联,以期对水煤浆制备相关的生产实践提供指导依据.

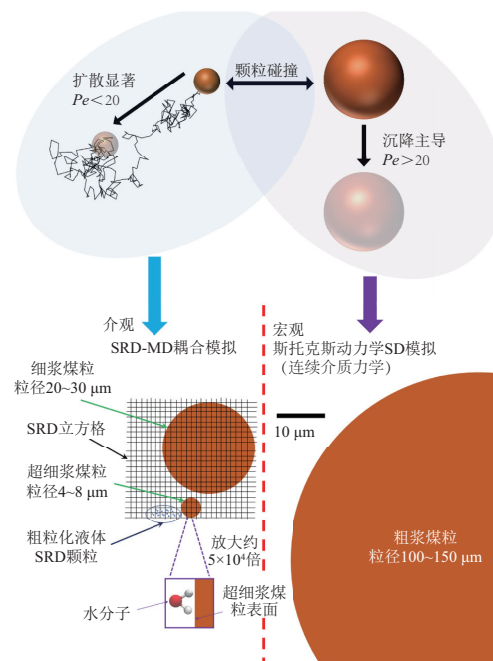


图 1 SRD-MD 耦合模拟与 SD 及模拟体系的比较示意
Fig. 1 Comparison of the simulation system simulated by coupled SRD-MD simulation and Stokesian dynamics

SRD-MD 耦合模拟与 SD 更详细的对比以及本工作选择模拟体系的重要参数见表 1.

表 1 SRD-MD 耦合模拟与 SD 的对比与参数设置
Table 1 Comparison and parameter setting of coupled SRD-MD simulations and Stokesian dynamics simulations

对比项	SRD-MD 耦合模拟	SD
模型性质	介观, 随机性	宏观, 确定性
模拟对象	细浆煤粒、超细浆煤粒	粗浆煤粒
模拟体系大小	125 个球形固体颗粒 + 数万个(随浓度变化而不同)粗粒化液体 SRD 颗粒	100 个球形固体颗粒
适用条件	$Pe < 20$, 即沉降速率/扩散速率小于 20	$Re < 1, Pe = \infty$, 颗粒间介质为牛顿流体
文中采用的 Pe	$Pe = 0$	$Pe = \infty$
文中采用的粒径比	$r_R = 1.0, 1.5, 2.0, 5.0$	$r_R = 1.0$

1 多尺度模型与模拟计算方法

1.1 小粒径颗粒的 SRD-MD 耦合模拟

用于模拟小粒径颗粒运动的 SRD-MD 耦合模拟方法通过 Lammmps 软件中的 SRD 模块实现^[33], 且使用无量纲的约化单位(Lammmps 中的 LJ 单位)与周期性边界条件. 所谓约化单位是指将基本物理量设为无量纲的 1.0, 而其他物理量的单位由此导出(例如, 将细浆煤粒与超细浆煤粒组成的双分散体系中的粒径为 $4 \mu\text{m}$ 的超细浆煤粒直径设为 1.0 时, 粒径为 $20 \mu\text{m}$ 的细浆颗粒的直径在模拟体系中就设定为 5.0).

对水煤浆体系中颗粒两体碰撞过程影响最大的因素是悬浮液中固体颗粒间的相互作用势. 当前, 主要使用 DLVO 理论^[34-35]或 eDLVO 理论^[36]估计不同煤粒间的相互作用. 经典的 Lennard-Jones 势(以下称为 LJ 势), WCA 势, 以及一种长焰煤^[35](与三峰级配水煤浆中煤质分析数据很接近^[31-32])依照 DLVO 理论计算得到的煤粒间的相互作用势^[34-35](粒径 $75 \mu\text{m}$)与球形颗粒中心间距 r 的关系分别绘制在图 2a 及 2b 中(此时两相互作用的球形颗粒的半径均设为 0.5). 当在 SRD-MD 耦合模拟分别使用纯排斥的 WCA 势(图 2a 中橙色曲线)和拥有吸引部分的 LJ 势(图 2a 中蓝色曲线)时, 系统最终平衡结构如图 2a 中插图所示. 该插图表明, 即使强度不高的吸引势 LJ 也会造成系统中球形颗粒团聚, 使得 SRD-MD 耦合模拟无法

$$U_{\text{WCA}}(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right], & r_{ij} \leq 2^{1/6} \sigma, \\ 0, & r_{ij} > 2^{1/6} \sigma, \end{cases} \quad (5)$$

式中: U_{WCA} 为 WCA 势; r_{ij} 为第 i 个球形颗粒与第 j 个颗粒间的距离; σ 为 2 个颗粒半径之和, $\sigma = a_i + a_j$; $2^{1/6} \sigma$ 为截断半径. 较小的球形颗粒的半径 $a_{\text{SMA}} = 0.5$. 使用粒径比 r_R 表示双分散球形颗粒体系中大粒径颗粒半径 a_{LAR} 与小粒径颗粒半径 a_{SMA} 的比值. $\epsilon = 4.0 a_i a_j$, 且 ϵ 的单位为系统的能量单位. 系统的温度设定为 1.0 (即 $k_B T = 1.0$), 时间步长 $\Delta t = 0.001$. 模拟起始时, 将 125 个球形颗粒随机放置在计算盒子中, 并对该体系进行 5×10^6 步 NVT 系综下的 MD 模拟. 在此系统平衡步骤中, 各球形颗粒间的相互作用设定为 LJ 势. 系统平衡步骤中, 系统的总势能随时间的变化如图 3a 所示(图中 ϕ 为系统中的固体颗粒的体积分数; f_L 为较大颗粒的数量占比). 该图显示 5×10^6 步长的

描述悬浮液体系的性质.

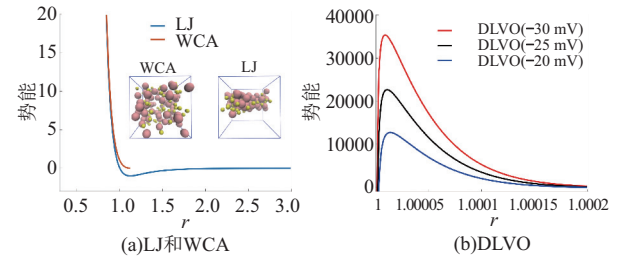


图 2 球形颗粒间相互作用势与 r 的关系

Fig. 2 The relationship between potential energy and r

图 2 中横纵坐标均使用约化单位, 横坐标为 r (实际距离除以颗粒直径), 纵坐标为实际能量单位除以 $k_B T$. 由图 2b 可知, DLVO 理论计算得到的煤样颗粒间作用势比 WCA 势、LJ 势更“陡峭”(即排斥力更强, zeta 电位范围为从 -20 mV 变为 -30 mV 时). 当系统中作用力增大时, 为了保证模拟计算的稳定性, 需要减小计算的时间步长 Δt ^[17]. 因此, 为加快 SRD-MD 耦合模拟的计算速度, 各个固体球形颗粒间的相互作用使用 WCA 势表示, 见式(5). 需指出, 使用 WCA 势替代根据试验结果与 DLVO 理论计算出的相互作用(图 2b 中曲线)并不会对悬浮液的动态结构等造成明显影响, 因为 WCA 势与 DLVO 势均显示为很强的排斥力, 对于球形颗粒均表现为刚性的“势垒”. 这一结论也可以通过图 3c 中的模拟计算结果确认. 当球形颗粒间作用力使用 WCA 势描述时, 系统的势能接近 0 (即两球形颗粒紧密接触的概率接近 0).

