氧化镨钕粉末颗粒离散元模型参数标定

李辰辉[1],陶理科[2],刘士琦[1*],赵国宇[1],徐晋勇[1]

(1. 桂林电子科技大学 机电工程学院,广西 桂林 541004;
2. 贺州市金利新材料有限公司,广西 贺州 542829)

摘 要:稀土金属的熔盐电解制备过程中,由于稀土粉末直径过小,易产生粉末结拱、流动死区等现象。为确保在粉末传输下料过程中离散元仿真的准确性,需要获得准确的氧化镨钕颗粒相关接触参数。在仿真试验前通过测量氧化镨钕粉末的粒径、密度、休止角参数,在离散元仿真试验中选择 Hertz-Mindlin with JKR 接触模型与颗粒接触缩放原理为基础,对接触参数进行参数标定。通过 Plackett-Burman 试验筛选出对休止角仿真模拟试验影响显著的关键因素;通过最陡爬坡试验选择最佳显著性参数区间;根据 Box-Behnken 试验及响应面设计,完成对休止角与显著性参数的二阶回归模型的设计及优化,得到最佳参数组合为:氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数为 0.242、JKR 系数为 0.148 J/m^2、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数为 0.397。验证结果表明,休止角仿真试验值与实测值的相对误差为 1.06%。标定的氧化镨钕粉末颗粒参数结果可靠,能为后续粉末传输下料仿真过程提供参考。

关键词:氧化镨钕;离散元法;休止角;参数标定;模型

中图分类号:TB44 **文献标识码**:A **文章编号**:1004-0277(2026)03-0046-11

稀土元素因其优异的磁学、电学、光电特性,在新一代电子信息、航空航天等高技术领域有着广泛应用[1]。镨钕合金作为高性能钕铁硼永磁金属生产的主要原料[2],目前主要采用电解还原法提炼,但氧化镨钕粉末下料过程中由于其易出现结拱、流动死区等现象,严重影响了镨钕合金生产质量[3]。为实现氧化镨钕粉末更稳定、均匀地下料,需要对其流动性能有更深入研究,才能更加具有针对性地开发相应机械设备以解决此类问题。通过离散单元法(Discrete element method, DEM)处理非连续介质问题,能够更准确地研究氧化镨钕粉末的相关流动性能。Hou 等[4]运用 DEM 法对粘性颗粒在螺旋输送器中的颗粒流动进行研究,发现颗粒间内聚力显著影响其中的颗粒流动。

近年来,运用离散单元法对各类颗粒进行参数标定的文献很多,但大多对应于粒径为毫米级及以上的颗粒,例如植物种子、煤粉[5~7]等。对于氧化镨钕这类微米级颗粒,由于粒径较小,仿真中颗粒数量超千万级,普通计算机难以完成仿真试验。为减少计算量,往往使用颗粒缩放理论。2009 年 Feng

收稿日期:2023-09-07
基金项目:广西科技计划青年创新人才科研专项[桂科(AD23026081)]
作者简介:李辰辉(1998-),男,重庆人,硕士研究生,主要从事稀土氧化物粉体仿真的研究,E-mail:lichenhui158@163.com
* 通信作者:刘士琦,讲师,E-mail: liushiqi67keyan@163.com
DOI:10.3724/S1004-0277.202603006

等[8]提出,基于颗粒间相互作用,使用颗粒缩放理论时应遵循:几何相似、运动相似、动力相似。任建莉、白玉菱等[9,10]运用此方法对颗粒进行参数标定与仿真试验。在 2014 年 Sakai 等[11]开发了一种颗粒粗粒化模型,并通过 DEM 试验模拟,验证了此模型。Bierwisch 等[12]证明粗粒化后恢复系数不变,对休止角角度没有显著影响。目前,许多学者运用该方法对硫磺粉、金属粉末、中药粉末等微米级颗粒进行了参数标定[13~15],然而对氧化镨钕颗粒的离散元仿真接触参数及参数标定的相关研究内容较少。

