

А.Я. Карвацкий, д-р техн. наук, Т.В. Лазарев (Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»). E-mail: anton@rst.kiev.ru

Оценка метода дискретного элемента для прогнозирования поведения сыпучих сред на примере нефтяного кокса

Сыпучие среды применяются в химической, металлургической, нефтеперерабатывающей и других отраслях промышленности. Нефтяной кокс — важный компонент электродных и металлургических производств. Для получения и переработки сыпучих материалов используют разнообразные бункеры, транспортеры, смесители, классификаторы, мельницы и т. д. В этих агрегатах сыпучая среда находится в статическом или в динамическом состоянии. Кроме этого, сыпучие материалы подвергаются различным видам обработки, например высокими температурами (нагревание электрической энергией или теплотой сгорания топлива).

Для моделирования поведения сыпучих материалов существует ряд различных математических постановок. В частности, одной из наиболее близких к представлениям механики сыпучей среды постановок является дискретное описание движения каждой отдельной частицы с учетом ее взаимодействия с соседними частицами. При современном уровне вычислительной техники и возможности параллельных вычислений такой подход весьма эффективен. Метод получил название «Метод молекулярной динамики» (Molecular dynamics) или «Метод дискретного элемента» (МДЭ) (Discrete element method) [1].

В основе МДЭ — баланс механического движения частицы сыпучего материала [2]:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = m_i \mathbf{b} + \sum_{j=1}^k \mathbf{F}_{ij}; \\ I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=1}^k (\mathbf{T}_{ij} + \mathbf{M}_{ij}), \end{cases} \quad (1)$$

где m_i — масса частицы; i — индекс частицы, относительно которой рассматривается система уравнений (1); \mathbf{v}_i — вектор линейной скорости центра масс; I_i — момент инерции; $\boldsymbol{\omega}_i$ — вектор угловой скорости; \mathbf{b} — вектор массовой силы; \mathbf{F}_{ij} — внешняя сила, действующая на частицу i через контакт с частицей j ; j — индекс частицы, находящейся в контакте с частицей i ; k — число частиц в контакте с частицей i ; \mathbf{T}_{ij} — внешний крутящий момент, связанный с контактным взаимодействием частиц i и j ; \mathbf{M}_{ij} — момент сопротивления качению.

В МДЭ применяется допущение, что каждая частица представляет собой сферу радиусом R_i . Схе-

матически взаимодействие между частицами i и j представлено на рис. 1 (где $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j$ — векторы скорости центров масс частиц; $\boldsymbol{\omega}_i, \boldsymbol{\omega}_j$ — векторы угловой скорости; $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ — радиус-векторы; \mathbf{n} — вектор нормали вдоль линии, соединяющей центры частиц i и j).

Для описания контактного взаимодействия между частицами в МДЭ применяются различные постановки. Наиболее часто используется модель Герца — Миндлина [3], в которой предполагается, что частицы при контакте не деформируются, а перекрывают друг друга на величину ξ , образуя пятно контакта. Суммарная сила взаимодействия между двумя частицами состоит из нормальной и тангенциальной составляющих $\mathbf{F}_{n,ij}, \mathbf{F}_{t,ij}$ [1–6]:

$$\mathbf{F}_{n,ij} = k_n \xi_n \mathbf{n} - \gamma_n \mathbf{v}_n; \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_{t,ij} = -\min\{k_t \xi_t \mathbf{t} - \gamma_t \mathbf{v}_t; \mu_s \mathbf{F}_n\}, \quad (3)$$

где $k_n = (4/3)E^* \sqrt{R^* \xi_n}$ — коэффициент упругости при контактном взаимодействии; $\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j}$ —