MD 模拟能够使添加 SRD 颗粒前的系统达到热力学平衡状态. 系统平衡后, 将计算盒子划分为边长为 0.25 的正方体格子, 并在每个格子中添加粗粒化的流体 SRD 颗粒(见图 3b 中蓝绿色的格点). 之后对系统进行 1×10^7 步 SRD-MD 耦合模拟, 并使用其中的最后 2×10^6 步计算结果进行相应的动力学分析. 图 3c 显示, 系统此时已达平衡.

在 SRD-MD 耦合模拟中, 通过更改计算盒子的大小以改变系统中的固体颗粒的体积分数 ϕ . SRD 颗粒与球形颗粒的碰撞选择滑动碰撞模型(“slip”). 所有球形固体颗粒设置为相同的密度, 并忽略重力作用, 即 $Pe = 0$.

作为 SRD-MD 耦合模拟方法的对照方法, 使用 BD_BOX 软件^[37], 对上述体系进行布朗动力学(BD)

模拟. 采用固定的时间步长 $\Delta t = 10$ ps, 体系温度固

定为 298.15 K, 水的黏度设置为 $0.001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$.

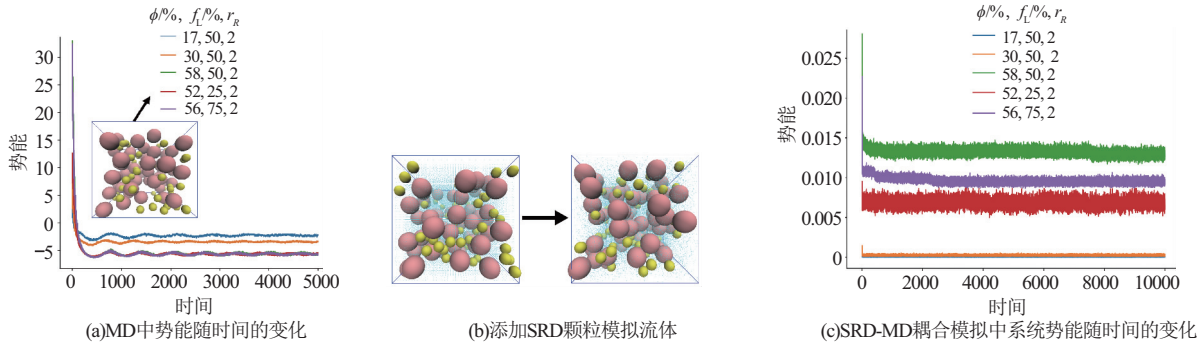


图 3 系统的平衡过程

Fig. 3 System equilibration

1.2 大粒径颗粒的 SD 模拟

为研究较大粒径的煤粉颗粒 ($Pe = \infty$) 在水煤浆中的动力学, 使用由文献[38]开发的 Python 程序包 Stokesian-dynamics 模拟球形颗粒在重力场下的沉降. 该程序包亦使用无量纲的约化单位. 在 SD 模拟起始时, 将 100 个同样半径 ($a = 1.0$) 的圆球随机放置于模拟盒子中, 计算盒子采用非周期性边界条件 (unbounded). SD 模拟中仅考虑润滑力与 HI. 计算步长设置为 $\Delta t = 0.5$, 并进行 10 000 步 SD 计算. 外加力场仅为重力作用 (例如, 第 i 个球形颗粒受到的重力可设为 $F_{gi} = -1.0$).

SD 计算结果描述的是一个确定的物理过程, 即计算结果仅依赖于初始设置与边界条件. 对于流体, SD 计算不可压缩流体 Navier-Stokes 方程在低雷诺数下的近似方程 (Stokes^[38] 方程), 表达式为

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = 0, \\ \nabla p = \eta \nabla^2 u, \end{cases} \quad (6)$$

式中: ∇ 为 nabla 算符; u 为流速; p 为压强.

而固体颗粒的运动分三步计算: 1) 使用 Faxén's law^[38] 对全部颗粒计算运动矩阵 \mathbf{M}^∞ 以及其逆矩阵 $(\mathbf{M}^\infty)^{-1}$; 2) 通过润滑力计算技术对所有间距小于截断半径的颗粒得到精确两体阻力矩阵 $\mathbf{R}^{2B, \text{exact}}$; 3) 对上述相互靠近的颗粒依步骤 1) 方式计算得到渐近表示的运动矩阵并求逆矩阵得到 $\mathbf{R}^{2B, \infty}$. 按照式(7)计算得到大阻力矩阵 \mathbf{R} , 并据此更新球形颗粒的位置.

$$\mathbf{R} = (\mathbf{M}^\infty)^{-1} + (\mathbf{R}^{2B, \text{exact}} - \mathbf{R}^{2B, \infty}). \quad (7)$$

2 双分散球形颗粒悬浮液的 SRD-MD 耦合模拟

为将 SRD-MD 耦合模拟方法应用于模拟水煤浆体系, 首先验证 SRD-MD 耦合模拟方法对双分

散球形颗粒悬浮液体系的适用性.

选取 2 种粒径比 ($r_R = 1.5, r_R = 2.0$) 的双分散球形颗粒体系进行 SRD-MD 模拟. 不同粒径的影响通过在式(5)中将 ϵ 设置为 $4.0a_i a_j$ 引入系统, 该近似值能有效地抵消系统中因引入“虚粒子”(SRD 颗粒)造成的耗尽力并避免其带来的颗粒聚集. 式(5)中 WCA 势可被替换为更精确的 DLVO 势, 但当 DLVO 势中静电排斥作用造成的两固体颗粒相互靠近需克服的势垒 ΔU 足够高时, 跨越该势垒的速率可以近似认为 $\propto e^{-\Delta U/k_B T}$ ^[39], 此时颗粒间排斥力的具体数学形式影响不明显.

若干代表性体系中固体颗粒的平均径向分布函数 $g(r)$ 绘制于图 4a 与 4b 中. 在图 4a 中, 以 $\phi = 52\%$, $f_L = 0$ 为例 (系统中所有颗粒均为小粒径颗粒), 其平均径向分布函数 $g(r)$ (橙色曲线) 呈现 3 个峰值, 依次递减并趋近于 1, 表明当 ϕ 较大时, 悬浮液中固体颗粒表现为较为规整的类似晶体的周期性结构. 当 ϕ 逐渐减小时, $g(r)$ 的峰不再明显, 表明在稀的悬浮液中固体颗粒表现为随机行走而非规整的结构. 随着 f_L 的增加, $g(r)$ 的峰值向 x 轴正向移动, 因为颗粒间的平均间距随着大粒径颗粒占比的升高而增大.

