

Wykorzystanie modelu DEM do symulacji oddziaływań międzycząsteczkowych

Agata Widuch*

Instytut Techniki Ciepłej, Politechnika Śląska

Słowa kluczowe: CFD, DEM, cząsteczki, współczynnik tarcia

Streszczenie

Modele komputerowe coraz częściej znajdują zastosowanie w bardzo wielu gałęziach przemysłu, szczególnie do modelowania złożonych zjawisk cieplno-przepływowych. Jednym z przykładów może być energetyka zawodowa, gdzie modele komputerowe wykorzystywane są do optymalizacji procesu konwersji energii chemicznej paliwa w ciepło użyteczne wykorzystując kotły pyłowe oraz fluidalne. Obecnie szczególnym zainteresowaniem cieszy się ta druga grupa dzięki ich dużej sprawności, małej wrażliwości na jakość spalanego paliwa, oraz możliwości łatwej redukcji NO_x, a także wychwytu SO_x. W celu zamodelowania silnych oddziaływań międzycząsteczkowych zachodzących w warstwie fluidyzującego materiału konieczne jest stosowanie odpowiednich modeli wielofazowych. Do modelowania przepływu wielofazowego może być stosowana metoda Eulera, hybrydowy model Euler-Lagrange oraz modele bazujące na metodzie elementów dyskretnych (ang. Discrete Element Method – DEM). Podejście DEM, w porównaniu ze wspomnianymi dwoma technikami obliczeniowymi pozwala na fizyczne uwzględnienie oddziaływań międzycząsteczkowych [1], umożliwia modelowanie pękania czy aglomeracji ziaren. Technika DEM jest alternatywą dla metod opartych na koncepcji ciągłości ośrodka, dająca możliwość odwzorowania bezpośrednich interakcji między cząstkami. W porównaniu z metodą Eulera, podejście DEM nie jest zbyt popularne w przypadku jego stosowania do modelowania procesu fluidyzacji. W prezentowanej pracy sprawdzono możliwość wykorzystania modelu DEM do modelowania oddziaływań międzycząsteczkowych na poziomie ziarnowym.

* Rozdział przygotowano podczas pracy nad projektem dyplomowym inżynierskim wykonywanym przez autora w Instytucie Techniki Ciepłej na Wydziale Inżynierii Środowiska i Energetyki Politechniki Śląskiej, pod opieką Dra inż. Wojciecha Adamczyka.



1. Wstęp:

Proces fluidyzacji jest to wielofazowe zjawisko, w którym materiał fazy rozproszonej (cząstki stałe) są zawieszane w poruszającym się płynie. Intensywne mieszanie materiału sypkiego mające miejsce w złożu fluidalnym zwiększa wymianę pędu, masy oraz energii, co prowadzi do kompaktowych wymiarów kotłów fluidalnych. Dużą zaletą kotłów pracujących w technologii fluidalnej jest ich duża elastyczność pod względem jakości spalanego paliwa, niskie koszty odsiarczania oraz przygotowania paliwa. Dodatkowymi zaletami kotłów fluidalnych jest brak konieczności budowy drogich instalacji odsiarczania spalin. Tlenki siarki usuwane są przez dodawanie kamienia wapiennego bezpośrednio do złoża fluidalnego. Złożony charakter procesu fluidyzacji związany jest również z silnie sprzężonymi oddziaływaniami międzyfazowymi, jak również oddziaływaniami międzycząsteczkowymi w fazie granularnej. Występujące oddziaływania oraz zróżnicowanie skal czasowych jak i przestrzennych sprawia, że modelowanie hydrodynamiki złoża fluidalnego jest zadaniem bardzo trudnym i wymagającym.

Dostępne modele numeryczne pozwalające na modelowanie złożonego procesu fluidyzacji można sklasyfikować w dwóch grupach modele bazujące na podejściu Eulera oraz Lagrange'a. Najczęściej wykorzystywana techniką obliczeniową jest model Eulera, w którym faza gazowa oraz rozproszona traktowane są równocześnie jak wzajemnie przenikające się fazy ciągłe. W takim podejściu zapewniona jest ciągłość pomiędzy fazami. Głównymi wadami tego modelu jest długi czas obliczeń wynikający z konieczności stosowania gęstych siatek numerycznych oraz brak możliwości bezpośredniego śledzenia rozkładu cząstek. Kolejny z dostępnych modeli, który pozwala na uwzględnienie rozkładu cząstek to model Lagrange'a, gdzie śledzony jest ruch każdej cząstki w domenie obliczeniowej. Standardowe podejście Lagrange'a może być wykorzystywane do przepływów, dla których udział objętościowy fazy stałej nie przekracza 10%, podczas gdy w złożu fluidalnym jest on znacznie większy. W celu uwzględnienia zalet wyszczególnionych modeli został zaproponowany model hybrydowy łączący podejście Eulerowskie oraz Lagrange'owskie do modelowania procesu fluidyzacji. W modelu hybrydowym równania Lagrange'a rozwiązywane są dla paczek cząstek, które zdefiniowane są jako skupiska cząstek posiadających tę samą prędkość, średnicę oraz masę. W modelu hybrydowym kolizje cząstek nie są śledzone bezpośrednio, oddziaływania międzycząsteczkowe (tensor naprężeń granularnych) obliczane są w komórkach siatki numerycznej na podstawie udziału objętościowego fazy stałej. Dużą trudność podczas wykorzystywania modelu hybrydowego do modelowania kotłów fluidalnych sprawia wybór odpowiednich modeli odpowiedzialnych za przewidywanie oddziaływań w fazie granularnej oraz zbieżność obliczeń numerycznych.