本研究通过运用颗粒缩放理论,对氧化镨钕粉末进行参数标定。试验响应值选择能有效表现粉末流动性能的休止角。通过 Plackett-Burman 试验、最陡爬坡试验、Box-Behnken 试验及响应面设计,对缩放后的氧化镨钕粉末进行离散元仿真参数标定并建立回归方程、绘制三维响应曲面,为后续氧化镨钕粉末下料设备的相关离散元仿真模拟提供参考。

1　材料与方法

氧化镨钕粉末,是一种具有一定吸水性的深灰色细粉,同时氧化镨钕粉末具有易结拱、流动性较差、易吸水的特点,在选用颗粒接触模型时应选择能够表现内聚力的接触模型,Hertz-Mindlin with JKR 接触模型能够通过设置颗粒间表面能参数来表示细小颗粒与吸水颗粒间的内聚力与粘结作用[16]。在本次试验准备的氧化镨钕粉末中,氧化钕占比 74.7%,氧化镨占比 25.3%。

1.1　粉体颗粒的参数测定

通过激光粒度仪马尔文 3000 测定氧化镨钕粉末样品的粒径分布,如图 1 所示。其中 $d_{10}=2.823$ μm、$d_{50}=5.819$ μm、$d_{90}=9.137$ μm,平均粒径为 5.819 μm。

休止角(AOR)是粉体的基本物性之一,是衡量流动性的重要参数之一[17]。本次休止角试验,设备选择为 BT 1000 型粉体测试仪。共测量 3 次,如图 2 所示,平均休止角为 54.73°。

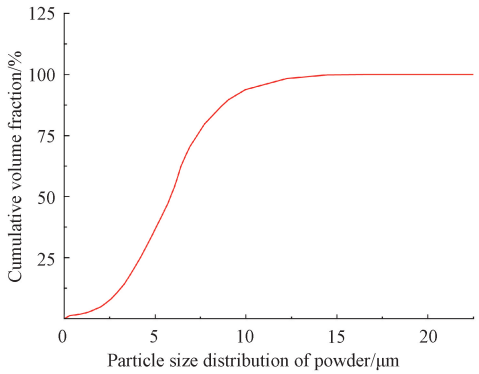


图 1　氧化镨钕粉末颗粒粒径分布

Fig. 1　Particle size distribution of praseodymium-neodymium oxide powder

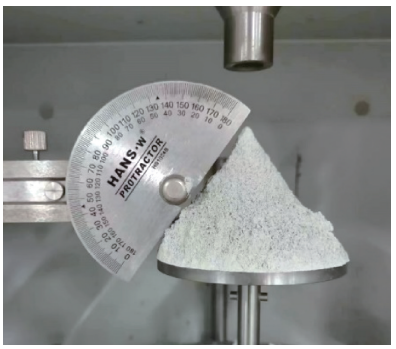


图 2　休止角测量

Fig. 2　Measuremet of the repose angle

由于氧化镨钕粉末并非完全的纯净物,其质量变化较大,需要对其先进行密度测量。在此按照国标 GB/T 5071—2013 标准对其进行真密度测量,其真密度为 6260 kg/m^3。

1.2　JKR 接触模型

1971 年 Johnson 等开发并验证了 Johnson-Kendall-Roberts(JKR)接触模型,这是基于 Hertz 于 1882 年提出的 non-linear Hertz-Mindlin 模型[18,19]。Johnson 提出,通过在计算中加入单位接触面积(J/m^2)与表面能 γ,能够更好地对黏性颗粒接触表面变形进行计算。颗粒的表面能法向弹性接触力为:

$$W_J=\frac{4E^*\alpha^3}{3R^*}-\sqrt{8\pi\Delta\gamma E^*\alpha^3} \tag{1}$$

$$\delta=\frac{\alpha^2}{R^*}-\sqrt{\frac{2\pi\Delta\gamma\alpha}{E^*}} \tag{2}$$

式中：W_{JKR} 为法向弹性接触力，N；E^* 为等效弹性模量，Pa；α 为接触半径，m；R^* 为等效颗粒半径，m；γ 为接触颗粒表面能，J/m^2；δ 为法向重叠量，m。颗粒接触材料相同时，$\Delta\gamma = 2\gamma$。

