

知识介绍

模拟颗粒流动的离散元方法及其应用

武锦涛 陈纪忠 阳永荣

(浙江大学材料与化工学院, 浙江 杭州 310027)

摘要:介绍了离散元(DEM)方法的基本原理、颗粒运动控制方程和颗粒相互作用力的数学模型。综述了 DEM 在流化床和固定床反应器,以及一些单元操作如料仓卸料过程、混合过程等中的最新应用和研究结果,表明 DEM 能够反映过程的本质机理,可以利用基本的数据模拟复杂的颗粒流动系统。最后指出了 DEM 发展中亟待解决的问题。

关键词:离散元方法;颗粒流动;数值模拟

中图分类号:TQ018

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2003)04-0056-03

Method and application of discrete element model for granular flow

WU Jin-tao, CHEN Ji-zhong, YANG Yong-rong

(College of Materials Science and Chemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou, 310027, China)

Abstract: The basic principles of DEM(discrete element model), and the equations of particle motion and models of particle-particle interaction are introduced. The new progress and applications of DEM in many fields are reviewed, including fluidized bed reactor, fixed bed reactor and some unit operations such as discharge of silo, mixing, etc. It is shown that DEM can simulate the highly complex processes on the basis of basic data, and reveal the mechanism of these processes. The main limitative factors which should be resolved in DEM development are also presented.

Key words: discrete element model; granular flow; simulation

颗粒材料是离散固体粒子的聚集,粒子的数目庞大,大小、形状、性质各不相同,是一个典型的复杂系统。颗粒流动指的是颗粒材料在外力作用和内部应力状况变化时的类似流体的运动状态。颗粒流动在自然界中广泛存在,在各种工业过程中也有广泛的应用,以化学工业为例,其产品的一半、原材料的3/4为颗粒状物质,当代化工中若干前沿发展也与颗粒学有关,例如材料、制药、生化和环境等。颗粒的流动与常见的气体、液体流动有很大的不同,人们对颗粒运动机理认识得还不深,据估计,在相关的工业部门,单由输送颗粒材料遭遇的问题所带来的工业设备利用能力的浪费就高达40%,远远达不到优化设计和节能的要求。

1 颗粒运动的模型

人们根据不同问题的研究目的和精度要求,提

出了许多的模型来描述颗粒的流动,这些模型大致可以分为两类^[1]:连续机理模型(Continuum Mechanics Method, CMM)或宏观模拟;离散元模型(Discrete Element Method, DEM)或微观(颗粒尺度)模拟。

连续机理模型的问题在于它们忽略了颗粒个体性质,而过分依赖高度简化的、规定性质的本构方程。DEM的基本思想是把整个介质看作由一系列离散的独立运动的粒子(单元)所组成,单元本身具有一定的几何(形状、大小、排列等)和物理、化学特征。单元的尺寸是微观的,其只与相邻的单元作用,其运动受经典运动方程控制,整个介质的变形和演化由各单元的运动和相互位置来描述。

1.1 DEM 基本原理

DEM模型最早是由Cundall等^[2]提出来的,颗粒的运动是由Newton第二定律和颗粒间接触的力-位移定律来描述。颗粒*i*的线性运动和转动由下面

的方程描述^[2]:

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} = F_{gi} + \sum F_{cij} \quad (1)$$

$$I_i \frac{\partial \omega_i}{\partial t} = \sum (r_i \times \sum F_{cij}) \quad (2)$$

式中: m_i 是颗粒 i 的质量, I_i 是颗粒 i 的惯量, v_i 是颗粒 i 的线速度, ω_i 是颗粒 i 的角速度, F_{gi} 是颗粒 i 所受的体积力, $\sum F_{cij}$ 是颗粒 i 与颗粒 j 的接触力, r_i 是由颗粒 i 的质心指向接触点的向量。

1.2 颗粒间的接触力

当颗粒与颗粒(或壁面)接触时发生形变,产生接触力,颗粒的接触力包含弹性应力(阻止颗粒的形变)和阻尼(耗散颗粒碰撞的能量),如图1所示。该接触力一般分解为法向和切向的分量:

$$F_{cij}^n = K_n(R_i + R_j - |l_{ij}|) - \mu_n m_c (v_{rel} \cdot \hat{n}_{ij}) \quad (3)$$

$$F_{cij}^s = -\mu_s m_c (v_{rel} \cdot \hat{t}_{ij}) - \text{sign}(\Delta s) \min(K_s |\Delta s|, \mu |F_{cij}^n|) \quad (4)$$

式中: F_{cij}^n 是颗粒接触力的法向分量, F_{cij}^s 是切向分量, K_n 是法向弹性系数, K_s 是切向弹性系数, R_i 是颗粒 i 的半径, R_j 是颗粒 j 的半径, $|l_{ij}|$ 是颗粒 i 和 j 中心的距离, m_c 是有效质量 $m_c = m_i m_j / (m_i + m_j)$, v_{rel} 是两颗粒的相对速度, μ 是滑动摩擦系数, μ_n 是法向阻尼系数, μ_s 是切向阻尼系数, \hat{n}_{ij} 是法向单位向量, \hat{t}_{ij} 是切向单位向量。