W celu rozwiązania problemu z poprawnym doбором modeli empirycznych pozwalających na uwzględnienie oddziaływań międzycząsteczkowych może być stosowany model Discrete Element Method (DEM). Model ten pozwala na dokładne modelowanie procesu kolizji cząstek, a tym samym nie jest konieczne stosowanie kinetycznej teorii przepływów granularnych (Kinetic Theory of Granular Flow – KTGF) [15]. Technika DEM docelowo może być stosowana do modelowania transportu pneumatycznego, transportu cząstek w podajnikach ślimakowych, złożach stałych oraz procesu fluidyzacji bez konieczności stosowania uproszczeń. W pracy inżynierskiej została przeanalizowana możliwość wykorzystania modelu DEM do modelowania oddziaływań międzycząsteczkowych, na podstawie serii przeprowadzonych obliczeń dla różnych danych wejściowych, w tym także

zostały przeanalizowane oddziaływania pomiędzy cząsteczkami dla dwóch wybranych materiałów. W pracy przeanalizowany został wpływ współczynnika tarcia na oddziaływania między cząsteczkami znajdującymi się w prostopadłościennym kontenerze oraz cząstek poruszających się w prostopadłościennym kanale. W pracy modelowany był transport cząstek oraz oddziaływania międzycząsteczkowe bez uwzględnienia wpływu płynu na ich ruch.

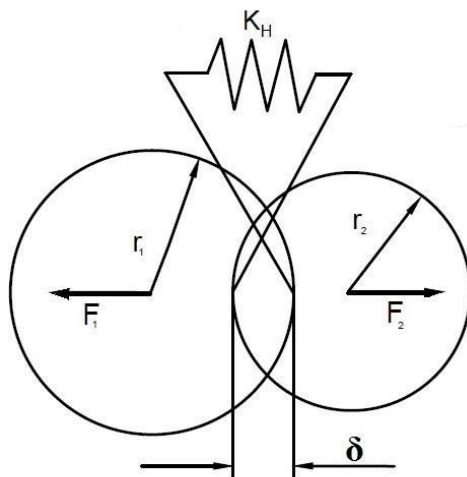
2. Model matematyczny

Implementacja DEM-u w programie Ansys Fluent 17.2 [3] bazuje na pracy Cundall'a i Strack'a [2], uwzględniając odkształcenie sprężyste cząstek, w wyniku ich kolizji (Soft Sphere Collision). Metoda ta pozwala również na dokładne uwzględnienie kształtu śledzonych cząstek. Ruch cząstki opisywany jest przez równanie wykorzystujące II zasadę dynamiki Newton'a [17]

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_{drag} + \vec{F}_{pressure} + \vec{F}_{virtual\ mass} + \vec{F}_{gravitation} + \vec{F}_{other} \quad (1)$$

$$\frac{dx}{dt} = \vec{v} \quad (2)$$

gdzie \vec{F}_{drag} jest wektorem siły tarcia, $\vec{F}_{pressure}$ określa wektor siły ciśnienia, $\vec{F}_{virtual_mass}$ reprezentuje wektor siły masy wirtualnej, \vec{F}_{other} uwzględnia siły działające na cząstkę w wyniku odkształcenia, x przemieszczenie cząstki, t czas całkowania, oraz v prędkość cząstki. Rysunek 1 ilustruje graficzną interpretację modelu kolizji



Rys. 1 Zderzenie dwóch cząstek.

x_1 i x_2 odpowiednio położenie cząstki 1 i 2, r_1 i r_2 odpowiednio średnica cząstki 1 i 2, \vec{F}_1 i \vec{F}_2 to siły oddziaływania na siebie cząstek, K_H to współczynnik sprężystości, δ to wielkość odkształcenia.

Model DEM jest głównie przeznaczony do modelowania ruchu pojedynczych cząstek. Zdarza się jednak tak, że w wybranych aplikacjach (proces fluidyzacji w kotle CFB) wymagane jest stosowanie bardzo dużej liczby cząstek, co z punktu widzenia dostępnych zasobów obliczeniowych jest znacznie ograniczone. W celu umożliwienia śledzenia dużej liczby cząstek, są one grupowane w paczki, które zawierają cząstki o tej samej prędkości, średnicy oraz pozycji. Liczbę cząstek w paczce można wyznaczyć ze wzoru

$$NP = \frac{\dot{m}_{parcel}\Delta t}{m_p} \quad (3)$$

gdzie NP to liczba cząstek w paczce, \dot{m}_{parcel} strumień masowy wprowadzanych cząstek, Δt krok czasowy, m_p masa pojedynczej cząsteczki. Do przeprowadzonych obliczeń zastosowano nieliniowy model sprężysty, który oparty jest na prawie kontaktu Hertz'a [5]. Wykorzystany model kontaktu cząstek uwzględnia własności fizyczne materiału z których wykonane są śledzone cząstki. Siły międzycząsteczkowe określone są za pomocą zależności [3]

$$\vec{e}_{12} = (x_2 - x_1)/||x_2 - x_1|| \quad (4)$$

$$\delta = ||x_2 - x_1|| - (r_1 + r_2) \quad (5)$$

$$f_{loss} = \sqrt{\pi^2 + \ln^2 \eta} \quad (6)$$

$$m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (7)$$

$$t_{coll} = f_{loss} \sqrt{\frac{m_{12}}{K_H}} \quad (8)$$

$$\gamma = -2 \frac{m_{12} \ln \eta}{t_{coll}} \quad (9)$$

$$\vec{v}_{12} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 \quad (10)$$

gdzie \vec{e}_{12} wektor jednostkowy wyznaczający kierunek, na którym znajdują się środki obu cząstek, f_{loss} współczynnik strat, η współczynnik sprężystości (ważne, aby pamiętać, że jego wartość musi mieścić się między $0 < \eta \leq 1$), γ współczynnik tłumienia, m_1 i m_2 masa odpowiednio 1 i 2 cząstki, t_{coll} czas kolizji, v_1 i v_2 prędkość odpowiednio 1 i 2 cząstki, v_{12} prędkość względna cząstek.