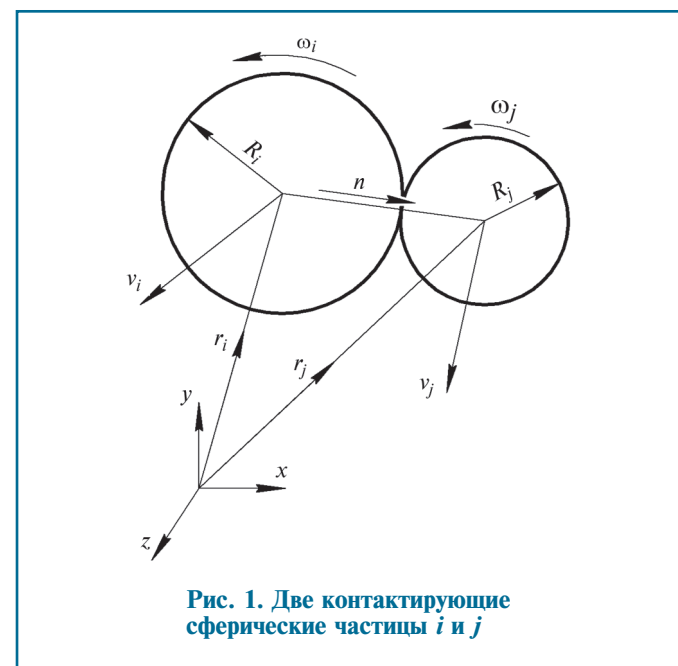


Рис. 1. Две контактирующие сферические частицы i и j

эффективный модуль упругости; E_i, E_j — модуль упругости при одноосном растяжении/сжатии, ν_i, ν_j — коэффициент Пуассона; $1/R^* = 1/R_i + 1/R_j$ — приведенный радиус частиц; $\xi_n = R_i + R_j - \langle \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, \mathbf{n} \rangle$ — относительное нормальное перекрытие частиц при контактном взаимодействии; $\gamma_n = -2\sqrt{5}/3\beta\sqrt{E^* m^*} \sqrt[4]{R^* \xi_n} \geq 0$ — коэффициент демпфирования в нормальном направлении к контакту; $\beta = \ln e_{ij} / \sqrt{\ln^2 e_{ij} + \pi^2}$ — безразмерный коэффициент демпфирования; e_{ij} — коэффициент реституции между материалами частиц i и j ; $1/m^* = 1/m_i + 1/m_j$ — приведенная масса; $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j + (R_i\omega_i + R_j\omega_j) \times \mathbf{n}$ — относительная скорость в точке контакта частиц; $\mathbf{v}_n = \langle \mathbf{v}_{ij}, \mathbf{n} \rangle \mathbf{n}$ — нормальная составляющая \mathbf{v}_{ij} ; $\mathbf{v}_t = (\mathbf{n} \times \mathbf{v}_{ij}) \times \mathbf{n}$ — тангенциальная составляющая \mathbf{v}_{ij} ; μ_s — коэффициент трения скольжения; $\xi_t = \int_{t_0}^t |(\mathbf{n} \times \mathbf{v}_{ij}) \times \mathbf{n}| dt$ — относительное

тангенциальное перекрытие частиц, которое началось в момент времени t_0 и длится до данного момента времени t ; $\mathbf{t} = \mathbf{v}_t / |\mathbf{v}_t|$ — единичный тангенциальный вектор; $k_t = 8G^* \sqrt{R^* \xi_n}$ — коэффициент

сдвига при контактном взаимодействии; $\frac{1}{G^*} = \frac{2(2 + \nu_i)(1 - \nu_i)}{E_i} + \frac{2(2 + \nu_j)(1 - \nu_j)}{E_j}$ — эффектив-

ный модуль сдвига; $\gamma_t = -4\sqrt{5}/3\beta\sqrt{G^* m^*} \sqrt[4]{R^* \xi_n} \geq 0$ — коэффициент демпфирования в тангенциальном направлении к контакту.

