

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2017.05.003

# 基于离散元方法的 RDX-Al 颗粒混合数值模拟分析\*

李世伟<sup>①</sup> 王鹏程<sup>②</sup> 王正宏<sup>①</sup> 王彩玲<sup>③</sup> 赵省向<sup>③</sup> 陶宇浩<sup>②</sup> 李建良<sup>②</sup>

① 辽宁庆阳特种化工有限公司(辽宁庆阳,111002)

② 南京理工大学化工学院(江苏南京,210094)

③ 西安近代化学研究所(陕西西安,710065)

[摘 要] 基于离散元方法,以旋转筒内 RDX-Al 二元颗粒体系的搅拌过程为研究对象进行模拟。采用离散元软件(EDM),首先研究 RDX-Al 二元颗粒各自随转速的变化趋势,并进一步得出二元颗粒变化率的特点,做出分布上的拟合,得出最吻合模拟试验的函数为指数函数。然后,将旋转筒细分为多个单元空间,考察旋转轴与单元空间之间的距离对二元颗粒混合效果的影响。结果表明:单元空间离旋转轴越远,即旋转半径越大,颗粒之间的变化率也就越快,越容易达到均匀状态。最后,考察加入抄板的影响,结果表明:RDX-Al 二元颗粒趋于的稳定值分别发生了改变。

[关键词] 离散元方法;二元颗粒;变化率;抄板

[分类号] O439

## Numerical Simulation of RDX-Al Particle Mixture by Discrete Element Method

LI Shiwei<sup>①</sup>, WANG Pengcheng<sup>②</sup>, WANG Zhenghong<sup>①</sup>, WANG Cailing<sup>③</sup>, ZHAO Shengxiang<sup>③</sup>, TAO Yuhao<sup>②</sup>, LI Jianliang<sup>②</sup>

① Qingyang Chemical Industry Corporation (Liaoning Qingyang, 111002)

② School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology (Jiangsu Nanjing, 210094)

③ Xi'an Modern Chemistry Research Institute (Shaanxi Xi'an, 710065)

[ABSTRACT] Stirring process of RDX-Al particles in rotating cylinder was simulated based on discrete element method. Discrete element method and related software (EDM) was used. Trends of RDX particle or Al particle changing with rotation rate was studied at first. Change rate of the binary granular mixture and the fitting on the distribution could be obtained. Exponential function is the most suitable function. Then, the rotating cylinder was divided into multiple unit spaces. Effect of distance between rotation axis and unit space on mixture of the two kinds of particles was researched. Results show that the greater the distance (rotation radius), the faster the change rate between particles, the more evenly the mixture. Influence of copy board on the particle mixture in different situations was also tested. The change of number of particles in the whole rotating cylinder was estimated in the same way, and stable value of RDX-Al particles has been changed.

[KEYWORDS] discrete element method; two kinds of particles; change rate; copy board

## 引言

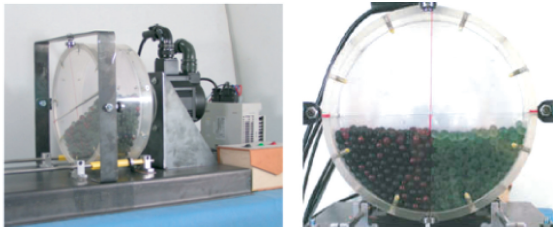
单元颗粒在滚筒型反应釜中的混合是反应器设计者有必要深入研究的问题<sup>[1]</sup>。目前,有学者采用离散元方法直接跟踪滚筒中每一个颗粒,并进行模拟。该方法首先设定单元颗粒材料由离散颗粒随机组合而成,其宏观性质由颗粒的形状、尺寸、材料属

性以及空间分布等参数决定。采用离散元方法进行数值模拟的时候,为较准确地反映所需混合颗粒的非均质特征,通常将颗粒材料模型化为离散颗粒集合体。

一般来说,运用离散元方法对圆筒中的颗粒进行数值模拟时,对圆筒为水平滚筒时颗粒的混合问题研究得比较多<sup>[2-6]</sup>。这主要是因为水平滚筒滚动时,对设备的振动较小,内摩擦和所需做功也较低,

