

薄滚筒内二元湿颗粒体系混合行为的离散单元模拟研究*

高红利¹⁾²⁾ 陈友川¹⁾ 赵永志^{1)†} 郑津洋¹⁾

1) (浙江大学化学工程与生物工程学系, 杭州 310027)

2) (广东石油化工学院机电工程学院, 茂名 525000)

(2011年1月5日收到; 2011年8月8日收到修改稿)

采用所建立的四方程线性弹性-阻尼离散单元模型,同时考虑了液桥力的作用,对填充量为40%、含液量为3%的水平薄滚筒内S型(不同直径颗粒)二元湿颗粒体系混合过程进行了数值模拟,并与同等操作条件下不含液的干颗粒体系的混合行为进行了比较,分析了液体对颗粒体系混合行为的影响. 同时还将计算结果与文献中的实验结果进行了比较. 结果表明,由于湿颗粒间液桥力的牵引作用使不同性质的颗粒不易分离,使部分颗粒聚结成团,减弱了离析作用的影响,使得滚筒内湿颗粒的混合程度高于相同条件下的干颗粒体系,且接触力的分布较干颗粒体系更加均匀. 通过对混合过程的模拟,直观地反映了混合过程中颗粒的微观运动特性和内部的力学结构,为研究湿颗粒体系混合过程机理提供了依据和参考.

关键词: 湿颗粒体系, 混合, 分离, 离散单元法

PACS: 45.70.-n, 05.45.-a, 83.10.Rs

1. 引言

颗粒物质是自然界和很多工业过程中常见的一种物质形态. 不同性质的颗粒组成的颗粒体系在外力作用下混合时会伴随着分离和分层(又称离析),这是颗粒体系的一个重要特性. 常见的分离和分层有水平机械振动导致的分层、垂直机械振动导致的分离和分层、雪崩类分离与分层以及滚筒内的分离和分层^[1].

利用滚筒对两种不同性质的颗粒进行混合是很多工业(如食品工业、制药工业、化工工业等)常用的生产工艺,因此对滚筒内颗粒的混合和分离过程与机理的研究有很重要的理论意义和实用价值,也是近年来颗粒体系研究的热点之一. 目前,针对滚筒内干颗粒体系的混合和分离模式的研究有很多^[2-6],但自然界和很多工业过程中普遍存在着由固体、液体和气体三相组成的湿颗粒体系,由于颗粒间存在液桥力的作用,使得它与干颗粒体系的力学行为有很大的区别,并且液桥的存在

会对颗粒的混合和分离模式产生很大影响^[7-13]. 目前对湿颗粒体系混合和分离过程的研究相对较少,特别是有关湿颗粒体系微观作用机理的研究更少,因此有必要对其进行系统的研究以提高对其作用机理的认识.

通常情况下,对颗粒体系的研究主要采用实验方法,直到近十几年随着数值计算方法的发展,尤其是离散单元法(DEM)成功地应用于颗粒体系的研究,为人们研究颗粒体系的微观力学行为和运动规律提供了一种有效的手段. 通过对颗粒体系混合和分离过程的数值模拟^[9,12,13],可以直观地反映混合和分离过程中颗粒内部的微观运动特性和规律. 本文在以往研究工作^[1,14,15]的基础上,以干颗粒体系模型为基础,进一步引入了液桥力,建立了更加完善的计算模型. 利用所建立的模型和自行编制的计算程序,对含液量为3%的湿颗粒体系以及不含液的干颗粒体系在水平薄滚筒内的混合过程进行了模拟研究,并对其中的不同作用机理进行了分析. 这为进一步认识和控制粉体混合/分离过程提供了有效的理论依据.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号:2007CB209706)和浙江省自然科学基金(批准号:Y1100636)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: yzzhao@zju.edu.cn

2. 计算模型

离散单元模型把每一个单独的颗粒作为一个刚体,并与周围的颗粒发生碰撞运动. 对于球形颗粒 i ,在运动过程中主要受自身重力 $m_i g$ 和邻近颗粒 j 对其的法向碰撞接触力 $F_{n,ij}$ 及切向碰撞接触力 $F_{t,ij}$ 的作用,含液颗粒体系中,球形颗粒 i 还可能与其邻近颗粒 j 之间形成液桥,所以颗粒 i 除了受到以上三种力的作用外,还受到液桥力 $F_{l,ij}$ 的作用. 根据牛顿第二定律,球形颗粒 i 的平动运动方程为