Крутящий момент, действующий на частицу, создается тангенциальной силой $\mathbf{F}_{t,ij}$ и определяется выражением

$$\mathbf{T}_{ij} = (R_i \mathbf{n}) \times \mathbf{F}_{t,ij} \quad (4)$$

При относительном движении частиц также возникает момент сопротивления качению \mathbf{M}_{ij} [4, 5]

$$\mathbf{M}_{ij} = -\mu_r k_n \xi_n R^* \frac{\omega_i}{|\omega_i|}, \quad (5)$$

где μ_r — коэффициент трения качения.

Для однозначности системы уравнений (1) в качестве начальных условий примем координаты всех частиц системы и их начальные скорости, а в качестве граничных условий — взаимодействие с границами расчетной области.

Рассчитывая силы взаимодействия (2)–(5) и интегрируя по времени систему уравнений (1), находим скорости и перемещения каждой частицы системы [2].

Экспериментальные исследования

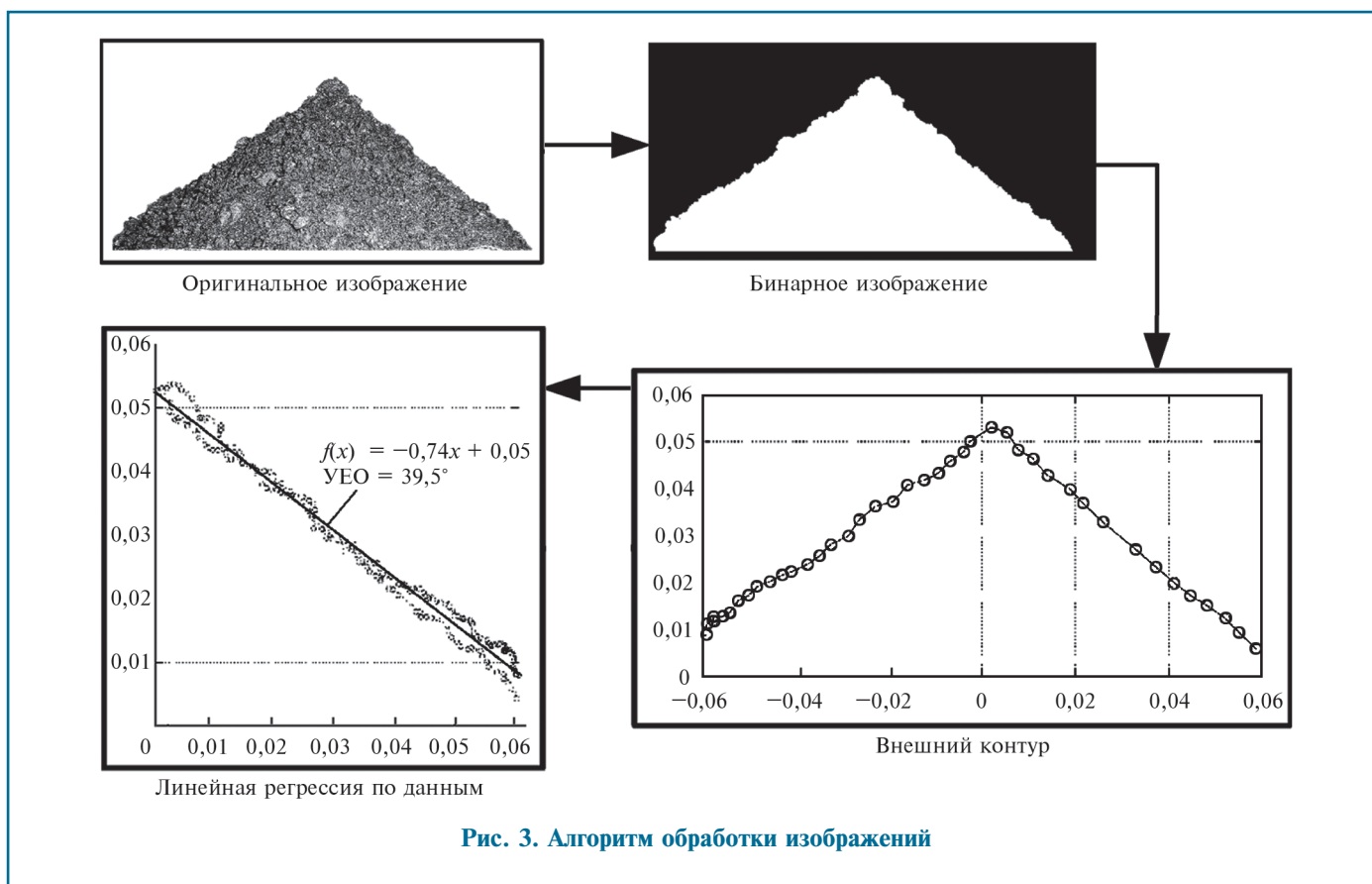
Формирование угла естественного откоса (УЕО) — одна из отличительных характеристик сыпучих материалов. Данная величина определяется как угол между свободной поверхностью и горизонтальной плоскостью основания горки сыпучего материала. УЕО используется как наиболее простой и удобный для измерения параметр, характеризующий поведение порошков и сыпучих материалов. Величина УЕО зависит от многих факторов: сил трения, возникающих при перемещении частиц материала относительно друг друга; сил сцепления между частицами; размера и формы частиц; гранулометрического состава; поверхности, на которой формируется горка, и др.