SRD-MD 耦合模拟中可以由颗粒位置随时间的变化计算得到不同条件下颗粒的均方位移 (MSD) 随时间间隔的变化. MSD 可以通过下式 (Einstein formula) 计算得到:

$$MSD(r_d) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |r_d - r_d(t_0)|^2 \right\rangle_{t_0}, \quad (8)$$

式中: N 为颗粒的数量; r 为颗粒的坐标; $d = 3$ 代表 MSD 的维度; t_0 为起始时间; $\langle \rangle$ 表示总体均值. 不同 r_R , 不同 f_L , 以及不同 ϕ 下的若干代表性颗粒均方位移 MSD 随时间间隔的变化绘制于图 4c 和 4d 中. 该图中, 不同 ϕ, f_L, r_R 的颗粒均方位移

与时间间隔的关系近似为直线,显示悬浮液中固体颗粒仍呈现正常扩散.图 4 c 和 4d 中实线表示小粒径颗粒的 MSD,同颜色虚线描述相同体系中

大粒径颗粒的 MSD 随时间间隔的变化.正如式 (3) 所示,当粒径减小时,颗粒的扩散系数增加.

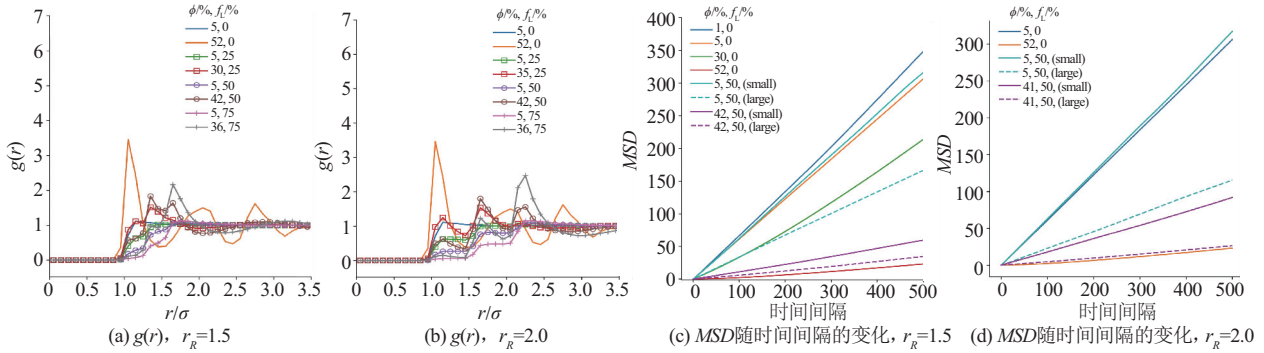


图 4 双分散球形颗粒体系的 SRD-MD 耦合模拟

Fig. 4 Coupled SRD-MD simulations of bi-dispersed spherical particles

SRD-MD 耦合模拟得到的 MSD 随时间间隔变化的计算结果对式(3)拟合,得到标准化的表观黏度 η^*/η 在不同条件下随 ϕ 的变化规律,并绘制于图 5a 中.不同条件下的 SRD-MD 耦合模拟均重复了 3 次,图 5 中的误差棒为 3 次重复模拟计算的标准差.因为在 SRD-MD 耦合模拟系统中引入了虚拟的流体粒子(SRD 颗粒),其模拟计算得到的动力学信息无法直接还原为真实物理单位.因此,在图 5 中,规定 $\phi=1\%$ 时拟合得到的表观黏度即为零浓度时的流体黏度,作为表观黏度标准化的依据.在固体颗粒体积分数较小时($\phi \leq 15\%$),图 5a 显示不同条件下(不同 f_L 、不同 r_R)标准化后表观黏度随 ϕ 的变化(即曲线的斜率)均与式(1)(图 5 中黑色虚线)一致.注意到大粒径颗粒 $r_R=2$ (红褐色曲线)或 $r_R=1.5$ (粉红色曲线)对应的数值在小粒径颗粒($f_L=0\%$,深蓝色曲线)数值之上,显

示出相同的固体颗粒体积分数 ϕ 下,SRD-MD 耦合模拟中,颗粒间的相互作用以及流体动力相互作用 HI 对较大颗粒的扩散影响更大.

随着 ϕ 的增加,在 SRD-MD 耦合模拟中所有颗粒对应的表观黏度均大幅偏离零颗粒浓度下推导出的方程(1),而能够较好地符合以往文献中球形玻璃颗粒悬浮液的试验观测到的表观黏度与 ϕ 的关系^[40](该试验数据拟合为图 5a 中的深绿点划线).该体系中玻璃球的直径分布为 $100 \sim 160 \mu\text{m}$, 即其粒径比 $r_R=1.6 \in (1.5, 2.0)$,正好吻合 SRD-MD 耦合模拟选取的小粒径比双分散颗粒悬浮液体系.需特别指出,该玻璃颗粒试验^[40]中玻璃颗粒为沉降主导,之所以该试验曲线与 SRD-MD 模拟结果接近是因为当 $\phi < 40\%$ 且 $Pe < 100$ 时, Pe 对悬浮液表观黏度的影响可忽略^[17],这也再次确认 ϕ 对表观黏度的决定性影响^[15].

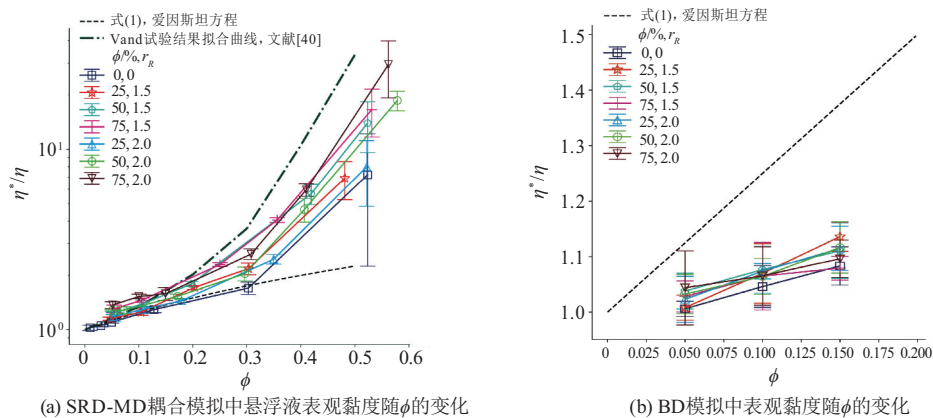


图 5 SRD-MD 耦合模拟与 BD 模拟的对比

Fig. 5 Comparison between SRD-MD coupled simulation results and Brownian dynamics simulation results

图 5a 还显示,当 ϕ 较小时($\phi \leq 40\%$),误差棒也较小,计算结果的一致性较好,且与试验结果符

合,表明 125 个固体颗粒与数万个 SRD 颗粒构成的系统对该条件($\phi \leq 40\%$)足够大.然而,当 ϕ 较

大时,尤其是超过 49%时,由于整个系统不再是流体(在模拟时间内表现为发生了玻璃化转变),其误差迅速增大.此时拟合得到的体系表观黏度与试验值^[40]尽管趋势一致,但存在较大误差.