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = m_i g + \sum_{j=1}^{N_i} (F_{n,ij} + F_{t,ij}) + \sum_{j=1}^{M_i} F_{l,ij}. \quad (1)$$

此外,颗粒 i 还受到切向力形成的力矩 $T_{t,ij}$ 和滚动摩擦力矩 $T_{r,ij}$ 的作用,即

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} (T_{t,ij} + T_{r,ij}). \quad (2)$$

滚动摩擦力矩 $T_{r,ij}$ 由法向滚动摩擦力矩 $T_{r,n,ij}$ 和切向滚动摩擦力矩 $T_{r,t,ij}$ 两部分组成,即

$$T_{r,ij} = T_{r,n,ij} + T_{r,t,ij}. \quad (3)$$

在上述力和力矩的作用下,颗粒发生移动和滚动. (1), (2) 式中 m_i 和 I_i 分别表示颗粒 i 的质量和转动惯量, N_i 表示与颗粒 i 所接触的颗粒总数, M_i 表示与颗粒 i 通过液桥相连的颗粒总数, v 表示移动

速度, ω 表示角速度, t 表示时间, g 表示重力加速度.

2.1. 接触力模型

当两个球形颗粒发生碰撞时,首先在接触点处发生弹性变形,颗粒在前进方向受到阻力. 该阻力的大小与法向变形位移、颗粒硬度成正比,达到最大位移变形时,颗粒停止运动后沿原来运动的方向反弹,碰撞后颗粒的动能会有一定的损失,损失的大小与颗粒的弹性阻尼系数及颗粒间的相对速度有关. 当两个颗粒发生偏心碰撞时,相撞点的接触力可分解为法向分力和切向分力,同时颗粒间还存在着滚动摩擦力矩,也可分解为法向分力矩和切向分力矩两部分. 在本文中,离散单元模型考虑了法向接触力、切向接触力(包括了滑动摩擦力)以及法向滚动摩擦力矩和切向滚动摩擦力矩,将颗粒简化为刚性球体,碰撞时用颗粒间的叠加量表示弹性变形量,每种作用力和力矩都可以简化为一个弹簧、一个阻尼以及一个滑动器,如图 1 所示. 该模型可用四组弹性-阻尼方程来描述,可称为四方程线性弹性阻尼模型,是三方程线性弹性阻尼模型^[14]的一种改进,法向接触力与法向变形成正比,切向力和滚动摩擦力矩(含法向和切向)分别与切向变形和扭曲变形成正比,但其最大值分别受到滑动摩擦系数和滚动摩擦系数(含法向和切向)与法向力乘积的限制.

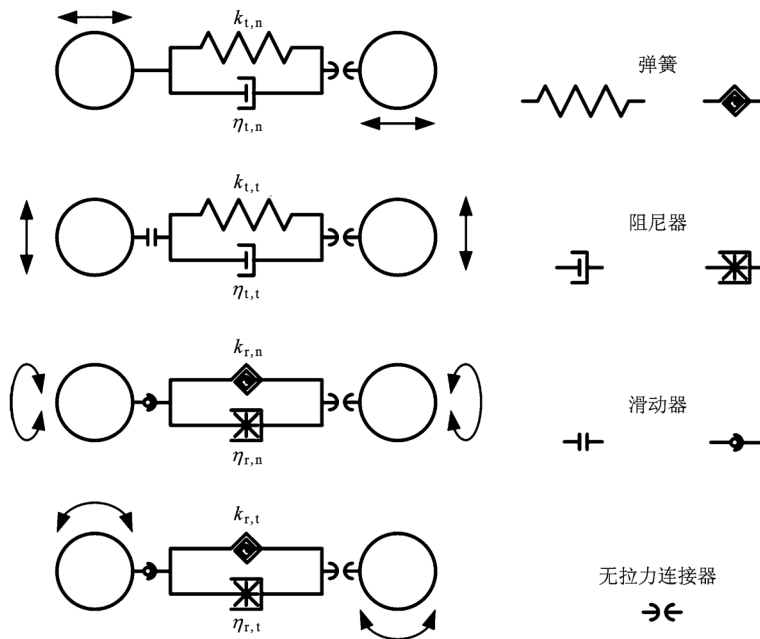


图 1 四方程线性弹性阻尼模型

2.2. 液桥力模型

本文在文献[16,17]的基础上发展建立了一种较完善的数学模型(图2),模型中假设液桥的侧面是一段圆弧绕中心轴旋转而形成的,并据此推导出颗粒不等径、固液接触角不为零且颗粒之间存在距离时的液桥力计算公式. 颗粒*i*和*j*的半径分别为*r_i*和*r_j*,固液接触角为*θ*,两颗粒之间的距离为*d_{ij}*,液桥体积为*V_{ij}*,液桥力*F_{1,ij}*的计算公式如下:

