

## 颗粒流动模型研究进展

张 欣<sup>1</sup>, 王文庆<sup>1</sup>, 武锦涛<sup>2</sup>, 王靖岱<sup>2</sup>, 阳永荣<sup>2</sup>

(1. 中国石化齐鲁股份有限公司, 山东 淄博 255411; 2. 浙江大学 化学工程与生物工程学系, 浙江 杭州 310027)

**摘 要:** 颗粒流动在自然界中和各种工业过程中广泛存在, 但人们对于其机理认识的还不深入。描述颗粒运动的模型有很多, 连续介质模型应用简单但准确性比较低, 离散微粒学模型是近来人们研究的一个热点, 以每个颗粒为考察对象, 能够更准确地反应颗粒系统的性质。本文介绍了描述颗粒流动的模型, 概述了各模型的理论和应用, 通过对多种模型比较可以看到, 每个模型都有一定的使用范围, 要更准确、更方便地描述颗粒系统的运动, 还要进行深入地研究。

**关键词:** 颗粒运动; 数学模型; 模型比较

中图分类号: TQ018

文献标识码: A

文章编号: 1008-5548(2007)06-0036-05

## Progress in Model for Particle Flow

ZHANG Xin<sup>1</sup>, WANG Wen-qing<sup>1</sup>, WU Jin-tao<sup>2</sup>,WANG Jing-dai<sup>2</sup>, YANG Yong-rong<sup>2</sup>

(1. Sinopec Qilu Corp, Zibo 255411;

2. Department of Chemical and Biochemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

**Abstract:** The granular materials are utilized in a wide variety of industrial applications. The complex hydrodynamics of granular flow is still not fully understood. The models for particle flow are reviewed including continuum mechanics methods and discrete mechanics methods. The continuum mechanics methods are simple but have low accuracy. The discrete mechanics methods are fully based on the Lagrangian approach for the simulation of motion of granular material on the microscopic level of particles, and can describe the motion of particles more accurately. The theory and the applications of these models are briefly described. It is clear that every model has its own application range. It needs to make a further research on the model for particle flow in order to describe the motion of granular materials more factually and conveniently.

**Key words:** particle flow; simulation; comparison of models

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。颗粒流指的是颗粒材料在外力作用和内部应

力状况变化时发生的类似于流体的运动状态。颗粒流动在自然界中和各种工业过程中广泛存在, 以化学工业为例, 其产品的一半、原材料的 3/4 均为颗粒状物质<sup>[1]</sup>。但是由于人们至今对颗粒流动机理认识不深, 据估计, 在相关工业部门, 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要达到 40%, 远达不到优化设计和节省能源的要求<sup>[2]</sup>。

为了预测松散颗粒流动特性, 人们提出了许多分析模型, 这些模型一般可以分为两类, 一是基于连续介质的观点; 二是基于微粒学的观点<sup>[3,4]</sup>。在连续介质模型中, 颗粒系统的特性被假设是一个连续的函数, 并且颗粒系统可以无限被分割而不失去任何固有的特性, 不连续的颗粒特性不予考虑。而在微粒学中, 是用有限的、不连续的粒子(理想的刚性或弹性球体)的特性来推导代表整个颗粒系统性质的定律。

## 1 连续介质流动模型

连续介质模型忽略了颗粒系统的不连续性和单个颗粒的特性, 利用连续性的假设, 就可以用一个统一的计算模式代替所有的各种各样的颗粒物料, 模型的性质可以用数量不多、由实验测定的常数来表征。连续介质模型主要包括有塑性模型、粘性流模型和势流模型等。