W nieliniowym modelu kolizji siła obliczana jest ze wzoru [2]

$$\vec{F}_1 = K_H \delta^{3/2} \vec{e}_{12} \quad (11)$$

gdzie K_H uwzględnia własności fizyczne materiału [2]

$$K_H = \frac{4}{3} \frac{E_1 E_2}{E_2(1 - \nu_1^2) + E_1(1 - \nu_2^2)} \sqrt{\frac{r_1 r_2}{r_1 + r_2}} \quad (12)$$

E_1 i E_2 odpowiednio Moduł Young'a 1 i 2 cząsteczki, ν_1 i ν_2 odpowiednio współczynnik Poisson'a dla 1 i 2 cząsteczki. Moduł Young'a to inaczej moduł sprężystości podłużnej,

określa własności sprężyste dla danego ciała stałego, charakteryzuje zdolność podatności materiału na odkształcenia podłużne przy ściskaniu, zginaniu, rozciąganiu.

Współczynnik Poisson'a to stosunek względnego odkształcenia prostopadłego do kierunku rozciągania (lub ściskania) do względnego odkształcenia w kierunku działania siły obciążającej [6]. W celu uwzględnienia sił działających na cząsteczki podczas kolizji wykorzystuje się III zasadę dynamiki Newton'a

$$\vec{F}_1 = -\vec{F}_2 \quad (13)$$

gdzie uwzględniając współczynnik tłumienia odbicia, siłę kolizji cząstki oblicza się z zależności

$$\vec{F}_1 = (K_H \delta^3 + \gamma(\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}_{12})) \vec{e}_{12} \quad (14)$$

Oprócz sił odbicia w modelu uwzględniana jest również siła tarcia występująca między przemieszczającymi się cząsteczkami. Równanie określające tę siłę oparte jest na prawie Coulomba [16]

$$F_{friction} = \mu F_{normal} \quad (15)$$

gdzie $F_{friction}$ siła tarcia, μ współczynnik tarcia, F_{normal} siła działająca prostopadle do płaszczyzny odkształcenia spowodowanego siłą kolizji. Współczynnik tarcia zależy od materiału, z którego wykonane są cząstki, ich średnicy, siły grawitacji oraz sił oporu. Współczynnik tarcia jest funkcją zależącą od bezwzględnej prędkości stycznej. W celu jego wyznaczenia należy spełnić warunki i skorzystać ze wzorów [3]

$$v \leq v_{glide}$$

$$-\mu(v) = \mu_{stick} + (\mu_{stick} - \mu_{glide}) \left(\frac{v}{v_{glide}} - 2.0 \right) \left(\frac{v}{v_{glide}} \right)$$

$$v_{glide} < v \leq v_{limit}$$

$$-\mu(v) = \mu_{glide}$$

$$v > v_{limit}$$

$$-v_{ratio} = \frac{(v - v_{glide})}{slope_{limit}}$$

$$-\mu_{ratio} = \frac{\mu_{glide}}{\mu_{limit}}$$

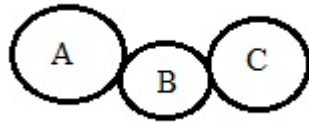
$$-\mu(v) = \mu_{glide} \frac{1 + v_{ratio}}{1 + \mu_{ratio} v_{ratio}}$$

gdzie μ_{stick} współczynnik tarcia ściernego, μ_{glide} współczynnik tarcia ślizgowego, μ_{limit} graniczna wartość współczynnika tarcia v_{glide} prędkość poślizgu, v_{limit} prędkość graniczna, dla wyższych prędkości $\mu(v)$ osiąga wartość μ_{limit} , $slope_{limit}$ parametr decydujący jak szybko $\mu(v)$ osiągnie wartość μ_{limit} . W zależności od przyjętych wartości poszczególnych współczynników wykres zależności współczynnika tarcia od prędkości

ma różny przebieg. Dodatkowo pod uwagę zostały wzięte siły rotacji, które również oparte zostały na prawie Coulomba [16]

$$F_{rolling} = \mu_{rolling} F_{normal} \quad (16)$$

W celu uproszczenie procesu, przed obliczeniem sił oddziałujących między cząstkami najpierw zostaje określone prawdopodobieństwo zderzenia się cząsteczek. Na rysunku 2 został zilustrowany proces zderzenia kilku cząstek. Cząstka A oddziałuje tylko na B, na cząstkę C oddziałuje tylko B, a na cząstkę B oddziałuje zarówno A jak i C.



Rys. 2 Model zderzenia cząstek.

Siła odbicia cząstek od siebie lub odbicia cząstki od ściany uwarunkowana jest wielkością zderzenia. Na tę wielkość duży wpływ ma krok czasowy przyjęty do obliczeń [2]

$$\Delta t = t_0 + \Delta t_{DEM} \quad (17)$$

gdzie Δt_{DEM} to krok czasowy śledzenia cząsteczki.

Wielkość odkształcenia cząstki ściśle zależy od kroku czasowego i określana jest wzorem [2]

$$\Delta \delta = v \Delta t \quad (18)$$

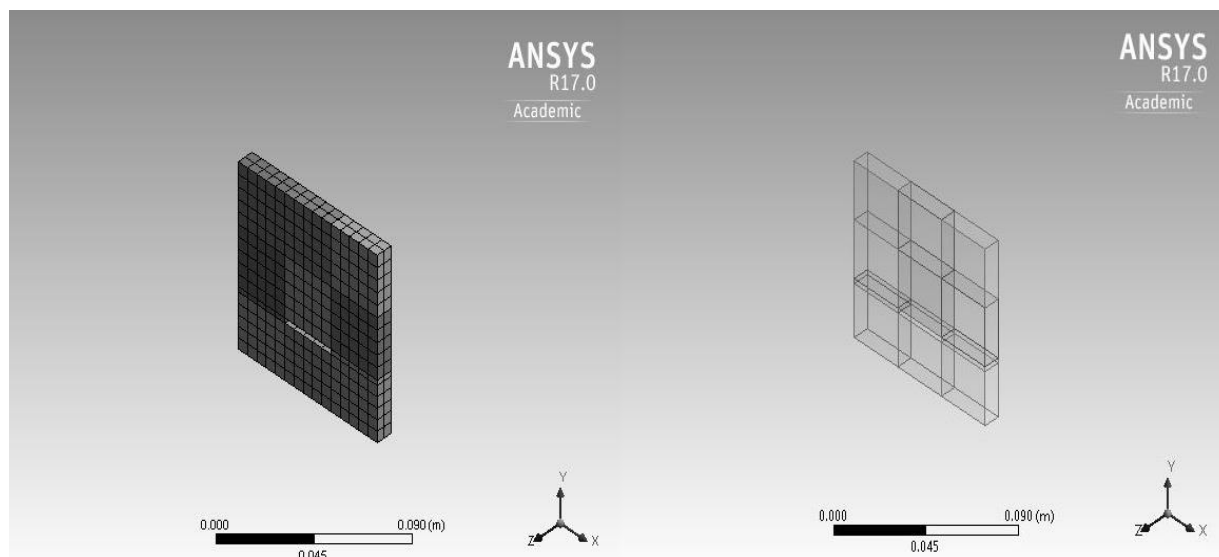
Krok czasowy obliczony powinien zostać ze wzoru [8]