$$F_{1,ij} = \pi\gamma\rho_{2,ij}\left(\frac{\rho_{1,ij} + \rho_{2,ij}}{\rho_{1,ij}}\right) + \frac{3}{2}\pi\mu v_{n,ij} \times \frac{\rho_{2,ij}^4}{d_{ij}\left[d_{ij} + \frac{\rho_{2,ij}^2(r_i + r_j)}{2r_i r_j}\right]^2}, \quad (4)$$

其中*γ*为液体表面张力;*ρ_{1,ij}*和*ρ_{2,ij}*分别为液桥的第一曲率半径和第二曲率半径,可根据液桥体积求得,而液桥体积由含液量确定;*μ*为液体黏度;*v_{n,ij}*为两球的相对法向速度(趋近为负,远离为正). (4)式等号右端第一项为静态液桥力,详细的计算模型参见文献[18];等号右端第二项为动态液桥力,与颗粒间的相对运动速度有关,由于该项的分母部分含有*d_{ij}*,当两球间距离接近于零时,在时间步长较大时可能会造成该力数值过大,因此模型中定义了一个极限最小距离*d_{min}*,当*d_{ij} < d_{min}*时按*d_{min}*计算,本文中*d_{min}*取为10 μm.

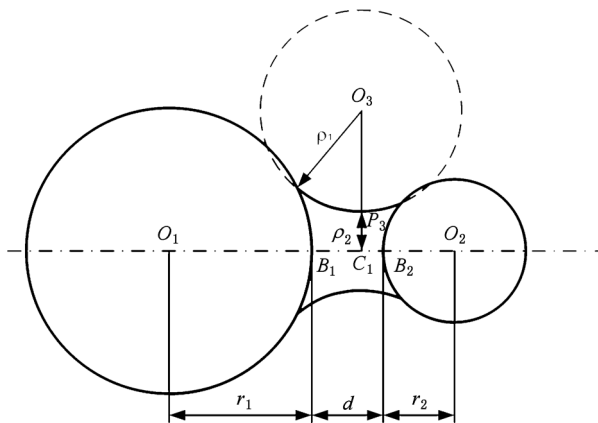


图2 两球形颗粒之间的液桥纵截面示意图

本文采用上述模型,分别对含液和不含液的颗粒体系在水平薄滚筒内颗粒的混合过程进行了模拟,并将两种体系的混合过程进行比较,分析了液体对混合过程的影响.

3. 结果分析与讨论

在本文的模拟中,颗粒充装量为滚筒容积的40%;颗粒总数为104453个,其中直径为4 mm的大颗粒(图中为深色)11606个,直径为2 mm的小颗粒(图中为浅色)92847个,大小颗粒体积比约为1:1,颗粒密度均为2500 kg/m³;弹性恢复系数均为0.95,滑动摩擦系数为0.35,滚动摩擦系数为5 × 10⁻⁴;滚筒直径为500 mm,厚度为15 mm,滚筒转速为1 r/min,初始时大、小颗粒分别在滚筒的右侧和左侧,如图3所示. 本文分别模拟了液体黏度为0.1 Pa·s、含液量为3%的湿颗粒体系以及不含液的干颗粒体系的混合过程,计算时间步长为2 × 10⁻⁴ s,每组都进行了1.8 × 10⁶步迭代计算,模拟时间均为360 s,共6 r,以保证混合过程达到相对稳定的状态. 在模拟实验中,干颗粒体系和湿颗粒体系呈现出不同的混合模式,图4和图5所示分别为两种体系在*t* = 120 s, *t* = 260 s, *t* = 340 s时颗粒的混合状态.

