

УДК 531.1

Аблогін А. М.

*(Таврійський державний агротехнологічний університет)*

## ВИБІР МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ДЛЯ ОПИСУ РУХУ СИПУЧИХ МАТЕРІАЛІВ

*Сыпучие материалы широко используются в химической, фармацевтической, пищевой промышленности, сельском хозяйстве, строительстве и многих других отраслях. Описание их движения является весьма сложной задачей, что привело к появлению множества различных математических моделей. Статья посвящена выбору наиболее подходящей модели.*

Granular materials are widely used in chemical, pharmaceutical, food production, agriculture, building and many other industries. Describing of their movement is a quite complicated task. Many different mathematical models were proposed for it. The article focused on choosing the most appropriate model.

### ***Вступ та постановка проблеми***

Сипучі (або гранульовані) матеріали застосовуються людиною дуже давно. Але не дивлячись на величезне прикладне значення, властивості гранульованих матеріалів до недавнього часу практично не вивчалися. Математичний опис руху гранульованих матеріалів є дуже складною задачею через значну різноманітність поведінки гранульованих матеріалів [1] [2] [3]. Наприклад, звичайний пісок у відповідних умовах може вести себе як тверде тіло, рідина, або ж як газ, при чому, кожна «фаза» матиме як унікальні, так і властивості «справжніх» рідин, газів та твердих тіл [4]. Тому для опису спостережуваних феноменів було запропоновано багато різноманітних теоретичних підходів від гідродинаміки до теорії газів.

### ***Постановка завдання***

Метою даної статті є визначити найбільш придатну модель для опису руху потоків сипучих матеріалів.

### ***Основна частина***

Усі математичні моделі для опису поведінки сипучих матеріалів, на нашу думку, можна умовно розділити на дві групи:

- методи засновані на молекулярно-кінетичній теорії, в яких макроскопічні показники руху гранульованого матеріалу виводяться із закономірностей взаємодії окремих зерен всередині потоку матеріалу (див. наприклад [5]);

- опис із позицій континуальних теорій, у якому гранулярний матеріал розглядається як неперервне середовище із однорідними властивостями (див. наприклад [6]).

Такий варіант запропонований у [7] [8], однак не всі дослідники використовують подібний варіант класифікації, наприклад, Aranson I. та Tsimring L. у своїй роботі [2] поділяють усі теоретичні підходи на три категорії: мікроскопічні моделі і молекулярна динаміка; статична механіка і кінетична теорії; континуумна і феноменологічна моделі. Крім того, існують так звані «гібридні» теорії, які займають проміжне становище. До них, на нашу думку, можна віднести фрикційно-кінетичну модель [8], модель коміркового автомата [9] та інші.

Розглянемо обидві групи математичних моделей більш детально.

### ***Дискретні моделі***

Як уже було зазначено, більшість дискретних моделей засновані на молекулярно-кінетичній теорії. На відміну від взаємодій частинок у молекулярних газах, зіткнення макроскопічних зерен в основному непружні, звідси виникає можливо найбільш фундаментальна мікроскопічна властивість гранульованих матеріалів – це нереверсивне розсіювання енергії унаслідок взаємодій (зіткнень) між частинками.

Існує декілька загально визнаних моделей, що ілюструють специфіку розсіювання енергії при зіткненнях. У простому випадку використовуються частинки, що не деформуються (тверді), не випробовують тертя, з фіксованим коефіцієнтом відновлення  $0 < k < 1$ , що характеризує частину енергії, що втрачається в результаті зіткнення. Випадок  $k = 1$  відповідає пружним зіткненням (частинки обмінюються швидкостями) і  $k = 0$  характеризує повністю непружні зіткнення. Моделювання зіткнень між частинками за допомогою фіксованого коефіцієнта відновлення є дуже простим і інтуїтивним, проте, це спрощення приводить до суперечностей в деяких випадках. Насправді, відомо що, коефіцієнт відновлення залежить від відносних швидкостей частинок, що стикаються, і наближається до одиниці при  $|\vec{V}_1 - \vec{V}_2| \rightarrow 0$  ( $\vec{V}_1, \vec{V}_2$  – відповідно, вектори швидкості першої та другої частки, що стикаються).