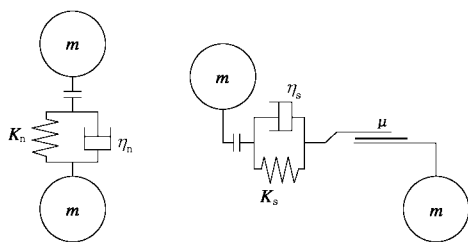


图1 颗粒接触力

根据研究对象和目的的不同,采用的颗粒接触力模型也就有所不同,一般常见的有 Hooke 定律、Hertz 理论等,主要是式(3)、式(4)中的 K_n 、 K_s 等的计算方法不同。Langston 等^[3]利用连续势能来描述颗粒的相互作用力,可以确保 DEM 算法在比较大的时间步长情况下也有很好的稳定性。Zhang 等^[4-5]改进了切向应力的模型,在他们的模型中根据切向应力的变化情况来计算 K_s 。另外,Kafui 等^[6]在其文章中介绍了 JKR 模型,它是将表面能引入到 Hertz 模型中。

2 DEM 模型在化工中的应用

2.1 料仓卸料过程的模拟

对于漏斗型料仓卸料过程的模拟,人们已经做了许多研究,从简单的几何形状流场到复杂的工业规模的流场,从二维到三维,从球形均一尺寸颗粒到非球形有一定粒径分布的情况都有所涉及。Yang 等^[7]利用 DEM 模型考察了二维料仓加料和卸料的过程,通过安置圆锥形的内件可有效的改善颗粒的流动状态。Chou 等^[8]利用 DEM 模拟了“百叶窗”形状流场内颗粒的流动情况,考察了颗粒流动的形态、速度场和死区的发展,与试验的结果吻合得比较好。Paul 等^[9]对工业尺寸的料仓进行了三维的模拟,并对非球形的颗粒流动进行了研究,他们发现颗粒的形状对流动有很大影响,将球形颗粒换成椭球形颗粒不仅流速减慢了 29%,而且颗粒的流动形态也由质量流变成了漏斗流。以上的研究都没有考虑颗粒物料物性对流动的影响,徐泳等^[10]利用 DEM 方法模拟了无黏软颗粒和黏性硬颗粒在平底料仓的卸料过程,研究了物料弹性模量和表面黏性对卸料过程的影响,他们发现颗粒的弹性模量对卸料中接触力学、运动行为以及卸料流速影响均较小,但表面黏性对卸料有迟滞作用。

2.2 颗粒混合过程的模拟

在化工生产过程中,颗粒的混合、分离是一个很常见而且重要的过程,但是对颗粒物料混合的机理认识得还不是充分,通过对颗粒流动的计算模拟,可以更好地对这些过程进行研究。Cleary^[11-12]提出了一个利用颗粒分布来表征颗粒混合程度的方法,通过 DEM 方法模拟了铲斗挖土、转筒内的混合以及离心研磨机的加料过程,发现颗粒的物性和形状对混合的影响很大。Kuo 等^[13]将线性弹性、减震器阻尼和滑动摩擦模型应用到颗粒间以及颗粒和壁面间的接触力中,模拟 V-型混合器中颗粒的混合过程,分析颗粒接触力模型中各参数对混合过程的影响,通过与试验结果的比较,得到了最佳的模型参数。Yasunobu 等^[14]利用 DEM 模拟了螺旋带混合器内颗粒的三维流动,结果发现颗粒在叶片区和中心区分别向上、向下流动时轴向混合得很差,另外床高对颗粒的混合和循环影响很大。Stewart 等^[15]测定了搅拌混合器中颗粒的流动,同时通过 DEM 获得混合器内三维的数据,二者吻合得很好,而 DEM 可以获得混合器内部更多细节的数据,可以用于指导混合器的设计和操作。Rhodes 等^[16]以示踪颗粒的浓度变化为混合指标,考察了气-固流化床中颗粒的混合,通过 DEM 方法获得混合速率和平衡态下的混合度等参数,分析了气速和颗粒物性对混合的影响。

2.3 颗粒在流化床内的流动

Yasunobu 等^[17]通过二维流化床作 DEM 模拟,分别分析了乙烯和丙烯的气相聚合过程,发现由于流场的不均匀剪切以及由于气泡的运动,诱发产生了许多小尺度的气固涡流,而涡流中心区域的颗粒传热效率最差,由于聚合反应的强放热特点,导致在涡流中心形成热点。Kafui 等^[18]将连续的流体相和离散的颗粒相耦合起来计算,二者间的联系采用了 2 种方法:压力梯度力(PGF)模型和基于流体密度的浮力(FBD)模型,通过模拟表明,PGF 模型与试验结果和经验关联式吻合得更好。Kenya 等^[19]通过 DEM 模拟二维流化床,考察了黏性细颗粒的聚并和大颗粒的破碎,模拟结果证实了在气泡生成区颗粒发生聚并,在气泡的顶部聚并的颗粒发生破碎,模拟得到的聚并尺寸与 I-H 模型吻合。