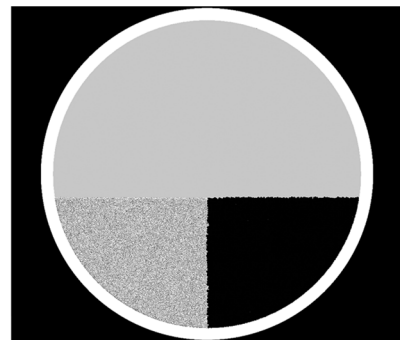


图3 不同粒径干颗粒体系和湿颗粒体系混合初始状态

从模拟结果可以看出:在混合初期,两种颗粒随时间基本是整体迁移,一段时间后,两种体系都达到了一定程度的混合. 随着时间的延续,在干颗粒体系中大、小颗粒区域的界面形成了波浪形并逐渐发展,最后形成了花瓣模式^[3,4,5,14],如图4所示;而湿颗粒体系则不同,并没有出现花瓣状分界面,而是形成月亮模式^[3,4,5,14],如图5所示.

为了定量地描述滚筒内两种颗粒体系的整体混合程度,本文将模拟得到的混合状态用分离指数进行了统计分析. 为了得到分离指数,首先须将滚筒划分成有限数量的样本,然后再进行统计分析. 根据滚筒内颗粒大小以及滚筒的尺寸,每个样本均

