

基于离散单元法和人工神经网络的近壁颗粒动力学特征研究

段总样，赵云华，徐 璋

CHARACTERIZATION OF NEAR-WALL PARTICLE DYNAMICS BASED ON DISCRETE ELEMENT METHOD AND ARTIFICIAL NEURAL NETWORK

Duan Zongyang, Zhao Yunhua, and Xu Zhang

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-313>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[基于人工神经网络的非结构网格尺度控制方法](#)

UNSTRUCTURED MESH SIZE CONTROL METHOD BASED ON ARTIFICIAL NEURAL NETWORK

力学学报. 2021, 53(10): 2682–2691

[基于人工神经网络的亚格子应力建模](#)

SUBGRID-SCALE STRESS MODELING BASED ON ARTIFICIAL NEURAL NETWORK

力学学报. 2021, 53(10): 2667–2681

[基于人工神经网络的湍流大涡模拟方法](#)

ARTIFICIAL NEURAL NETWORK-BASED SUBGRID-SCALE MODELS FOR LARGE-EDDY SIMULATION OF TURBULENCE

力学学报. 2021, 53(1): 1–16

[基于人工神经网络的声子晶体逆向设计](#)

INVERSE DESIGN OF PHONONIC CRYSTALS BY ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

力学学报. 2021, 53(7): 1992–1998

[基于机器学习的非结构网格阵面推进生成技术初探](#)

PRELIMINARY INVESTIGATION ON UNSTRUCTURED MESH GENERATION TECHNIQUE BASED ON ADVANCING FRONT METHOD AND MACHINE LEARNING METHODS

力学学报. 2021, 53(3): 740–751

[考虑等效曲率的超二次曲面单元非线性接触模型](#)

NON-LINEAR CONTACT MODEL FOR SUPER-QUADRIC ELEMENT CONSIDERING THE EQUIVALENT RADIUS OF CURVATURE

力学学报. 2018, 50(5): 1081–1092



关注微信公众号，获得更多资讯信息

基于离散单元法和人工神经网络的近壁 颗粒动力学特征研究¹⁾

段总样 赵云华²⁾ 徐 璇

(浙江工业大学机械工程学院, 杭州 310014)

摘要 颗粒与壁面的相互作用往往对颗粒流动具有显著影响。为研究颗粒与壁面作用机理, 对滚筒内颗粒流动过程进行离散单元法(DEM)数值模拟。基于模拟结果统计分析靠近壁面处颗粒的运动特征, 结果表明, 小摩擦系数时颗粒平动和旋转速度均近似满足正态分布, 但由于壁面影响, 摩擦系数增大时颗粒沿滚筒轴向的旋转速度偏离正态分布, 颗粒动力学理论推导壁面边界条件时应考虑速度正态分布的修正及速度脉动的各向异性。采用人工神经网络(ANN)构建了颗粒无因次旋转温度、滑移速度和平动温度之间的函数模型, 进而可以在常规双流模型壁面边界条件中考虑颗粒旋转的影响。基于 DEM 模拟及结果分析可以为壁面边界条件的理论构造和半经验修正提供基础数据和封闭模型。

关键词 离散单元法, 人工神经网络, 颗粒动力学, 固壁边界条件, 滚筒

中图分类号: TK05 文献标识码: A doi: [10.6052/0459-1879-21-313](https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-313)

CHARACTERIZATION OF NEAR-WALL PARTICLE DYNAMICS BASED ON DISCRETE ELEMENT METHOD AND ARTIFICIAL NEURAL NETWORK¹⁾

Duan Zongyang Zhao Yunhua²⁾ Xu Zhang

(School of Mechanical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China)

Abstract The interactions between the particles and the walls often have significant effects on the particle flows. In order to study the mechanism of the interactions between the particles and the walls, the discrete element method (DEM) simulations of the particle flow in the rotating drum are carried out. Based on the statistical analysis of the simulation results, the characteristics of the near-wall particle motion are shown. The results indicate that the particle translational and rotational velocity approximately satisfy the normal distribution when the friction coefficient is small. However, due to the wall effects, the axial rotational velocity deviates from the normal distribution when the friction coefficient increasing. The kinetic theory of granular flow should consider the correction of the velocity normal distribution and also the anisotropic of the velocity fluctuation when deriving the wall boundary conditions. An artificial neural network (ANN) is used to construct a function model between dimensionless particle rotational temperature and particle slip velocity and particle translational temperature, and then the influence of particle rotation can be incorporated in the conventional boundary conditions within the two-flow model. Through comprehensive DEM simulation and result

2021-06-29 收稿, 2021-09-09 录用, 2021-09-10 网络版发表。

1) 国家自然科学基金资助项目 (51976194).

2) 赵云华, 副教授, 主要研究方向: 气固两相流. E-mail: zhaoyh@zjut.edu.cn

引用格式: 段总样, 赵云华, 徐璇. 基于离散单元法和人工神经网络的近壁颗粒动力学特征研究. 力学学报, 2021, 53(10): 2656-2666

Duan Zongyang, Zhao Yunhua, Xu Zhang. Characterization of near-wall particle dynamics based on discrete element method and artificial neural network. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2021, 53(10): 2656-2666

analysis could provide basic data and closure models for the theoretical construction and semi-empirical correction of the wall boundary conditions.

Key words discrete element method, artificial neural network, kinetics theory of granular flow, solid-wall boundary conditions, rotating drum

引言

密集颗粒流及气粒两相流大量应用于食品和药物加工、石油化工和能源转化等行业。由于颗粒与颗粒之间及气体与颗粒之间存在强烈的非线性耗散作用, 密集颗粒流及气粒流动中往往会出现复杂的非均匀多尺度流动现象^[1-5]。近年来, 国内外诸多学者致力于采用数值模拟方法来研究这种复杂流动, 目前针对颗粒相的数值模拟方法主要有离散单元法(DEM)和双流体方法(TFM)。DEM 相当于颗粒相的直接数值模拟, 计算准确性高, 但计算量大; 而 TFM 方法中颗粒相都被视为完全互穿的连续体, 由单独的质量、动量和能量守恒方程描述。这种颗粒拟流体的连续性表示, 使得计算量不直接取决于颗粒数, 计算量相对较小。但需要提供额外的颗粒相本构模型以及气体与颗粒相间作用模型, 而这些模型的可靠性将直接影响到 TFM 计算结果的准确性。

颗粒力学理论^[6-8](KTGF)被广泛用于推导颗粒相本构模型, 其中包含了描述颗粒与颗粒作用的本构模型和描述颗粒与固体壁面作用的壁面边界条件。对于后者, 理论研究相对较少, 当前应用最广泛的是 Johnson 和 Jackson 边界条件^[9], 它包含弹性恢复系数 e 和光滑因子 ϕ 两个输入参数, 分别用以描述颗粒与壁面碰撞时法向和切向上的速度变化。光滑因子 ϕ 的直接实验测量是不可行的, 通常都是通过调整数值来拟合实验数据而获得, 这非常耗时且适用范围窄^[10-11]。为此, 一些学者尝试使用颗粒物性和流动参数来建立光滑因子 ϕ 的函数。Li 和 Benyahia^[12]提出了一个适用于低摩擦系数下的光滑因子函数关联式, 其中光滑因子被拟合为壁面上颗粒法向恢复系数、摩擦系数和无因次滑移速度的函数。Jenkins^[13]引入 3 个可测物性参数, 库伦摩擦系数 μ 、切向弹性恢复系数 β 和法向弹性恢复系数 e , 来共同描述微观颗粒与壁面的碰撞行为, 并通过假设近壁颗粒速度满足正态分布, 建立了小摩擦和大摩擦两种极限情况下的壁面边界条件。Schneiderbauer 等^[14]进一步推导了从小摩擦到大摩擦全域统一的

