Обогащение руд. 2010. № 1. С. 30–35.

# Методы динамики частиц и дискретных элементов как инструмент исследования и оптимизации процессов переработки природных и техногенных материалов

Арсентьев В.А.[1], Блехман И.И.[1,2], Блехман Л.И.[1,2], Вайсберг Л.А.[1], Иванов К.С. [1,2], Кривцов А.М. [2,3] (1 – НПК “Механобр-техника”, 2 – Институт проблем машиноведения РАН, 3 – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет (СПбГПУ))

Среди современных методов компьютерного моделирования физических и технологических процессов особый интерес представляют методы, базирующиеся на концепции дискретного представления вещества, – метод динамики частиц (молекулярной динамики) и метод дискретных элементов [1, 2].

В настоящей статье сообщается о результатах использования этих подходов для решения некоторых задач обогащения руд и переработки отходов. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования этих подходов также для моделирования и оптимизации более широкого класса процессов переработки природного и техногенного сырья. При этом возможно математическое моделирование различных воздействий на движение и превращения не только в сыпучих, но и в жидких, а также в газообразных средах и любых их композициях. Намечены первоочередные задачи исследований. Дана общая постановка соответствующих задач.

## 1. О методах динамики частиц и дискретных элементов – варианты программ и подходов

Метод динамики частиц и один из хорошо разработанных его вариантов – метод молекулярной динамики – состоит в представлении среды в виде совокупности взаимодействующих частиц – материальных точек или твердых тел. Их движение описывается уравнениями классической механики, причем взаимодействия учитываются посредством так называемых потенциалов взаимодействия, в соответствии с которыми

частицы, например, отталкиваются при сближении и притягиваются при некотором удалении. При моделировании движения частиц с помощью метода динамики частиц на каждом шаге итерационными методами решается задача Коши – интегрируются дифференциальные уравнения при заданных начальных условиях. Строго говоря, метод молекулярной динамики является одной из разновидностей метода динамики частиц, когда в качестве частиц выступают атомы или молекулы. В случае, когда частицы представляют собой более крупные образования (зерна, гранулы, макроскопические частицы), часто также используют термин “молекулярная динамика”, хотя правильнее в этом случае говорить о динамике частиц или дискретных элементов. Наиболее известные программы, для расчетов с помощью метода молекулярной динамики – AMBER, CHARMM, GROMACS, GROMOS, NAMD.

Метод дискретных элементов может рассматриваться как обобщение метода конечных элементов. Он был разработан и впервые применен для исследования механики горных пород. При моделировании процесса этим методом задаются начальные положения и скорости частиц. Затем, исходя из этих начальных данных и также задаваемых физических законов взаимодействия частиц, вычисляются силы, действующие на каждую частицу. При этом можно учитывать самые различные законы взаимодействия; достаточно, чтобы для их описания существовали разрешимые уравнения. Для каждой частицы вычисляется результирующая сила и также решается задача Коши на выбранном отрезке времени. В результате получаются начальные данные для следующего шага. Вычисления продолжаются в течение всего представляющего интерес времени протекания процесса. Провести четкую границу между методом динамики частиц и методом дискретных элементов сложно; основное различие состоит в том, что первый возник как обобщение метода молекулярной динамики, а второй – как обобщение метода конечных элементов. Однако в настоящее время оба метода могут

приводить фактически к одинаковым вычислительным алгоритмам, и название в основном определяется тем, какие пакеты программ используются для расчета.

Наиболее известны следующие программы, реализующие метод дискретных элементов: Chute Maven (Hustrulid Technologies Inc.), PFC2D и PFC3D, EDEM (DEM Solutions Ltd.), GROMOS 96, ELFEN, MIMES, PASSAGE®/DEM.

Безусловно, при вычислении движений каждой частицы описанными методами возникают необратимые погрешности, а задача вычисления индивидуальных траекторий принципиально нелинейна и неустойчива. Однако, исходя из физических соображений, можно ожидать, что эти обстоятельства не повлияют на макроскопическую усредненную картину процесса.

Важной при использовании рассматриваемых методов является возможность визуализации моделируемых процессов на дисплее компьютера или с использованием 3D-виртуальной реальности [3]. В последнее время подобные системы успешно используются в ряде крупных фирм и учебных заведений (например, в СПбГПУ под руководством Н.Н. Шаброва) [4]. Как показали уже первые опыты, в процессе такой визуализации у исследователей и изобретателей возникают плодотворные идеи по совершенствованию соответствующих процессов и устройств (см. п. 4).

## 2. Исследование процессов вибрационного транспортирования и грохочения методами молекулярной динамики

Программы для моделирования этих процессов были разработаны на основе методов молекулярной динамики [1], причем для простоты использовалась двумерная (плоская) модель. Применение трехмерной (пространственной) модели не создает принципиальных трудностей. При этом количественные характеристики становятся более близкими к экспериментальным результатам.

Состояние материала в один из моментов установившегося процесса вибротранспортирования представлено на рис. 1, *а*. Одним из важных результатов явилось обнаружение волнового характера движения сыпучего материала в направлении, перпендикулярном вибрирующей плоскости (рис 1, *б*).