1.3 颗粒缩放理论

在对使用颗粒缩放原理时应遵循：几何相似、运动相似、动力相似。运动相似指颗粒和缩放后模型的接触点处的速度方向相同，大小成比例。动力相似指颗粒和缩放后模型受到相同性质的力的作用，且这些力成比例缩放[8]。在运用几何相似原理时需要保持与缩放前相同的颗粒数量，并不能对计算量形成有效减少。在面对颗粒物理模型和几何模型的缩放问题上，通过引入缩放比例系数 S_n 进行表示，如式(3)所示：

$$S_n = \frac{D}{R} = h \tag{3}$$

式中：S_n 为缩放比例系数，D 为物理模型特征尺寸，R 为离散元模型特征尺寸。运用量纲分析减少由于颗粒缩放而造成的模拟误差，建立物理模型与缩放模型间各物理量的比例因子。将通过比重瓶试验测量的真密度 ρ、长度 L、时间 T 作为基本量纲对其余物理量的缩放关系进行推导，将其缩放比设置为 $\lambda_\rho = 1$、$\lambda_T = h$、$\lambda_L = h$。以此为基础可推导颗粒轴向力 W、杨氏模量 E、速度 v 质量的比例因子，具体如下：

$$W = ma \Rightarrow [W] = [M][L][T]^{-2} = [\rho][L]^4[T]^{-2} = h^2 \tag{4}$$

$$W = \frac{EA\delta}{L} \Rightarrow [E] = [\rho][L]^2[T]^{-2} \Rightarrow \lambda_E = \lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_T^{-2} = 1 \tag{5}$$

式中：W 为颗粒轴向力，N；m 为颗粒质量，g；a 为颗粒所受加速度，m/s^2；E 为杨氏模量，Pa；A 为横截面积，m^2；δ 为法向重叠量，m。

$$v = \frac{L}{T} \Rightarrow [v] = [L][T]^{-1} \Rightarrow \lambda_v = \lambda_L \lambda_T^{-1} = 1 \tag{6}$$

式中：v 为速度，m/s；L 为长度，m；T 为时间，s。

由量纲分析可知，模型密度保持不变时，颗粒杨氏模量与速度均保持不变，但所受轴向力与缩放颗粒半径的平方成正比。同时将式(1)转换为应力应变形式，可知其公式右侧 $\frac{4E^*\alpha^3}{3R^*}$ 符合标准 Hertzian 模型，且符合尺度不变原则，但颗粒间黏着力 $\sqrt{8\pi\Delta\gamma E^*\alpha^3}$ 并不符合尺度不变原则，所以为保证在运用颗粒缩放法进行离散元仿真试验时的准确性，需将颗粒 JKR 表面能设置为常数，并通过参数标定确定其具体数值。

2 离散元仿真参数标定

2.1 仿真参数设置

由于氧化镨钕颗粒粒径过小，部分有关颗粒的物理参数难以测量，在 EDEM 2022 软件中，运用 GEMM 数据库模块通过输入试验获得的颗粒粒径分布、真密度、休止角，能够获得氧化镨钕颗粒与不锈钢材料之间的仿真基础参数参考范围。

表 1 离散元仿真参数表

Table 1 Discrete element simulation parameters table

Simulation parameters	Value
Density of praseodymium-neodymium oxide/(kg/m^3)	6260
Poisson's ratio of praseodymium-neodymium oxide	0.28
Shear modulus of praseodymium-neodymium oxide/Pa	1.6×10^{10}
Density of stainless steel/(kg/m^3)	7800
Poisson's ratio of stainless steel	0.30
Shear modulus of stainless steel/Pa	7×10^{10}
Praseodymium-neodymium oxide powder restoration coefficient	0.10~0.50
Praseodymium-neodymium oxide powder static friction coefficient	0.20~0.60
Praseodymium-neodymium oxide powder rolling friction coefficient	0.05~0.35
Praseodymium-neodymium oxide-stainless steel restoration coefficient	0.10~0.50
Praseodymium-neodymium oxide-stainless steel static friction coefficient	0.20~0.60
Praseodymium-neodymium oxide-stainless steel rolling friction coefficient	0.05~0.50
JKR surface energy/(J/m^2)	0.05~0.25