边界条件表达式。Zhao 等^[15]和 Yang 等^[16]考虑颗粒旋转运动, 建立了适用于粗糙颗粒的壁面边界条件, 并发现考虑颗粒旋转效应后, 模型预测与 Louge^[17]模拟结果的一致性要优于之前的模型。由此可见, 可靠的壁面边界条件需要关联各种颗粒物性参数和更详尽的颗粒流动状态参数, 但由于壁面附近颗粒属性真实分布函数的缺乏以及三维碰撞过程数学积分求解的复杂, 想要通过理论精确推导出统一的壁面边界条件较为困难。因而在前期研究中, 通常假设颗粒速度满足正态分布^[12-16], 并且忽略颗粒旋转效应^[12-14]; 而考虑颗粒旋转效应时又会增加额外的旋转变量, 在 TFM 中需要求解附加的输运方程进行封闭^[15-16]。为此, 本文尝试在常规 TFM 中对近壁颗粒旋转变量进行局部代数型封闭, 从而避免在整个流场中求解旋转变量的输运方程。

近年来, 随着计算机技术不断提高, 使得机器学习等人工智能技术也快速发展, 其中作为机器学习研究热门之一的人工神经网络模型(ANN)已经发展得较为完善。人工神经网络是对人脑组织和运行机制的某种抽象、简化和模拟, 根据已知的一系列训练集, 利用黑箱式学习方法的一种高效的数据处理和预测方法, 具有效率高、联想记忆、预测效果好等优点, 因此, 人工神经网络模型逐渐应用于不同学科的研究之中。如胡洲等^[18]采用神经网络建立非球形散体颗粒的休止角模型, 发现休止角随颗粒形状变量、摩擦因数的增加都呈现增大的趋势, 与现有研究结果一致; 闫盛楠等^[19]采用人工神经网络模型, 对非球形颗粒气固曳力系数进行了预测及分析, 并将模拟结果同文献中的实验数据进行对比分析, 结果表明, 人工神经网络可用于非球形颗粒气固曳力系数的预测研究。

因此, 本文拟采用 DEM 方法对颗粒流进行直接模拟, 获得壁面附近颗粒微观运动数据和壁面与颗粒直接作用力; 在此基础上统计分析颗粒的宏观运动特征, 为颗粒力学理论推导的基本假设提供参考, 并基于人工神经网络模型挖掘颗粒旋转运动变量与颗粒物性参数和平动运动变量之间的隐含关

系。旨在为常规 TFM 方法建立更加可靠的壁面边界条件寻求可行的方法和基础数据。

1 数学模型

在 DEM 模拟中, 每个颗粒的运动受牛顿第二定律支配, 质量为 m_i 的颗粒的平动和旋转运动可由下式描述^[20]

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_{n,ij} + \mathbf{F}_{t,ij}) + m_i \mathbf{g} \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j \left(\mathbf{R}_{c,ij} \times \mathbf{F}_{t,ij} - \mu_r R^* |\mathbf{F}_{n,ij}| \frac{\omega_{r,ij}}{|\omega_{r,ij}|} \right) \quad (2)$$

式中, \mathbf{v}_i , ω_i 和 I_i 分别表示颗粒 i 的平动速度、旋转速度和惯性矩, \mathbf{g} 为重力加速度。 $\mathbf{F}_{n,ij}$ 和 $\mathbf{F}_{t,ij}$ 分别表示颗粒 j 施加在颗粒 i 上的法向和切向接触力。 $\mathbf{R}_{c,ij}$ 为从颗粒 i 的中心到颗粒 i 与颗粒 j 之间接触点的矢量。式(2)中的最后一项为滚动摩擦引起的阻力扭矩。 μ_r 为滚动摩擦系数, $R^* = R_i R_j / (R_i + R_j)$ 为等效半径, $\omega_{r,ij} = \omega_i - \omega_j$ 为相对角速度。

根据 Hertz–Mindlin 接触理论^[21–22], 法向接触力可以由下式给出

$$\mathbf{F}_{n,ij} = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R^* \delta_{n,ij}} \delta_{n,ij} \mathbf{n}_{ij} - \sqrt{\frac{5}{6}} \frac{2 \ln e}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}} \sqrt{2m^* E^* \sqrt{R^* \delta_{n,ij}}} (\mathbf{v}_{n,ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij} \quad (3)$$

式中, \mathbf{n}_{ij} 是指从颗粒 j 的中心指向颗粒 i 的中心的单位矢量, $\mathbf{v}_{n,ij}$ 和 $\delta_{n,ij}$ 分别为两个颗粒之间的法向相对速度矢量和接触重叠量, e 为弹性恢复系数; $m^* = m_i m_j / (m_i + m_j)$ 为等效质量, $E^* = E_i E_j / [(1 - \nu_j^2) E_i + (1 - \nu_i^2) E_j]$ 为等效杨氏模量, ν_i 和 ν_j 为颗粒 i 和颗粒 j 的泊松比。

相应的切向接触力由下式给出

$$\mathbf{F}_{t,ij} = 8G^* \sqrt{R^* \delta_{n,ij}} \delta_{t,ij} \mathbf{t}_{ij} - \sqrt{\frac{5}{6}} \frac{2 \ln e}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}} \sqrt{8m^* G^* \sqrt{R^* \delta_{n,ij}}} (\mathbf{v}_{t,ij} \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{t}_{ij} \quad (4)$$

式中, \mathbf{t}_{ij} , $\mathbf{v}_{t,ij}$ 和 $\delta_{t,ij}$ 分别表示两颗粒之间切向的单位矢量、相对速度矢量和重叠量, $G^* = G_i G_j / [(2 - \nu_j) G_i + (2 - \nu_i) G_j]$ 为等效剪切模量。

切向力的大小受到库仑摩擦定律的限制。如果式(3)和式(4)计算结果满足以下条件

$$|\mathbf{F}_{t,ij}| > \mu |\mathbf{F}_{n,ij}| \quad (5)$$

式中, μ 为摩擦系数, 则碰撞接触点上会发生滑动, 此时切向接触力按下式计算

$$\mathbf{F}_{t,ij} = \mu |\mathbf{F}_{n,ij}| \mathbf{t}_{ij} \quad (6)$$

2 模拟结果与讨论

2.1 模拟工况

在研究颗粒与壁面作用关系时, 可以选择相对简单的模拟对象, 如滚筒、斜槽^[23] 或者库埃特(Couette)流^[17]。本文以石油化工中常见的滚筒为模拟对象。事实上, 已经有许多学者对滚筒进行各种实验和模拟研究, 如顾从汇等^[24]通过实验和数值模拟研究丝状散体颗粒在滚筒内的停留时间; 胡陈枢等^[25]采用 DEM 方法对滚筒内二元颗粒在不同转速下的运动进行模拟; 张立栋等^[26]采用 DEM 方法研究滚筒内构件对二元颗粒体系运动混合的影响, 并分析其增混机理。但多数研究都是关注滚筒内部颗粒宏观运动特征, 然而颗粒和壁面作用通常至关重要^[27–29], 对滚筒而言, 颗粒和壁面间的相互作用驱动着整个颗粒系统运动。

本文模拟的滚筒为 Parker 等^[30]的实验装置。为了最大限度的接近实验, 模拟采用与实验一致的全尺寸, 颗粒则简化为均一直径。滚筒壁和颗粒材料均为有机玻璃, 相关结构和物性参数如表 1 所示。模拟运行 18 s, 时间步长为 5.6×10^{-6} s, 为避免初始效应

表 1 模拟参数

Table 1 Simulation parameters

Parameters	Value
drum diameter, D/m	0.1
drum length, L/m	0.65
drum fill level/%	35
total number of particles	72 000
particle diameter, d/m	0.003
particles density, $\rho/(kg \cdot m^{-3})$	2500
Young modulus, $E/(N \cdot m^{-1})$	1.0×10^7
Poisson ratio, ν	0.29
restitution coefficient, e	0.9
sliding friction coefficient, μ	0.7
rolling friction coefficient, μ_r	0.01

的影响, 用于统计的数据样本取自 8~18 s.