## 1.1 塑性模型

塑性模型包括两个主要内容<sup>[5]</sup>。一个是屈服函数, 它在应力空间定义了一个应力面(屈服轨迹), 在该面内颗粒材料是完全弹性的, 当发生塑性形变时应力点必定位于屈服轨迹上。在 Mohr-Coulomb 条件下屈服轨迹可以表示为:

$$|\tau_n| = C + \sigma_n \tan \phi \quad (1)$$

Coulomb 颗粒的屈服轨迹与  $\tau$  轴相交得到的  $\tau$  值被定义为单位粘聚力  $C$ , 而角度  $\phi$  定义为内摩擦角。塑性模型的第二个主要内容是流动判据。当应力点位于屈服轨迹上时弹性应力转变为塑性应力, 颗粒开始流动, 同时任一处的应力不再随时间而变化,

收稿日期: 2007-04-28, 修回日期: 2007-06-29。

第一作者简介: 张欣(1971-), 女, 工程师。电话: 0533-7521732, E-mail: zhang\_xinxin@sohu.com。

而流动的速度对应力也没有明显的影响。当颗粒流动时,表达其应力状态的 Mohr 圆<sup>[6]</sup>必须与该颗粒物的有效屈服轨迹相切,根据 Mohr 圆可以确定作用在颗粒单元上的各种应力的关系。

塑性模型更多的是用于计算颗粒系统与壁面间的应力或是移动床中的‘架桥’现象,关于塑性模型的同轴假定和流动判据还有很多争论。

### 1.2 粘性流模型

Chen<sup>[7]</sup>把在重力作用下流动的颗粒看作连续的粘性流体,提出了粘性流模型。粘性流模型利用 Navier-Stocks 方程模拟颗粒的流动:

$$\text{div}(\varepsilon_s \rho_s \nabla \Phi - \varepsilon_s \mu_s \text{grad} \Phi) = -\varepsilon_s \text{grad} P_s - \varepsilon_s \rho_s \mathbf{g} + \mathbf{F}$$
 (2)

式中,  $\mu_s$  是固体颗粒粘度,粘性流模型的主要思想就是引入颗粒粘度的概念来描述颗粒间的摩擦;  $\mathbf{F}$  是除了重力以外的其他作用力。

Chen 利用粘性流模型模拟了二维和三维移动床中颗粒的运动情况,与实验结果吻合的很好。

### 1.3 势流模型

势流模型<sup>[8]</sup>是把颗粒的运动作为无旋的势流来处理,认为颗粒下降的速度正比于速度势的梯度。势流模型可以表示如下:

连续方程:  $\text{div}(\rho_s \mathbf{v}) = S$  (3)

动量方程:  $\text{div}(-\rho_s \text{grad} \psi_s) = S$  (4)

其中,  $\psi_s$  是速度势。

## 2 离散微粒学流动模型

连续介质模型忽略了颗粒个体性质,而过分依赖于高度简化的、规定性质的本构方程,但是人们发现单个颗粒的一些特性对整个系统的运动存在着影响<sup>[9]</sup>,颗粒运动的‘散、动’特征与常规的均匀、连续假定冲突,导致理论与实际的偏离。为了更精确地描述颗粒系统的运动状况就需要从离散粒子的特性出发推导整个系统的性质。

### 2.1 Monte Carlo 模拟

Monte Carlo 模拟是一种统计力学的方法。在 Monte Carlo 模型中颗粒是刚性的,颗粒间可以相互接触但是不能相互重叠(颗粒不能发生形变),颗粒的位置由随机数生成程序产生,颗粒相互作用的对势(pair potential)定义如下:

$$U(l) = \begin{cases} 0 & \text{if } l \geq d_p \\ \infty & \text{if } l < d_p \end{cases} \quad (5)$$

颗粒的能量是对势与势能的和。颗粒的运动是随机的,如果新状态下系统的能量减小则保留新的状态为当前状态;如果系统的能量增加,则需要计算接受新状态的概率:

$$P(\Delta E) = \frac{P(E')}{P(E)} = \exp\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right) \quad (6)$$