2.2　仿真模型的建立

在仿真过程中按照国家标准 GB/T 31057.3—2018 建立休止角离散元 1∶0.75 仿真模型。张锐等[20]证明了不同方式的休止角测量方式对颗粒休止角数值几乎没有影响,模型尺寸与测量方式对粉末休止角影响也较小,所以通过缩小模型能够有效减少仿真所需时间,减少颗粒计算数量。休止角仿真试验模型主要由以下两部分组成,上方为一锥度为 60°的圆锥漏斗,漏斗底端出口内径为 7.5 mm,下方是直经为 $D=60$ mm 的接料圆盘,漏斗底端出口处距接料圆盘上端面的表面距离为 60 mm,其几何模型如图 3 所示。

试验用氧化镨钕平均直径为 5.819 μm,粉末颗粒粒径较小,为提高离散元仿真效率并节约计算时间,在离散元仿真过程中将颗粒形状设置为球形以加快计算效率,通过颗粒缩放法,将颗粒直径设置为 1 mm。

在仿真过程中颗粒生成方式设定为 Dynamic 动态生成,生成速率为每秒 5000 个,生成数量为 Unlimited Number 不受限制,仿真时间设置为 10 s,瑞利时间步长统一设置为 25%,计算域内网格尺寸选取为颗粒半径的 3 倍。待颗粒沉降完成后,继续仿真 2 s,使模型中颗粒速度小于 5×10^{-2} m/s 时,对休止角进行测量。以接料圆盘圆心为原点,对堆积颗粒分别以 x 轴、y 轴绘制剖面图,进行图片采集。运用 matlab 软件对采集图片进行边缘检测,导出像素点坐标,再在 Origin 软件中去除坏点后取得最高点坐标,划分出左右两侧曲线,并绘制拟合曲线(图 4),获得斜率,最终得出休止角。

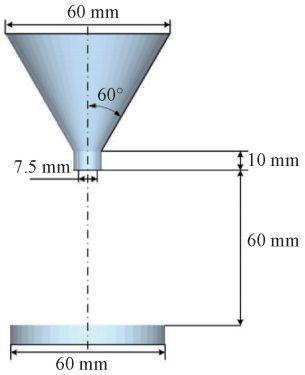
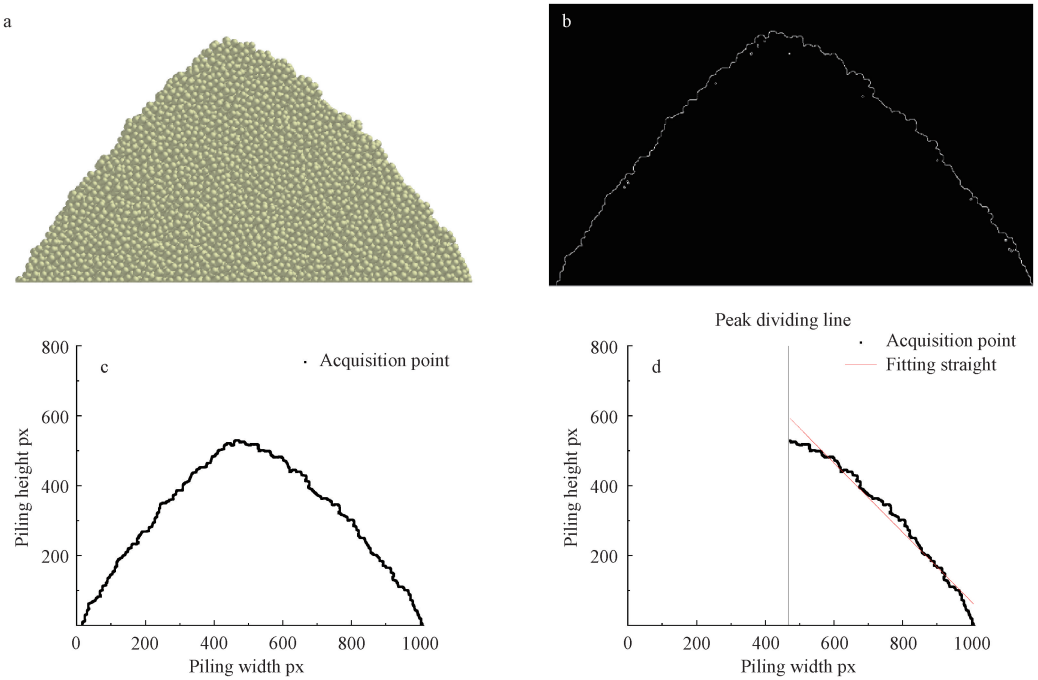


