

УДК 628.33:531.133

Е.Н. Дьяченко

**АНАЛИТИЧЕСКАЯ ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ СЕДИМЕНТАЦИИ,  
ОСНОВАННЫХ НА МЕТОДЕ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ<sup>1</sup>**

В статье приводится один из способов верификации численных моделей, основанных на методе дискретных элементов, которые часто применяются для моделирования процессов седиментации, фильтрации и уплотнения седиментационных слоев. Предложенный метод заключается в сравнении результатов тестового расчета с точным аналитическим решением.

**Ключевые слова:** *моделирование, верификация, метод дискретных элементов, седиментация.*

Верификация является одним из необходимых элементов любого моделирования, так как только после проведения верификации моделей исследователь и научное сообщество может доверять результатам моделирования.

Метод дискретных элементов (DEM) изначально был предложен Кандэллом (Cundall) и Стрэком (Strack) для моделирования поведения горных пород [1]. С увеличением вычислительной мощности суперкомпьютеров этот метод развивается и применяется для моделирования широкого спектра задач, в которых имеются системы из большого числа таких частиц, как молекулы, песчинки, зерна и т.д. Для верификации моделей, основанных на методе дискретных элементов, часто проверяется закон сохранения полной энергии системы [2]. Наиболее часто результаты моделирования верифицируются сравнением с экспериментальными результатами, например [3, 4].

В данной статье предлагается метод верификации, который можно применять для DEM-моделей осаждения частиц, фильтрации и медленного уплотнения седиментационных слоев.

**1. Основы метода моделирования**

Подробное описание метода моделирования приводится в [5]. Здесь показаны лишь основные элементы математической постановки метода моделирования. Полагается, что для каждой из множества сферических частиц решается система уравнений движения центра массы:

$$\begin{cases} \frac{dv_i}{dt} = \frac{F_i}{m_i}, \\ \frac{dx_i}{dt} = v_i, \end{cases} \quad (1)$$

где  $m_i = \rho \frac{4}{3} \pi r_i^3$  – масса частицы,  $t$  – время,  $F_i$  – результирующая сила, дейст-

<sup>1</sup> Работа проводилась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы. Соглашение № 14.В37.21.0872.

вующая на частицу,  $\mathbf{x}_i$  – положение центра частицы в пространстве,  $\mathbf{v}_i$  – вектор скорости частицы,  $\rho$  – плотность материала частиц.

Считается, что частица  $i$  в некоторый момент имеет  $N_i$  точек соприкосновения с другими частицами и/или с границами расчетной области.

Сила  $\mathbf{F}_i$  выражается в виде

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i} [\mathbf{f}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, r_i, r_j) + \mathbf{F}_{\text{ad}}(r_i, r_j) + \mathbf{F}_{\text{fr},ij}] + \mathbf{g}m_i + \mathbf{F}_{\text{st},i}, \quad (2)$$

где  $N_i$  – количество контактов частицы радиусом  $r_i$  с окружающими ее частицами радиусами  $r_j$ ,  $\mathbf{g}$  – ускорение свободного падения,  $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, r_i, r_j)$  – сила упругого взаимодействия двух частиц  $i$  и  $j$ ,  $\mathbf{F}_{\text{ad}}(r_i, r_j)$  – сила адгезии двух частиц, находящихся в контакте,  $\mathbf{F}_{\text{fr},ij}$  – обобщенная сила трения скольжения и качения между двумя частицами,  $\mathbf{F}_{\text{St},i}$  – сила сопротивления движению, вычисляемая по закону Стокса (Stokes).

Для решения поставленной выше задачи численно интегрируется система уравнений (1) с учетом соотношений (2), начальных и граничных условий [5].