а)

б)

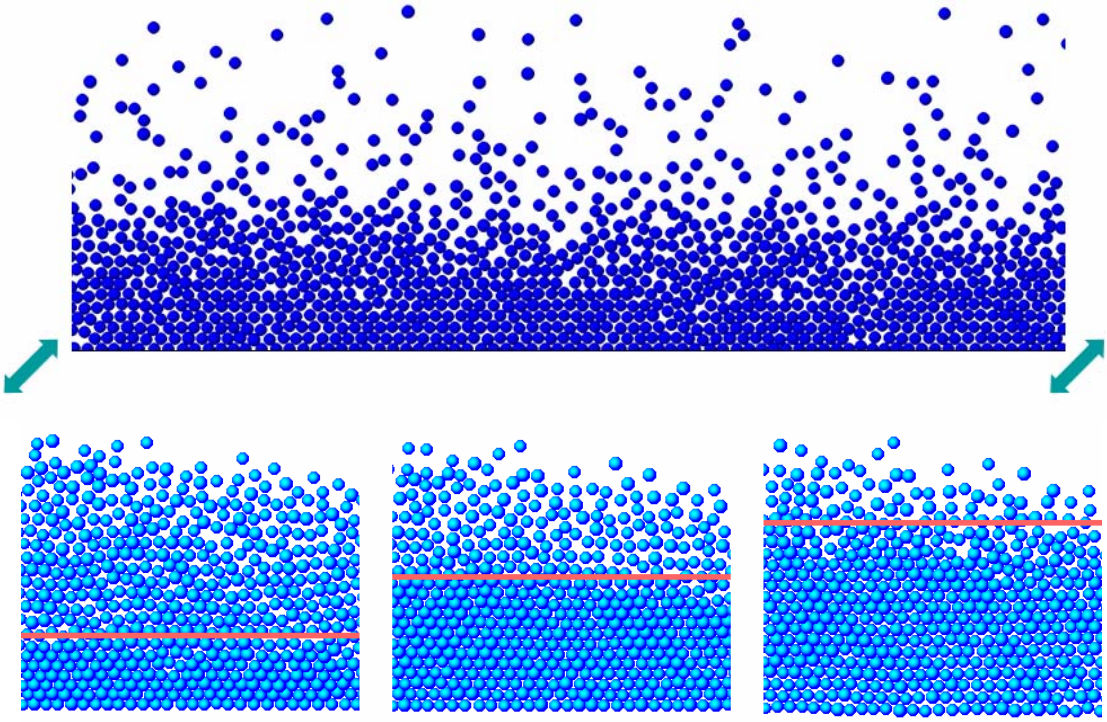

Рис. 1. Вибрационное транспортирование

а) Состояние материала в один из моментов установившегося процесса
б) Движение фронта волны в сыпучей среде под действием вибрации

На рис. 2 представлена картина установившегося процесса грохочения, полученная при его моделировании. Примечательно, что найденные оптимальные значения параметров вибрации оказались близкими к хорошо известным из практики грохочения.

При освоении программ применительно к исследованию грохочения проводилось их тестирование, которое зфключалось в решении трехмерной задачи о времени истечения песка из неподвижных и вибрирующих песочных часов. Предварительно в широком диапазоне параметров были проведены физические эксперименты, давшие ряд

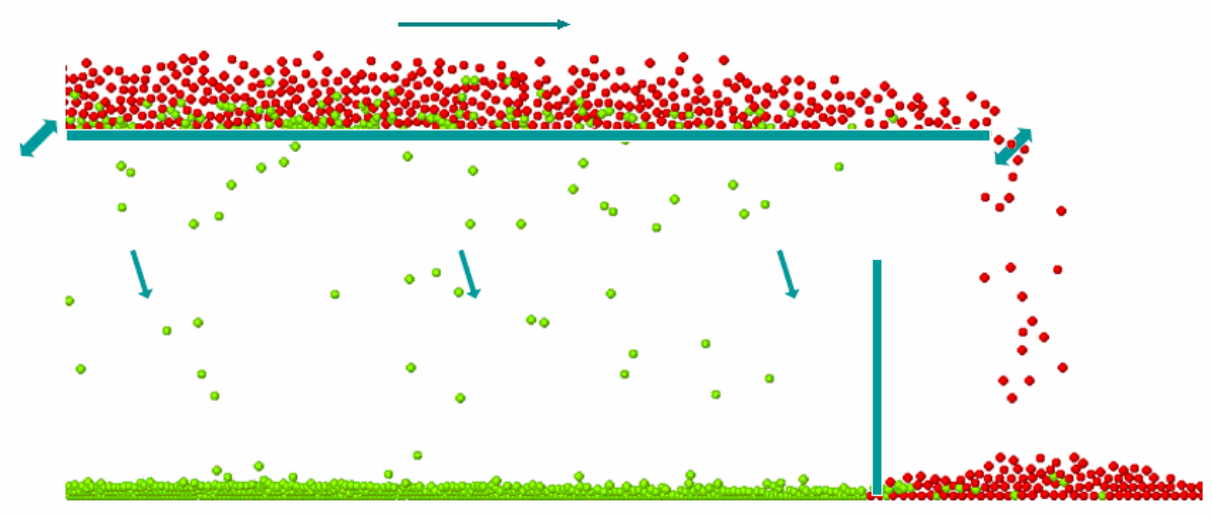

Рис. 2. Установившийся процесс грохочения

неочевидных результатов. В частности, выяснилось, что вследствие вибрации истечение может замедлиться в 10 и более раз и даже полностью прекратиться (опыты В.Б. Василькова и К.С. Якимовой). Результаты моделирования соответствовали этим данным.