图 3　休止角测量仪器简化模型

Fig. 3　Repose angle measuring instrument simplified model



a:休止角原始图像;b:灰度化兼边缘处理图像;c:采集点绘制图像;d:划分后拟合曲线

图 4　离散元仿真休止角测量

a:Original image of pile angle;b:Grayscale and edge-processed image;c:Data point plot image;d:Fitted curve after segmentation

Fig. 4　DEM simulation for angle of repose measurement

3 离散元仿真参数响应面设计

离散元仿真参数的响应面设计具体步骤如下:首先通过 Plackett-Burman 试验,以粉末休止角为响应值对表 1 所列出的 7 个需进行标定的离散元参数各自设置高、低水平,运用高、低水平的试验值结果对相关系数进行筛选,运用 Design-Expert 软件计算获得休止角的 3 种显著性参数。在 Plackett-Burman 试验基础上,采用最陡爬坡试验对筛选出的显著因子设定爬坡步长并进行优化,通过仿真试验获得休止角 54.73°对应的最佳参数区间;第三步以最陡爬坡试验获得的最佳参数区间设置高、中、低水平进行 Box-Behnken 试验,以获得休止角与显著性参数的数学回归模型,并观察其是否对响应值休止角具有交互性影响,运用 Design-Expert 软件进行回归模型交互分析与数学回归模型优化,设置 54.73°休止角为目标值,通过优化后的回归模型计算出三种显著性参数的最佳组合,进行仿真试验与实际试验对比验证。

3.1 Plackett-Burman 试验

Plackett-Burman 试验是一种通过比较各因子水平间差异确定各因子对响应值的影响显著性大小的试验。将粉末休止角作为响应值,将氧化镨钕颗粒间、颗粒与材料间相关系数作为影响因子,通过该试验比较各系数高、低水平间差异来确定各系数对氧化镨钕粉末休止角的影响显著性,筛选出对氧化镨钕粉末休止角影响最显著的 3 种颗粒相关系数。其具体试验参数见表 2,并对参数进行显著性筛选,试验设计与结果如表 3 所示。

表 2 Plackett-Burman 试验参数

Table 2 Plackett-Burman test parameters

Number	Parameters	Low level	High level
A	Praseodymium-neodymium oxide powder restoration coefficient	0.10	0.50
B	Praseodymium-neodymium oxide powder static friction coefficient	0.20	0.60
C	Praseodymium-neodymium oxide powder rolling friction coefficient	0.05	0.35
D	Praseodymium-neodymium oxide-stainless steel restoration coefficient	0.10	0.50
E	Praseodymium-neodymium oxide-stainless steel static friction coefficient	0.20	0.60
F	Praseodymium-neodymium oxide-stainless steel rolling friction coefficient	0.05	0.50
G	JKR surface energy/(J/m^2)	0.05	0.25

表 3 Plackett-Burman 试验设计与结果

Table 3 Plackett-Burman test design and results

Number	A	B	C	D	E	F	G	Repose angle/(°)
1	0.5	0.2	0.05	0.1	0.6	0.05	0.2	31.44
2	0.1	0.2	0.05	0.5	0.2	0.5	0.2	35.18
3	0.5	0.6	0.05	0.1	0.2	0.5	0.05	27.22
4	0.5	0.6	0.05	0.5	0.6	0.5	0.05	33.68
5	0.5	0.6	0.35	0.1	0.2	0.05	0.2	55.39
6	0.1	0.6	0.05	0.5	0.6	0.05	0.2	33.26
7	0.5	0.2	0.35	0.5	0.2	0.5	0.2	59.29
8	0.1	0.2	0.05	0.1	0.2	0.05	0.05	21.61
9	0.1	0.6	0.35	0.1	0.6	0.5	0.2	63.87
10	0.1	0.6	0.35	0.5	0.2	0.05	0.05	49.75
11	0.1	0.2	0.35	0.1	0.6	0.5	0.05	56.49
12	0.5	0.2	0.35	0.5	0.6	0.05	0.05	39.67