式中,  $E$  是系统能量;  $E'$  是新状态下的系统能量;  $P(E)$  是某种结构下具有能量  $E$  的 Boltzmann 分布概率;  $R$  是 Boltzmann 常数;  $T$  是系统的绝对温度。将概率  $P(\Delta E)$  与一随机数  $\xi$  比较,如果  $\xi < P(\Delta E)$  则保留新状态,如果  $\xi > P(\Delta E)$  则保留原来的状态。

Rosate<sup>[10]</sup>首先将 Monte Carlo 模拟应用到振动系统中分离现象的研究,Seibert 和 Burns<sup>[11,12]</sup>则模拟了液体流化床中的颗粒分离现象,Khakhar<sup>[13]</sup>和 Ottino<sup>[14]</sup>也对 Monte Carlo 模拟在颗粒混合分离中的应用作了介绍。

Monte Carlo 模拟的颗粒位移是虚拟的,并不代表颗粒的真实运动历程,所以利用该方法模拟其他传递性质的时候要特别注意。另外, Monte Carlo 模拟采用的 Boltzmann 概率分布是平衡状态下的概率分布,因此 Monte Carlo 模拟更适合于稳态过程的模拟。Monte Carlo 模拟的时间步长可以通过校正的方法与实际的时间联系起来<sup>[16]</sup>。

### 2.2 GLMG 模型

Károlyi<sup>[16]</sup>在格子气体动力学的基础上提出了 GLMG(granular medium lattice gas)模型,模型定义了三角形的格子,颗粒沿着这些格子的边界运动,颗粒的速度为 0(静止)或 1。颗粒的碰撞发生在格子的节点上,碰撞后向邻近的节点传递。弹性颗粒的碰撞规则如图 1 所示。GLMG 模型考虑了非弹性碰撞、摩擦力和重力的影响,并给出了相应的规则。

与 Monte Carlo 模拟一样, GLMG 模型得到的颗粒运动轨迹也不是颗粒的真实运动历程,应用该模型时应注意。

### 2.3 颗粒随机运动模型——PKM 模型

第一个从纯运动学角度考察颗粒运动的是 Litwinsky<sup>[9]</sup>,他假定颗粒处于一系列的大小相同的立方体格子中,通过计算上层格子中颗粒补充下层



图 1 GLMG 模型弹性颗粒碰撞规则

格子中空隙的概率来描述颗粒的运动。Mullins<sup>[9, 17, 18]</sup>也提出了一个类似的“随机运动”模型,但他是用空隙的向上运动代替颗粒的向下运动。Nedderman和Tüzün<sup>[19]</sup>提出了第三种不同的颗粒运动模型,他们假定颗粒的运动完全是由重力引起的,颗粒流动产生的空隙马上会被邻近的颗粒所补充。通过分析颗粒运动的趋势可以假定颗粒水平运动的速度  $v_x$  是垂直运动速度梯度的函数,其中一个最简单的形式为:

$$v_x = B \frac{\partial v}{\partial x} \quad (7)$$

式中,  $B$  为运动常数,具有长度的量纲。Nedderman和Tüzün认为  $B$  值与颗粒的尺寸有关,一般为颗粒直径的 2~3 倍。

以上的各个 PKM 模型都用于中心卸料过程的模拟,Chou<sup>[20]</sup>分别推导了出口左右两侧的速度表达式来描述偏心卸料过程。但是当出口紧贴壁面的时候,Chou 的方法仍无法准确的描述颗粒的流动。武锦涛<sup>[21]</sup>利用 Lie 群变换的方法得到了 PKM 模型的解析解,利用移动坐标的方法对传统的 PKM 模型进行修正,描述颗粒的偏心流动过程,所得结果与实验吻合的很好。

PKM 模型形式简单,仅有一个模型参数——运动常数  $B$ ,不需要通过复杂的实验来确定,很适合于实际应用。

## 2.4 离散元模型(DEM)

DEM (discrete element method) 模型最早是由 Cundall<sup>[22]</sup>等人提出来的,颗粒的运动是由 Newton 第二定律和颗粒间的应力-应变定律来描述。颗粒  $i$  的线性运动和转动由下面的方程描述<sup>[23]</sup>:

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} = F_{gi} + \sum_{cj} F_{cij} \quad I_i \frac{\partial \omega_i}{\partial t} = (r_i n_i \times \sum_{cj} F_{cij}) \quad (8)$$

式中,  $m_i$ 、 $I_i$ 、 $r_i$ 、 $v_i$ 、 $\omega_i$ 、 $F_{gi}$  分别是颗粒  $i$  的质量、惯量、半径、线速度、角速度和所受的体积力;  $F_{cij}$  是颗粒  $i$  与颗粒  $j$  的接触力;  $n_i$  是由颗粒  $i$  的质心指向接触点的法向单位向量。

因为在 Cundall 的模型中允许颗粒发生弹性形变,所以他们的 DEM 模型又被称为软颗粒模型。相对于 Cundall 的软颗粒模型, Campbell<sup>[24]</sup>提出了硬颗粒模型。在该模型中假设颗粒的接触是瞬间的、二元的,颗粒不发生形变,其计算速度要比软颗粒模型快,并且不会产生过低的空隙率。另外还有 Hybrid 模型和平均模型等。一般来说,硬颗粒模型主要应用于

高速颗粒流,采用这一模型可以模拟每个颗粒的碰撞过程和碰撞后颗粒的运动轨迹。软颗粒模型通常用于颗粒接触是持续且有粘着的情况。硬颗粒模型的颗粒瞬间碰撞的假设与实际的物理过程有一定的偏差,而软颗粒模型通过选取适宜的参数可以很好地预测颗粒的接触时间,这在考察颗粒间以及颗粒与气相间的热、质传递时很重要。

传统的 DEM 对颗粒的旋转运动没有过多的限制, Oda<sup>[25, 26]</sup>对此进行了修正,提出 MDEM 模型,加入了旋转弹簧-阻尼器模型。MDEM 模型对理想圆颗粒的易滚动而引起的偏离实际情况有明显的改进。

## 3 几种模型的比较

人们开展了大量的研究工作,以发展一种建立在颗粒特性基础上的流动理论,取得了许多显著的成果。在前面介绍的描述颗粒流动的模型中,塑性模型的理论是最早形成的,它主要是用于分析颗粒系统的应力结构,为料仓等设备的设计提供参考。

Chen<sup>[6]</sup>对粘性流模型、势流模型和 PKM 做了比较,具体结果如图 2 所示,3 个模型都能比较好地描绘出颗粒流动区域的形状,粘性流模型和势流模型得到的流动区域比较宽,PKM 得到的结果与实验最吻合。另外,在流动区域内势流模型得到的颗粒流动状态为平推流,这与实验结果不符合。

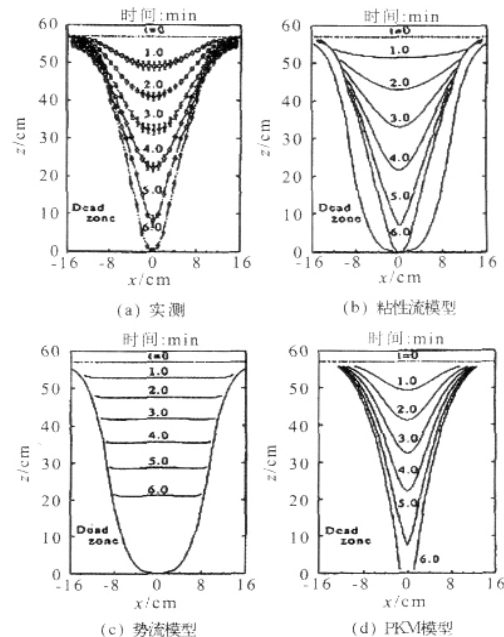


图 2 粘性流模型、势流模型和 PKM 的比较(平底移动床,中心卸料)