**3. Моделирование процесса вибрационной сегрегации (первые результаты)**

Моделирование вибрационной сегрегации осуществлялось по аналогичной программе. На рис. 3 представлены некоторые результаты исследований для двух, трех и четырех типов разделяемых частиц, отличающихся как по размерам, так и по плотности. Все картины соответствуют достаточно большому времени протекания процесса, при котором состояние смесей можно считать стационарным. Каждому рисунку соотнесена колонка чисел, указывающих на относительные плотности частиц, относительные размеры которых показаны во второй колонке. Рис. 3, *а* относится к случаю эффективного разделения трех типов частиц, отличающихся как по плотности, так и по размерам. Рис 3, *б* и *в* соответствуют затрудненному разделению трех и двух типов частиц одинаковой плотности, отличающихся по размеру. На рис. 3, *г* представлена картина разделения смеси четырех типов частиц в случае, когда два сорта крупных и два сорта мелких частиц, отличающихся в два раза по плотности, имеют одинаковый размер. В этом случае разделение

эффективно, но требует значительно большего времени. Рис. 3, *д* и *е* соответствуют эффективному разделению частиц с различными комбинациями плотностей и размеров.

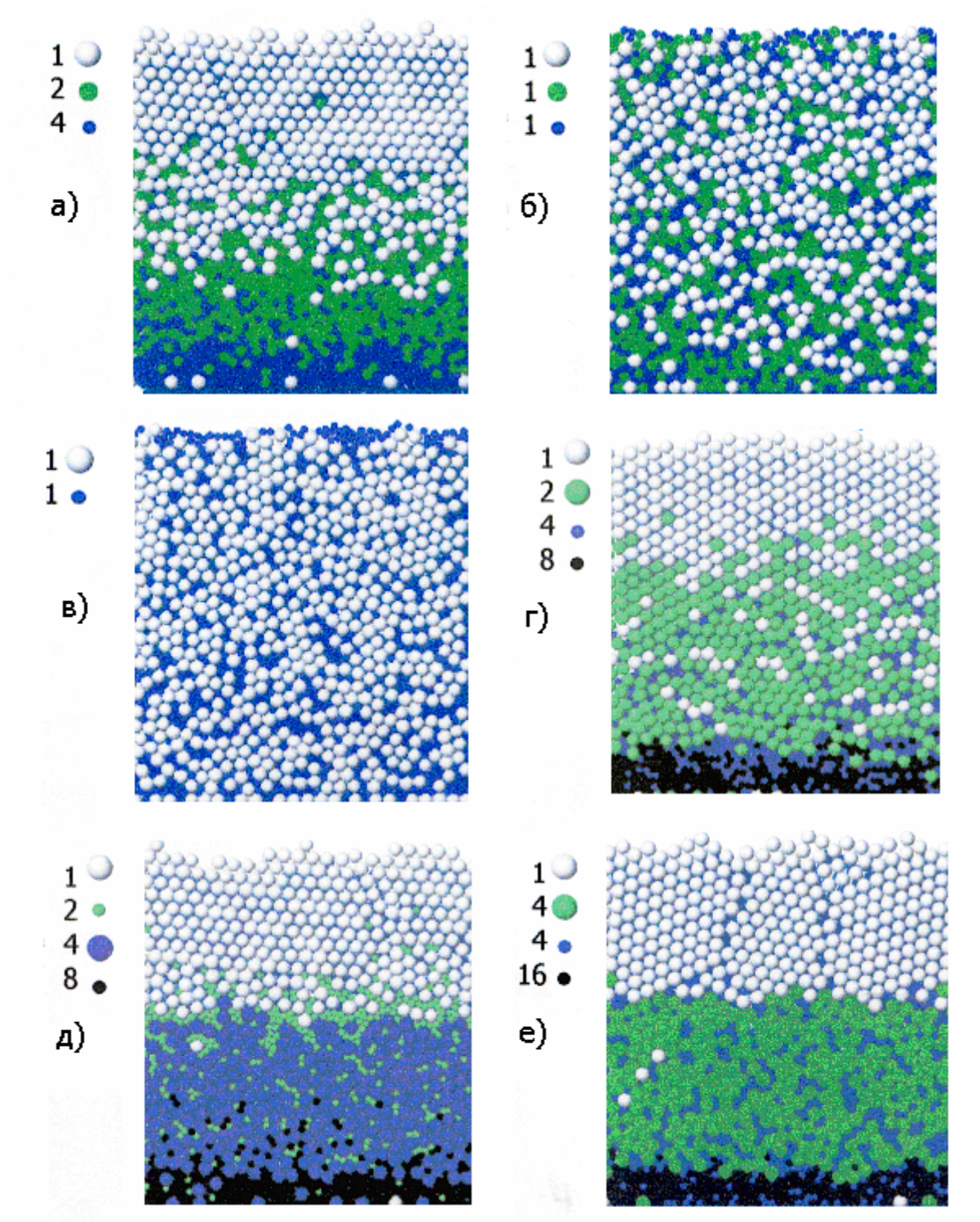


Рис. 3. Некоторые результаты исследований вибрационной сегрегации для различных типов частиц

Особый интерес представляет качественное исследование поведения двухкомпонентных смесей для выяснения принципиальных закономерностей их поведения под действием вибрации. На рис. 4 представлено состояние двухкомпонентной смеси частиц равных диаметров (1.5 мм) с разным соотношением плотностей. Естественно, что эффективность разделения возрастает по мере увеличения отношения плотностей.