作为对照,在图 5b 中,绘制了对于相同双分散球形颗粒悬浮液体系使用布朗动力学模拟得到的较小固体颗粒体积分数下($\phi \leq 15\%$)表观黏度随 ϕ 的变化.图 5b 显示,即是对于较小的 ϕ ,BD 模拟结果仍与式(1)差异明显.BD 计算得到的表观黏度也明显小于 SRD-MD 耦合模拟的计算结果,这是由于在 BD 中使用 Rotne-Prager 张量近似表示的 HI 无法像 SRD-MD 耦合模拟中 SRD 颗粒那样较为准确地描述流体动力相互作用.

为探究悬浮液中固体颗粒体积分数 ϕ 的变化对何种颗粒的运动影响更大,小粒径颗粒的扩散系数 D_{small} 与大粒径颗粒的扩散系数 D_{large} 之比与 $1/r_R$ 之积(其中粒径比 $r_R = a_{\text{LAR}}/a_{\text{SMA}}$ 表征颗粒粒径依 Stokes-Einstein 方程(3)对球形颗粒扩散系数的影响)与体积分数的关系描绘在图 6 中.

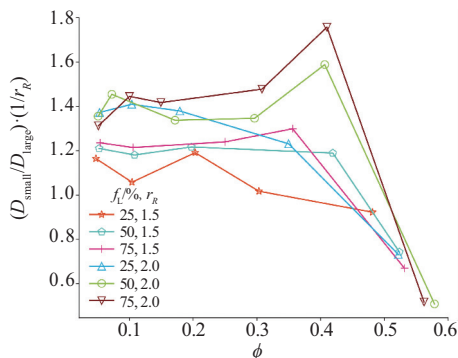


图 6 双分散悬浮液中 $(D_{\text{small}}/D_{\text{large}}) \cdot (1/r_R)$ 随 ϕ 的变化
Fig. 6 The product of r_R and the ratio between diffusivity of small particles and that of large particles versus volume fraction ϕ obtained by SRD-MD simulations

该图纵坐标 $(D_{\text{small}}/D_{\text{large}}) \cdot (1/r_R)$ 反映固体颗粒体积分数 ϕ 对小粒径颗粒与大粒径颗粒扩散系数的影响之比.由于零浓度时粒径的影响已经被考虑在 $1/r_R$ 之中,当 ϕ 趋近于 0 时,无论粒径分布为何,其纵坐标 $(D_{\text{small}}/D_{\text{large}}) \cdot (1/r_R)$ 的值应趋近于 1.但图 6 显示,在体积分数较小时($\phi \leq 40\%$),各点的纵坐标均 ≥ 1.0 ,这表明悬浮液中较大颗粒的扩散运动比式(2)预计的更慢.随着大粒径颗粒占比 f_L 的增加以及粒径比 r_R 的增加,这种影响会更显著,即大粒径颗粒对体积分数的变化更敏感.但当 ϕ 升高至 50% 以上时,各点纵坐标明显小于 1.0.这是由于在 SRD-MD 耦合模拟中,当 ϕ 升高超过 49% 时,固体颗粒不再进行随机行

走,转而在平衡位置进行振动,此时较小粒径的颗粒的扩散将因“笼蔽效应”(cage effect)在玻璃化转变附近急剧减缓乃至转变为反常扩散^[41].

需要注意的是,由于此时($\phi > 50\%$)SRD-MD 耦合模拟的计算误差很大(见图 5a),且模拟采用了周期性边界条件,高 ϕ 体系的耦合模拟计算结果的可靠性明显低于发生玻璃化转变前的低 ϕ 体系.

至此,通过对比 SRD-MD 耦合模拟结果与相似体系的试验结果^[40],爱因斯坦在低浓度下的理论预测值(式(1)),甚至布朗动力学模拟结果,可以得出对于发生玻璃化转变前($\phi \leq 49\%$)^[41]的双分散球形固体颗粒体系,SRD-MD 耦合模拟能够以较少的计算资源消耗,较为准确地描述悬浮液中固体颗粒的扩散现象并计算得到悬浮液的表观黏度.

3 水煤浆的多尺度混合模拟

3.1 水煤浆中小粒径颗粒对煤浆黏度影响的 SRD-MD 耦合模拟

由于典型的三峰级配水煤浆中细浆颗粒直径(20~30 μm)约为超细浆颗粒直径(4~8 μm)的 5 倍^[31],使用如上所述 SRD-MD 耦合模拟方法研究由 1 个直径为 5.0 的球形颗粒与 124 个直径为 1.0 的球形颗粒组成的体系(即 $r_R = 5.0$,见图 7a 中插图)的动力学.此时,2 类颗粒的质量占比均约为 50%(假设颗粒密度一致).由于典型的三峰级配水煤浆中细浆与超细浆质量占比约为 15%,而粗浆煤粒质量占比为 85%^[31].因此,此模拟体系中固体颗粒体积分数 $\phi = 6\% \sim 9\%$ 对应于三峰水煤浆体系总固体颗粒体积占比 $\phi_{\text{total}} = 40\% \sim 60\%$ ($\phi_{\text{total}} = \phi/15\%$).如图 7a 所示,对于 $\phi = 6\% \sim 9\%$,在 1×10^7 步 SRD-MD 耦合模拟中,系统的势能在极短的时间内降为 0,且对于较低体积分数 $\phi \leq 10\%$,此体系的总势能在 SRD-MD 耦合模拟过程中保持为 0,显示润滑力阻止了稀悬浮液中颗粒的表面接触.对比图 7a 与图 3c,观察到尽管粒径比 r_R 区别较大,低体积分数下,体系中固体颗粒间的势能均接近 0,这再一次表明,在一对固体颗粒跨越 DLVO 理论中的“势垒”并团聚在一起之前,固体颗粒间作用力的具体数学形式影响可忽略.

$r_R = 5.0$ 体系中球形颗粒的均方位移 MSD 随时间间隔的变化依式(8)计算并绘制于图 7b 中.由该图可知,2 种颗粒仍接近正常扩散(MSD

和时间的关系近似为直线)。

不同 ϕ 下,所有对 $r_R = 5.0$ 双分散颗粒体系的 SRD-MD 耦合模拟得到的 MSD 对式(3)拟合得到相应的表观黏度并绘制于图 8a 中. 该图显示,小颗粒的扩散行为几乎不受 ϕ 从 6% 增加到 9%