## 2. Частный случай, имеющий аналитическое решение

Рассмотрим систему из 10 частиц размером  $d = 0,1$  мм, плотностью  $\rho = 2500$  кг/м<sup>3</sup>, эффективным модулем Юнга  $E = 100$  ГПа, коэффициенты адгезии и трения полагаются равными нулю,  $\mu = 1 \cdot 10^{-3}$  Па·с. В начальный момент времени частицы имеют координаты

$$\vec{x}_i = (0,5, 0,5, 0,1 + 0,2 \cdot i) \text{ мм},$$

где  $i = 0 - 9$ . Таким образом, частицы располагаются строго друг над другом на расстоянии 0,1 мм (рис. 1, а) вдоль вертикальной оси  $Z$ . Начальные скорости частиц равны нулю. Очевидно, частицы будут падать вниз, образуя вертикальный столб, поскольку отсутствуют силы, которые бы смещали частицы по осям  $X$  и  $Y$ .

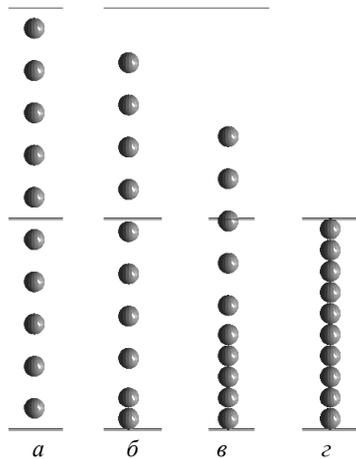


Рис. 1. Положение системы 10 частиц для моментов времени  $t$ , с:  
а – 0, б – 0,015, в – 0,045, з – 1

На рис. 1, б, в, г представлено положение системы для некоторых моментов времени, полученное с помощью описанной в [5] численной модели.

### 3. Результаты моделирования частного случая

Зависимость относительной совместной деформации 1-й и 2-й частиц  $\left(\frac{h}{d} = \frac{d - |\bar{x}_2 - \bar{x}_1|}{d}\right)$  от времени показано на рис. 2; на рис. 3 приведена более детальная информация для моментов времени 0,0183–0,0186 с, в течение которых происходил контакт между 2-й и 3-й частицей и установление положения 2-й частицы относительно первой.

Из рис. 2 видно, что в момент времени  $t \approx 0,012$  с на первую частицу упала вторая частица, и относительная деформация составила  $h/d \approx 1 \cdot 10^{-7}$ . Каждая последующая частица падала на столб с периодом  $T \approx 0,0079$  с. При этом, когда последняя частица соединилась со столбом, относительная деформация составила  $h/d \approx 3,7 \cdot 10^{-7}$ . В моменты касания новой частицы со столбом в нем возникали колебания, обусловленные переходом кинетической энергии частицы в потенциальную упругую энергию.

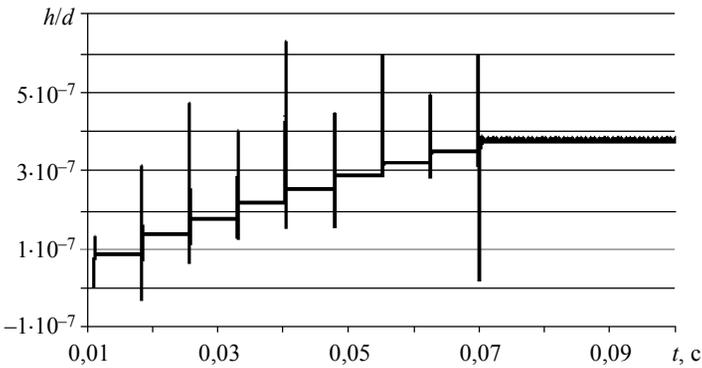


Рис. 2. Зависимость относительной совместной деформации 1-й и 2-й частиц (считая снизу) от времени

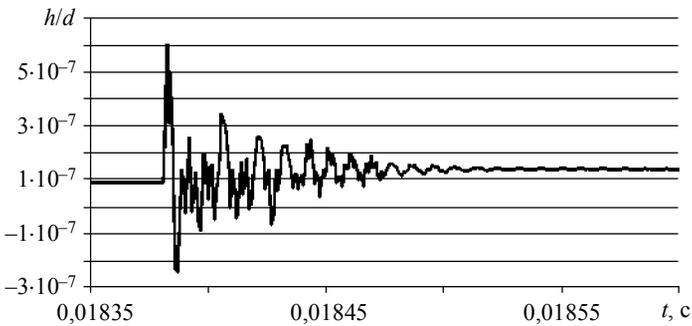


Рис. 3. Зависимость относительной совместной деформации 1-й и 2-й частиц (считая снизу) от моментов времени, в течение которых происходил контакт между 2-й и 3-й частицами и установление положения 2-й частицы относительно первой