图 1 为瞬时颗粒分布, 其中颜色表示速度大小. 图中颗粒速度在轴向具有较好的相似性, 但在两端面附近表层颗粒速度略有增加. Zhang 等^[31] 研究表

明端壁摩擦对颗粒轴向扩散具有增强效应, 但其研究的滚筒长径比为 1, 而本模拟的滚筒长径比为 6.5, 因此端壁摩擦导致的轴向非均匀性较弱, 模拟结果在轴向上具有较好的对称性.

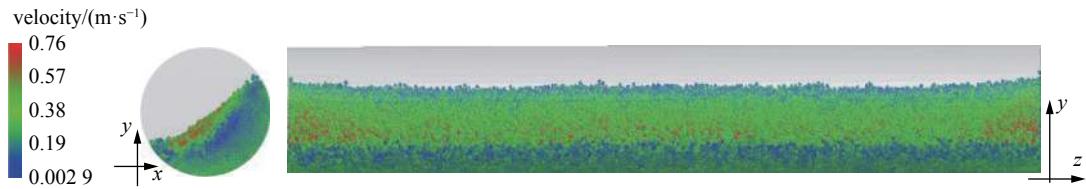


图 1 滚筒内的颗粒分布

Fig. 1 Particle distribution in the drum

图 2 为各转速下滚筒最低点偏右 $\theta = 30^\circ$ 位置上颗粒切向速度模拟和实验结果对比图. 从图 2(a) 中可以看出, 摩擦系数取为 0.7 时得到的切向速度曲线与实验结果一致; 图 2(b) 中针对不同转速下也获得较好的预测结果, 特别是在近壁区域, 模拟预测与实验结果吻合较好. 通过 DEM 模拟获得接近物理实际的结果, 将保障后续数据统计分析结果的可靠性.

在统计近壁处颗粒信息时, 为保证结果的独立性, 选取贴壁网格应该尽量要小, 同时又要保证一定的颗粒数以减小统计误差. 考虑到颗粒在滚筒轴向

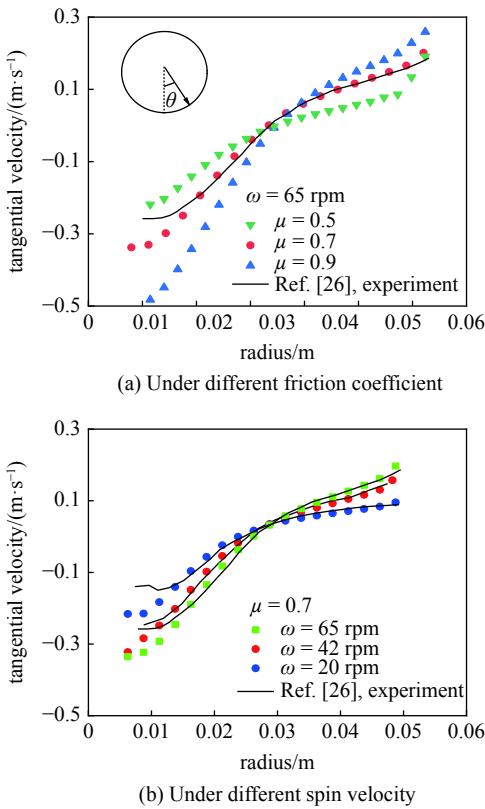


图 2 切向速度与实验数据的比较

Fig. 2 Comparison of the tangential velocity with experiment data

的对称性, 贴壁网格在轴向取滚筒全长, 而在横截面上则如图 3 阴影区域所示, 由周向尺寸 $\delta\theta$ 和径向尺寸 Δ 共同确定. 其中径向尺寸 Δ 决定了统计颗粒靠近壁面的程度, 对近壁颗粒的统计特性更为重要. 图 3 显示了贴壁网格的径向尺寸 Δ 与平均颗粒变量(颗粒速度 v_t 和 ω_z 以及颗粒温度 T 和 Θ) 的关系. 其中颗粒温度是颗粒速度脉动程度的度量, 颗粒平动温度和旋转温度的定义和统计公式如下所示

$$T = \frac{1}{3} \langle (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) \cdot (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) \rangle$$

$$= \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N \left[(v_{x,i} - \bar{v}_x)^2 + (v_{y,i} - \bar{v}_y)^2 + (v_{z,i} - \bar{v}_z)^2 \right] \quad (7)$$

$$\Theta = \frac{I}{3m} \langle (\boldsymbol{\omega} - \bar{\boldsymbol{\omega}}) \cdot (\boldsymbol{\omega} - \bar{\boldsymbol{\omega}}) \rangle$$

$$= \frac{I}{3mN} \sum_{i=1}^N \left[(\omega_{x,i} - \bar{\omega}_x)^2 + (\omega_{y,i} - \bar{\omega}_y)^2 + (\omega_{z,i} - \bar{\omega}_z)^2 \right] \quad (8)$$

式中, $\bar{\mathbf{v}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{\omega}}$ 分别是颗粒平动和旋转速度的平均值, 运算符 $\langle \rangle$ 表示系综平均, N 为贴壁网格内的颗粒样本总数. 从图 3 中可以看出, 当贴壁网格周向尺寸

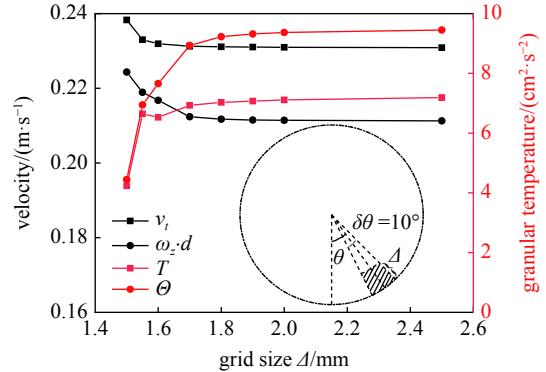


图 3 网格大小与平均颗粒变量的关系

Fig. 3 Relationship between mesh size and averaged particle variables

$\delta\theta = 10^\circ$, 径向尺寸 Δ 达到 1.8 mm 时平均颗粒速度和温度都趋于稳定, 因此选取贴壁网格大小 $\delta\theta = 10^\circ$ 和 $\Delta = 1.8$ mm 进行后续分析研究.