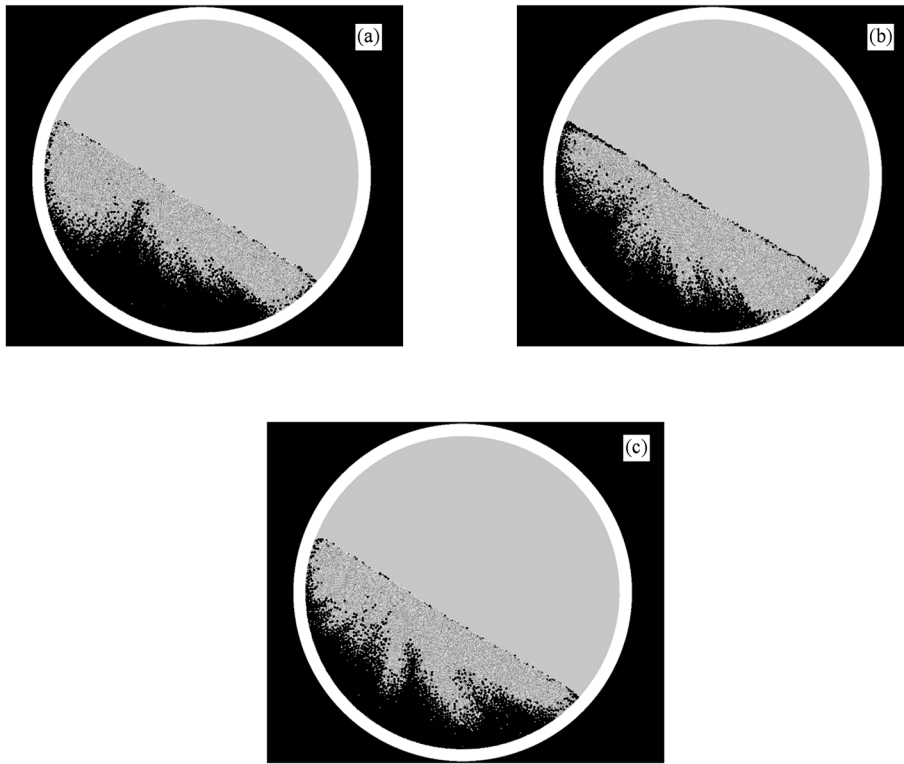


图4 干颗粒体系混合状态 (a) $t = 120$ s, (b) $t = 260$ s, (c) $t = 340$ s

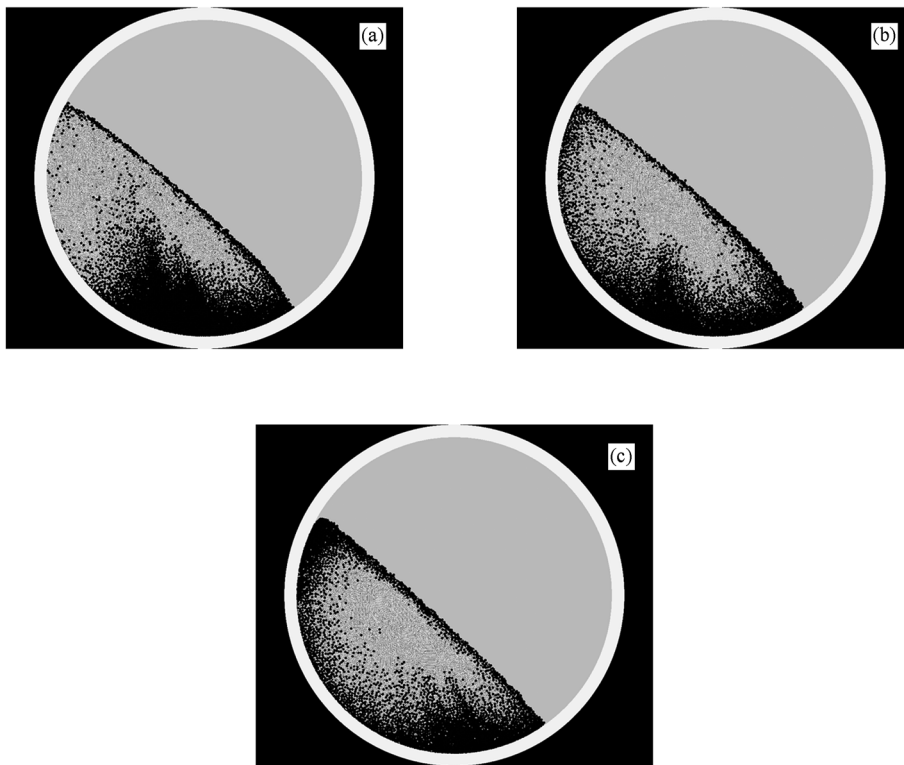


图5 湿颗粒体系混合状态 (a) $t = 120$ s, (b) $t = 260$ s, (c) $t = 340$ s

取宽为 20 mm、高为 20 mm、厚为 15 mm 的网格. 但是, 由于每个样本内的颗粒数量相差很大, 在滚筒上半部, 样本网格内可能不含颗粒, 因此我们采用了加权方案来解决这一问题, 即含有较多颗粒的样本具有较大的权重, 而含有较少颗粒的样本具有较小的权重, 如果样本网格内没有颗粒, 那么其权重为零. 在此原则上, 可求得两类颗粒的分离指数

$$S = \sqrt{\frac{1}{k} \sum_{i=1}^{N_s} k_i (a_i - \bar{a})^2}, \quad (5)$$

其中 N_s 为样本总数, a_i 为两类颗粒中任意一类颗粒在样本内的体积分数, \bar{a} 为相应颗粒在滚筒内的体积分数, k 可用下式表示:

$$k = \sum_{i=1}^{N_s} k_i. \quad (6)$$

这里 k_i 为样本的权重, 可表示为

$$k_i = \frac{N_i}{N_t}, \quad (7)$$

其中 N_i 为样本内等效颗粒数, N_t 为所有样本内等效颗粒数之和. 所谓“等效颗粒”是一种处理不同粒径颗粒时的方法, 该方法首先将小颗粒直径设为基准直径, 大颗粒按体积确定其等效颗粒数, 本系统中大颗粒直径是基准颗粒的两倍, 那么其体积为基准颗粒的 8 倍, 即等效为 8 个颗粒.

图 6 是模拟结果与文献[11]实验结果的对比, 本文模拟条件与文献[11]的实验条件完全相同, 因此结果具有可比性.

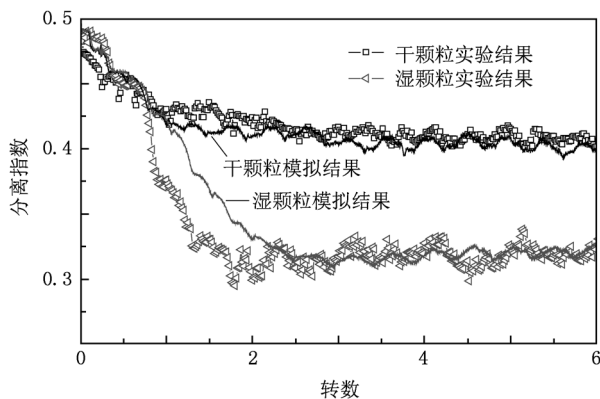


图 6 干颗粒体系和湿颗粒体系分离指数随转数的变化

从图 6 可以看出: 模拟结果与实验结果基本符合, 且反映出了相同的规律. 在混合开始时, 干颗粒体系和湿颗粒体系中大、小颗粒都是完全分离的, 分离指数为 0.5, 随着时间的持续, 分离指数呈近似