2.4 DEM 在固定床中的应用

Zhang 等^[20]模拟了固定床填料添加的过程,发现下落高度、阻尼系数越大,沉降度、摩擦系数越小,填料堆积密度、径向分布函数和配位数就越大,他们还给出了一个平均配位数和填料堆积密度之间的关联式。Matuttis 等^[21]应用 DEM 考察了颗粒静态堆积时颗粒尺度的应力分布,发现当床底不平整时球形颗粒规则堆积也会产生架桥和应力链,换成不平整颗粒时应力状况也没有明显改变,另外颗粒的堆积过程对应力分布有明显影响。

2.5 其他方面的应用

Yang 等^[22]应用 DEM 模拟了振动床输送颗粒的问题,发现振动加速度对颗粒分布影响较小,而振幅对其影响很大,振动加速度和振幅对颗粒温度影响都很大,质量流率随床速呈指数变化。Ting 等^[23]模拟了盐粒在气相输送系统中的磨损,Ghadiri 磨损模型被引入到 DEM 中用于定义颗粒尺寸的变化,模型预测的磨损速率以及粒径分布与试验值吻合。

3 展望

DEM 方法是在颗粒尺度上考察各种量的变化,能够更好地反映一些过程的本质,因此有了更广泛的应用。但是应该同时看到在 DEM 的发展过程中还存在着许多困难,比如复杂的数据结构、分格检索、相邻块体的确定和块体接触的产生或取消的判定等,都将消耗大量微机内存和 CPU 时间,有时会导致该法应用的失败。另外,描述多颗粒相互作用

和非规则颗粒的新理论、模型和方法也亟待研究。这些问题的解决,需要各个学科共同努力。

参考文献

- [1] Bernhard P, Algis D. [J]. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2002, 191:1983 - 2007.
- [2] Cundall P A, Strack O D L. [J]. *Geotechnique*, 1979, 29:47 - 65.
- [3] Langston P A, Tuzun U, Heyes D M. [J]. *Chem Eng Sci*, 1994, 49(8): 1259 - 1275.
- [4] Vu-Quoc L, Zhang X, Walton O R. [J]. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2000(187):483 - 528.
- [5] Xiang Zhang, Vu-Quoc L. [J]. *Mechanics of Materials*, 2000, (32):115 - 129.
- [6] Kafui K D, Thornton C, Adams M J. [J]. *Chem Eng Sci*, 2002, (57): 2395 - 2410.
- [7] Shie-Chen Yang, Shu-San Hsiau. [J]. *Powder Technology*, 2001, (120):224 - 255.
- [8] Chou C S, Tseng C Y, Smid J, et al. [J]. *Powder Technology*, 2000, (110):239 - 245.
- [9] Cleary P W, Sawley M L. [J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2002, (26):89 - 111.
- [10] 徐泳, Kafui K D. [J]. *农业工程学报*, 1999, 15(3):65 - 69.
- [11] Cleary P W, Metcalfe G, Liffman K. [J]. *Applied Mathematical Modelling*, 1998, (22):995 - 1008.
- [12] Cleary P W. [J]. *Powder Technology*, 2000, 109:83 - 104.
- [13] Kuo J P, Knight P C, Parker D J, et al. [J]. *Chemical Engineering Science*, 2002, (57):3621 - 3638.
- [14] Yasunobu Kaneko, Takeo Shiojima, Masayuki Horio. [J]. *Powder Technology*, 2000, (108):55 - 64.
- [15] Stewart R L, Bridgwater J, Zhou Y C, et al. [J]. *Chemical Engineering Science*, 2001, (56):5457 - 5471.
- [16] Rhodes M J, Wang X S, Nguyen M, et al. [J]. *Chem Eng Sci*, 2001, (56):2859 - 2866.
- [17] Yasunobu Kaneko, Takeo Shiojima, Masayuki Horio. [J]. *Chemical Engineering Science*, 1999, (54):5809 - 5821.
- [18] Kafui K D, Thornton C, Adams M J. [J]. *Chem Eng Sci*, 2002, (57): 2395 - 2410.
- [19] Kuwagi Kenya, Horio Masayuki. [J]. *Chemical Engineering Science*, 2002, 57(22 - 23):4737 - 4744.
- [20] Zhang Z P, Liu L F, Yuan Y D, et al. [J]. *Powder Technology*, 2001, 116:23 - 32.
- [21] Matuttis H G, Luding S, Herrmann H J. [J]. *Powder Technology*, 2000, 109:278 - 292.
- [22] Yang S C, Hsiau S S. [J]. *Chemical Engineering Science*, 2000, (55): 3627 - 3637.
- [23] Han Ting, Avi L, Haim K. [J]. *Powder Technology*, 2003, 129(8):92 - 100. ■