Формирование УЕО для его последующего измерения может быть проведено различными способами [7]. Наиболее распространенные — высыпание материала из воронки на горизонтальную поверхность или на цилиндрическое основание; опорожнение прямоугольного короба с плоским дном; скольжение гранул по наклонной поверхности; перемешивание сыпучего материала в горизонтальном вращающемся барабане. Измерения УЕО часто дают различные результаты, поэтому рекомендуется вместе с полученными данными приводить описание метода измерения.

Метод измерения УЕО с учетом неправильной конической формы горки материала [8]. Полюый цилиндр устанавливают на круглое основание, внутренний диаметр цилиндра и диаметр основания — эквивалентны. Заполненный материал цилиндр поднимают с постоянной скоростью 5 мм/с, и частицы образуют горку на круглом основании; проводят фотосъемку горки с восьми сторон при повороте основания на 22,5°. При таком подходе может быть учтена сложная, неконическая форма горки материала. Полученные снимки обрабатывают специализированным программным обеспечением и определяют плоскую проекцию геометрической формы горки. Результат измерений УЕО — угол при основании равнобедренного треугольника, площадь которого эквивалентна площади проекции горки сыпучего материала.

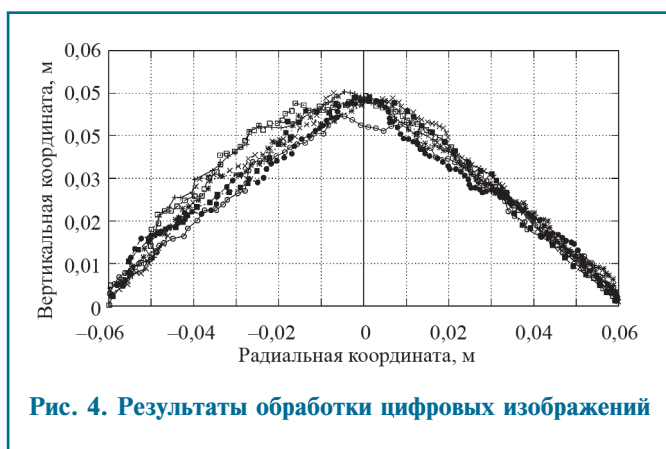


Рис. 2. Схема проведения измерений УЕО



Для апробации МДЭ провели ряд натурных измерений УЕО. В качестве сыпучего материала использовали нефтяной кокс истинной плотностью 2120 кг/м^3 и гранулометрическим составом 1...13 мм. Схема проведения экспериментов приведена на **рис. 2**.