线性迅速减小, 随后趋于稳定. 比较分离指数随时间的变化规律, 干颗粒体系与湿颗粒体系有明显差异. 干颗粒体系的分离指数经过线性快速下降后, 又经过一段较缓慢的减小过程随后趋于稳定, 而湿颗粒体系则不同, 经过线性快速下降后稍有增加并趋于稳定. 两种体系达到稳定状态时分离指数的值不同, 干颗粒体系较湿颗粒体系的分离指数值要大, 说明湿颗粒体系的混合程度要比干颗粒体系好. 分析其原因是由于湿颗粒体系中有液体的存在, 液桥的牵引作用影响了颗粒的混合模式. 为便于分析, 可将混合过程分为三个阶段, 即快速混合阶段、离析与混合竞争阶段和稳定阶段. 第一阶段为快速混合阶段. 在混合初期大小两种颗粒完全分离, 对流和扩散是主要运动机制, 颗粒的混合作用大于离析作用, 因此混合速度较大, 宏观表现为快速的混合过程, 在这个阶段液体的影响不明显. 第二阶段为离析与混合的竞争阶段. 混合进行到一定程度时离析作用逐渐凸显, 混合与离析作用同时存在并相互竞争. 干颗粒体系中离析作用不断加强, 混合作用趋缓, 两者很快达到平衡; 湿颗粒体系中液桥力的牵引作用使部分颗粒聚集在一起形成颗粒团, 颗粒之间相互粘结, 在自由表面层小颗粒向大颗粒空穴填充的自组织作用减弱, 从而降低了由尺寸差异引起的离析作用, 因此在较长一段时间内混合作用始终占主导地位, 随着混合程度的增加, 混合作用减缓并最终与离析作用达到平衡. 第三阶段为稳定阶段. 这个阶段混合作用与离析作用达到均衡, 两者速度相当, 系统处于稳定状态. 干颗粒体系中由于离析作用较强, 经过与混合作用的竞争很快进入稳定阶段, 而湿颗粒体系则经过较长时间才进入稳定阶段. 由于离析作用的存在, 两种体系最终都不能达到完全均匀的混合, 但湿颗粒体系较干颗粒体系的整体混合程度要好.

颗粒体系中颗粒间的力是链状传递的, 体系中的作用力构成了树状的力链图. 图 7 是 $t = 360$ s 时干颗粒体系和湿颗粒体系内的法向接触力力链分布, 力链的粗细和颜色深浅反映作用力的大小, 力链越粗颜色越浅表示力越大; 图 8 是相同状态下与之对应的液桥力力链分布; 图 9 是上述力链对应的颗粒分布状态.

从图 7 可以看出: 干颗粒体系中力链分布不均匀, 且外围区域力链较粗, 往内核方向逐渐变细, 说明外围区域接触力较大; 湿颗粒体系中力链短且分

布较均匀. 说明接触力的大小和分布都较均匀; 两个体系中力链的分布均与大颗粒的分布状态(图9)有关. 从图8可看出, 液桥力的力链分布较均匀, 力链粗细变化不大, 说明液桥力的大小和分布都较均匀. 两种体系力链结构不同的主要原因如下: 有液体存在时, 由于液桥表面张力的产生, 接触力会增大, 同时产生一部分排斥力来平衡表面张力^[19], 与

干颗粒体系相比, 湿颗粒体系能量的消耗除了用于非弹性碰撞和摩擦消耗外, 还有一部分用于克服液体黏性产生的阻力以及打断液桥^[20], 湿颗粒之间的碰撞接近于非弹性碰撞, 因此湿颗粒体系要消耗更多的能量, 减弱了力在颗粒间的传递, 表现为力链较短, 几种作用叠加后使接触力的分布更加均匀.