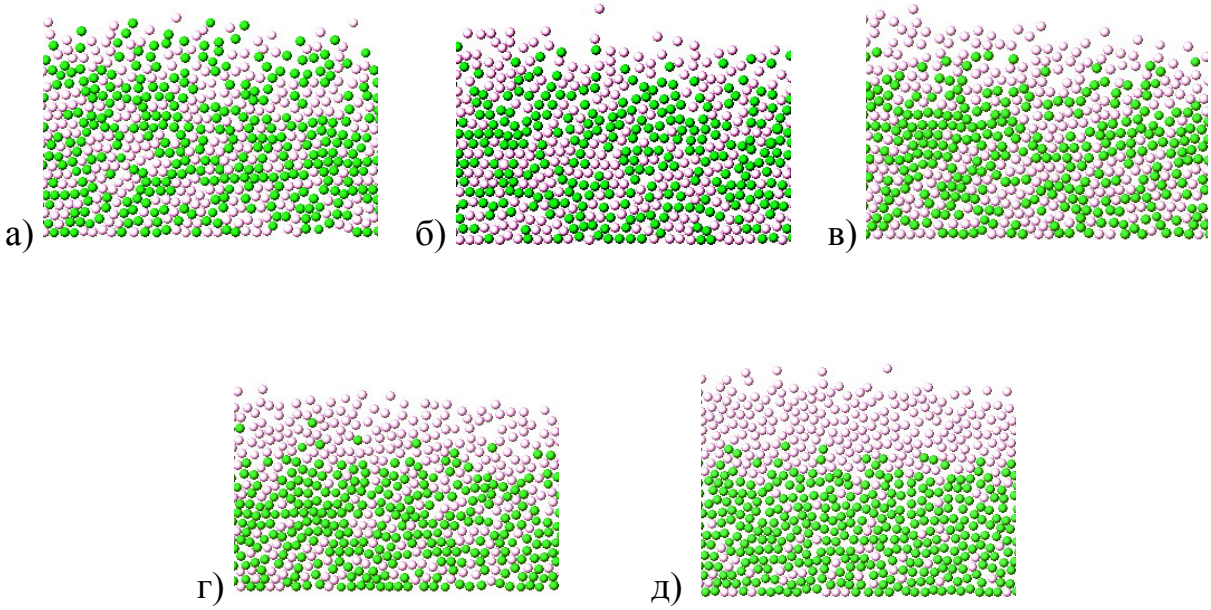


Рис. 4. Моделирование разделения по плотности; состояние смеси через 60 с воздействия вибрации с амплитудой 2 мм и частотой 25 Гц.
Отношение плотностей: а) 1.125, б) 1.25, в) 1.5, г) 2, д) 5

На рис. 5 показано состояние двухкомпонентной смеси частиц равных плотностей с разным соотношением диаметров через 80 с воздействия вибрации с амплитудой 2 мм и частотой 25 Гц, что соответствует амплитуде ускорения около $5g$ .

Отметим, что высокий уровень ускорений связан с использованием двумерной модели, в которой частицы моделируются кругами. Для прохода каких-либо частиц вниз в этом случае требуется интенсивное подбрасывание с образованием каналов достаточной ширины. Реальная смесь при указанной интенсивности вибрации находится в состоянии виброкипения. При использовании трехмерной модели шарообразные

частицы “более подвижны”, т.к. каналы могут быть трехмерными и, как отмечалось в п. 2, результаты расчета становятся близки к результатам реальных экспериментов.