$$\Delta t = \frac{\pi r \sqrt{\frac{\rho}{G}}}{0,163v + 0,8766} \quad (19)$$

gdzie ρ gęstość materiału, G to moduł Kirchoff'a, czyli współczynnik uzależniający odkształcenie postaciowe od materiału naprężenia.

3. Symulacje

3.1.1 Geometria i siatka prostokątnego kontenera



Rys 3. Geometria testowa wraz z siatką numeryczną

Geometria oraz siatka numeryczna zostały wykonane w programie Ansys. Wymiary prostokątnej domeny obliczeniowej to $0,03 \times 0,09 \times 0,0$ m, a półka, na której umieszczone są sferyczne kule znajduje się na wysokości 0,03 m od dolnej krawędzi domeny obliczeniowej. Siatka numeryczna składa się z 261 sześciennych elementów o rozmiarze 0,007 m. Każdej ze ścian oraz półce został przypisany warunek brzegowy typu *ściana* (ang. wall).

3.1.2 Implementacja

W celu wprowadzenia 100 tytanowych cząstek do domeny obliczeniowej, stworzony został plik, który każdej z nich nadaje odpowiednie położenie, prędkość oraz strumień masowy. Wartość strumienia została obliczona ze wzoru (3) tak, by w jednej paczce znajdowała się jedna cząstka. W każdym przypadku cząsteczki wrzucane są do domeny w tym samym czasie, ich prędkość początkowa jest równa 0. Poprzez włączenie sił rotacji oraz siły grawitacji, której wektor skierowany jest przeciwnie do zwrotu osi OY, ich zsuwanie następuje samoczynnie. Materiałem ścian jest aluminium.

Tab. 1 Własności fizyczne materiałów [9,10,11]

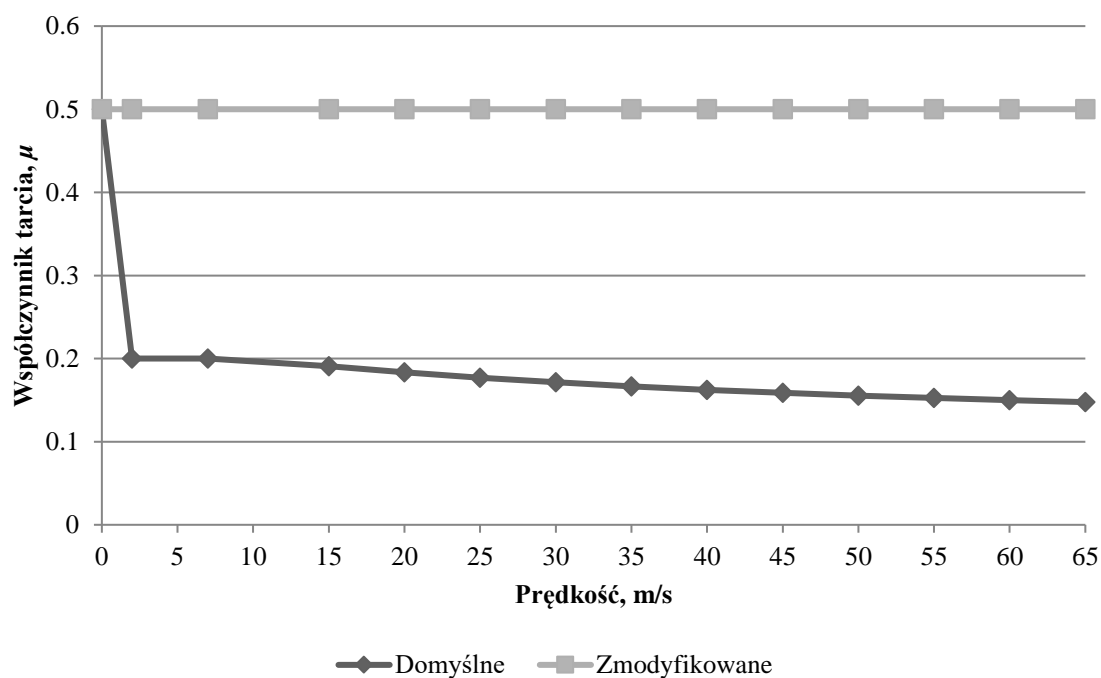
Moduł Young'a dla aluminium (Pa)	$69 \cdot 10^9$
Moduł Young'a dla tytanu (Pa)	$110 \cdot 10^9$
Moduł Young'a dla gumy (Pa)	$2 \cdot 10^7$
Współczynnik Poisson'a dla aluminium (-)	0,33
Współczynnik Poisson'a dla tytanu (-)	0,32
Współczynnik Poisson'a dla gumy (-)	0,499
Współczynnik sprężystości (ściana-ściana) (-)	1
Współczynnik sprężystości (ściana-cząstka) (-)	0,95
Współczynnik sprężystości (cząstka-cząstka) (-)	0,9
Średnica cząstek (m)	0,003
Gęstość tytanu (kg/m^3)	4850
Gęstość gumy (kg/m^3)	910
Moduł Kirchoff'a dla tytanu	$42 \cdot 10^9$

W interakcjach cząstek ze ścianami wartość współczynnika tarcia pozostała niezmienną i wraz ze wzrostem prędkości malała. Podczas symulacji pod uwagę wzięto jedynie wpływ zmiany współczynnika tarcia występującego między cząsteczkami. W pierwszym przypadku wartość współczynnika tarcia wraz ze wzrostem prędkości malała, a w drugim była stała. Dodatkowo uwzględniony został wpływ kroku czasowego na wyniki obliczeń, (wg wzoru (19) krok czasowy dla tytanowych kul $\Delta t = 2,56 \cdot 10^{-6}$ s). W tabeli 2 przedstawione zostały wartości współczynników wpływających na tarcie.