\* 收稿日期:2017-01-28  
作者简介:李世伟(1971-),男,本科,高工,主要从事混合炸药的研究。E-mail:lsww@163.com  
通信作者:王鹏程(1985-),男,副研究员,主要从事含能材料的研究。E-mail:alexwpc@mail.njust.edu.cn

适合含能材料的混合(图 1)。但水平滚筒的缺点是混合均匀度较差,主要原因在于颗粒在水平圆筒中的运动过程具有周期性,剪切力较大。即使经过长时间的混合,同种颗粒仍堆积在一起,不易发生变化,难以均匀分散。因此,影响颗粒的混合。



(a) 正面 (b) 侧面

图 1 混合圆筒装置图

Fig. 1 Equipment diagram of mixing drum

研究表明,转速的增加可以削弱颗粒运动的周期特性,使颗粒达到混合均匀的时间缩短。在滚筒内壁加入抄板可以改变颗粒的混合特性,并且靠近筒壁区域比中心区域颗粒的混合均匀程度增加更显著。导致这一现象的原因在于,抄板在抄起卸出的运动过程中会破坏颗粒之间的原有剪切力,改变分离机制,最终影响混合效果。另外,二元颗粒的混合效果还受物料的填充率、颗粒的自身性质(例如颗粒表面张力)以及转筒参数(例如转速)等因素影响。

已有的试验数据表明:二元颗粒间的接触次数会随壁面转速(即周向线速度)的逐渐增大而增加。加入抄板会直接改变不同颗粒的运动规律,破坏颗粒的自由表面流,使颗粒之间的相对速度发生变化,从而改善颗粒之间的混合效果。

本文中的模拟与分析是在 Windows 操作系统下,采用 Visual C++ 6.0 编辑语言器,通过 Matlab 数值分析软件和 EDEM 离散元模型软件进行,硬件条件为 2.4 GHz Intel CPU, 4.0 G 双通道内存,单路刀片服务器。

1 单元空间内的颗粒模拟

首先通过离散元软件 EDEM 对设定空间体系内的二元颗粒的数值进行模拟。在模拟体系中,假定所模拟旋转圆筒的内径与高相等,混合物质 RDX 与 AI 分设为大颗粒与小颗粒。大颗粒与小颗粒的个数之比约为 1 : 7;密度比为 0.85 : 1.15;半径比为 2 : 1。所加入的抄板的物理特性与旋转筒壁相同。其他的旋转圆筒自身参数以及系统内设参数,

如表 1 所示。

表 1 模拟时旋转筒的一些参数数值

Tab. 1 Parameters of rotating cylinder in simulation

| 基本参数                          | 参考数值      |
|-------------------------------|-----------|
| 旋转筒转速 $n/(r \cdot \min^{-1})$ | 1.59      |
| 壁面摩擦系数 $f$                    | 0.2       |
| 壁面法向刚度系数                      | $10^8$    |
| 壁面剪切刚度系数                      | $10^8$    |
| 泊松比                           | 0.2       |
| 剪切模量                          | $10^8$    |
| 时间步长/ $s$                     | 0.000 001 |
| 重力加速度 $g/(m \cdot s^{-2})$    | 9.8       |

然后,对旋转筒空间中靠近筒壁的单元空间分别进行两组数值模拟。第一组模拟,是在给定的初始二元颗粒分布与转速分布条件下,进行 120 次数值模拟,图 2 和图 3 分别表示在同样的转数之后圆筒内单位空间的大颗粒 RDX 数目以及小颗粒 AI 的数目。第二组模拟是对第一组中单次模拟的数值试验,图 4 和图 5 记录不同转数之下圆筒内单位空间的大颗粒 RDX 以及小颗粒 AI 的数目变化情况。