Относительное положение двух частиц описывается затухающими колебаниями (рис. 3). Колебания затухают ввиду наличия между частицами вязкости среды (коэффициент вязкости  $\mu$  взят такой же, как у воды). Стоит отметить, что в случае отсутствия вязкости ( $\mu = 0$ ) частицы отскакивают после падения, и высота, до которой они отскакивают, остается постоянной, т.е. в модели сохраняется полная энергия, а расчетная схема не обладает численной вязкостью. Незначительные колебания системы из 10 частиц сохраняются с момента  $t = 0,071$  с и до конца численного расчета (рис. 2). Вероятно, эти колебания обусловлены численными погрешностями, с чем согласны авторы работы [2].

Для построения рис. 2, 3 использовался только каждый десятый шаг по времени из численных расчетов.

#### 4. Аналитическое решение и сравнение

Определим силу, действующую на первую частицу со стороны вышележащих 9 частиц:

$$F = 9mg = 9V\rho g = 9\frac{4}{3}\pi r^3\rho g \approx 1,16 \cdot 10^{-7} \text{ Н}. \quad (4)$$

Тогда, согласно решению задачи Герца [6], имеем углубление частиц:

$$h = \sqrt[3]{\frac{2F^2}{E^2 R}} = \sqrt[3]{\frac{2(1,15 \cdot 10^{-7})^2}{(10^{11})^2 0,05 \cdot 10^{-3}}} \approx 3,76 \cdot 10^{-11} \text{ м}. \quad (5)$$

Относительная совместная деформация 1-й и 2-й частиц

$$\frac{h}{d} \approx \frac{3,76 \cdot 10^{-11}}{1 \cdot 10^{-4}} = 3,76 \cdot 10^{-7}. \quad (6)$$

Это значение хорошо согласуется с полученным из расчетов (рис. 2) значением  $h/d$ . Отклонение аналитического значения (6) от расчетного находится в пределах численной погрешности схемы и не более 0,1 %.

#### Заключение

Представлен способ верификации численной модели осаждения частиц, основанной на методе дискретных элементов. Способ верификации заключается в сравнении результатов тестового расчета с известным аналитическим решением. Применение этого метода верификации на численной модели [5] показало адекватность модели.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Cundall P.A., Strack O.D.L. A discrete numerical model for granular assemblies // Geotechnique. 1979. No. 29. P. 47–65.
2. Simo Siiriae, Jouko Yliruusi. Particle packing simulation based on Newtonian mechanics // Powder Technology. 2007. No. 174. P. 82–92.
3. Fu G., Dekelbab W. 3-D random packing of polydisperse particles and concrete aggregate grading // Powder Technology. Elsevier Science B.V. 2003. No. 133. P. 147–155.
4. Theuerkauf J., Witt P., Schwesig D. Analysis of particle porosity distribution in fixed beds using the discrete element method // Powder Technology. 2006. No. 165. P. 92–99.

5. *Dyachenko E., Dueck J.* Modeling of sedimentation and filtration layer formation by discrete element method // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. № 1. Т. 4. С. 105–120.
6. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука. 1987. 246 с.

Статья поступила 30.08.2012г.

*D'yachenko E. N.* ANALYTICAL VERIFICATION OF SEDIMENTATION MODELS BASED ON THE DISCRETE ELEMENT METHOD. A way to verify numerical models based on the discrete element method is presented. This kind of models is often applied for the simulation of sedimentation, filtering, and slow shrinking processes. The proposed method involves a comparison of a test calculation with the exact analytical solution.

Keywords: simulation, verification, discrete element method, sedimentation.

*D'YACHENKO Evgenii Nikolaevich* (Tomsk State University)  
E-mail: Evg.Dya@gmail.com