Tab. 2 Przyjęte wartości współczynników

Parametr	Wartości domyślne	Wartości po zmianie
μ_{stick}	0,5	0,5
μ_{glide}	0,2	0,5
μ_{limit}	0,1	0,5
v_{glide}	1	1
v_{limit}	10	10
$slope_{limit}$	100	100

W celu obliczenia wartości współczynnika tarcia dla danej prędkości, przy uwzględnieniu warunków podanych wyżej napisano kod programu w VBA – Visual Basic for Applications. Dzięki obliczonym wartościom, stworzony został wykres obrazujący zmianę współczynnika tarcia w zależności od prędkości.



Rys. 4 Wykres zależności współczynnika tarcia od prędkości

3.1.3 Wyniki symulacji:

Obliczenia przeprowadzone zostały dla 4 różnych przypadków, które zostały zebrane w tabeli 3.

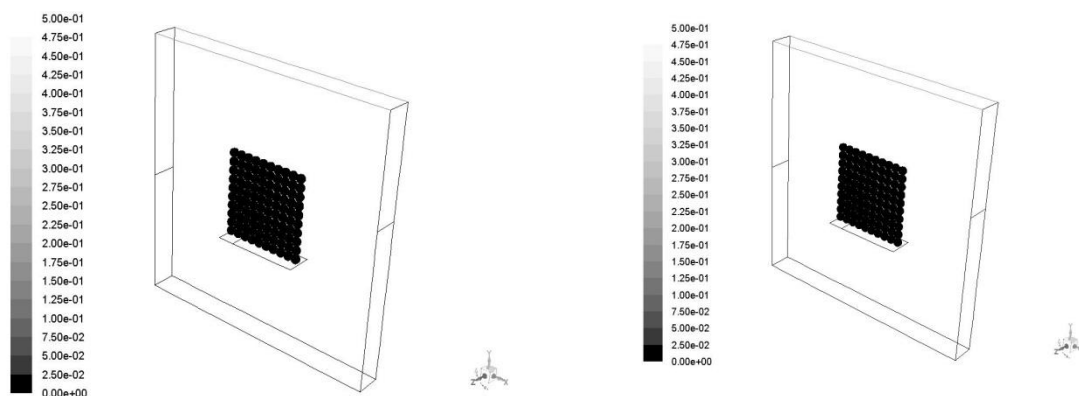
Tab. 3 Zestawienie 4 wariantów obliczeń

Materiał	Krok czasowy (s)
Tytan – domyślne μ	10^{-5}
Tytan – stałe μ	10^{-5}
Tytan – stałe μ	$2 \cdot 10^{-6}$
Guma – stałe μ	10^{-5}

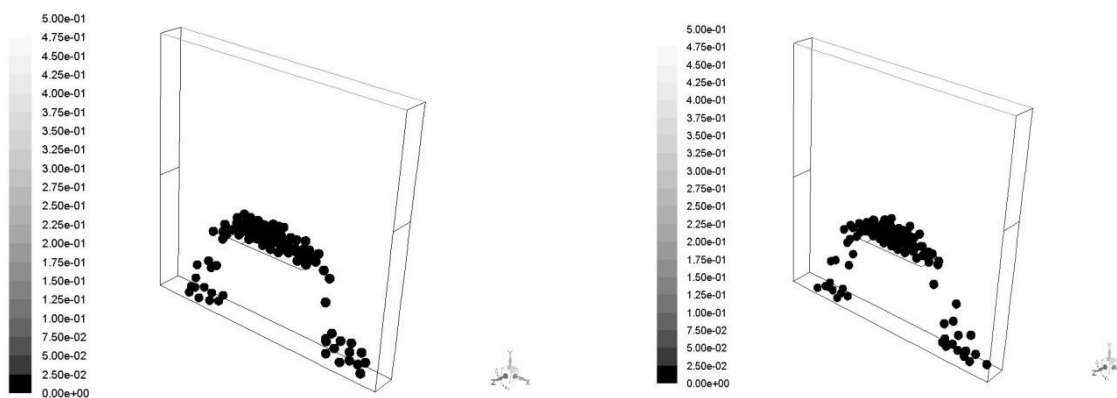
Cząsteczki z tytanu

Domyślny współczynnik tarcia krok czasowy
 10^{-5} s

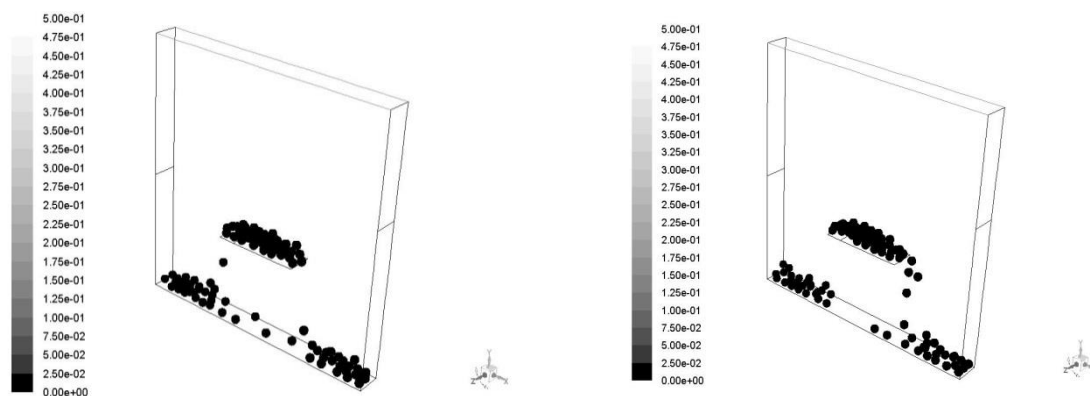
Stały współczynnik tarcia krok czasowy
 10^{-5} s