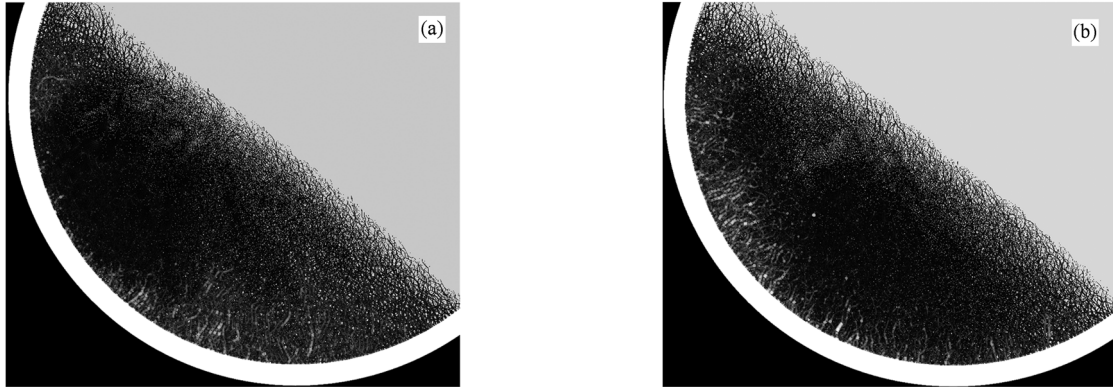


图7 $t = 360$ s 时法向接触力力链分布 (a) 干颗粒体系, (b) 湿颗粒体系

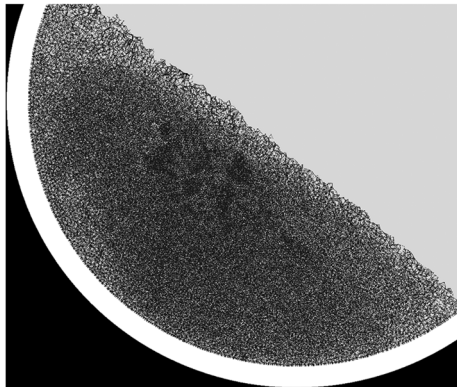


图8 $t = 360$ s 时液桥力的力链分布

对比接触力和液桥力可以发现, 液桥力较接触力小很多, 但其对颗粒体系的影响却很大. 干颗粒体系中, 由于离析作用引起大小颗粒的分离, 在自由表面层形成不均匀的雪崩流, 从而形成了花瓣状的径向分离模式; 而湿颗粒体系中, 由于液桥力的影响减弱了离析作用, 在自由表面流动层形成均匀连续流, 颗粒分离模式表现为月亮模式. 不同分离模式下颗粒的分布状态不同, 力链的大小和分布也不同, 液桥力的存在减弱了不同颗粒间离析作用的影响. 因此, 湿颗粒体系分离指数较小, 混合程度较高.

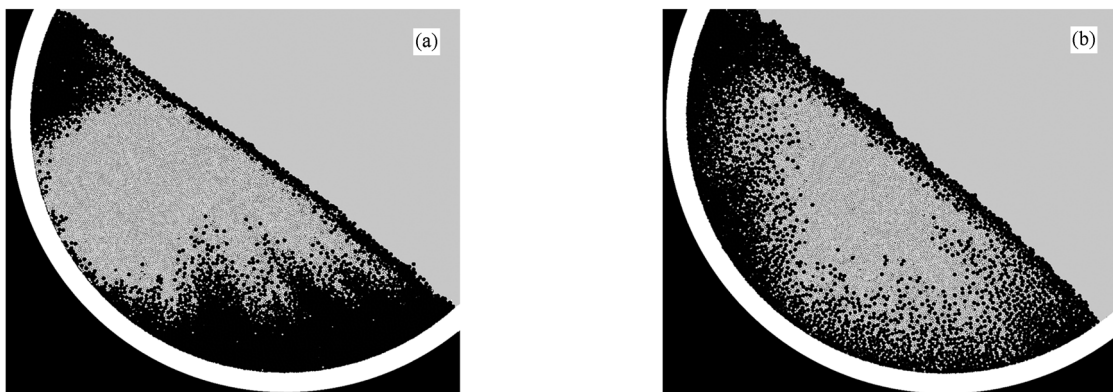


图9 $t = 360$ s 时颗粒分布 (a) 干颗粒体系, (b) 湿颗粒体系

4. 结 论

本文通过对 S 型二元颗粒体系在含液和不含液两种情况下混合过程的数值模拟,从混合过程的发展模式、分离指数变化以及力链分布几个方面比较了两种体系的差异,分析了液体对混合过程以及混合模式的影响. 模拟结果与实验结果基本符合,说明本文的计算模型和算法是正确的. 模