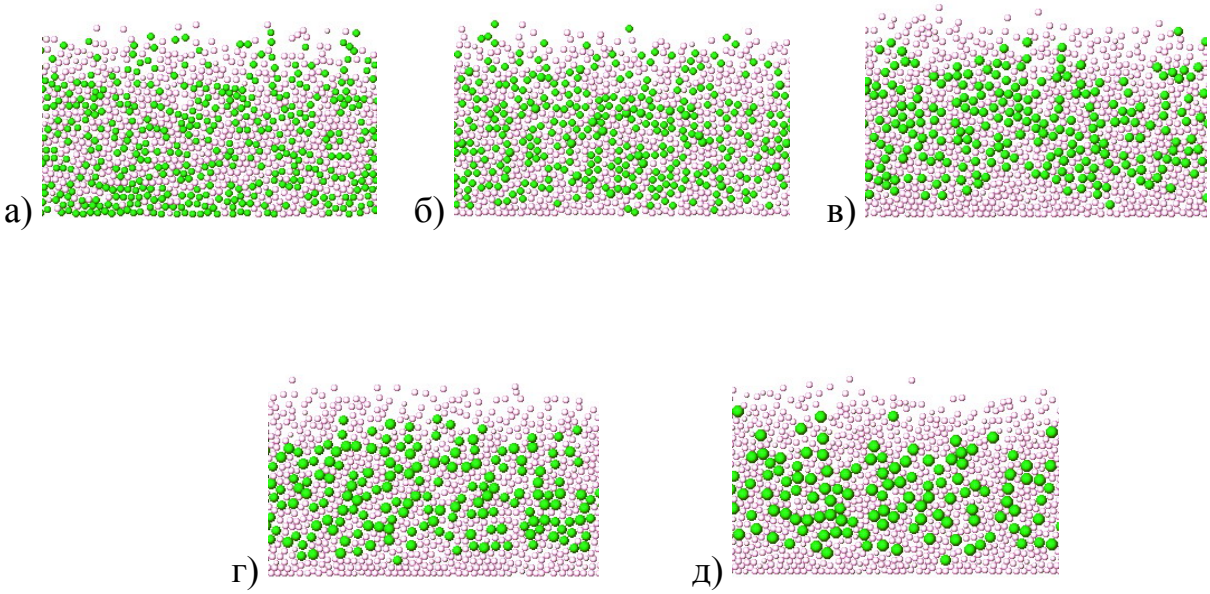


Рис. 5. Моделирование разделения по крупности. Состояние смеси через 80 с воздействия вибрации. Отношение диаметров частиц: а) 1.25, б) 2, в) 4, г) 6, д) 8

Данная модель демонстрирует принципиально большую чувствительность к плотности частиц. В процессе моделирования как разделения по плотности, так и по крупности, имеет место тенденция создания на поверхности сыпучей среды слоя частиц меньшей абсолютной массы, вне зависимости от плотности. Эффект может быть объяснен особенностями передачи импульса при соударении частиц, который для легких частиц приводит к “подбрасыванию” на большую высоту. И если в случае разделения по плотности иные факторы разделения не действуют и разделение происходит достаточно “чисто”, то в случае разделения по крупности действует также тенденция, обусловленная способностью более мелких частиц просыпаться между крупными. Это, в свою очередь, делает возможным разделение на три слоя (рис. 5, *г* и *д*).

На рис. 6 представлена зависимость эффективности разделения двухкомпонентной смеси от частоты вибрации при фиксированной

амплитуде. Смесь состоит из мелких тяжелых частиц и крупных легких (отношение диаметров частиц 1:2, отношение плотностей 4:1). Примечательно, что эта зависимость имеет максимум при частоте около 10 Гц.

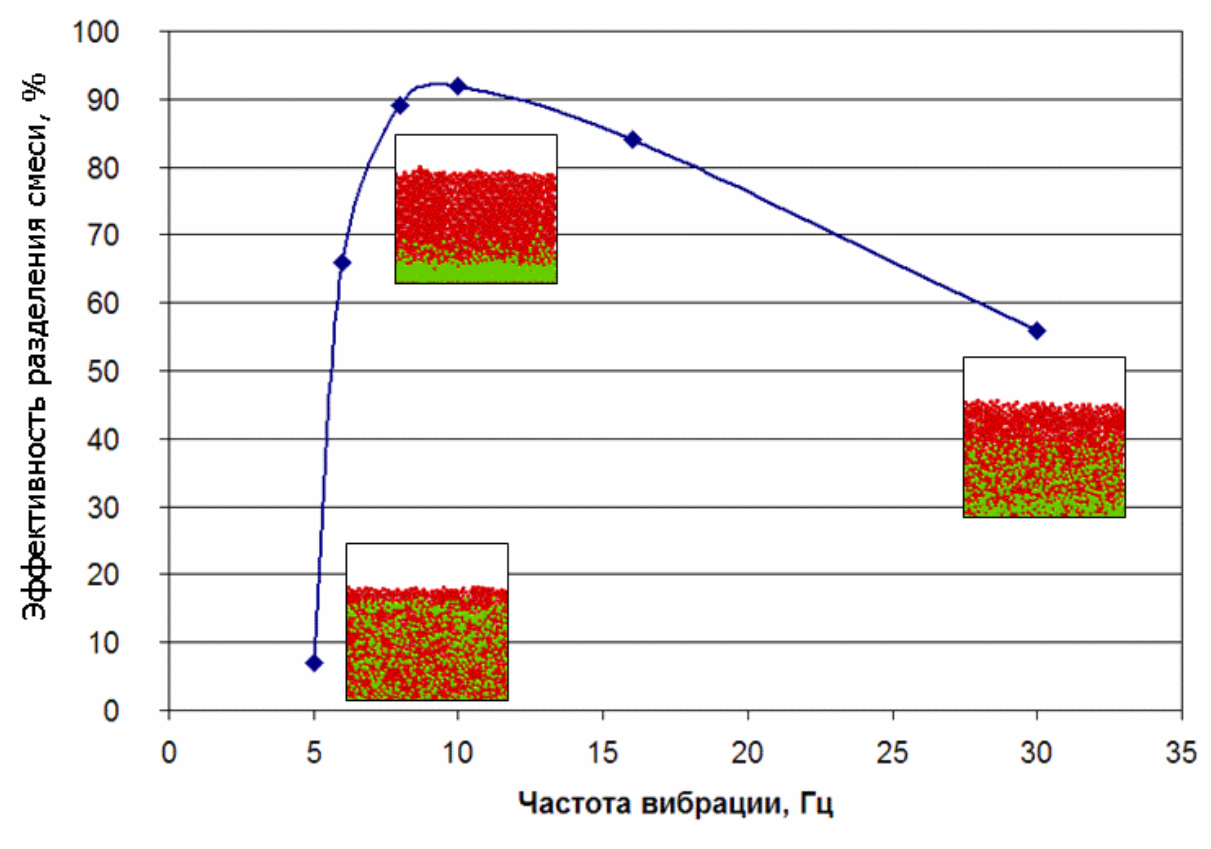


Рис. 6. Зависимость эффективности разделения частиц двухкомпонентной смеси от частоты вибрации при фиксированной амплитуде