综合比较这 3 个模型, 势流模型得到结果与实验有比较大的偏差, 而粘性流模型对中心卸料过程和偏心卸料过程都可以得到比较好的结果, PKM 模型通过武锦涛<sup>[21]</sup>的修正也可以应用到偏心卸料过程的模拟。粘性流模型把颗粒相处理为连续的粘性流体, 可以利用 NS 方程来描述颗粒的运动, 这样求解连续流体运动的方法就可以用来模拟颗粒的运动, 模型方程可以通过通用的程序来求解。但要注意对不同的颗粒物系, 粘性流模型需要选用不同的颗粒粘度, 并且颗粒粘度不能通过颗粒物系的其他一些物性常识计算求得, 需要通过实验来确定, 这限制了粘性流模型的广泛应用。

武锦涛<sup>[27]</sup>对 PKM 和 DEM 模型进行了比较, 在

几何形状复杂的移动床中利用 DEM 模拟得到的数据分析  $v_x$  与  $\partial v/\partial x$  间的关系, 发现二者间的关系十分混乱, 完全偏离了线性关系, 如图 3 所示。由此可以看到, 对于几何复杂的流场, PKM 模型的颗粒水平速度  $v_x$  与垂直速度梯度  $\partial v/\partial x$  为线性关系的假定不再成立。Chou<sup>[20]</sup>认为运动常数 B 不再是一个不变的常量, 其值根据卸料后残留在移动床中的颗粒的高度来确定。Hsiau<sup>[34]</sup>也发现运动常数 B 与流场形状有关, 在颗粒汇聚流动时 B 为正, 而在进出口由于颗粒的膨胀, B 为负。另外出口处 B 的绝对值随壁面倾角的增大而增大。因此如果要进一步拓展 PKM 的应用范围, 需要深入的研究  $v_x$  与  $\partial v/\partial x$  间的关系。

另外, Monte-Carlo 模拟和 GMLG 模型都是基

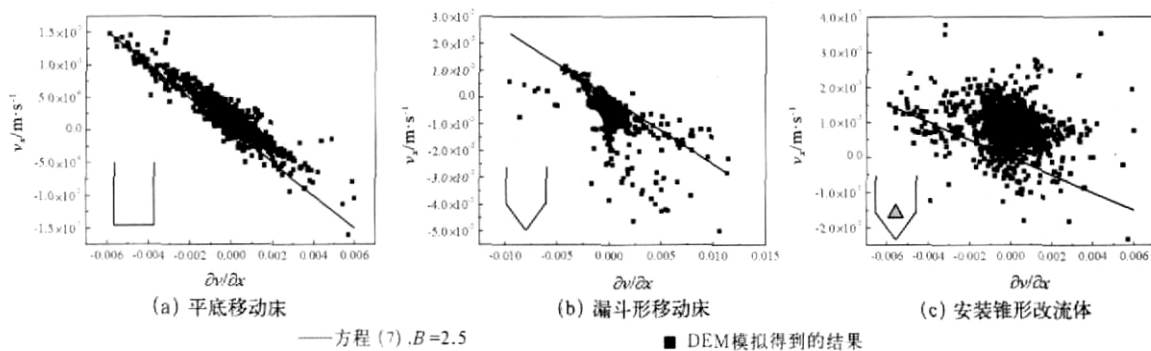


图 3 DEM 模型得到的不同几何结构移动床中  $\partial v/\partial x$  与  $v_x$  的关系

于随机算法的模型, 需要根据一定的概率来判断颗粒的运动, 得到的颗粒的运动轨迹是虚拟的, 并不代表颗粒的真实运动历程。当我们需要考虑颗粒系统中的热量传递和质量传递的时候, 往往要求知道颗粒的真实运动状况, 此时这些模型就不再适用了。