Rys 5. Czas symulacji - 0,005 s



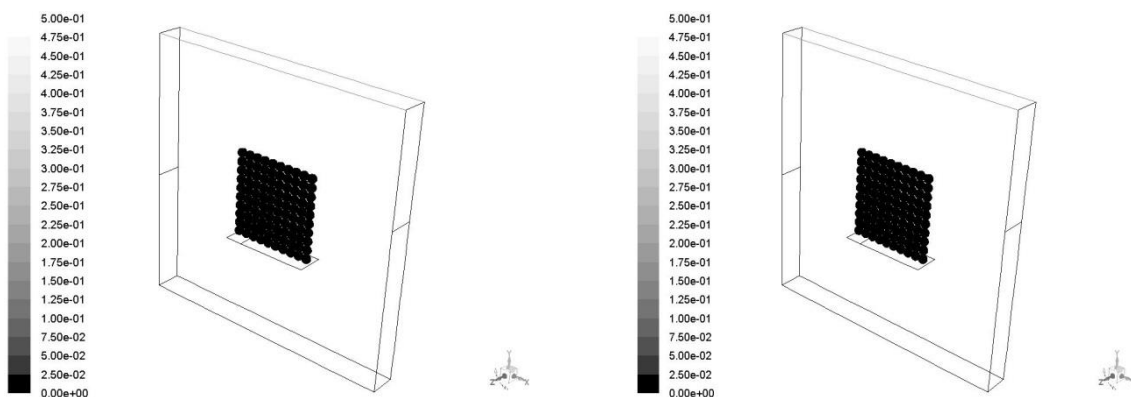
Rys.6 Czas symulacji - 0,15 s



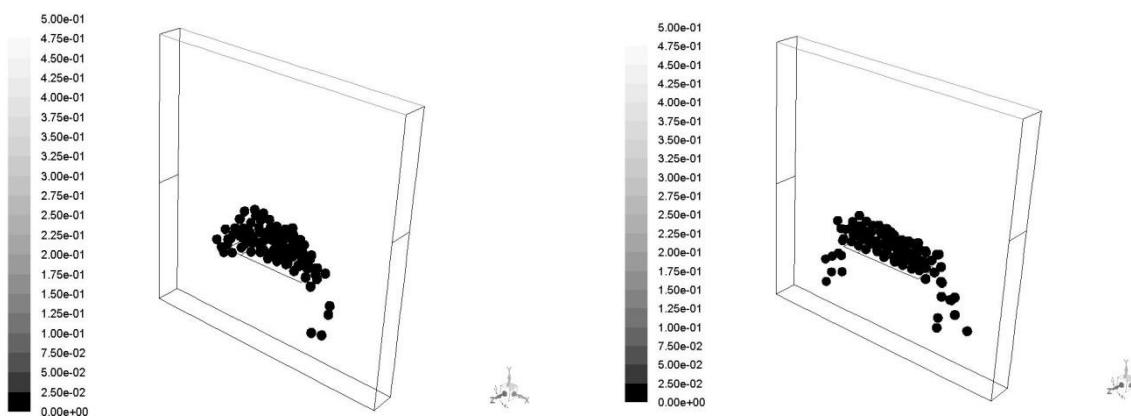
Rys.7 Czas symulacji - 0,30 s

Stały współczynnik tarcia

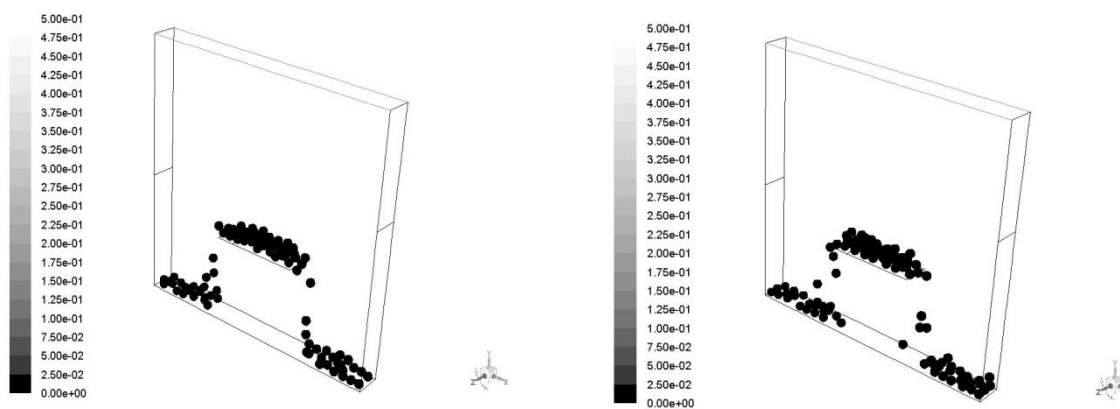
Cząsteczki z tytanu – krok czasowy $2 \cdot 10^{-6}$ s Cząsteczki z gumy – krok czasowy 10^{-5} s