Все представленные картины качественно достаточно хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

Помимо описанных выше исследований с использованием метода динамики частиц, сегрегация изучалась также методом дискретных элементов. Главным результатом исследований процесса стала идея создания сегрегационного вибрационного классификатора (бесситового грохота). Аппарат позволяет решать технологические задачи тонкой классификации, выходящие за рамки возможностей обычных грохотов. В отличие от грохотов, у этого устройства при эксплуатации не возникает проблем с износом сит и забивкой их отверстий; оно требует также

меньших энергозатрат. Разработан и испытан экспериментальный образец классификатора, на его схему оформлена патентная заявка.

При моделировании процесса сегрегации методом дискретных элементов была использована программа EDEM (DEM Solutions Ltd). Эта программа позволяет учитывать большое разнообразие физических законов, быстро изменять параметры системы по ходу исследования. Программа обладает гибким интерфейсом и широким спектром возможностей визуализации. Из недостатков стоит отметить высокую требовательность к вычислительным ресурсам. Программа имеет хорошие перспективы для применения в моделировании исследуемых процессов.

## 4. Перспективы использования методов при исследовании и оптимизации процессов переработки природных и техногенных материалов

В различных процессах поэтапной переработки природного и техногенного сырья приходится иметь дело с твердыми, сыпучими телами, жидкостями, газожидкостными средами и средами типа суспензии. Основными являются процессы дезинтеграции твердых материалов и сепарации частиц по различным признакам – плотности, размеру, форме и другим. Особое значение имеют процессы, протекающие под действием вибрации. Вибрация позволяет, в частности, как бы перевести силы сухого трения между частицами в силы типа вязкого трения и тем самым снизить энергозатраты на разрушение и способствует действию разделительных факторов. Рассматриваемые методы могут явиться особенно эффективными для моделирования и оптимизации таких процессов.

Важной при этом является возможность “сопряжения” данных методов с эффективным аналитическим подходом к исследованию действия вибрации на нелинейные механические системы, называемым вибрационной механикой [5]: имеется возможность наблюдения за процессом как бы в стробоскопическом освещении, т.е. выделения наиболее существенной медленной составляющей процесса.

Конкретно можно наметить задачи моделирования и оптимизации следующих технологических процессов.

***1) Вибрационное транспортирование сыпучих материалов.*** Эта операция широко используется в процессах рудоподготовки, в химической, пищевой и других отраслях промышленности. Если теория вибротранспортирования одиночных твердых тел разработана достаточно полно, то движение слоя сыпучего материала по вибрирующей поверхности изучено далеко не исчерпывающим образом [6]. Поэтому моделирование вибротранспортирования слоя посредством рассматриваемых методов представляет значительный интерес. Уже первые пробные исследования в этом направлении позволили выявить ряд важных, неизвестных ранее, закономерностей. В частности, оказалось возможным наблюдать мало изученный волновой характер движения среды в поперечном к поверхности транспортирования направлении. Здесь проявляется уже подчеркнутое важное достоинство рассматриваемых и других компьютерных методов моделирования – возможность визуализации динамических процессов.

***2) Вибрационная сегрегация и грохочение сыпучих материалов***. Под вибрационной сегрегацией понимается процесс расслоения по крупности и по плотности в вибрирующем сосуде или лотке. При этом, как правило, в нижнем слое оказываются мелкие тяжелые частицы, затем располагаются мелкие легкие и крупные тяжелые, а затем – крупные легкие. Процесс сегрегации является важной составной частью вибрационного грохочения – одного из самых распространенных в промышленности процессов классификации сыпучего материала на вибрирующих ситах [6]. Моделирование процесса сегрегации посредством рассматриваемых методов позволит не только оптимизировать процесс вибрационного грохочения с учетом свойств материала, но и инициировать идеи создания новых классифицирующих устройств.

При выборе оптимальных параметров классифицирующих аппаратов описанные подходы дают технологам широкие возможности. Задав исходную производительность, параметры аппарата и распределение частиц исходного материала, например, по крупности и плотности, можно в результате моделирования получить ожидаемые аналогичные распределения продуктов разделения, их выходы и значения критериев эффективности разделения. Таким образом, моделирование позволяет в значительной степени заменить физический эксперимент и обработку его результатов. Программа моделирует ситовой анализатор и гранулометр и выдает технологам готовый отчет об испытаниях.