На неподвижную круглую пластину диаметром 120 мм установили полый цилиндр диаметром 100 мм и высотой 100 мм, который заполнили сыпучим материалом. Далее цилиндр резко подняли, материал свободно осыпался, сформировав горку; провели фотосъемку с обработкой снимков на компьютере. Схематический алгоритм обработки



изображений для определения координат свободной границы между сыпучей средой и воздухом приведен на **рис. 3**.

Цифровые снимки привели к одному масштабу и одной системе координат с преобразованием в черно-белое бинарное изображение. Используя алгоритмы обработки цифровой графики, определили точки контакта белой и черной областей, которые приняли за границу кокс/воздух. УЕО определили как арктангенс коэффициента при аргументе уравнения линейной регрессии по данным цифровых снимков. Результаты обработки цифровых изображений приведены на **рис. 4**.

Расчеты УЕО по проведенной серии натурных измерений показали, что значение УЕО для нефтяного кокса фракционным составом 1...13 мм при измерении описанным способом составляет $(38,9 \pm 1,9)^\circ$.

Численный анализ с применением МДЭ

Для моделирования процесса формирования горки сыпучего материала использовали свободный открытый программный код LIGGGHTS [9]. Схема проведения численных экспериментов аналогична натурным. Начальные условия — упакованные под действием сил тяжести гранулы в объеме, ограниченном цилиндрической стенкой диаметром 100 мм, снизу — горизонтальной круглой



Таблица 1

Параметр	Значение
Истинная плотность, кг/м ³	2120
Эффективный модуль упругости при одноосном растяжении/сжатии, МПа	$5,0 \cdot 10^6$
Эффективный коэффициент Пуассона	0,3
Коэффициент реституции (восстановления после взаимодействия)	0,1
Диаметр частиц, мм	1...13
Число частиц	262 560

Таблица 2

μ_s	μ_r	УЕО, град	Высота горки, м	Число частиц в горке, шт
0,3	0,3	27,04	0,031	57 742
0,4	0,4	35,14	0,037	71 908
0,5	0,5	36,60	0,042	81 566
0,6	0,6	37,95	0,046	88 860
0,7	0,7	46,06	0,047	96 301
0,8	0,8	45,39	0,050	101 885

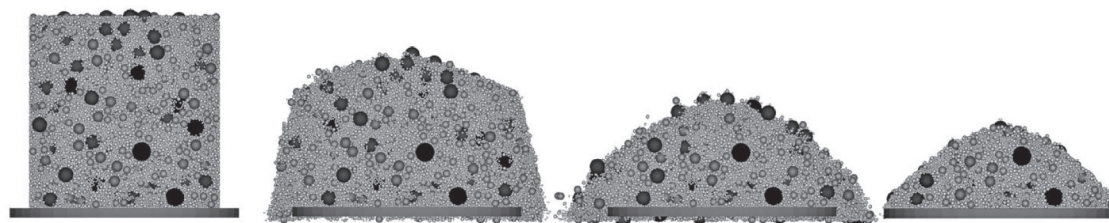


Рис. 5. Этапы моделирования формирования горки сыпучего материала методом МДЭ

пластиной диаметром 120 мм. Физические свойства расчетного материала приведены в табл. 1.

В начале эксперимента скорость системы — нулевая. Свободное движение частиц началось после удаления цилиндрической стенки. В процессе движения частиц сформировалась горка сыпучего материала с углом естественного откоса (рис. 5). Полученную информацию обработали с использованием алгоритма (см. рис. 2).