DEM 方法是在颗粒尺度上来考察各种量的变化<sup>[29]</sup>, 其主要优点是可以基于基本的数据模拟复杂系统而不必采用过分的简化假设, 能够更好地反映一些过程的本质, 并且与前面介绍的离散微粒学模型相比, 模拟得到的颗粒运动轨迹即为颗粒的实际运动历程, 并且可以很容易的将时间因素考虑进来, 因此可以应用到更广泛的领域, 包括移动床<sup>[29]</sup>、固定床<sup>[30]</sup>、流化床<sup>[31]</sup>以及气力输送过程<sup>[32]</sup>, 也可以描述颗粒系统中的传热过程<sup>[33]</sup>和化学反应<sup>[34]</sup>。但是也应该看到, DEM 模型以每个颗粒为研究对象, 其计算量随着颗粒数目的增加而指数增加。相信随着计算机技术的飞速发展以及计算方法的不断改进, 这个问题应该会得到有效的解决。

## 4 结 论

实际的颗粒流问题看似简单, 却十分复杂, 许多机理问题至今还不清楚。颗粒材料范围很广, 物性(形状、大小、密度、刚度、粗糙度等)各异, 聚集形态有别, 诱发流动方式也各不相同。因此, 各种流动机制差别很大。实践证明, 对不同的流动必须有不同的模型进行分析。现有模型尚只能处理一些较简单的颗粒流动问题, 要发展新的理论模型还需深入地开展研究。

### 参考文献(References):

- [1] YANG SC, HSIAU S S. The simulation and experimental study of granular materials discharged from a silo with the placement of inserts [J]. Powder Technology, 2001, 120 (3): 224-255.
- [2] JAEGER H M, NAGEL S R, BEHRIUGER R P. The physics of granular materials [J]. Physics Today, 1996, 49(2): 32-38.
- [3] BERNHARD Peters, ALGIS Dziugys. Numerical simulation of the motion of granular material using object-oriented techniques [J]. Comput. Methods Appl Mech Engrg, 2002, 191(17-18): 1983-2007.