2.2 颗粒微观运动

2.2.1 平动速度分布

在欧拉方法中, 通常由颗粒动力学理论提供描述颗粒运动特性的本构关系. 颗粒动力学借鉴分子运动论, 假设颗粒运动速度近似满足正态分布, 颗粒壁面边界条件也是基于这样的假设^[13]. 对颗粒运动信息进行统计分析, 发现近壁处颗粒的平动速度的确较好地符合正态分布, 如图 4 所示. 图中统计参数

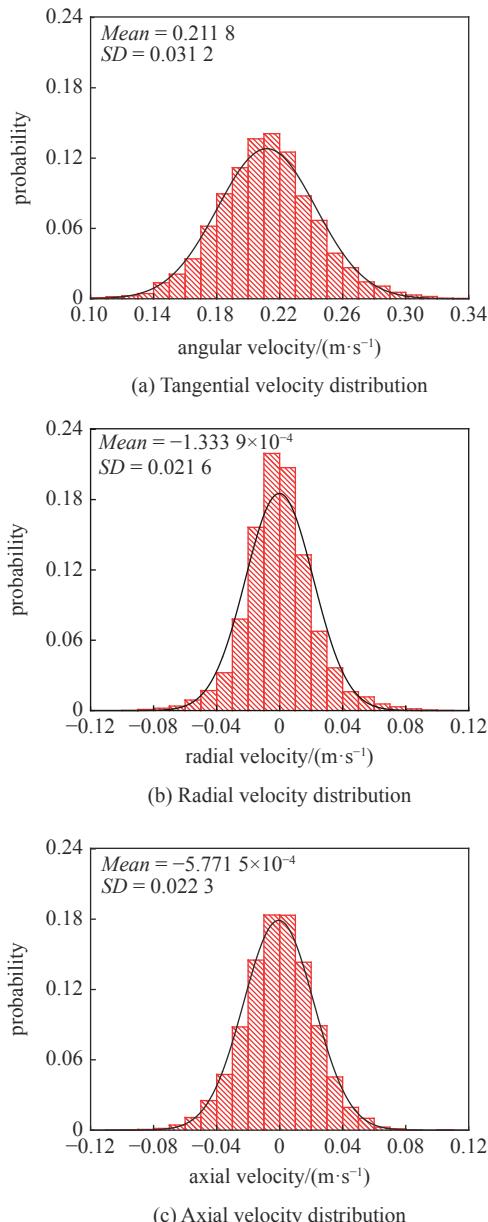


图 4 近壁颗粒平动速度分布

Fig. 4 Translational velocity distribution of near-wall particles

取自滚筒最低点偏右 $\theta = 30^\circ$ 贴壁网格(网格见图 3)内的颗粒. 由于受到壁面剪切作用, 切向的颗粒平动速度均值和标准差 SD 最大; 而在壁面阻碍和轴向对称性作用下, 径向和轴向的颗粒平动速度均值趋近零, 标准差 SD 也相对较小. 颗粒速度分布的标准差反映了颗粒速度脉动的强弱, 显然, 在壁面作用下颗粒速度脉动呈现出各向异性.

在研究壁面边界条件时, 摩擦系数对壁面颗粒运动具有显著影响^[31]. 表 2 给出了不同摩擦系数下, 壁面附近颗粒平动速度分布的统计结果. 其中决定系数 R^2 可以表征正态分布函数拟合的好坏, 取值范围为 [0,1], 越接近 1 表明数据拟合地越好. 由表 2 可知, 4 个摩擦系数下的决定系数均大于 0.92, 表明颗粒平动速度都较好地符合正态分布; 此外, 不同摩擦系数下, 切向的标准差 SD 总是最大的, 表明颗粒平动速度脉动存在各向异性^[32].

表 2 平动速度分布的标准差和决定系数

Table 2 Standard deviation and determination coefficient of translational velocity distribution

μ	0.3	0.5	0.7	0.9
SD_t	0.02377	0.03048	0.03122	0.02929
SD_r	0.01312	0.02087	0.02157	0.02168
SD_z	0.0189	0.02023	0.02233	0.02215
R_t^2	0.93513	0.96393	0.98887	0.99515
R_r^2	0.92683	0.93184	0.96179	0.97895
R_z^2	0.98524	0.99693	0.99575	0.99548

随着摩擦系数的减小, 各个方向的标准差 SD 有减小的趋势; 当摩擦系数降为 0.3 时, 由于颗粒与壁面的摩擦作用减小, 颗粒受壁面剪切激发的程度也相对减弱, 颗粒速度脉动也因此减弱. 这在颗粒动力学理论中表现为颗粒从宏观运动中获得的能量减小, 从而导致颗粒温度下降. 此外, 摩擦系数减小后, 除轴向速度外, 切向和径向速度的决定系数也明显减小, 即正态分布假设的可靠性有所减弱; 这表明近壁颗粒速度分布的主要影响因素仍然是壁面的径向阻碍作用, 其次才是壁面切向的摩擦剪切作用. 因此, 在颗粒动力学理论中考虑颗粒与壁面作用时, 引入颗粒平动速度正态分布假设基本上是合理的, 但更精细的模型还应进一步考虑颗粒平动速度脉动的各向异性.

2.2.2 旋转速度分布

滚筒最低点偏右 $\theta = 30^\circ$ 贴壁网格内颗粒旋转速度分布如图 5 所示, 其中 ω_x 和 ω_y 两个旋转速度可以通过坐标旋转得到切向和径向旋转速度, 因此它们的分布规律共同体现了切向和径向旋转速度分布特征。由图 5 可知, x 和 y 方向上旋转速度较好的满足正态分布, 且均值接近零、标准差 SD 也大小相当; 但轴向 ω_z 均值和标准差都相对较大, 并且离正态分布有较大的偏离。因此, 在动力学理论中直接将颗粒旋转速度假设为正态分布, 将产生一定的误差。根据 Schneiderbauer 等^[14] 研究, 颗粒在壁面上的旋转速度 ω_z 主要由颗粒与壁面的平动滑移速度 $V_{\text{slip}} = \bar{v}_t - v_{\text{wall}}$

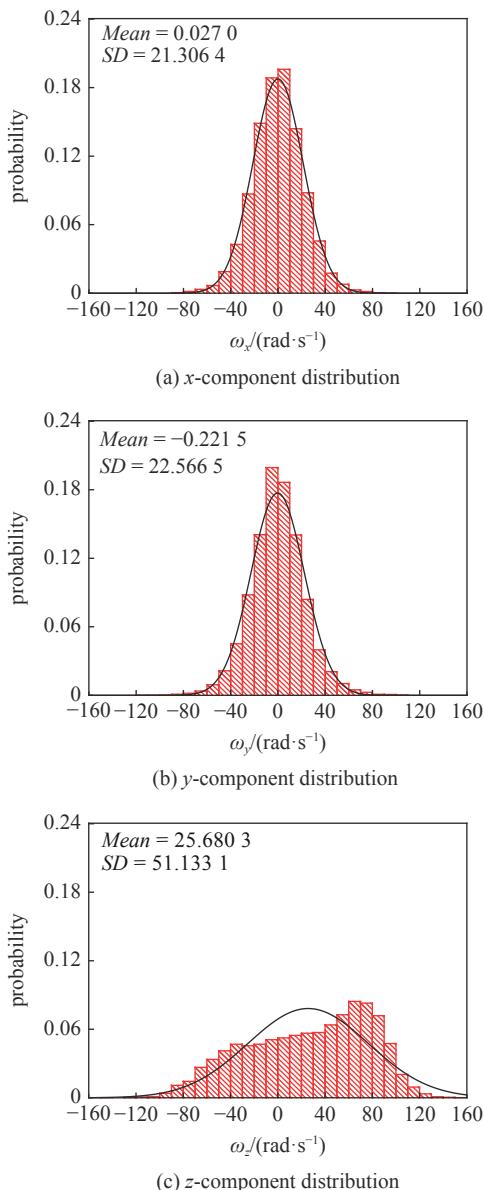


图 5 近壁颗粒旋转速度分布

Fig. 5 Rotational velocity distribution of near-wall particles

驱动, 如果颗粒速度满足正态分布, 则 $\omega_z \approx \mu V_{\text{slip}}/d$ 。根据图 4 中的平动速度均值及滚筒转速可以计算出 $\omega_z \approx 30 \text{ rad/s}$, 与模拟统计均值约 25.7 rad/s 相比误差明显。