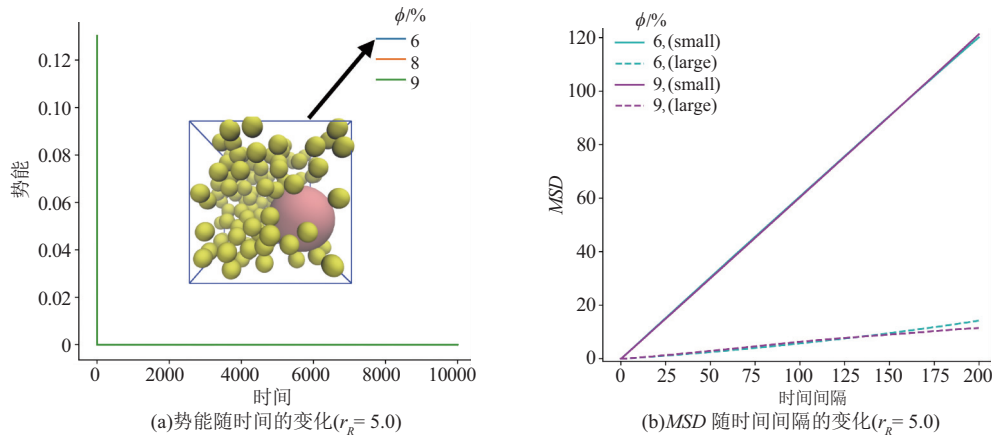


图 7 双分散($r_R = 5.0$)球形颗粒的 SRD-MD 耦合模拟

Fig. 7 SRD-MD coupled simulations of bi-dispersed ($r_R = 5.0$) spherical particles

根据此 SRD-MD 耦合模拟的计算结果以及玻璃球悬浮液的试验结果^[40]可以近似计算得到三峰级配水煤浆的表观黏度,以及水煤浆表观黏度与 ϕ 的关系. 假设煤粒密度与水的差异可忽略,且水的黏度为 $0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$,使用四次多项式拟合 Vand 试验测得的玻璃球悬浮液表观黏度与 ϕ 的关系^[40](11 个数数据点)得到下式(9):

$$\eta^* / \eta = 4.44 \times 10^4 \phi^4 - 3.59 \times 10^4 \phi^3 + 8.97 \times 10^3 \phi^2 - 6.87 \times 10^2 \phi + 7.03. \quad (9)$$

对于三峰级配水煤浆体系,质量占比 15% 的细浆和超细浆煤粒^[31]的存在对水煤浆黏度的影响有两方面:一是降低了粗浆中大粒径煤颗粒($100 \mu\text{m}$ 以上)的实际体积分数;二是增加了由细浆和超细浆组成的背景流体的表观黏度. 因此,结合

的变化影响. 然而通过大颗粒($a_{\text{LAR}} = 2.5$)的扩散行为拟合得到的表观黏度相较于水的黏度增加约 1 倍. 此计算结果符合已有研究中的试验结果^[15,42].

SRD-MD 耦合模拟计算结果与文献^[40]的试验结果得到的预测曲线为

$$\begin{aligned} \eta^* / \eta = & 2.0 \times [4.44 \times 10^4 \times (0.85\phi)^4 \\ & - 3.59 \times 10^4 (0.85\phi)^3 + 8.97 \times 10^3 (0.85\phi)^2 \\ & - 6.87 \times 10^2 (0.85\phi) + 7.03]. \end{aligned} \quad (10)$$

该式(10)等号右边第 1 项 2.0 是三峰水煤浆中细浆($20 \sim 30 \mu\text{m}$)颗粒对背景流体黏度增长的贡献(见图 8a 中浅蓝色五角星). 而使用 0.85ϕ 取代式(9)中的 ϕ 是为了考虑三峰水煤浆体系中大粒径颗粒的实际体积分数^[31](粗浆颗粒占比 85%). 式(9)与(10)分别绘制为图 8b 中的蓝色与橙色曲线.

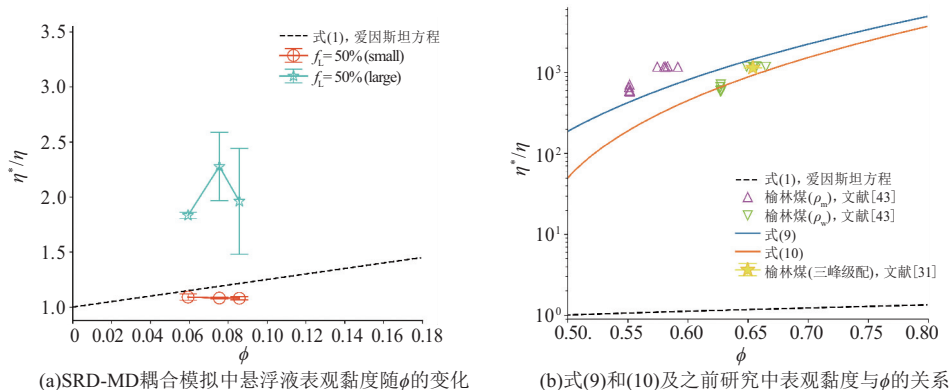


图 8 水煤浆的表观黏度

Fig. 8 Apparent viscosities of coal-water slurry

文献^[31]测得的三峰级配榆林煤(其中粗浆/细浆/超细浆的质量比为 85 : 10 : 5 或 85 : 5 : 10)的

表观黏度的平均值与标准差绘制为图 8b 中的黄色五角星. 由该图可知, 三峰级配水煤浆的实际表观黏度与通过结合 SRD-MD 耦合模拟结果与文献 [40] 的玻璃球悬浮液黏度试验结果得到的预测值 (即式 (10)) 很接近 (误差约 20%).

而与三峰级配水煤浆用榆林煤^[31]相似的一种榆林长焰煤的水煤浆成浆试验数据^[43] (非三峰级配) 也绘制在图 8b 中. 其中, 图 8b 中粉红色上三角代表的是文献 [43] 中 10 个依照煤的真密度 (约为水的 1.37 倍) 计算得到的水煤浆表观黏度与 ϕ 的关系 (原始数据为表观黏度与煤粒质量分数的关系). 而图 8b 中浅绿色下三角代表的是同样 10 个数据点, 但将煤粒的密度近似为水的密度. 图 8b 显示, 使用由试验数据拟合得到的式 (9) (图 8b 中蓝线) 能够近似计算得到水煤浆的表观黏度.

当使用如上所述的结合 SRD-MD 耦合模拟结果与玻璃颗粒试验拟合得到的经验关系式 (式 (10)), 或单纯依靠经验关系式 (9) 近似计算得到水煤浆表观黏度时, 会引入以下 3 类误差.

1) 使用 SRD-MD 耦合模拟结果时, 隐含假设了细浆煤粒、超细浆煤粒与水组成的粗浆煤粒间的介质是牛顿流体. 不过, 由图 5a 知, 当颗粒体积分数低于 20% 时, 表观黏度与 ϕ 的关系近似等于爱因斯坦方程 (式 (1)), 而爱因斯坦方程是在零浓度下推导得到的线性方程, 表明此处使用牛顿流体近似计算粗浆颗粒间的流体介质性质误差较小. 另外, 文献 [44-45] 观察到当颗粒体积分数低于 20%, 并且较小颗粒粒径明显小于较大颗粒时 ($r_R > 10$), 由较小颗粒组成的悬浮液对于较大颗粒来说表现为牛顿流体, 这也再次验证了 SRD-MD 耦合模拟的计算结果 (见图 5a).

2) 因为煤粒在水煤浆中运动时, 处于煤粒孔隙内的水分子将随之运动, 使用煤粒真密度计算水煤浆中固体颗粒体积分数 ϕ 可能会低估 ϕ . 如图 8b 中, 更准确 ϕ 值对应的数据点^[38] 应当在粉红色上三角与浅绿色下三角之间.