拟结果表明:(1)混合过程是混合和离析共存的一个动态竞争过程,混合过程不能达到理想的均匀混合状态,离析和混合两种机理达到均衡时,系统达到稳定的混合状态.(2)对湿颗粒体系的研究表明,由于体系中加入液体,液桥力的牵引作用使混合程度加强,湿颗粒体系的混合程度较干颗粒体系好.(3)液桥力远小于接触力,但液桥力对颗粒的混合状态及颗粒体系内力学结构的影响很大.

- [1] Zhao Y Z, Jiang M Q, Zheng J Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1812 (in Chinese) [赵永志、江茂强、郑津洋 2009 物理学报 **58** 1812]
- [2] Hill K M, Khakhar D V, Gilchrist J F, McCarthy J J, Ottino J M 1999 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **96** 11701
- [3] Zuriguel I, Gray J M N T, Peixinho J, Mullin T 2006 *Phys. Rev. E* **73** 061302
- [4] Hill K M, Gioia G, Amaravadi D 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 224301
- [5] Meier S W, Barreiro D A M, Ottino J M, Lueptow R M 2008 *Nat. Phys.* **4** 244
- [6] Hill K M, Jain N, Ottino J M 2001 *Phys. Rev. E* **64** 011302
- [7] Mitari N, Nori F 2006 *Adv. Phys.* **55** 1
- [8] Li H M, McCarthy J J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 184301
- [9] Li H M, McCarthy J J 2005 *Phys. Rev. E* **71** 021305
- [10] Li H M, McCarthy J J 2006 *Powder Technol.* **164** 58
- [11] Chou S H, Liao C C, Hsiao S S 2010 *Powder Technol.* **201** 266
- [12] McCarthy J J, Khakhar D V, Ottino J M 2000 *Powder Technol.* **109** 72
- [13] McCarthy J J 2003 *Powder Technol.* **138** 63
- [14] Zhao Y Z, Cheng Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 322 (in Chinese) [赵永志、程 易 2008 物理学报 **57** 322]
- [15] Zhao Y Z, Zhang X Q, Liu Y L, Zheng J Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8386 (in Chinese) [赵永志、张宪旗、刘延雷、郑津洋 2009 物理学报 **58** 8386]
- [16] Mehrotra V P, Sastry K V S 1980 *Powder Technol.* **25** 203
- [17] Lian G P, Thornton C, Adams M J 1993 *J. Colloid. Interf. Sci.* **161** 138
- [18] Chen Y C, Zhao Y Z, Gao H L, Zheng J Y 2010 *Particuology* **9** 374
- [19] Yang R Y, Zou R P, Yu A B 2003 *AIChE J.* **49** 1656
- [20] Yang S C, Hsiao S S 2001 *Chem. Eng. Sci.* **56** 6837

Simulation of mixing process for size-type binary wet particulate systems in a rotating horizontal drum by discrete element method*

Gao Hong-Li¹⁾²⁾ Chen You-Chuan¹⁾ Zhao Yong-Zhi^{1)†} Zheng Jin-Yang¹⁾

1) (Department of Chemical and Biochemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

2) (College of Mechanical and Electrical Engineering, Guangdong University of Petrochemical Technology, Maoming 525000, China)

(Received 5 January 2011; revised manuscript received 8 August 2011)

Abstract

Using the four-equation of linear spring-dashpot discrete element method and considering effect of the liquid bridge, the mixing and segregation process of size-type binary wet particulate system in a rotating horizontal drum is simulated. The effect of interstitial liquid on the mixing and segregation process is discussed. To assess the accuracy of the simulation result, some comparisons are made with the experimental data in the literature. The simulation results show that the liquid bridge between particles plays an important role in mixing and segregation process, and that the cohesion force induced by liquid-bridge leads to the formation of agglomerates of particles. As a result, segregation may be mitigated and mixing may be enhanced, and the network distribution of the contact forces is more uniform in wet particulate system.

Keywords: wet particulate systems, mixing, segregation, discrete element method

PACS: 45.70.-n, 05.45.-a, 83.10.Rs

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CB209706) and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. Y1100636).

† Corresponding author. E-mail: yzzhao@zju.edu.cn