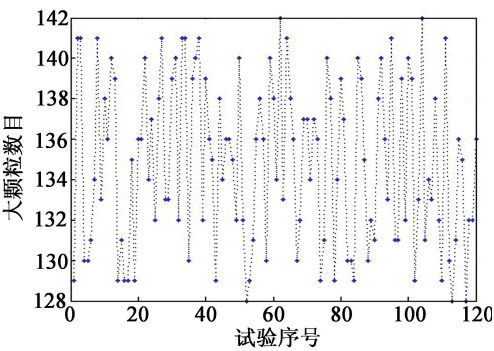


图 2 120 次模拟试验中得到的最终大颗粒数

Fig. 2 The final number of large particles in the 120 sets of simulated experiments

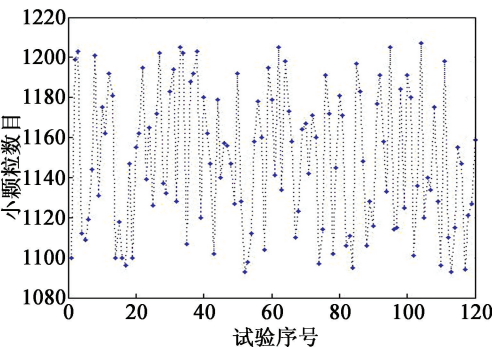


图 3 120 次模拟试验中得到的最终小颗粒数

Fig. 3 The final number of small particles in the 120 sets of simulated experiments

从图 4 和图 5 中可以看出,随着圆筒旋转次数的增加,即转数的增大,大颗粒 RDX 的数目逐渐减小,小颗粒 AI 的数目逐渐增加,最终分别稳定在一个数值范围之内,该数值范围即为混合均匀时二元颗粒的最终数目。

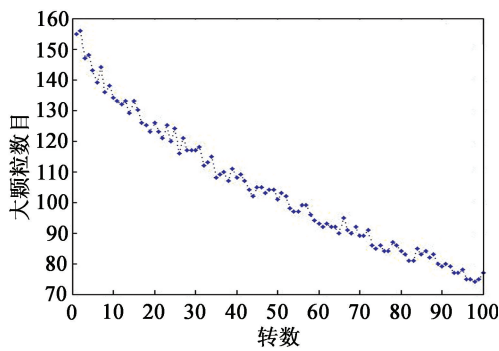


图 4 单元空间内大颗粒数目随转数的变化趋势  
Fig. 4 Trends of large particles changing with revolution in the unit space

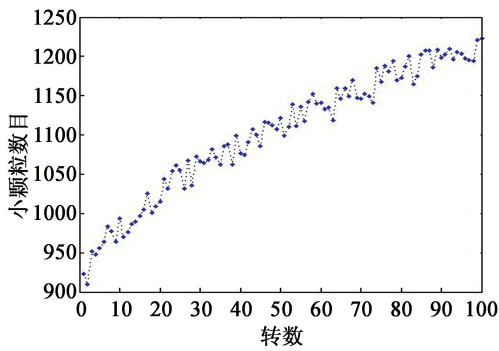


图 5 单元空间内小颗粒数目随转数的变化趋势  
Fig. 5 Trends of small particles changing with revolution in the unit space

对于上述的第二组模拟,当混合时间趋于无穷大( $t \rightarrow \infty$ )时,RDX-AI 二元颗粒会分层,并最终达到平衡,靠筒壁的单元空间中,二元颗粒数目会趋近于某个极限稳定值。假设最终趋于稳定时,RDX 大颗粒和 AI 小颗粒数目的极限分别为  $N_1$  和  $N_2$ 。极限值  $N_1$  与  $N_2$  的大小将跟靠筒壁的单元空间内的颗粒组成以及可容纳的颗粒数目有关。AI 小颗粒会倾向于沉降至下层并靠近筒壁,把 RDX 大颗粒挤到筒中间。假定圆筒的总装填二元颗粒较少,靠近筒壁单元空间可以容纳全部 AI 颗粒,那么  $N_1$  的极限值是初始 AI 颗粒数目的  $1/4$ ,  $N_2$  的极限值是单元空间内剩下空间还能容纳的 RDX 大颗粒数目;当总装填的二元颗粒数目较多时,靠近筒壁的单元空间将不能完全容纳小颗粒,那么  $N_1$  的极限值即为单元空间内所能容纳的小颗粒数目,  $N_2$  的数值约为 0,不能容纳大颗粒。