***3) Измельчение в барабанных мельницах.*** Процесс измельчения твердых материалов в барабанных мельницах является весьма энергоемким – на измельчение тонны руды до нужной для обогащения крупности обычно тратится до 20 кВт·ч, а в особых случаях, например при сверхтонком измельчении отходов твердых сплавов – до 1000 кВт·ч. Поэтому, несмотря на многолетний опыт использования данного процесса, его оптимизация, например, путем подбора объема и состава мелющих тел, частоты вращения барабана и других параметров, остается актуальной задачей [7].

Перспективным направлением значительного снижения энергозатрат на измельчение является использование мельниц с нетрадиционной формой рабочей камеры [7, 8]. Изменение формы камеры в этих мельницах позволяет “турбулизовать” движение загрузки, вовлечь в процесс так называемое малоподвижное ядро. Предложено, в частности, использовать камеры с сечениями в виде неосесимметричной трехлепестковой фигуры, имеющие в продольном направлении форму дискретной спирали. Механика движения загрузки в таких мельницах значительно сложнее, чем в стандартных, где она также весьма сложна.

Использование компьютерного моделирования на основе метода динамики частиц или метода дискретных элементов позволяет исследовать

движение загрузки в мельницах разных конструкций, с различной формой камер и различными типами футеровок, при любых значениях степени заполнения барабана, частоты его вращения и при любом составе мелющих тел. Это даст возможность при испытаниях новых конструкций и при оптимизации работы эксплуатируемых машин заменить значительную часть трудоемких технологических исследований вычислительными экспериментами. При этом такой важный количественный критерий, определяющий эффективность измельчения, как полезная мощность, легко рассчитывается как произведение веса загрузки, горизонтальной координаты ее центра тяжести и частоты вращения барабана. Расчет дает также картину пульсаций мощности, обусловленных некруговой формой сечения или автоколебательными процессами в случае круговой формы. Интересен и характер пускового режима мельницы. Фактически расчет моделирует показания прибора, регистрирующего потребляемую мощность. При усложнении модели можно исследовать непосредственно процесс измельчения, а также износ футеровки и мелющих тел. Наблюдение за процессом с любых точек позволяет увидеть то, что недоступно при фотосъемке через прозрачный торец лабораторной модели. Можно, например, наблюдать распределение шаров по крупности вдоль барабана при использовании шаросортирующих футеровок.

Несомненно, что использование рассматриваемых методов моделирования позволит не только оптимизировать параметры обычных и нетрадиционных мельниц, но и приведет к созданию новых эффективных конструкций.

***4) Дробление в щековых и конусных дробилках.*** Процессы разрушения материала в дробилках и в мельницах, являются достаточно энергоемкими. Движение и разрушение материала в дробилках происходит между двумя вибрирующими твердыми поверхностями. Как показывают опыт эксплуатации дробилок и теоретические исследования, выбор формы этих поверхностей оказывает значительное влияние на технологические и

эксплуатационные показатели [9]. Что касается параметров колебаний этих поверхностей, то и они в известной мере могут выбираться из соображений целесообразности. Кроме того, в таких дробилках как инерционные конусные и щековые, колебания рабочих поверхностей могут лишь приближенно считаться заданными. Фактически же они существенно зависят не только от геометрических и динамических параметров машины, но и от количества и свойств дробимого материала, находящегося в рабочем пространстве (камере дробления). В проблеме профилирования актуальными являются, в частности, следующие задачи:

- получение материала определенной или минимально возможной при заданных ограничениях крупности конечного продукта,
- минимизация износа броней, равномерность износа по длине камеры дробления,
- минимизация энергозатрат на дробление при заданной крупности конечного продукта,
- получение материала с заданной гранулометрической характеристикой,
- минимизация переизмельчения продукта,
- получение продукта с максимальным содержанием частиц кубовидной формы (это желательно для получения прочного бетона и при устройстве дорожных покрытий).

Можно ожидать, что все эти задачи могут быть успешно решены рассматриваемыми методами.

***5) Электромагнитная сепарация.*** Моделирование рассматриваемыми методами процесса электромагнитной сепарации позволит оптимизировать процесс путем выбора основных параметров с учетом характера материала. Появляется также возможность исследования процесса при подаче исходного сыпучего материала в виброкипящем слое. Использование вибрации совместно с электромагнитным разделением частиц может

существенно повысить качество и производительность процесса. И в этом случае важна возможность визуализации изучаемого процесса.

***6) Другие процессы.*** Представляется перспективным использование рассматриваемых методов моделирования также для процессов переработки сырья в присутствии жидкой среды – на концентрационных столах, в гидроциклонах, при отсадке, флотации. Жидкие среды при таком моделировании могут быть представлены соответствующими частицами, либо учитываться в виде сил вязкого сопротивления (в последнем случае, конечно, не принимаются во внимание инерционные свойства среды). Кроме того, рассматриваемые программы предусматривают возможность взаимодействия с другими вычислительными пакетами, например, ANSYS Fluent (задачи газодинамики, химии, горения) и ANSYS CFS (решение уравнений Навье-Стокса, модели турбулентности).

Ряд результатов использования программы EDEM для исследования процессов в горно-металлургической промышленности приводится в докладе [10].

## 5. Общая постановка задачи

В общей форме задача моделирования рассмотренных выше технологических процессов может быть поставлена следующим образом.