Всього існує три фундаментально різних наближення до молекулярно-динамічних симуляцій: метод симуляції м'яких частинок, алгоритм подій, і метод контактної динаміки для розріджених частинок.

У алгоритмі м'яких частинок, всі сили, що діють на частинку від стін, або інших частинок, або зовнішніх сил підраховуються, ґрунтуючись на положенні частинок у просторі. Коли сили знайдені, час просувається вперед, використовуючи закон Ньютона про передачу руху. У більшості реалізацій, нормальні контактні сили визначаються через перекриття частинки  $s_n$ , яке визначається як різниця між відстанню між центрами мас 2 частинок і сумою їх радіусів. Нормальне зусилля  $F_n$  пропорційно або  $s_n$  (лінійний контакт Гука) або  $\Delta_n^{3/2}$  (контакт Герца). У пружинно-ударній моделі додана додаткова розсіююча сила, пропорційна нормальній складовій відносно швидкості, для моделювання непружності зерен. Безліч наближень використовується для моделювання дотичних сил, найбільш загально прийнятим з них є алгоритм Cundall-Strack-a, в якому дотичний контакт моделюється розсіюючою лінійною «пружиною». Дотичне зусилля ігнорується, якщо його відношення до нормальної сили  $\left| \frac{F_t}{F_n} \right|$  менше коефіцієнта тертя  $\mu$  відповідно до закону Кулона.

Метод м'яких частинок відносно повільний і використовується в основному для аналізу щільних потоків, коли немає можливості застосовувати швидші алгоритми.

У алгоритмі подій, частинки прийняті нескінченно жорсткими і рухаються вільно (або рухаються макроскопічними зовнішніми полями). Під час зіткнення двох часток алгоритм знаходить час наступного зіткнення, швидкості і положення всіх частинок у цей момент часу, згідно законів Ньютона. Таким чином, час просувається безпосередньо від одного зіткнення до наступного, і відповідно змінний часовий крок визначається інтервалами між зіткненнями. Тоді як методи подій типово швидше для розріджених швидких потоків гранул, вони стають непрактичними для щільних потоків, в яких зіткнення дуже часті, тим більше, якщо частинки знаходяться в стійкому контакті.

Контактна динаміка – це метод в якому вирази руху інтегровані для кожної частинки. Подібно до алгоритму подій деформації частинок виключаються, приймаючи частинки нескінченно твердими. Метод динаміки контакту розглядає контакти, що з'являються в межах певного короткого проміжку часу, як одночасні і розраховує контактні сили, одночасно задовольняючи кінематичні обмеження, накладені непроникністю частинок, і закон тертя Кулона. Введення кінематичних обмежень робить необхідними контактні (обмежуючі) сили, які не можуть бути розраховані тільки виходячи з положень і швидкостей частинок. Обмежуючі сили визначаються шляхом компенсації прискорень, що не відповідають обмеженням (більш детально див. [10]).

### Континуальні теорії

Континуальні теорії широко застосовуються для опису як статичного, так і динамічного опису гранулярних матеріалів. У цих моделях частки заміщені неперервним середовищем, а такі величини як швидкість та щільність прийняті плавними функціями від координат та часу. Більшість досліджень гранульованих матеріалів зосереджені на діапазоні розмірів часток 0,1 ... 10 мм. У цьому випадку матеріал навіть для неозброєного ока виглядає дискретним, тому може здатися дивним, що континуальні моделі взагалі можуть бути застосовні. Більш того, масштаби експериментальних установок, що застосовуються у більшості досліджень, дуже рідко перевищують 50 – 100 діаметрів часток. Однак, не дивлячись на це континуальні моделі застосовуються із перемінним успіхом у багатьох ситуаціях.