另外,从图 4、图 5 还可以看出,随着圆筒旋转时间增长,次数增加,靠筒壁单位空间内 RDX 大颗粒的减少速度和 AI 小颗粒的增加速度也逐渐变慢。进一步可将大、小颗粒的变化率标为  $N$ ,此时颗粒数与极限值之间的差值标为  $\Delta N$ 。颗粒的变化率越大,表明同种颗粒越容易分离,混合越容易达到均匀状态,混合效果也越好。

2 变化率拟合

根据上面所述进行逆推分析,假定已知二元颗粒的变化率,那么,就可以结合初始颗粒数给出二元颗粒随着圆筒转数增加的变化情况。

具体步骤如下,先通过已知的变化率,计算得到一个周期之后的二元颗粒数期望值,然后根据正态分布,随机给出具体的大、小颗粒数。然后,采用大、小颗粒数,重复上面圆筒颗粒模拟步骤。

以大颗粒为例进行分析。如图 4 所示,大颗粒数总体趋势呈现出单调下降,并且相应的变化率随着转数增加,逐步变小。对图 4 中点列的变化趋势,分别用指数函数、幂函数和对数函数进行拟合<sup>[7]</sup>。拟合结果的吻合程度,采用拟合度表示,拟合得越准确,拟合度越高。并用 3 种函数拟合的结果与实际进行对比。对指数函数、幂函数以及对数函数这 3 种方式进行曲线拟合。得出的拟合方程如下:

$$y = 95.334e^{-0.025x} + 79.547\ 6;$$
$$y = 151.730\ 6x^{-0.106\ 8} + 0.867\ 2;$$
$$y = -21.77\ln x + 183.5。$$

(1)(2)(3)

这里指数函数、幂函数、对数函数的拟合度分别为 0.98、0.87 和 0.92。即与数值试验的数据最为吻合的是指数函数。

颗粒数的实际数值并不完全在拟合曲线上,拟合曲线只是对应的期望值,实际获得的颗粒数变化是一个离散的过程。因此,根据马尔可夫过程分析方法,需要将该过程依据已得到的指数函数中的参数,再进行一次基于实际数值的对比拟合。其过程是,基于获得的颗粒数,根据变化率,得到下一个采样时间节点的颗粒数期望,通过正态分布随机产生一个颗粒数,然后再将该颗粒数重复迭代,最后考察实际数值与指数函数的吻合程度。

下面,在给定初始颗粒分布条件上(小颗粒和大颗粒分布趋向于 1 250 个和 70 个),采用马尔可夫方法进行分析。将大、小颗粒数的初始值分别设定为 150 个和 900 个。以大颗粒为拟合对象,按指数函数进行拟合,得到其参数值相应为: $a = 95.354$ ,



$b = -0.025$ , 拟合图与模拟数据的对比见图 6。从图 6 中可以看出, 实际结果与指数函数的拟合曲线的变化规律基本吻合。

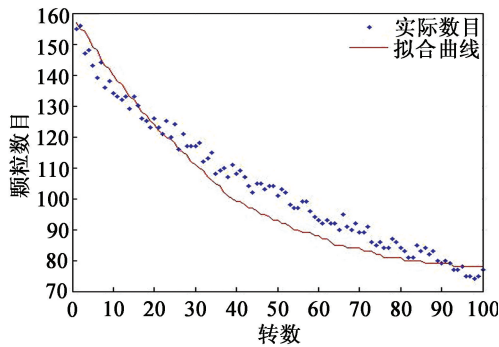


图 6 指数函数再次拟合与实际数值对比  
Fig. 6 Comparison of the exponential function fitted again with the actual value

3 单元空间与转轴之间的距离分析

在进行上述数值模拟时, 只是简单地将旋转轴位于空间的中心, 而实际圆筒混合过程中, 会存在有多个旋转轴, 进而在划分多个单元空间时, 对每一个抽离出的空间, 其旋转轴都不在单元空间的中心。也就是说, 还需要考虑旋转轴与单元空间的距离对二元颗粒混合效果的影响。