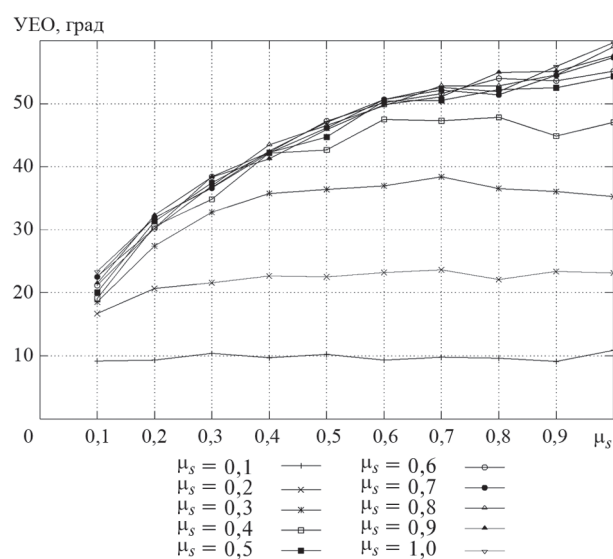
Проведенный численный анализ показал, что на УЕО, рассчитанный методом МДЭ, существенно влияют эффективные значения коэффициентов трения скольжения μ_s и качения μ_r . Результаты численных экспериментов при различных значениях μ_s и μ_r приведены в табл. 2.

Количество частиц в расчетной системе ограничено только доступными вычислительными ресурсами. Так, численное моделирование движения 262 560 частиц в течение 2 с (шаг интегрирования по времени 10^{-6} с) на пользовательском компьютере (Intel Core i5-760, 4 ядра 3,6 GHz) занимает порядка 19...20 ч расчетного времени. Следовательно, проведение численного анализа динамики сыпучих материалов промышленного масштаба затруднительно.

Один из способов упрощения задачи — замена реального гранулометрического состава сыпучего материала на подобный с меньшим разбросом размеров частиц или с частицами эквивалентного диаметра. Проведена серия численных экспериментов по формированию УЕО системой из 12315 частиц

эквивалентным диаметром 4 мм при различных значениях μ_s и μ_r (от 0,1 до 1,0). При этом продолжительность каждого эксперимента сократилась до 0,8...0,9 ч. Результаты численного анализа представлены на рис. 6.

Проведенные расчеты показали, что применение эффективных значений коэффициентов тре-

Рис. 6. Расчетные значения УЕО при различных значениях μ_s и μ_r 

ния скольжения и качения дает возможность моделировать УЕО для различных материалов с различными гранулометрическим составом и формой гранул. При больших значениях коэффициентов μ_s и μ_r формируется УЕО, характерный для порошковых или влажных материалов.

Выводы

УЕО — одно из характерных свойств сыпучих сред, которое может быть использовано как параметр для верификации численного метода МДЭ при моделировании поведения сыпучего материала. Результаты численных экспериментов с применением свободного открытого кода LIGGGHTS показали, что в системе, состоящей из частиц сферической формы диаметром 1...13 мм, формируется УЕО, наиболее соответствующий экспериментально измеренному для нефтяного кокса (рис. 7, а), при значениях эффективных коэффициентов трения скольжения и качения $\mu_s = 0,6$, $\mu_r = 0,6$ (см. рис. 7, б). Проведенный численный анализ системы из эквивалентных сфер диаметром 4 мм показал тенденции в поведении системы частиц в зависимости от значений коэффициентов μ_s и μ_r ; при значениях $\mu_s = 0,6$ и $\mu_r = 0,3$ (см. рис. 7, в) рассчитанный УЕО соответствует измеренному экспериментально.

Сопоставление данных численного анализа с экспериментальными подтверждает возможность применения метода МДЭ для решения задач, связанных с поведением сыпучих сред.

Список литературы

1. Pöschel T. Computational granular dynamics models and algorithms. Berlin Heidelberg New York, Springer, 2005. 2. K. Kesava Rao., Prabhu R. Nott. An Introduction to Granular Flow: New York, Cambridge University Press, 2008. 3. Makse H.A., Gland N., Johnson D.L., Schwartz L. Granular packings: Nonlinear elasticity, sound propagation, and collective relaxation dynamics // Phys. Rev. E. 2004. V. 70. P. 061302. 4. Zhou Y.C., Wright B.D., Yang R.Y., Xu B.H., Yu A.B. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 1999. V. 269 (2–4). P. 536–553. 5. Jun Ai, Jian-Fei Chen, Rotter J.M., Jin Y. O. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations // Powder Technology. 2011. 206(3).