完成试验后,运用 Design Expert 软件对结果进行方差分析,各参数的显著性见表 4。从表 4 中可知,模型 Model $P<0.01$,表现了模型的有效性。对于粉末休止角影响最显著的参数为氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数(H),其 $P<0.01$,对粉末颗粒休止角影响极为显著,而颗粒 JKR 表面能系数(I)与氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数(J)的 $P<0.05$,对粉末颗粒休止角影响显著,其余参数 $P>0.05$,对粉末颗粒休止角影响较小。

表 4　Plackett-Burman 试验显著性分析

Table 4　Significance analysis of Plackett-Burman test

Parameters	Sum of squares	F-value	P-values	Significance ranking
Model	2113.55	21.72	0.0050	—
A	15.12	1.09	0.3558	5
B	31.66	2.28	0.2058	4
C	1681.99	121.01	0.0004	1
D	2.24	0.1615	0.7083	7
E	8.28	0.5960	0.4832	6
F	165.84	11.93	0.0260	3
G	208.42	15.00	0.0180	2

3.2　最陡爬坡试验

Plackett-Burman 试验只能够筛选显著性参数的种类与影响程度,并不能确定显著性参数的数值范围与获得最佳参数组合,而最陡爬坡试验能够通过设置爬坡步长,快速找到 Plackett-Burman 试验中获得的显著性参数以 54.73°休止角为响应值的最佳参数区间。

从 Plackett-Burman 试验中可以得知,以下参数对氧化镨钕粉末休止角影响最大,依次为:氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数、颗粒 JKR 表面能系数、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数。因此在最陡爬坡试验中只考虑这三种参数,其余显著性较低参数选择中间值进行仿真试验。根据上述三个参数的高、低水平值,设置爬坡步长值分别为 $\Delta H=0.06$、$\Delta I=0.03$、$\Delta J=0.09$,设置共 6 组试验进行休止角仿真试验,具体试验参数设置与试验结果见表 5。

表 5　最陡爬坡试验设计及结果

Table 5　Experimental design and results of steepest climb test

Number	H	I	J	Repose angle/(°)	Relative error/%
1	0.05	0.05	0.05	27.29	50.14
2	0.11	0.08	0.14	38.72	29.25
3	0.17	0.11	0.23	46.39	15.24
4	0.23	0.14	0.32	52.82	3.49
5	0.29	0.17	0.41	57.97	5.92
6	0.35	0.20	0.50	62.71	14.58

由表 5 可知,4 号仿真试验结果的休止角相对误差最小,为 3.49%,而 3 号、5 号仿真试验结果的休止角相对误差分别为 15.24%、5.92%。由此选择 4 号仿真试验参数数值为中心点,将 3 号、5 号仿真试验参数数值设置为低、高水平,以此为基础进行后续的 Box-Behnken 试验。

3.3　Box-Behnken 试验及回归模型

通过最陡爬坡试验获得了三种显著性参数的最优数值存在区间,为得到三种显著性参数的数学回归模型,了解各显著性参数之间是否存在交互影响,采用 Box-Behnken 试验进行响应面试验,并进行响应面分析。根据最陡爬坡试验结果,在试验时选择显著性参数氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数、JKR 表面能系数、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数的低、中、高水平进行试验设计,并选择 3 个中心点进行误差评估。Box-Behnken 试验结果如表 6 所示。其相关方差分析见表 7,从表中可知,拟合模型的 $P<0.0001$,Lack of fit 失拟项 $P=0.8684$,大于 0.05,说明模型拟合可靠。在其他数据中氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数、JKR 表面能系数、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数、氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数的二项式,其 $P<0.01$ 说明其对休止角的影响特别显著。同时氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数与 JKR 表面能系数的交互项的 $P<0.05$,对休止角也有