图 6 为摩擦系数为 0.3, 0.5 和 0.9 时, 颗粒轴向旋转速度分布。结合图 5(c), 可以发现随着摩擦系数的提高, 颗粒轴向旋转速度 ω_z 分布逐渐偏离正态分布; 在摩擦系数为 0.9 时, ω_z 分布明显趋近于双峰分布。在 Parker 等^[30] 的实验分析中, 对 $A = 6 \text{ mm}$ 的贴壁网格也统计出双峰分布的结果, 并且双峰效应随着滚筒转速的增加而增强; 其解释为贴壁网格径向

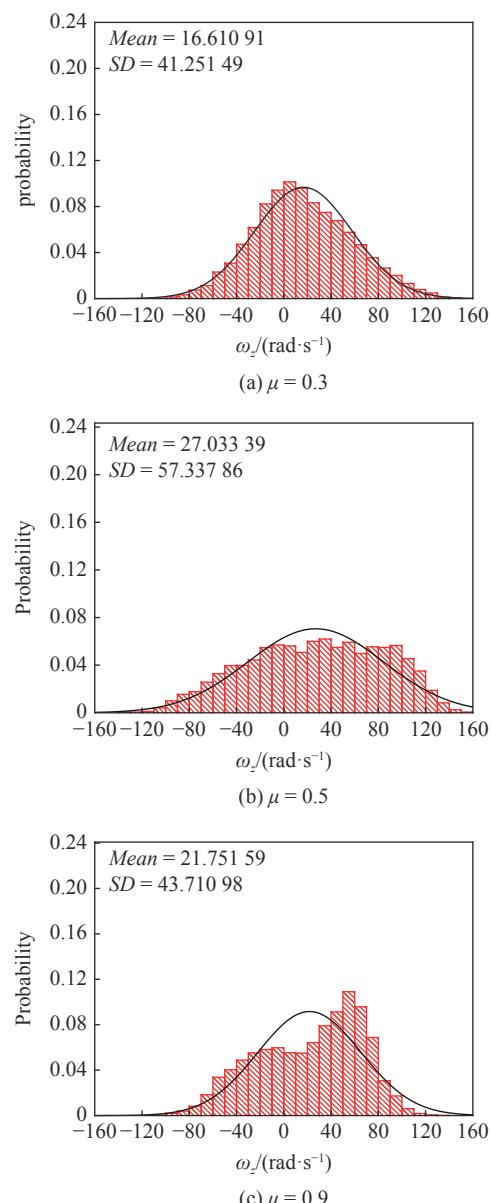


图 6 不同摩擦系数下的近壁颗粒轴向旋转速度分布

Fig. 6 Axial rotational velocity distribution of near-wall particles under different friction coefficients

尺寸为 6 mm 至少包含两层直径为 3 mm 的颗粒, 不同层颗粒因受壁面剪切影响程度不同而具有各自不同的旋转特性, 从而导致在 $\Delta = 6 \text{ mm}$ 的贴壁网格中出现双峰分布。而本文贴壁网格 $\Delta = 1.8 \text{ mm}$, 所统计颗粒都贴近壁面, 出现双峰分布的主要原因仍是剪切效应; 此时, 贴壁网格内的颗粒受到下层壁面和上层颗粒的两面剪切, 不同摩擦系数下两面剪切的影响程度不同, 当摩擦系数增大时, 两面剪切差异增加从而产生双峰结果。

表 3 为不同摩擦系数下的颗粒旋转速度统计分析结果。从表 3 中可以看出, 摩擦系数为 0.3 时, 旋转

速度分布的拟合决定系数接近 1; 但随着摩擦系数增加, 轴向旋转速度分布的拟合决定系数明显减小, 摩擦系数在 0.5, 0.7 和 0.9 时, 拟合决定系数小于 0.9, 表明其严重偏离正态分布, 这与图 6 旋转速度的直观分布是一致的。同时, 不同摩擦系数下, 轴向旋转速度分布的标准差 SD 均明显大于其他两个方向, 表现出较强的各向异性。总的来说, 切向和径向的旋转速度分布仍然较好的满足正态分布, 但轴向的旋转速度分布随着摩擦系数的增加越偏离正态分布。因此, 与颗粒平动速度分布不同, 在动力学理论中将壁面附近颗粒旋转速度假设为正态分布需谨慎。

表 3 旋转速度分布的标准差和决定系数

Table 3 Standard deviation and determination coefficient of rotational velocity distribution

μ	0.3	0.5	0.7	0.9
SD_X	11.903 68	18.654 82	21.306 43	21.806 27
SD_Y	15.862 29	22.586 76	22.566 52	21.888 01
SD_Z	41.251 49	57.337 86	51.133 13	43.710 98
R^2_X	0.986 82	0.992 91	0.995 69	0.995 35
R^2_Y	0.990 72	0.984 69	0.985 89	0.984 91
R^2_Z	0.977 12	0.870 48	0.767 09	0.728 41

2.3 无因次旋转温度

在颗粒动力学理论中, 颗粒温度将单个颗粒的微观小尺度脉动行为与大量颗粒所表现的宏观流动性质相关联, 出现在颗粒黏度、压力和扩散系数等参数的本构关系中。实际颗粒碰撞过程中, 平动能与旋转能量会相互转化, 因此颗粒平动温度与旋转温度应相互耦合。颗粒与壁面作用时, 旋转温度的影响是不可忽略的^[14], 但常规欧拉双流体模型中并未求解颗粒旋转温度, 为此需建立颗粒旋转温度的代数型封闭关联式。Jenkins 和 Zhang^[33] 曾将球形颗粒无因次旋转温度 $\lambda = 2.5\theta/T$ 关联为颗粒物性参数的函数; Zhao 等^[15] 曾将 λ 关联为颗粒物性参数和无因次滑移速度的函数。但这些封闭关联式, 主要是根据理论简化假设或简单数据拟合, 可能忽略了某些起作用的因素。通过 DEM 模拟, 可以得到大量的近壁颗粒运动信息, 传统方法在处理这些数据时较为吃力; 而数据挖掘方法不仅能够处理大量数据, 同时能够探索数据之间的隐藏规律, 神经网络就是数据挖掘常用的一种方法。因此本文将 DEM 模拟得到的颗

粒运动信息包括颗粒速度和颗粒温度等作为神经网络的输入, 采用人工神经网络进行颗粒无因次旋转温度的预测学习, 尝试建立颗粒无因次旋转温度的封闭关联式。

图 7 为本文采用的 BP 神经网络结构示意图。BP 神经网络是一种多层的前馈神经网络, 其主要的特点是: 信号是前向传播的, 而误差是反向传播的, 传播过程主要分为两个阶段, 第一阶段是信号的前