3) 使用由玻璃颗粒 (近单分散) 悬浮液拟合的试验结果 (式 (9) 或 (10)) 近似计算水煤浆黏度, 等效于使用单分散颗粒体系模拟宽分布的水煤浆颗粒体系 (且不同水煤浆的粒径分布变化显著), 是很粗糙的估计. 然而, 近期文献 [46-49] 构建并试验验证了能够对任意粒径分布的多分散颗粒体系进行表观黏度预测的理论模型, 本文应用的颗粒动力学方法可以依照文献 [46-49] 使用的近似方法, 对粒径分布的影响进行更细致的考察.

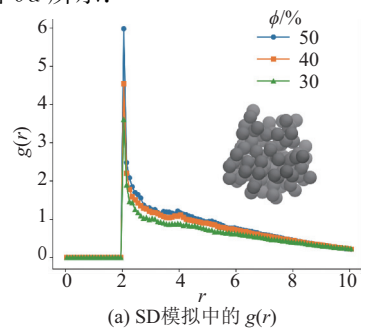
3.2 水煤浆中大粒径颗粒的 SD 模拟

斯托克斯动力学尽管也是颗粒动力学计算方法, 但其本质是近似求解低雷诺数 ($Re \ll 1$) 下的 Navier-Stokes 方程, 即 Stokes 方程 (式 (6)). 水煤浆中固体颗粒的表面可被认为是 Stokes 方程的边界条件.

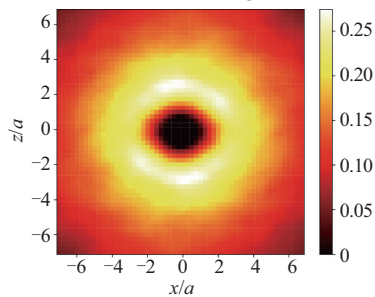
需特别指出, 之所以要将水煤浆中固体颗粒依照布朗运动是否可以忽略分为 2 种类型 (“扩散主导”, “沉降主导”), 正是因为在使用 SD 求解 Stokes 方程时, 小粒径颗粒的表面因为布朗运动发生位移、旋转等, 导致 Stokes 方程的边界条件在求解过程中发生变化. 只有对于大粒径颗粒, 对于每一步计算, Stokes 方程才有确定的边界条件, 能够求出其流场, 并依据 Stokes 方程的解及式 (7) 更新每个颗粒的位置等信息.

尽管文献 [38] 使用 Python (以及 numpy、numba 等包) 开发的 Stokesian dynamics 软件可用于多分散颗粒体系的模拟, 并适用于不同流型 (如简单的 Couette 流), 但需要修改该软件的源代码, 相关程序验证工作超出了本文的范畴. 而由于 SD 方法在模拟单分散球形颗粒在牛顿流体中运动时的准确性已经得到了验证^[25], 三峰级配水煤浆中颗粒直径超过 100 μm 的粗浆煤粒在重力场中、牛顿流体内的 SD 模拟计算可以被认为是准确的.

10 000 步 SD 计算 (单线程, 需约 80 h) 模拟颗粒沉降的结果中, 球形颗粒的平均径向分布函数 $g(r)$ 如图 9a 所示.



(a) SD模拟中的 $g(r)$



(b) xz 平面上的投影数密度分布

图 9 斯托克斯动力学模拟结果

Fig. 9 Stokesian dynamics simulation results

随着固体颗粒体积分数 ϕ 的升高, $g(r)$ 的峰值也在升高, 显示颗粒间平均间距随着体积分数的升高逐渐减小. 需要注意的是, 在没有使用周期性边界条件的 SD 计算中, $g(r)$ 将在较大的距离 r 上降为 0, 而非使用周期性边界条件时的值 1. 对于 SD 模拟, 也可以使用 Edwald Summation 方法解决采用周期性边界条件时 HI 不收敛的问题^[38]. 为计算二维或投影数密度分布函数, 先将 xz 平面划分为同样大小的正方形单元格, 再使用式(11)求得相应的的数密度分布函数 $g_n(r)$.

$$g_n(r) = \frac{1}{T\rho_0} \int_0^T \sum_{n_p} \frac{n(r)}{n_p \Delta s} dt, \quad (11)$$

式中: T 为总的模拟计算时间; ρ_0 为该区域的颗粒平均数密度; 单元格边长 $\Delta s = 0.2$; r 为计算单元

格的极坐标; $n(r)$ 为该单元格中所含球形颗粒的数量; $n_p = 100$ 为体系中颗粒的总数量; $dt = \Delta t = 0.5$ 为 SD 步长,

$\phi = 0.4$ 的体系的 SD 模拟结果中, 其 xz 平面上的投影数密度分布在整个 10 000 步 SD 计算中的平均值如图 9b 所示. 该图显示, 当球形颗粒群因重力向下(沿 $-z$ 方向)运动时, 颗粒在垂直方向上的排布比水平方向略微紧密(见图 9b 中的高亮区域).

SD 模拟与真实物理过程由雷诺数 Re 关联, 约化单位与物理单位的转化通过沉降特征时间 t_s 进行. 当 $\phi = 0.4$ 的悬浮液运动黏度约为水的 10 倍时(见图 5a), SD 模拟结果与真实物理过程的关联方法如表 2 所示.

表 2 SD 模拟与真实物理系统的比较及约化单位换算
Table 2 Comparison between Stokesian dynamics and real sedimentation, and conversion between reduced unit and SI unit

模拟体系	F_{gi}	沉降距离	t_s	粒径	Re
SD 模拟 100 步	-1.0	27.9	3.58	2.0	0.112
	-0.5	14.6	6.85	2.0	0.058
	-0.1	3.9	25.64	2.0	0.016
真实体系	F_{gi}	沉降距离	真实 t_s/s	粒径/ μm	Re
煤粒 $\rho = 1.8 \text{ g/cm}^3$			0.078	295.2	0.112
			0.097	237.0	0.058
			0.150	154.2	0.016

注: F_{gi} 为单个颗粒所受重力; $Re = 2a\mu/\nu = 4a^2/t_s/\nu$, μ 为沉降速度; a 为球形颗粒半径; ν 为运动黏度.

如表 2 所示, 以粒径 $154.2 \mu\text{m}$, 密度为 1.8 g/cm^3 的煤粒为例, 其沉降速度为 $154.2/0.15 = 1028$, 其雷诺数为 0.016 与 SD 模拟时每个颗粒受向下的重力约为 -0.1 (约化单位) 的体系相同. 则 100 步该体系 SD 模拟对应的真实物理过程的时长为 $100\Delta t/25.64 \times 0.15 \text{ s} = 0.29 \text{ s}$, 其中, $\Delta t = 0.5$ 为 SD 模拟的步长, 25.64 (约化单位) 为 SD 中的沉降特征时间, 而 0.15 s 为该颗粒的真实沉降特征时间. 类似的, 对于 $295.2 \mu\text{m}$ 粒径颗粒, 100 步 SD 模拟对应 1.09 s 的真实物理过程.