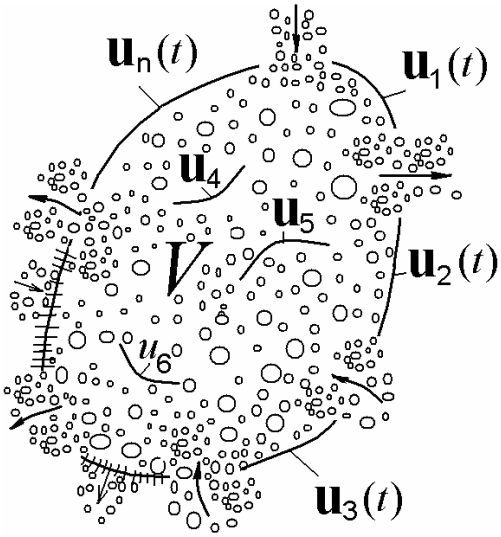


Рис. 7. К общей постановке задачи моделирования

Имеется некоторое число $n$ абсолютно твердых поверхностей, расположенных с некоторыми зазорами (рис. 7).

Движение каждой из поверхностей считается заданным векторами $\mathbf{u_1}(t),\ldots,\mathbf{u_n}(t)$, которые в общем случае пространственного движения поверхности имеют шесть компонент, соответствующих шести степеням свободы твердых тел. Наиболее важными при этом являются случаи периодических колебаний поверхностей, когда задаются траектории колебаний их точек (вибрационные грохоты, конвейеры и питатели, конусные и щековые дробилки), а также случай вращения всех или нескольких поверхностей как одного твердого целого (барабанные мельницы, центробежные сепараторы, мешалки, флотомашины). Все или отдельные поверхности могут быть и неподвижны, а определенным образом двигаться среда (гидроциклоны). Через зазоры осуществляется загрузка или разгрузка обрабатываемой среды; такая загрузка или разгрузка могут происходить также при проницаемости всех или отдельных поверхностей для частиц определенных размеров или других конкретных свойств.

Процесс происходит либо в пространстве между поверхностями (дробление руды, измельчение в мельницах), либо с одной стороны от поверхностей (грохочение, вибротранспортирование, концентрация на столах). На частицы или тела действуют как внешние объемные силы (гравитационные, электромагнитные и т.п.), так и силы взаимодействия между частицами или телами и поверхностями (сухое трение, соударения).

## Заключение

В данной статье приведены первые результаты использования методов динамики частиц и дискретных элементов для моделирования процессов переработки минерального и техногенного сырья. Эти результаты свидетельствуют о перспективности методов, в частности, благодаря возможности учета важных факторов, не учитываемых другими подходами.

Важное значение при этом имеет возможность детальной визуализации процессов, в том числе, в “стробоскопическом освещении”, позволяющем выделить медленные составляющие процессов. Развитие данного направления может послужить импульсом к разработке новых эффективных машин и технологий.

В статье намечены первоочередные задачи использования подходов: Это проблемы исследования и оптимизации процессов вибротранспортирования, сегрегации, грохочения, дробления и измельчения, магнитной сепарации. Приведена общая постановка задачи о моделировании таких процессов.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 09-08-00745, 09-08-00620, 08-01-00865, 09-01-12096).*

*Список литературы*

1. Кривцов А.М. Деформация и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М.: Физматлит, 2007, 304 с.
2. http://www.dem-solutions.com/
3. Pertti Broas. Advantages and problems of CAVE-visualisation for design purposes. – Trans. VTT Symposium “Virtual prototyping”. – Espoo, Finland, February 1 st, 2001. – pp. 73–81. (http://www.vtt.fi/inf/pdf/symposiums/2001/S210.pdf).
4. http://www.paracomtech.ru
5. Блехман И.И. Вибрационная механика. – М.: Физматлит, 1994. 400 с.
6. Вайсберг Л.А., Рубисов Д.Г. Вибрационное грохочение сыпучих материалов. – СПб.: Механобр, 1994.– 45 с.
7. Блехман Л.И. Теория, расчёт, разработка и внедрение новых аппаратов для циклов измельчения и классификации (барабанных мельниц и аппаратов гидроциклонного типа). – Автореф. дисс. … канд. техн. наук. – Л., 1990, 25 с.
8. Блехман Л.И., Кремер Е.Б. Интенсификация измельчения: камеры нетрадиционной формы и нерегламентные режимы мельниц самоизмельчения. – Материалы комплекса научных мероприятий стран СНГ. Часть 4. Научная школа “Вибротехнология – 97”. Механическая обработка дисперсных (сыпучих) материалов и сред. – Одесса, 1997, с. 85–90.
9. Блехман И.И., Иванов Н.А., Титова Л.Г. и др. Принципы профилирования камер дробления конусных дробилок и результаты предварительных испытаний оптимизированных профилей в промышленных условиях // Сб. науч. тр. Л.: Институт Механобр, 1985. С. 23–33.
10. Феоктистов А.Ю, Каменецкий А.А., Скрябин И.Н., Блехман Л.И., Иванов К.С. Применение программного пакета EDEM для моделирования

процессов в горно-металлургической промышленности // IV Междунар. конфер. “Инновационные технологии автоматизации и диспетчеризации горнодобывающих и перерабатывающих предприятий”. Тезисы докл. – (Санкт-Петербург, СПбГГИ, 2009).