为了分析过程, 笔者改变单元空间与转轴之间的距离, 观测相同初始颗粒分布下二元颗粒的变化趋势。将单元空间与转轴的距离设定为单元空间内径的整数倍, 分别为 1、5、10 倍和 20 倍<sup>[8]</sup>。该数值越大, 表明单元空间离旋转轴越远, 旋转半径越大, 然后记录变化数及混合时间。

具体考察计算模拟中每一个时间周期内变化数随距离的变化情况, 结果如图 7 所示。单元空间与转轴之间的距离越大, 变化数的初始变化就越大; 即

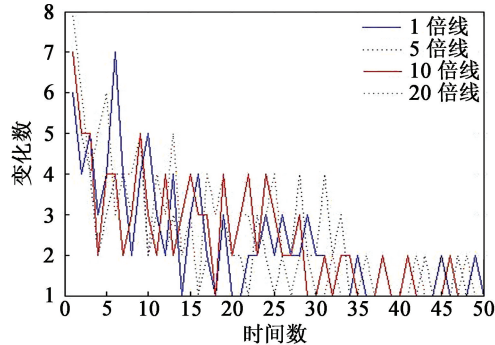


图 7 变化数与距离的关系  
Fig. 7 Relationship between the number of changes and distance

旋转半径越大, 则颗粒之间的变化率也就越大, 就越容易达到均匀状态。这与现有二元颗粒理论, 靠近筒壁的颗粒要比靠近中间的颗粒混合更均匀这一结论相吻合。但单元空间自身的变化率极限值仅与颗粒性质有关, 距离对空间内颗粒数的变化影响不大。从图 7 可以看出, 随着时间增长, 即转数的增加, 最后所有单位空间中的变化数趋近于相同。

4 加入抄板后混合效果的模拟分析

在简单水平圆筒的基础上加入抄板, 然后对二元颗粒混合情况进行数值模拟, 分析加入抄板后单元空间内的颗粒混合情况。图 8 和图 9 为单元空间内加入抄板后的二元颗粒模拟结果。

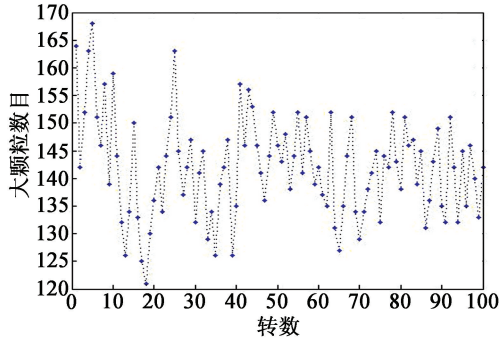


图 8 加入抄板之后, 单元空间内大颗粒的数目随转数的变化趋势  
Fig. 8 Trends of large particles changing with revolution in the unit space after addition of copy board

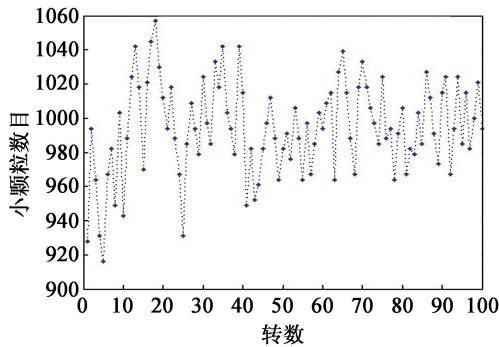


图 9 加入抄板之后, 单元空间内小颗粒的数目随转数的变化趋势  
Fig. 9 Trends of small particles changing with revolution in the unit space after addition of copy board

由图 8 和图 9 可以看出, 加入抄板后, 单位空间内, 无论颗粒大小, 其数目没有显著的上升或者下降, 即在一个范围内波动, 这说明加入抄板后变化率几乎维持不变。另外, 无论是 RDX 大颗粒还是 Al 小颗粒, 由于抄板的加入, 前面波动很大, 变化率改