Згідно деяких авторів, континуальні теорії є адекватними, якщо виконуються дві наступні умови:

- об'єм найменшого елемента  $dV$  має містити велику кількість часток;
- найменший часовий інтервал має бути великим у порівнянні до часу, який необхідний часткам для проходження через об'єм  $dV$ , за умови, що вони не відхилені зіткненнями.

Як було зазначено раніше, перша умова зазвичай порушується. Проте, якщо друга умова виконується, то елементарний об'єм  $dV$  може ефективно вміщувати значну кількість часток. І справді, прийемо гранулярний матеріал (подрібнене зерно) за сукупність ідеальних сфер із еквівалентним діаметром  $d_e = 1$  мм (це приблизно відповідає дійсним розмірам часток) і нехай  $dV$  – це куб із гранню 1 мм. Тоді у будь-який момент часу  $dV$  міститиме менше двох часток. Однак, якщо часточки у об'ємі  $dV$  не статичні, а рухаються із деякою швидкістю, наприклад,  $v = 1$  м/с (приблизно такі швидкості застосовуються у технологічних лініях з переробки сипучих матеріалів), тоді за одну секунду через елементарний об'єм  $dV$  проходить більше 1000 часток, що, звісно ж, значно більше ніж два.

Із моменту, коли гранулярний матеріал ідеалізовано як континуум, для нього вводяться рівняння збереження із механіки суцільних середовищ [11]. Ці рівняння вводяться для кожної із наступних величин: маси, кількості руху, енергії та ентропії, з яких найчастіше використовують перші два.

Рівняння збереження маси говорить, що маса будь-якого індивідуального об'єму залишається постійною (індивідуальний об'єм складається із однакових часток середовища):

$$m = const, \text{ або } \frac{dm}{dt} = 0, \quad (1)$$

У механіці суцільних середовищ майже завжди замість маси розглядають щільність  $\rho$ , тоді

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho \cdot dV = 0, \quad (2)$$

З огляду на специфіку гранульованих матеріалів,  $\rho$  – об'ємна маса, яка визначається за формулою:

$$\rho = \rho_p \cdot v, \quad (3)$$

де  $\rho_p$  – щільність матеріалу гранул;

$v$  – відношення об'єму, що зайнятий гранулами, до загального об'єму.

Рівняння кількості руху для кінцевого об'єму суцільного середовища має наступний вигляд:

$$\frac{dQ}{dt} = \int_{V_m(t)} F \cdot \rho \cdot dV + \int_{S_m(t)} p_n \cdot dS, \quad (4)$$

де  $Q = \int_{V_m(t)} v \cdot \rho \cdot dV$  – кількість руху суцільного середовища, що займає об'єм  $V$ ;

$\int_{V_m(t)} F \cdot \rho \cdot dV$  і  $\int_{S_m(t)} p_n \cdot dS$  – сума зовнішніх і поверхневих сил, що діють на середовище у об'ємі  $V$ , відповідно.

Таким чином, похідна по часу кількості руху для будь-якого індивідуального об'єму  $V$  суцільного середовища дорівнює сумі усіх зовнішніх масових та поверхневих сил, що діють на нього. Об'єм  $V$  є довільним субстанціональним рухомих об'ємом, що деформується, і складається із однорідних часток середовища.

Як зазначають деякі автори, континуальні теорії є одним із найбільш універсальних засобів (проте не завжди найкращим) для моделювання колективної поведінки рухомих гранульованих матеріалів. Вони широко використовуються в інженерній практиці для опису різноманітних потоків гранул. У середовищі фізиків континуальні теорії використовуються для опису різних явищ у малих потоках, наприклад, потоків, що рухаються навколо перешкод. Однак вони також часто використовуються далеко за межами їх застосовності, наприклад, для розріджених газів.