一定程度的影响。同时本次试验的变异系数 CV = 0.6914%、决定系数 R^2 = 0.9957、矫正决定系数 R^2_{adj} = 0.998、预测决定系数 R^2_{pre} = 0.9752、试验精确度 A_q = 35.3189 均表示该模型具有较好的可靠性与真实性。

由此结果建立 3 个显著性参数与休止角的二阶回归方程为：

$$AOR = 52.76 + 3.93H + 0.94J + 1.30I - 0.0875HJ - 0.495HI + 0.0825JI - 1.24H^2 - 0.165J^2 + 0.3324I^2 \quad (7)$$

通过去除对休止角影响不显著的 HJ、JI、J^2、I^2，对回归模型进行优化设计，其方差分析结果如表 8 所示：拟合模型的 P<0.0001，Lack of fit 失拟项 P = 0.8181，大于 0.05，变异系数 CV = 0.7147%，决定系数 R^2 = 0.9918，矫正决定系数 R^2_{adj} = 0.9872，预测决定系数 R^2_{pre} = 0.9731，试验精确度 A_q = 44.9522。

由此可见，该模型具有较好的可靠性与真实性，相较于优化前具有一定改善，优化后的回归模型如式(8)所示：

$$AOR = 52.86 + 3.93H + 0.9425J + 1.30I - 0.4950HI - 1.25H^2 \quad (8)$$

表 6 Box-Behnken 试验设计及结果

Table 6 Design and results of Box-Behnken test

Number	H	I	J	Repose angle/(°)
1	−1	0	−1	46.31
2	1	0	−1	54.57
3	−1	0	1	48.31
4	1	0	1	56.22
5	−1	−1	0	46.14
6	1	−1	0	54.78
7	−1	1	0	49.91
8	1	1	0	56.57
9	0	−1	−1	50.83
10	0	−1	1	52.61
11	0	1	−1	53.08
12	0	1	1	55.19
13	0	0	0	52.29
14	0	0	0	52.72
15	0	0	0	53.27

表 7 Box-Behnken 试验二次回归模型方差分析

Table 7 Anova of quadratic polynomial model of Box-Behnken test

Soruce of variation	Mean square	Freedom	Ouadratic sum	F-value	P-values
Modle	16.87	9	151.85	129.58	< 0.0001
H	123.80	1	123.80	950.77	< 0.0001
J	7.11	1	7.11	54.58	0.0007
I	13.49	1	13.49	103.64	0.0002
HJ	0.0306	1	0.0306	0.2352	0.6482
HI	0.9801	1	0.9801	7.53	0.0406
JI	0.0272	1	0.0272	0.2091	0.6667
H^2	5.70	1	5.70	43.78	0.0012
J^2	0.1005	1	0.1005	0.7720	0.4198
I^2	0.4082	1	0.4082	3.14	0.1368
Lack of fit	0.1684	3	0.0561	0.2327	0.8684
R^2 = 0.9957	R^2_{adj} = 0.9880		R^2_{pre} = 0.9752		Adep precision = 35.3198

表 8　Box-Behnken 试验优化回归模型方差分析

Table 8　Anova of modified model of Box-Behnken test

Soruce of variation	Mean square	Freedom	Ouadratic sum	*F*-value	*P*-value
Modle	151. 25	5	30. 25	217. 46	<0. 0001
H	123. 80	1	123. 80	889. 91	<0. 0001
J	7. 11	1	7. 11	51. 09	<0. 0001
I	13. 49	1	13. 49	97. 00	<0. 0001
HI	0. 9801	1	0. 9801	7. 05	0. 0263
H^2	5. 88	1	5. 88	42. 23	0. 0001
Lack of fit	0. 7694	7	0. 1099	0. 4555	0. 8181
R^2 = 0. 9918	R^2_{adj} = 0. 9872		R^2_{pre} = 0. 9731	Adep precision = 44. 9522	