变快,同种颗粒易分离,从而混合均匀得更快。随着时间增加,后面的波动都要小于前面的波动,即颗粒数的振荡逐渐变小,但颗粒数变化仍然存在,并趋于稳定振荡。因此可以认为,即使混合时间趋于无穷,颗粒数仍会一直发生变动,但总体样品来看,颗粒数在一个稳定值附近产生波动,对应的变化率也围绕某一数值波动。

另外,当加入抄板后,大颗粒以及小颗粒趋于的稳定值也发生了改变,因为加入抄板以后,改变了旋转轴和单位空间的分布,将会破坏二元颗粒原本的运动模式,增强颗粒间的剪切作用,使得颗粒之间不易出现分层现象,即改善了颗粒的混合效果。故颗粒数最终不会趋于极限值,而是趋于在另一值附近振荡。

5 结论

通过单元空间内的二元颗粒模拟,大颗粒和小颗粒变化率的拟合,单元空间与转轴之间的距离分析,以及加入抄板后混合效果的数值模拟,得到以下初步结论:

- 1)对于简单圆筒,随着混合圆筒转数增大,大颗粒的数目不断减小,小颗粒的数目不断增加,并且大颗粒的减少速度和小颗粒的增加速度也相应变慢,最终大、小颗粒数分别逐渐稳定,并趋近于某个数值;
- 2)对本混合体系的颗粒变化率采用 3 种数学模型进行拟合,指数函数、幂函数和对数函数的拟合度分别为 0.98、0.87、0.92,即指数函数与模拟试验数值最吻合,拟合效果最优;
- 3)模拟结果表明,二元颗粒的变化率与旋转半径有关,旋转半径越大,即单元空间与旋转轴间的距离越远,变化率也改变得越快,但变化率最终趋向于某一极限值,并且越接近筒壁的二元颗粒混合得越均匀;
- 4)加入抄板后,可破坏颗粒原有的剪切作用,使变化率改变快,同种颗粒容易分离,实现二元颗粒之间的混合,即改善了混合效果,有利于混合均匀。

参 考 文 献

[1] 耿凡,徐大勇,袁竹林,等. 滚筒干燥器中颗粒混合运动的三维数值模拟[J]. 应用力学学报,2008, 25(3): 529-534.  
GENG F,XU D Y,YUAN Z L, et al. Three dimensional numerical simulation of mixing process of particles in rotary dryer[J]. Chinese Journal of Applied Mechanics, 2008, 25(3): 529-534.

[2] LIU P Y, YANG R Y, YU A B. DEM study of the transverse mixing of wet particles in rotating drums [J]. Chemical Engineering Science, 2013, 86(5): 99-107.

[3] GUI N, YAN J, XU W K. DEM simulation and analysis of particle mixing and heat conduction in a rotating drum [J]. Chemical Engineering Science, 2013, 97(7): 225-234.

[4] HÖHER D, WIRTZ S, SCHERER V. A study on the influence of particle shape and shape approximation on particle mechanics in a rotating drum using discrete method[J]. Powder Technology, 2014, 253(2): 256-265.

[5] XU Y, XU C H, ZHOU Z. 2D DEM simulation of particle mixing in rotating drum: a parametric study [J]. Particuology, 2010, 8(2): 141-149.

[6] 黄德财,陆明,赵省向. 旋转筒内黑索今和铝颗粒混合与分离的计算机模拟[J]. 计算物理,2011, 28(3): 445-450.  
HUANG D C, LU M, ZHAO S X. Simulation of mixing and segregation of RDX and Al in a revolving drum[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2011, 28(3): 445-450.

[7] 吴家麟,杨东英,沈林勇,等. 基于曲率数据的曲线拟合方法研究[J]. 应用科学学报,2003, 21(3): 258-262.  
WU J L, YANG D Y, SHEN L Y, et al. Research on the curve-fitting method based on curvature data[J]. Journal of Applied Sciences, 2003, 21(3): 258-262.

[8] HUANG D C, LU M, SUN G, et al. Ring-like spin segregation of binary mixtures in a high-velocity rotating drum[J]. Physical Review E Statistical Nonlinear & Soft Matter Physics, 2012, 85: 031305.