### Висновки

Як було зазначено раніше, розмір часток, які зазвичай використовують у харчовій та переробній промисловості, знаходиться у межах від 0,5 до 5 міліметрів, тому на перший погляд дискретні моделі є більш реалістичними ніж континуальні теорії. Це резонний аргумент. Однак, не досконале та неоднозначне визначення контактних сил між часточками та практичні обмеження розрахункового часу значно ускладнюють їх застосування та роблять менш адекватними аніж ми могли б очікувати. Не дивлячись на це, багато з властивостей матеріалу, такі як форма, розподіл розмірів та характеристика деформування зерен, набагато легше враховуються у дискретних моделях. З іншої сторони симуляції великих систем, які зазвичай мають дуже велике число часточок, у даний час знаходяться за межами можливостей дискретних моделей. У таких випадках застосовують континуальні теорії. Таким чином жодна група підходів не є абсолютним лідером. Із нашої точки зору, для опису руху компонентів у більшості технологічних застосувань найбільш придатною є континуальна теорія. По-перше, через достатньо велику кількість часток, що залучені у взаємодію, а по-друге, через більшу простоту та менші вимоги до доступних розрахункових потужностей.

### Література

1. *Kruelle, C.A. Physics of granular matter: pattern formation and applications / C.A. Cruelle // Rev. Adv. Mater. Sci. – 2009. – Vol. 20. – p. 113-124.*
2. *Aranson, Igor Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts / Igor Aranson, Lev Tsimring // Reviews of modern physics. – 2006. – Volume 78. – p. 641 – 672.*
3. *Ciamarra, M.P. Granular Species Segregation under Vertical Tapping: Effects of Size, Density, Friction, and Shaking Amplitude / M.P. Ciamarra, M. Vizia, A. Fierro, M. Tarzia, A. Coniglio, M. Nicodemi // Physical Review Letters. – 2006. – Vol. 96, Issue 5.*
4. *Hákonardóttir, K. M. Oblique Shocks in rapid granular flows / K.M. Hákonardóttir, A.J. Hogg // Physics of fluids. – 2005. –Vol. 17 – Issue 7. – ISSN 1070-6631] [Jaeger, H. Granular solids, liquids and gases / H. Jaeger, S. Nagel, R. Behringer // J. Rev. Mod. Phys. – 1996. – Vol. 68, No 4. – p. 1259-1273.*
5. *Rognon, P. G. Dense flows of cohesive granular materials / P. G. Rognon, J. Roux, M. Naaim, F. Chevoir // Journal of Fluid Mechanics. – 2008. –Vol. 596. – p. 21-47.*
6. *Jop, Pierre Crucial role of side walls for granular surface flows: consequences for the rheology / Pierre Jop, Yoël Forterre, Olivier Pouliquen // J. Fluid Mech. – 2005. – Vol. 541. – p. 167-192.*
7. *Долгунин, В.Н. Быстрые гравитационные течения зернистых материалов: техника измерения, закономерности, технологическое применение / В.Н. Долгунин, В.Я. Борщев – Москва: «Издательство Машиностроение-1», 2005. – 112 с.*
8. *Rao, K.K. An Introduction to Granular Flow / K.K. Rao, P.R. Nott – New York: Cambridge University Press, 2008. – 490 p. – ISBN-13 978-0-521-57166-1.*
9. *LaMarche, K.R. Cellular automata model of gravity-driven granular flows / K.R. LaMarche, S.L. Conway, B.J. Glasser, T. Shinbrot // Granular Matter. – 2006. – Vol. 9, No 3-4. – p. 219-229.*



10. *Brendel, L. Contact Dynamics for Beginners / L. Brendel, T. Unger, D.E. Wolf // The Physics of Granular Media / eds H. Hinrichsen, D.E. Wolf. – Weinheim, FRG, 2004: Willey-VCH Verlag GmbH&Co. KGaA. – Chapter 14. – p. 325-343.*
11. *Седов, Л.И. Механика сплошной среды: в 2 т. / Л.И. Седов. – М.: Наука, 1970.*