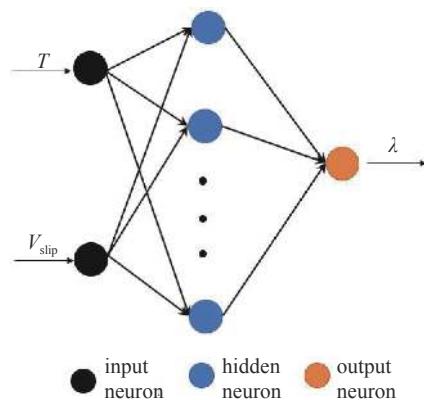


图 7 本文使用的神经网络结构

Fig. 7 Structure of neural network used in present work

向传播, 从输入层经过隐含层, 最后到达输出层; 第二阶段是误差的反向传播, 从输出层到隐含层, 最后到输入层, 依次调节隐含层到输出层的权重和偏置, 输入层到隐含层的权重和偏置. 每层的神经元节点通过权值与偏置与下一层的节点相连接, 输入信号通过激活函数转换成输出结果, 最后网络输出如下

$$y_p = f \left(\sum_{q=1}^Q x_{pq} w_{pq} + b_p \right) \quad (9)$$

式中, y_p 为输出值, 对于隐含层下标 p 为神经元序号, x_{pq} 则为第 p 个神经元的 q 个输入, w_{pq} 和 b_p 为对应的权值和偏置, Q 为该层输入值总数. f 是对应层的激活函数, 本文隐含层使用 Sigmoid 函数, 输出层使用 Linear 函数.

当神经网络输出值与目标值 \hat{y} 不等时, 存在输出误差 E , 定义如下

$$E = \frac{1}{2} (y_p - \hat{y})^2 \quad (10)$$

为了减小误差 E , BP 神经网络使用梯度下降反向传播算法对输入与隐含层间以及隐含层与输出层间的权值和偏置进行调整.

本研究输入参数为平动温度 T 和滑移速度 V_{slip} , 预期输出值为无因次旋转温度 λ . 为获取大范围滑移速度样本, 选取角度 θ 为 $0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ$ 和 60° 的贴壁网格. 为加快收敛速度, 采用最大-最小标准化方法处理训练样本. 训练时, 以随机数对神经网络权值和偏置进行赋值, 然后根据误差 E 反向传播对权值与偏置进行优化调整. 本文 BP 神经网络模型的具体细节见表 4 所示, 训练完的代数模型数学表达式如下

$$\lambda = W \frac{1}{1 + e^{-(W_x x + b_1)}} + b_2$$

$$x = [T \ V_{\text{slip}}]$$

$$b_1 = [0.028 \ 820 \ 17, 0.028 \ 820 \ 17, 0.028 \ 820 \ 17, \\ 0.028 \ 820 \ 17, 0.028 \ 820 \ 17, 0.028 \ 820 \ 17, \\ 0.028 \ 820 \ 17, 0.028 \ 820 \ 17]$$

$$b_2 = 0.718 \ 393 \ 26$$

$$W_x = [W_1 \ W_2]^T$$

$$W_1 = [-0.522 \ 647 \ 14, -0.522 \ 647 \ 14, -0.522 \ 647 \ 14, \\ -0.522 \ 647 \ 14, -0.522 \ 647 \ 14, -0.522 \ 647 \ 14, \\ -0.522 \ 647 \ 14, -0.522 \ 647 \ 14]$$

$$W_2 = [0.087 \ 477 \ 71, 0.087 \ 477 \ 71, 0.087 \ 477 \ 71, \\ 0.087 \ 477 \ 71, 0.087 \ 477 \ 71, 0.087 \ 477 \ 71, \\ 0.087 \ 477 \ 71, 0.087 \ 477 \ 71]$$

$$W = [0.613 \ 576 \ 85, 0.613 \ 576 \ 85, 0.613 \ 576 \ 85, \\ 0.613 \ 576 \ 85, 0.613 \ 576 \ 85, 0.613 \ 576 \ 85, \\ 0.613 \ 576 \ 85, 0.613 \ 576 \ 85]^T \quad (11)$$

表 4 人工神经网络模型的细节

Table 4 Details of the artificial neural network model

No.	Particulars	Specifications
1	network type	BP neural network
2	activation function	sigmoid and linear
3	error calculation	MSE
4	number of input layer unit	2
5	input parameters	T, V_{slip}
6	number of output layer unit	1
7	output parameters	λ
8	number of hidden layer unit	8
9	learning rate	0.0002
10	training times	600
11	training set size	2060
12	test set size	560

图 8 为模型预测结果与 DEM 统计结果的对比, 其中红色圆点为 BP 神经网络预测的无因次旋转温度 λ , 黑色的正方形为 DEM 模拟结果, δ 为统计的平均相对误差. 由图可见, 相同摩擦系数下, 无因次旋转温度随无因次滑移速度增大呈现出增长趋势; 且

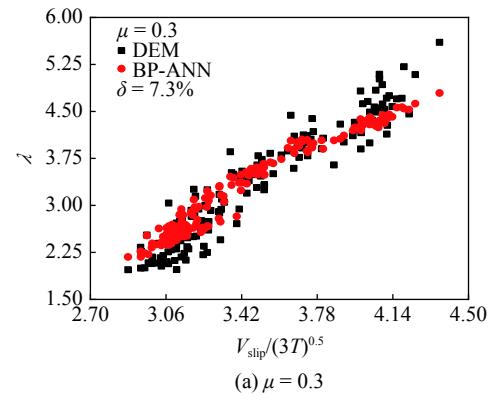


图 8 无因次旋转温度的模型预测与 DEM 统计结果对比

Fig. 8 Comparison of predicted dimensionless rotational temperature with DEM results

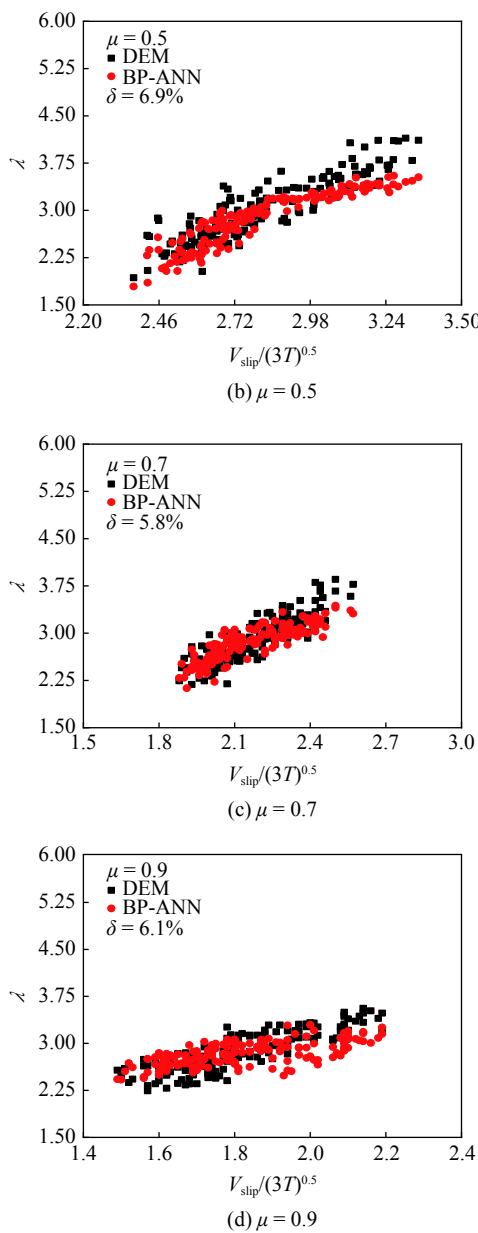


图8 无因次旋转温度的模型预测与DEM统计结果对比(续)