Rys.8 Czas symulacji - 0,005 s



Rys.9 Czas symulacji - 0,15 s



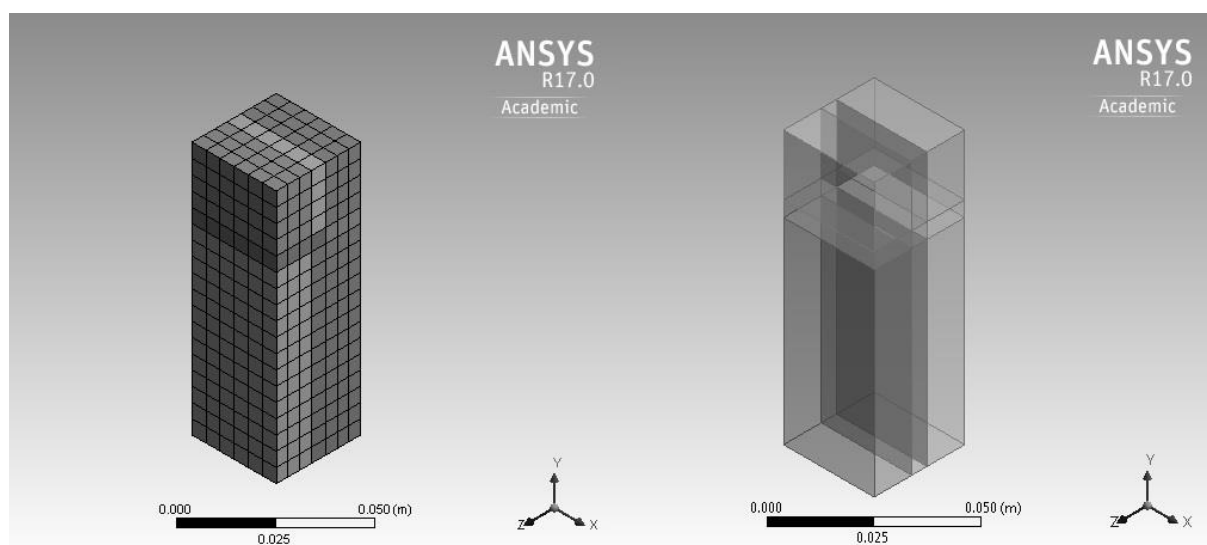
Rys.10 Czas symulacji - 0,30 s

Tab. 4 Wartości maksymalnej prędkości bezwzględnej dla poszczególnych czasów symulacji

Czas symulacji, s	Krok czasowy 10^{-5} s			Krok czasowy $2 \cdot 10^{-6}$
	Maksymalna prędkość bezwzględna, m/s			
	Tytan-domyślne μ	Tytan – stałe μ	Guma – stałe μ	Tytan – stałe μ
0,005	0,023	0,023	$8 \cdot 10^{-4}$	$5,39 \cdot 10^{-5}$
0,150	0,850	0,860	0,730	0,740
0,300	0,660	0,660	0,700	0,680

W przypadku, gdy krok czasowy wynosi 0,00001 s dla tytanowych cząstek różnica między prędkościami jest niewielka, ponieważ tytan nie jest materiałem skłonny do odkształceń sprężystych, a prędkość, od której zależy współczynnik tarcia jest niewielka. Przy mniejszym kroku czasowym cząstki wolniej zsuwają się z półki, pokazuje to jak ważny jest dobry dobór jego wartości w celu uzyskania poprawnych wyników. Również przy materiale, jakim jest guma cząstki wolniej się osuwają, ma na to wpływ sprężystość materiału, czyli większa jego zdolność do odkształcenia, co zwiększa siłę tarcia między cząstkami.

3.2.1 Geometria oraz siatka prostopadłościennego kanału



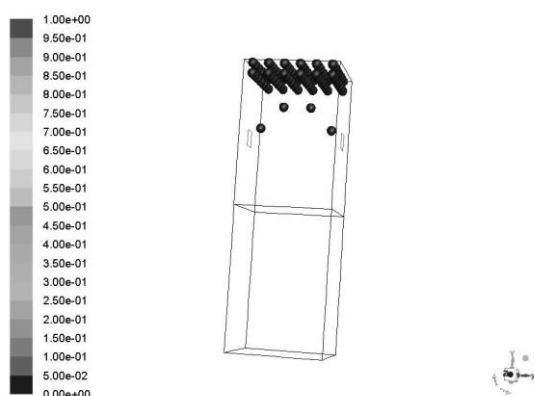
Rys. 11 Siatka oraz prostopadłościennego kanału

Wymiary kanału to 0,03x0,03x0,09 m z dwoma kwadratowymi wlotami o boku 0,005 m na wysokości 0,06 m. Siatka składa się z 756 sześciennych elementów, o rozmiarze 0,005 m. Ścianom zadany został warunek brzegowy – ściana, a miejscem, przez które wpadają cząsteczki – velocity inlet.

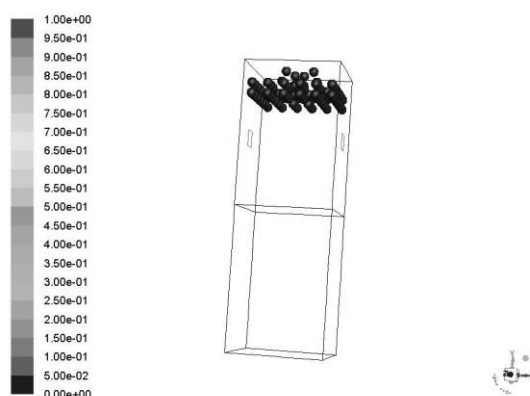
3.2.2 Implementacja

84 tytanowe sferyczne kule zostały wprowadzone do domeny z prędkością 0,5 m/s przez górną powierzchnię oraz 6 przez dwa boczne wloty pod kątem 45° z prędkością 1 m/s. Właściwości fizyczne materiału, z jakiego wykonane są cząstki, ich średnica oraz stosunek jedna cząsteczka w paczce zostały bez zmian.