由于水煤浆体系中固体颗粒粒径分布很宽 ($1 \sim 1 \times 10^3$), 在同一模拟方法下同时探究全部可能粒径颗粒的动力学仍极为困难, 因为系统的时间步长由最快的物理过程(最小颗粒的动力学)所决定, 这使得模拟计算变得极为缓慢(计算步数需要极多才能观察到最大颗粒的动力学过程). 依照类似构建集总参数模型思路, 将这一极具挑战性的问题划分成了 2 个较容易的问题, 即小粒径体系

的 SRD-MD 耦合模拟与大粒径体系的 SD 模拟. 同时应当指出过往分子动力学的计算结果^[9,14] 能作为 SRD-MD 耦合模拟的输入, 而 SRD-MD 的输出(如背景流体的表观黏度)又能成为 SD 的输入, 从而将包含煤颗粒表面性质、添加剂化学结构等分子层面的信息引入能对实际生产尺度进行较为准确模拟计算的 SD 之中, 为尺度差异巨大的理论研究和试验测量间搭建“平滑”连接的多尺度混合模拟的“桥梁”.

3 结 论

1) 水煤浆中固体颗粒体积分数 ϕ 对水煤浆表观黏度有决定性影响. 而对于某质量浓度水煤浆, 煤粒密度决定了其 ϕ 与煤粒沉降的推动力. 当测得煤粒密度后, 可通过本文依据文献^[40] 拟合得到的经验关系式(9)与颗粒沉降特征时间式(4)近似获得水煤浆的表观黏度与某一粒径煤粒的平均沉降速度.

2)SRD-MD 耦合模拟小粒径比双分散球形固体颗粒悬浮液时,其预测的悬浮液表观黏度随固体颗粒体积分数 ϕ 的变化规律符合相应的玻璃颗粒悬浮液体系的试验结果.且应用该 SRD-MD 耦合模拟三峰级配水煤浆中“扩散主导”的细浆与超细浆颗粒时,观察到细浆颗粒(直径为 20~30 μm)的扩散系数减小约 50%(即表观黏度增加为水的 2 倍);SRD-MD 耦合模拟结果结合玻璃颗粒悬浮液试验结果^[40](式(10)),可以拟合得到三峰级配水煤浆在不同浓度下的表观黏度,且预测结果较为符合试验测量值.

3)使用斯托克斯动力学模拟 SD 模拟“沉降主导”的大粒径煤粒时,不但可以计算得到沉降速度,还能得到煤粒在重力场中的浓度梯度以及依据经验公式或理论模型难以获得的悬浮液的动态结构信息.

参考文献:

- [1] 李 强,侯 健,廖长林,等.颗粒间作用力和 eDLVO 理论在水煤浆中的应用[J].中南大学学报(自然科学版),2021,52(10):3728-3740.
LI Qiang, HOU Jian, LIAO Changlin, et al. Application of interparticle potential and eDLVO theory in coal water slurry[J]. Journal of Central South University (Science & Technology), 2021, 52(10): 3728-3740.
- [2] 李 果,乔军强,芦海云.水煤浆分散剂研究进展[J].洁净煤技术,2021,27(5):52-59.
LI Guo, QIAO Junqiang, LU Haiyun. Advances on the coal water slurry dispersants [J]. Clean Coal Technology, 2021, 27(5): 52-59.
- [3] 张孝雨,何国锋,李 磊,等.水煤浆性能的影响因素及技术进展[J].洁净煤技术,2019,25(6):96-104.
ZHANG Xiaoyu, HE Guofeng, LI Lei, et al. Influence factors and technical progress of CWS performance [J]. Clean Coal Technology, 2019, 25(6): 96-104.
- [4] 梁霏飞,吴国光,孟献梁,等.煤泥水煤浆制备工艺研究[J].选煤技术,2011(6):7-10.
LIANG Feifei, WU Guoguang, MENG Xianliang, et al. Study on the preparation process of coal slurry [J]. Coal Preparation Technology, 2011(6): 7-10.
- [5] WANG G, GAO F, DENG J F, et al. The influence of coal water slurry particle size on the erosion of reducing pipe[C]// ISMAIL M Y, MOHDSANI M S, KUMARASAMY S, et al. Technological Advancement in Mechanical and Automotive Engineering (ICMER 2021). Singapore: Springer, 2022: 441-455.
- [6] MENG X L, ZHANG T H, WU G G, et al. Investigation on the interaction between the lipophilic structure of anionic dispersants and Shenhua non-caking coal in coal water slurry[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2022, 643: 128812.
- [7] MENG X L, SHI J J, WU G G, et al. Study on prediction model of slurry concentration of low-rank coal and anionic sulfonate additives [J]. Fuel, 2023, 343: 127976.
- [8] 许恩乐,陈仕兴,武玉发,等.废润滑油对城市污泥水煤浆成浆性能的影响机制[J].煤炭学报,2022,47(8):3155-3162.
XU Enle, CHEN Shixing, WU Yufa, et al. Influence mechanism of waste lubricating oil slurry characteristics of municipal sludge-coal water slurry[J]. Journal of China Coal Society, 2022, 47(8): 3155-3162.
- [9] JIANG X F, ZHOU Y, MENG X L, et al. The effect of inorganic salt modification of sludge on the performance of sludge-coal water slurry[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2022, 664: 131146.
- [10] 陈 浩.基于间断级配水煤浆复合流机理研究[D].北京:煤炭科学研究总院,2016.
CHEN Hao. Research on the mechanism of compound flow of discontinuous coal slurry[D]. Beijing: China Coal Research Institute, 2016.
- [11] SINGH H, KUMAR S, MOHAPATRA S K, et al. Slurryability and flowability of coal water slurry: Effect of particle size distribution [J]. Journal of Cleaner Production, 2021, 323: 129183.
- [12] HU S X, LI J G, YANG X, et al. Improvement on slurry ability and combustion dynamics of low quality coals with ultra-high ash content [J]. Chemical Engineering Research and Design, 2020, 156: 391-401.
- [13] HU S X, JIANG F H, ZHAO B L, et al. The enhancement on rheology, flowability, and stability of coal water slurry prepared by multipeak gradation technology [J]. Energy Fuels, 2021, 35(3): 2006-2015.
- [14] LI L, MA C D, LIN M Y, et al. Study of sodium lignosulfonate prepare low rank coal-water slurry: Experiments and simulations [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2021, 29: 344-353.
- [15] DÖRR A, SADIKI A, MEHDIZADEH A. A discrete model for the apparent viscosity of polydisperse suspensions including maximum packing fraction [J]. Journal of Rheology, 2013, 57: 743-765.