Fig. 8 Comparison of predicted dimensionless rotational temperature with DEM results (continued)

相同无因次滑移速度下,随着摩擦系数的增加,无因次旋转温度也表现为增长趋势。此外,即使样本数据点较为离散,BP神经网络预测结果的平均相对误差依然较小,表明采用神经网络模型建立颗粒旋转温度的代数型封闭关联式是可行的。

2.4 壁面处颗粒应力分析

欧拉双流体模型中,颗粒壁面边界条件主要是通过壁面上颗粒相法向应力来关联切向应力。因此,通过DEM模拟并统计分析壁面所受颗粒的切向和法向应力,可以为双流体模型中颗粒壁面边界条件

的构建提供数据参考。

图9给出了不同摩擦系数下,壁面上切向和法向应力比与颗粒无因次滑移速度之间的关系。由图可知,当摩擦系数为0.3和0.5时,应力比随无因次滑移速度的增加而增大,并趋近于摩擦系数值;当摩擦系数增大到0.7和0.9时,无因次滑移速度的增加到一定程度后不再增加,应力比出现非单值型分布,这和图中Louge^[17]针对摩擦系数0.75和 ∞ 两种状态下给出的分布趋势是一致的。本文统计结果和Louge的数据分布规律相同,但数值上存在差异,并随摩擦系数增加差异变大,其原因可能在于Louge的模拟中壁面上镶嵌有半球体,增大了颗粒与壁面的切向作用。

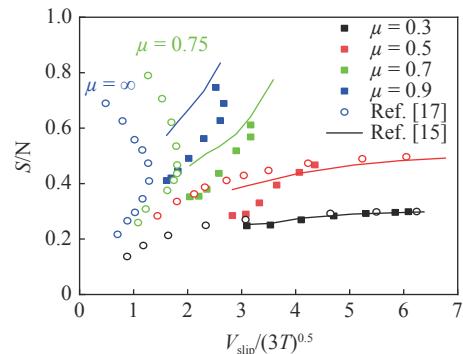


图9 不同摩擦系数下壁面切向与法向应力比
Fig. 9 Wall stress ratio under different friction

Johnson和Jackson壁面边界条件采用简单常数来描述应力比与无因次滑移速度的关系,这与实际数据是不相符的,只能作为一定范围内的近似或平均。Zhao等^[34]对近壁颗粒平动和旋转速度采用各向同性的正态分布,推导了应力比与滑移速度理论公式,对比Johnson和Jackson壁面边界条件即可将光滑因子表示如下^[15]

$$\phi = \mu \frac{1+e}{2} \cot \Phi \cdot \left[\frac{1}{(\lambda+1) \cot^2 \Phi + 1} + \frac{\arctan(\sqrt{\lambda+1} \cot \Phi)}{\sqrt{\lambda+1} \cot \Phi} \right] \quad (12)$$

其中, $\cot \Phi = 2(1+\beta)/[7\mu(1+e)]$ 。

将神经网络模型预测的无因次旋转温度代入上述光滑因子,再结合Johnson和Jackson壁面边界条件,可以计算出壁面上应力比如图9中实线所示。当摩擦系数为0.3时,由表2和表3可知颗粒速度分布的确较好的符合正态分布,因此公式预测结果与DEM统计结果相吻合;但当摩擦系数提高后,由于

颗粒旋转速度偏离正态分布, 公式预测和 DEM 统计结果偏差增加。

3 结论

采用 DEM 方法数值模拟了滚筒内颗粒流动状况。通过统计和 ANN 算法研究了壁面附近微观颗粒的运动特征, 得出了以下结论。

(1) 颗粒平动速度都基本符合正态分布, 小摩擦系数下颗粒旋转速度也满足正态分布, 但随着摩擦系数的提高, 壁面剪切产生的轴向旋转速度分布偏离正态分布; 同时颗粒平动和旋转速度脉动呈现较强的各向异性。

(2) 无因次旋转温度和无因次滑移速度存在一定的正相关, 并受摩擦系数的影响。将滑移速度和颗粒平动温度作为输入, 采用人工神经网络构建颗粒旋转温度模型, 可以为常规欧拉双流体模型框架下考虑颗粒旋转温度提供代数型封闭。

(3) 壁面与颗粒作用的切向与法向应力比, 受无因次滑移速度和摩擦系数的影响, 摩擦系数增大后, 其理论关系的建立需要考虑更真实的颗粒速度分布, 如非正态分布、各向异性。