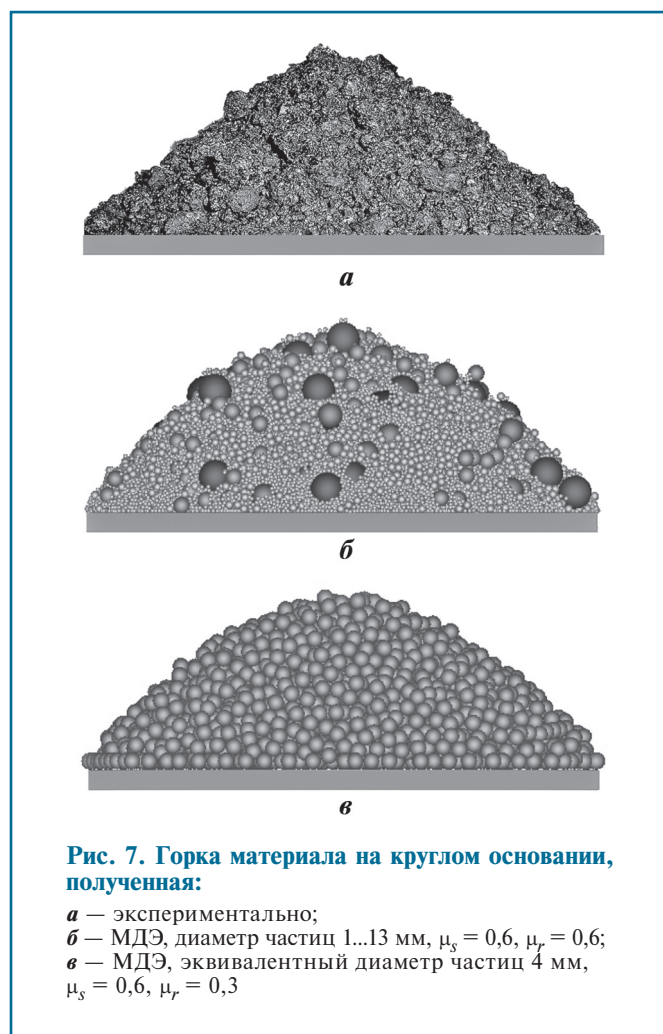


Рис. 7. Горка материала на круглом основании, полученная:

а — экспериментально;
 б — МДЭ, диаметр частиц 1...13 мм, $\mu_s = 0,6$, $\mu_r = 0,6$;
 в — МДЭ, эквивалентный диаметр частиц 4 мм, $\mu_s = 0,6$, $\mu_r = 0,3$

P. 269–282. 6. Ram Chand, Murad Ali Khaskheli, Abdul Qadir, Baoliang Ge, Qingfan Shi. Discrete particle simulation of radial segregation in horizontally rotating drum: Effects of drum-length and non-rotating end-plates // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2012. V. 391 (20). P. 4590–4596. 7. Iteleji K.E., Zhou B. The angle of repose of bulk corn stover particles // Powder Technology. 2008. V. 187 (2). P. 110–118. 8. Lumay G., Boschini F., Traina K. et al. Measuring the flowing properties of powders and grains // Powder Technology. 2012. V. 224. P. 19–27. 9. LIGGGHTS Open Source Discrete Element Method Particle Simulation Code. <http://www.liggghts.com>

Вниманию авторов

Если в ваших статьях приводятся заимствованные из других источников материалы, защищенные авторским правом, — иллюстрации, схемы, фотографии, воспроизведенные данные, расширенные цитаты, и т.п., то вы обязаны предоставить в Редакцию письменное разрешение на использование этих материалов от обладателей авторского права на них.

В особенности это касается зарубежных источников.

Вся юридическая ответственность за неправомерное использование таких материалов возлагается на авторов.

Редакция