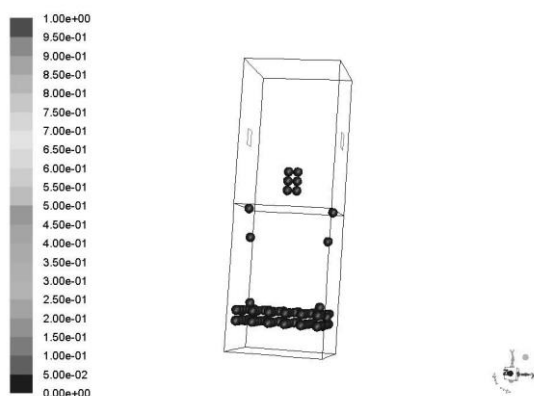
3.2.3 Wyniki symulacji



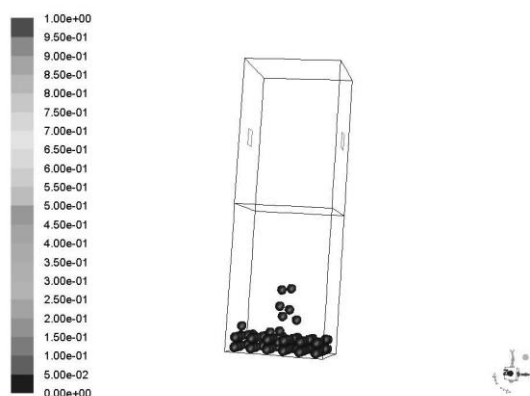
Rys. 12 Czas symulacji 0,075 s



Rys. 13 Czas symulacji 0,110 s



Rys. 14 Czas symulacji 0,200 s



Rys. 15 Czas symulacji 0,250 s

Cząsteczki wprowadzane przez górny wlot nie przylegają ściśle do siebie, co powoduje, iż nie występuje kolizja pomiędzy wszystkimi wprowadzonymi cząstkami. Na skutek kolizji przeciwnie poruszające się kule najpierw unoszą się, a później tracąc swoją energię kinetyczną na rzecz energii potencjalnej, grawitacyjnie opadają w dół. Przy zetknięciu się z dolną powierzchnią zatrzymują się. Kilka cząstek ulega odbiciu – wynika to z faktu, iż miały one większą prędkość, ponieważ w wyniku zderzenia spadały z większej wysokości. Odbicie od powierzchni wcześniej kolidujących cząsteczek jest duże, wynika to z faktu, iż zastosowany został większy krok czasowy od obliczonego (19).

4. Podsumowanie

Symulacja cząstek spadających z półki oraz zderzenia cząstek w prostopadłościennym kanale pozwoliły lepiej zrozumieć możliwości oraz ograniczenia modelu DEM. Dla otrzymania dokładnych wyników wymagany jest bardzo mały krok czasowy, co powoduje, iż cały proces jest kosztowny obliczeniowo. W zależności od przyjętego kroku czasowego oraz ilości cząstek znajdujących się w domenie czas obliczeń wahał się od 16 do 48 godzin. Z powodu, iż zamodelowana została jedynie faza dyspersyjna nie zbadano jej wpływu na płyn. Praca jest wstępem do dalszej pracy nad DEM-em, w celu zamodelowania przepływu wielofazowego w kotle fluidalnym.

[1] Wojciech Sobieski, Seweryn Lipiński, Waldemar Dudda, Anna Trykozko, Maciej Marek, Joanna Wiącek, Maciej Matyka, Jarosław Gołembiewski, Granularne ośrodki porowate

[2] Cundall P.A., Strack O.D.: A discrete element model for granular assemblies, Géotechnique, 1979, 29, 47- 65.

[3] ANSYS Academic Research, Release 17.0, Theory Guide, ANSYS, Inc.

[4] Przydatne definicje , strona internetowa :

https://pharmahub.org/resources/123/download/psl_purdue_dem_lecture06_normalcontactforcemodels_parti.pdf

[5] H. Hertz. “Über die Berührung fester elastischer Körper”. Journal für die reine und angewandte Mathematik. 92. 156-171. 1881.

[6] Przydatne definicje, strona internetowa:

<http://encyklopedia.pwn.pl/szukaj/wspólczynnik%20Poissona.html>

[7] Multiphase Flows with Droplets and Particles, Second Edition Autorzy Clayton T. Crowe, John D. Schwarzkopf, Martin Sommerfeld, Yutaka Tsuji

[8] Christoph Kloss, Stefan Pirker, Coupling of DEM and CFD simulations and experiments, Kopenhagen 25 March 2009

[9] Przydatne definicje , strona internetowa:

http://www.engineeringtoolbox.com/young-modulus-d_417.html

[10] Przydatne definicje , strona internetowa:

http://www.engineeringtoolbox.com/poissons-ratio-d_1224.html

[11] Przydatne definicje , strona internetowa:

<http://limba.wil.pk.edu.pl/~jg/pomoce/charakt.xls>

[12] Gidaspow D. “Multiphase Flow and Fluidization, Boston MA.” Academic Press. 1994

[13] Adamczyk W.P., Kozołub P., Klimanek A., Białecki R.A., Klajny M., Andrzejczyk M., Numerical simulations of the industrial circulating fluidized bed boiler under air- and oxy-fuel combustion. Applied Thermal Engineering, Vol. 87 (2015), 127-136

[14] Snider D.M. and Banerjee S., Heterogeneous gas chemistry in the CPFD Eulerian–Lagrangian numerical scheme (ozone decomposition), Powder Technology, Vol. 199 (2010), 100-106

[15] Syamlal M., Rogers W., and O'Brien T.J., MFIIX Documentation, National Technical Information Service, Vol. 1 (1993), 5540-5551

[16] Przydatne definicje , strona internetowa: <http://home.agh.edu.pl/~wslosar/siodmy.html>

[17] Przydatne definicje , strona internetowa:
http://www.fizykon.org/dynamika/dyn_druga_zasada_dynamiki.htm

Application of DEM approach for predicting particles interactions

Agata Widuch

Key words: CFD, DEM, particle-particle interactions, coefficient of friction

Abstract

The applications of numerical techniques for modeling of various industrial processes are getting very popular. One of the examples can be found in energy sector where advanced numerical models are often applied for optimization of the fuel chemical energy conversion processes into the useful form of energy. This process generally occurs within pulverized or fluidized coal boilers. Over the years, the popularity of the second boiler group constantly increased, mainly due to the reason that they are less sensitive to fuel quality and ensure high conversion of fuel into heat. Nevertheless, it is not a trivial task to simulate all interaction between particles, which occur during fluidization process. The fluidization process in nature is very complex and requires a specific approach. Multiphase flow can be simulated using Euler-Euler, hybrid Euler-Lagrange approaches or using the Discrete Element Method (DEM). The DEM approach contrary to both earlier mentioned techniques takes into account impact of material properties on the particles collision process. The DEM approach compared to the Euler-Euler technique has not been well tested yet for modelling fluidization process. In the present work the strength and weakness of the DEM model has been tested using simple test looking on collision of individual or groups of particles.