参 考 文 献

- 宋晓阳, 及春宁, 许栋. 明渠湍流边界层中颗粒的运动与分布. 力学学报, 2015, 47(2): 231-241 (Song Xiaoyang, Ji Chunning, Xu Dong. Motion and distribution of particles in turbulent boundary layer of open channel. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2015, 47(2): 231-241)
- 彭宁宁, 刘志丰, 王连泽. 亚微米颗粒在汇作用下运动机理的实验研究. 力学学报, 2017, 49(2): 289-298 (Peng Ningning, Liu Zhifeng, Wang Lianze. Experimental study on motion mechanism of sub-micron particles under sink effect. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2017, 49(2): 289-298)
- 孙倩, 彭天骥, 严安等. 密集颗粒流动的连续性方法应用研究. 原子能科学技术, 2019, 53(12): 2367-2374 (Sun Qian, Peng Tianji, Yan An, et al. Application research on the continuity method of dense particle flow. *Atomic Energy Science and Technology*, 2019, 53(12): 2367-2374)
- 姚晶星, 杨遥, 黄正梁等. 颗粒黏度模型对采用欧拉多相流模型模拟超密相颗粒流动行为的影响. 化工学报, 2020, 71(11): 4945-4956 (Yao JinXing, Yang Yao, Huang Zhengliang, et al. The effect of particle viscosity model on the simulation of ultra-dense particle flow behavior with Eulerian multiphase flow model. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)*, 2020, 71(11): 4945-4956)
- 李锡夔, 万柯. 颗粒材料多尺度分析的连接尺度方法. 力学学报, 2010, 42(5): 889-900 (Li Xikui, Wan Ke. Connected scale method for multiscale analysis of granular materials. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2010, 42(5): 889-900)
- 王帅, 郝振华, 徐鹏飞等. 粗糙颗粒动力学及稠密气固两相流动的数值模拟. 力学学报, 2012, 44(2): 278-286 (Wang Shuai, Hao Zhenhua, Xu Pengfei, et al. Kinetics of coarse particles and numerical simulation of dense gas-solid two-phase flow. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2012, 44(2): 278-286)
- 郝振华, 王帅, 陆慧林等. 考虑颗粒旋转的颗粒动力学模拟提升管气固两相流动特性. 高校化学工程学报, 2010, 24(5): 776-782 (Hao Zhenhua, Wang Shuai, Lu Huilin, et al. Particle dynamics simulation of gas-solid two-phase flow characteristics in riser considering particle rotation. *Chemical Engineering Journal of Chinese Universities*, 2010, 24(5): 776-782)
- 王淑彦, 何玉荣, 陆慧林等. 颗粒旋转对鼓泡流化床内气固两相流动特性影响的数值模拟. 化工学报, 2007(11): 2738-2746 (Wang Shuyan, He Yurong, Lu Huilin, et al. Numerical simulation of the effect of particle rotation on gas-solid two-phase flow characteristics in a bubbling fluidized bed. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 2007(11): 2738-2746)
- Johnson PC, Jackson R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing. *Journal of Fluid Mechanics*, 1987, 176: 67-93
- Rong WJ, Feng YQ, Li BK, et al. Numerical study of the solid flow behavior in a rotating drum based on a multiphase CFD model accounting for solid frictional viscosity and wall friction. *Powder Technology*, 2020, 361: 87-98
- Machado MVC, Nascimento SM, Duarte CR, et al. Boundary conditions effects on the particle dynamic flow in a rotary drum with a single flight. *Powder Technology*, 2017, 311: 341-349
- Li TW, Benyahia S. Revisiting Johnson and Jackson boundary conditions for granular flows. *AICHE Journal*, 2012, 58(7): 2058-2068
- Jenkins JT. Boundary conditions for rapid granular flow: flat, frictional walls. *International Journal of Applied Mechanics*, 1992, 59(1): 120-127
- Schneiderbauer S, Schellander D, Loderer A, et al. Non-steady state boundary conditions for collisional granular flows at flat frictional moving walls. *International Journal of Multiphase Flow*, 2012, 43: 149-156
- Zhao YH, Zhong YJ, Ding TQ, et al. A specularity coefficient model and its application to dense particulate flow simulations. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, 55(5): 1439-1448
- Yang L, Padding JT, Kuipers JAM, et al. Partial slip boundary conditions for collisional granular flows at flat frictional walls. *AICHE Journal*, 2017, 63(6): 1853-1871
- Louge MY. Computer simulations of rapid granular flows of spheres interacting with a flat, frictional boundary. *Physics of Fluids*, 1994, 6(7): 2253-2269
- 胡洲, 刘小燕, 武伟宁. 基于数据驱动的非球形散体颗粒休止角智能建模. 中国有色金属学报, 2020, 30(1): 227-234 (Hu Zhou, Liu Xiaoyan, Wu Weining. Intelligent modeling method for angle of repose of non-spherical granular particles based on data drive. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2020, 30(1): 227-234)
- 闫盛楠, 唐天琪, 任安星等. 基于人工神经网络模型的非球形颗粒曳力系数预测. 工程热物理学报, 2017(10): 2171-2175 (Yan Shengnan, Tang Tianqi, Ren Anxing, et al. Prediction of drag coefficient of non-spherical particles based on artificial neural network model. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2017(10): 2171-2175)

- 20 谭援强, 肖湘武, 张江涛. 尼龙粉末在 SLS 预热温度下的离散元模型参数确定及其流动特性分析. 力学学报, 2019, 51(1): 56-63 (Tan Yuanqiang, Xiao Xiangwu, Zhang Jiangtao. Determination of discrete element model parameters of nylon powder at SLS preheating temperature and analysis of its flow characteristics. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2019, 51(1): 56-63)
- 21 Vh A, Cmw B, Ma A. Elucidation of the role of cohesion in the macroscopic behaviour of coarse particulate systems using DEM. *Powder Technology*, 2020, 361: 374-388
- 22 Zhao L, Zhao Y, Bao C, et al. Laboratory-scale validation of a DEM model of screening processes with circular vibration. *Powder Technology*, 2016, 303: 269-277
- 23 Illic D, Roberts A, Wheeler C, et al. Modelling bulk solid flow interactions in transfer chutes: Shearing flow. *Powder Technology*, 2019, 354: 30-44
- 24 顾从汇, 张鑫, 袁竹林等. 散体颗粒在滚筒内运动特性的实验研究与数值模拟. 东南大学学报(自然科学版), 2015, 45(3): 491-496 (Gu Conghui, Zhang Xin, Yuan Zhulin, et al. Experimental study and numerical simulation of the movement characteristics of loose particles in the drum. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2015, 45(3): 491-496 (in Chinese))
- 25 胡陈枢, 罗坤, 樊建人等. 滚筒内二组元颗粒混合与分离的数值模拟. 工程热物理学报, 2015, 36(9): 1947-1951 (Hu Chenshu, Luo Kun, Fan Jianren, et al. Numerical simulation of the mixing and separation of binary particles in the drum. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2015, 36(9): 1947-1951 (in Chinese))
- 26 张立栋, 程硕, 李连好等. 滚筒内柱体内构件对二元颗粒体系混合的影响. 化工进展, 2017, 36(12): 4363-4370 (Zhang Lidong, Cheng Shuo, Li Lianhao, et al. The influence of the internal components of the cylinder on the mixing of the binary particle system. *Chemical Industry Progress*, 2017, 36(12): 4363-4370)
- 27 马华庆, 赵永志. 喷动流化床中杆状颗粒混合特性的 CFD-DEM 模拟. 浙江大学学报(工学版), 2020, 54(7): 1347-1354 (Ma Huaqing, Zhao Yongzhi. CFD-DEM simulation of mixing characteristics of rod particles in spouted fluidized bed. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2020, 54(7): 1347-1354)
- 28 董辉, 伍开松, 况雨春等. 基于 DEM-CFD 水力旋流器的水合物浆体分离规律研究. 浙江大学学报(工学版), 2018, 52(9): 1811-1820 (Dong Hui, Wu Kaisong, Kuang Yuchun, et al. Study on hydrate slurry separation based on DEM-CFD hydrocyclone. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2018, 52(9): 1811-1820 (in Chinese))
- 29 卢竟蔓, 蓝兴英, 高金森等. 壁面条件对 FCC 颗粒湍动床气固流动影响的模拟. 化学反应工程与工, 2014(1): 57-62 (Lu Jingman, Lan Xingying, Gao Jinsen, et al. Simulation of the effect of wall conditions on gas-solid flow in a turbulent bed of FCC particles. *Chemical Reaction Engineering and Technology*, 2014(1): 57-62 (in Chinese))
- 30 Parker DJ, Dijkstra AE, Martin TW, et al. Positron emission particle tracking studies of spherical particle motion in rotating drums. *Chemical Engineering Science*, 1997, 52(13): 2011-2022.
- 31 Zhang ZW, Gui N, Ge L, et al. Numerical study of mixing of binary-sized particles in rotating tumblers on the effects of end-walls and size ratios. *Powder Technology*, 2017, 314: 164-174
- 32 陈巨辉, 孟诚, 于广滨等. 考虑多组分颗粒运动各向异性的鼓泡流化床生物质气化数值模拟. 高校化学工程学报, 2017, 31(2): 361-368 (Chen Juhui, Meng Cheng, Yu Guanbin, et al. Numerical simulation of bubbling fluidized bed biomass gasification considering the anisotropy of multi-component particle motion. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2017, 31(2): 361-368 (in Chinese))
- 33 Jenkins JT, Zhang C. Kinetic theory for identical, frictional, nearly elastic spheres. *Physics of Fluids*, 2002, 14(3): 1228-1235
- 34 Zhao YH, Zhong YJ, He YR, et al. Boundary conditions for collisional granular flows of frictional and rotational particles at flat walls. *AIChE Journal*, 2014, 60: 4065-4075