- [16] EINSTEIN A. Eine neue bestimmung der moleküldimensionen[D]. Zurich: University of Zurich, 1905.
- [17] HECHT M, HARTING J, IHLE T, et al. Simulation of claylike colloids [J]. *Physical Review E*, 2005, 72: 011408.
- [18] STOKES G G. On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums[J]. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 1851, 9: 98-106.
- [19] EINSTEIN A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen[J]. *Annalen Der Physik*, 1905, 322(8): 549-560.
- [20] BOLINTINEANU D S, GREEST G S, LECHMAN J B, et al. Particle dynamics modeling methods for colloid suspensions[J]. *Computational Particle Mechanics*, 2014, 1: 321-356.
- [21] 刘振强, 卢东方, 王毓华, 等. 基于逆流重选柱斜面流场调控强化氧化锑预选效率[J]. *中国矿业大学学报*, 2023, 52(5): 1002-1013.
LIU Zhenqiang, LU Dongfang, WANG Yuhua, et al. Enhancing pre-concentration efficiency of antimony oxide by controlling the inclined flow of reflux classifier[J]. *Journal of China University of Mining & Technology*, 2023, 52(5): 1002-1013.
- [22] 王陆军, 闵凡飞, NGUYEN A V, 等. P(AM-DM-DAAC)设计合成及其对微细高岭石颗粒絮凝性能研究[J]. *中国矿业大学学报*, 2025, 54(2): 458-470.
WANG Lujun, MIN Fanfei, NGUYEN A V, et al. Study on the design and synthesis of P(AM-DM-DAAC) and its flocculation properties on microfine kaolinite particles [J]. *Journal of China University of Mining & Technology*, 2025, 54(2): 458-470.
- [23] 谢 佩, 王飞旺, 唐冬冬, 等. 数值模拟技术在磁选领域的应用研究进展[J]. *有色金属(选矿部分)*, 2023(6): 9-18.
XIE Pei, WANG Feiwang, TANG Dongdong, et al. Research progress in the application of numerical simulation in magnetic separation [J]. *Nonferrous Metals (Mineral Processing Section)*, 2023 (6): 9-18.
- [24] 肖蒙卓, 柳忠彬, 王 彪, 等. 旋振超重力流场对铜矿分选特性的影响[J]. *有色金属(选矿部分)*, 2024(4): 105-112.
XIAO Mengzhuo, LIU Zhongbin, WANG Biao, et al. Effect of rotating and vibrating high gravity flow field on separation characteristics of copper ore[J]. *Nonferrous Metals (Mineral Processing Section)*, 2024(4): 105-112.
- [25] BRADY J F, BOSSIS G. Stokesian dynamics [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1988, 20: 111-157.
- [26] ERMAK D L, MCCAMMON J A. Brownian dynamics with hydrodynamic interactions [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1978, 69 (4): 1352-1360.
- [27] BRADY J F, BOSSIS G. The rheology of concentrated suspensions of spheres in simple shear flow by numerical simulation [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1985, 155: 105-129.
- [28] MALEVANETS A, KAPRAL R. Mesoscopic model for solvent dynamics[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1999, 110(17): 8605-8613.
- [29] LAGANAPAN A M K, VIDECOQ A, BIENIA M, et al. Computation of shear viscosity of colloidal suspensions by SRD-MD[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2015, 142: 144101.
- [30] JIANG L, WATARI N, LARSON R G. How accurate are stochastic rotation dynamics simulations of polymer dynamics [J]. *Journal of Rheology*, 2013, 57(4): 1177-1194.
- [31] 周永涛. 三峰分形级配水煤浆提浓技术研究[J]. *洁净煤技术*, 2018, 24(1): 63-73.
ZHOU Yongtao. Three peak fractal grading coal water slurry concentration technology [J]. *Clean Coal Technology*, 2018, 24(1): 63-73.
- [32] 李 强, 廖长林, 侯 健, 等. 水煤浆粒度级配模型和实践的研究进展[J]. *洁净煤技术*, 2021, 27(1): 41-49.
LI Qiang, LIAO Changlin, HOU Jian, et al. Research progress on coal water slurry particle size gradation model and practice[J]. *Clean Coal Technology*, 2021, 27(1): 41-49.
- [33] PETERSEN M K, LECHMAN J B, PLIMPTON S J, et al. Mesoscale hydrodynamics via stochastic rotation dynamics: Comparison with Lennard-Jones fluid[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, 132: 174106.
- [34] GUVEN O. Application of DLVO theory on the interaction forces for rheology of coal-water slurries [J]. *Modern Concepts in Material Science*, 2020, 2(5): 000548.
- [35] 陈松降. 神东长焰煤的表/界面特征及与活性油泡粘附的作用机制[D]. 徐州: 中国矿业大学, 2020.
CHEN Songjiang. Surface/interface characteristics of Shendong Long-Flame Coal and its attachment mechanism with reactive oily bubbles[D]. Xuzhou:

- China University of Mining and Technology, 2020.
- [36] LI Q, WANG Q, HOU J, et al. Aggregating structure in coal water slurry studied by eDLVO theory and fractal dimension[J]. *Frontiers in Energy*, 2023, 17(2):306-316.
- [37] DŁUGOSZ M, ZIELIŃSKI P, TRYLSKA J. Brownian dynamics simulations on CPU and GPU with BD-BOX[J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2011, 32(12):2734-2744.
- [38] TOWNSEND A K. *The mechanics of suspensions* [D]. London: University College London, 2017.
- [39] KRAMERS H A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions [J]. *Physica*, 1940, 7:284-304.
- [40] MOONEY M. The viscosity of a concentrated suspension of spherical particles[J]. *Journal of Colloid Science*, 1951, 6(2):162-170.
- [41] WEEKS E R, WEITZ D A. Subdiffusion and the cage effect studied near the colloidal glass transition [J]. *Chemical Physics*, 2002, 284:361-367.
- [42] POSLINSKI A J, RYAN M E, GUPTA R K, et al. Rheological behavior of filled polymeric systems II. The effect of a bimodal size distribution of particulates[J]. *Journal of Rheology*, 1988, 32(8):751-771.
- [43] 张孝雨. 颗粒形态对水煤浆性能影响的研究[D]. 北京:煤炭科学研究总院, 2020.
ZHANG Xiaoyu. Study on the influence of particle morphology on the performance of coal water slurry [D]. Beijing: China Coal Research Institute, 2020.
- [44] FARRIS R J. Prediction of the viscosity of multimodal suspensions from unimodal viscosity data[J]. *Transactions of the Society of Rheology*, 1968, 12(2):281-301.
- [45] LARSON R G. *The structure and rheology of complex fluids* [M]. New York: Oxford University Press, 1998.
- [46] MWASAME P M, WAGNER N J, BERIS A N. Modeling the effects of polydispersity on the viscosity of noncolloidal hard sphere suspensions[J]. *Journal of Rheology*, 2016, 60(2):225-240.
- [47] MWASAME P M, WAGNER N J, BERIS A N. Modeling the viscosity of polydisperse suspensions: Improvements in prediction of limiting behavior[J]. *Physics of Fluids*, 2016, 28:061701.
- [48] MWASAME P M, MERTZ C A, ROSARIO E J, et al. An experimental study of multimodal glass suspension rheology to test and validate a polydisperse suspension viscosity model [J]. *Rheologica Acta*, 2017, 56:995-1006.
- [49] JARIWALA S, SONG R, HIPPI J B, et al. A polydisperse model for thixotropic elasto-viscoplastic suspensions of aggregating particles using population balances[J]. *AIChE Journal*, 2023, 69(10):e18184.

(责任编辑 沈菊全 腾)