- [4] FAYED M E, OTTEN L. 粉体工程手册[M]. 北京: 化学工业出版社, 1992.
- [5] TÜZÜN U, HOULSBY G T, NEDDERMAN R M, SAVEGE S B. The flow of granular materials- II: velocity distributions in slow flow [J]. Chemical Engineering Science, 1982, 37 (12): 1691-1709.
- [6] 黄长雄, 马兴华, 李佑楚, 等. 化学工程手册: 第 19 篇 颗粒及颗粒系统[M]. 北京: 化学工业出版社, 1989.
- [7] CHEN Ji-zhong, TOMOHIRO AKIYAMA, HIROSHI NOGAMI, et al. Modeling of solid flow in moving beds [J]. ISIJ International, 1993, 33 (6): 664-671.
- [8] CHEN Ji-zhong. Fundamental Study on Flow characteristics of Gas, Solids and Powders in the Blast Furnace[D]. Sendia Tohoku University, 1993.
- [9] MULLINS W W. Stochastic theory of particle flow under gravity[J]. Journal of Applied Physics, 1972, 43(2): 665-678.
- [10] ROSATE A, PRINZ F, STANDBURG K J, et al. Monte Carlo simulation of particulate matter segregation[J]. Powder Technology, 1986, 49 (1): 59-69.
- [11] KEVIN SEIBERT D, MARK BURNS A. Simulation of fluidized beds and other fluid-particle systems using statistical mechanics [J]. AIChE, 1996, 42 (3): 660-670.
- [12] KEVIN SEIBERT D, MARK BURNS A. Simulation of structural phenomena in mixed-particle fluidized beds[J]. AIChE, 1998, 44 (3): 528-537.
- [13] KHAKHAR D V, MCCHARTY J J, JOTTINO J M. Mixing and segregation of granular materials in chute flows[J]. Chaos, 1999, 9(3): 594-610.
- [14] OTTINO, J M, KHAKHAR, D V. Mixing and Segregation of Granular Materials[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2000, 32 (1): 55-91.
- [15] HOOMANS B P B. Granular Dynamics of Gas-Solid Two-Phase Flows[D]. Enschede, Twente University, 2000.
- [16] KÁROLYI A, KERTÉ SZ J. Granular medium lattice gas model: the algorithm[J]. Computer Physics Communications, 1999, 121-122: 290-293.
- [17] MULLINS W W. Experiment evidence for the stochastic theory of particle flow under gravity[J]. Powder Technology, 1974, 9(1): 29-37.
- [18] MULLINS W W. Critique and comparison of two stochastic theories of gravity-induced particle flow[J]. powder technology, 1979, 23(1): 115-119.
- [19] NEDDERMAN R M, TÜZÜN U. A kinematic model for the flow of granular materials[J]. Powder Technology, 1979, 22(2):243-253.
- [20] CHOU C S, HSU J Y, LAU Y D. The granular flow in a two-dimensional flat-bottomed hopper with eccentric discharge[J]. Physica A, 2002(308):46-58.
- [21] 武锦涛, 陈纪忠, 阳永荣. 移动床中固体颗粒“运动模型”的修正[J]. 高校化学工程学报, 2005, 19(6): 739-744.
- [22] CUNDALL P A, STRACK O D L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. Geotechnique, 1979, 29(1): 47-65.
- [23] 武锦涛, 陈纪忠, 阳永荣. 模拟颗粒流动的离散元方法及其应用[J]. 现代化工, 2003, 23(4): 56-58.
- [24] CAMPBELL C S, BRENNEN C E. Computer simulation of granular shear flows[J]. J Fluid Mech, 1985, 151:167-188.
- [25] IWASHITA K, ODA M. Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method[J]. Powder Technology, 2000, 109(1):192-205.
- [26] ODA M. A mechanical and statistical model of granular material[J]. Soils and Foundations, 1974, 14:13-27.
- [27] 武锦涛. 移动床中固体颗粒运动于传热的研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2005.
- [28] HSIU S S, SMID J, WANG C Y, et al. Velocity profiles of granules in moving bed filters[J]. Chemical Engineering Science, 1999, 54 (3): 293-301.
- [29] 武锦涛, 陈纪忠, 阳永荣. 移动床中颗粒运动的微观分析[J]. 浙江大学学报, 2006, 40(5):864-868.
- [30] MATUTTISH G, LUDING S, HERRMANN H J. Discrete element simulations of dense packings and heaps made of spherical and non-spherical particles[J]. Powder Technol. 2000, 109 (1-3): 278-292.
- [31] PANDIT Jai Kant, WANG X S, RHODES M J. On Geldart Group A behaviour in fluidized beds with and without cohesive interparticle forces: A DEM study[J]. Powder Technol. 2006, 164 (3): 130-138.
- [32] HAN Ting, LEVY Avi, KALMAN Haim. DEM simulation for attrition of salt during dilute-phase pneumatic conveying[J]. Powder Technol. 2003, 129 (1-3): 92-100.
- [33] 武锦涛, 陈纪忠, 阳永荣. 移动床中颗粒接触传热的数学模型[J]. 化工学报, 2006, 57(4), 719-725.
- [34] KANEKO Yasunobu, SHIOJIMA Takeo, HORIO Masayuki, DEM simulation of fluidized beds for gas-phase olefin polymerization [J]. Chem. Eng. Sci. 1999, 54(24): 5809-5821.

## 欢 迎 订 阅 2008年《中国粉体技术》 (双月刊)

订刊电话: 0531- 82765659, 87154935( 传真)      网址: <http://www.chinapowder.org>  
 汇款地址: 山东省济南市济微路 106 号, 济南大学中国粉体技术杂志社      邮编: 250022