3. 4　回归模型交互分析

以回归模型方差分析为基础,对各因素间的交互影响进行分析,并绘制响应面曲线,如图 5 所示。图 5a 为氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数与 JKR 表面能系数的响应面,可以看出等高线较密集,坡度较大,图形弯曲且不对称,表现两参数对响应面具有较大影响且交互影响作用明显。图 5b 所示为氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数与氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数的响应面,可以看出虽然坡度较大,但是图形没有出现不对称等情况,曲面较连续光滑,表现两参数交互影响作用较小。图 5c 所示为 JKR 表面能系数与氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数的响应面,可以看出其坡度平缓,响应面中心点等高线开口方向相反,证明两者对休止角影响较小且交互影响作用较小。

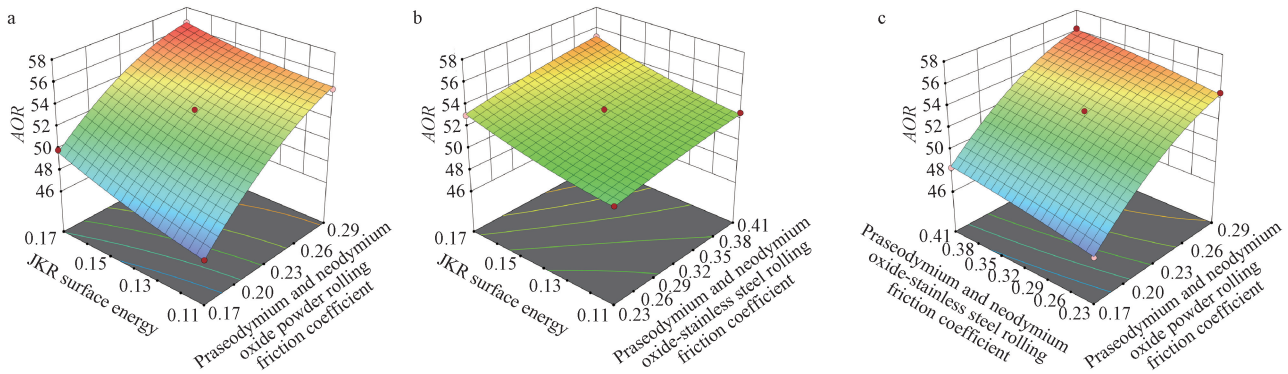
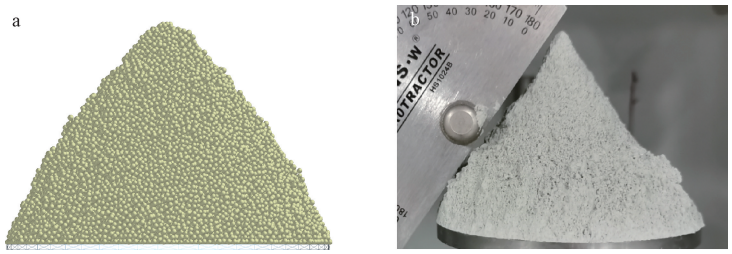


图 5　参数间交互作用图

Fig. 5　Parameters interaction diagram

3. 5　最佳参数组合的确定及仿真验证

通过 Design-Expert 软件中分析模块,设置氧化镨钕粉末实际休止角 54. 73°为目标值,运用优化后的二阶回归方程(8)进行求解,选择结果与实际休止角参数误差最小的最优解,可知氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数为 0. 242、JKR 系数为 0. 148 J/m^2、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数为 0. 397。使用最佳参数在 EDEM 软件中进行休止角仿真试验,所得休止角与实测休止角对比如图 6 所示。仿真试验休止角为 54. 15°,与实际值 54. 73°相对误差为 1. 06%。



a:仿真试验;b:物理试验

图 6 仿真结果与试验测量结果对比

a:Simulation test;b:Physical test

Fig. 6 Comparison of simulation results with test measurement results

4 结论

1. 通过激光粒度试验、休止角试验、真密度试验测量了氧化镨钕粉末的粒径、密度、休止角,得到其平均粒径 5.819 μm,真密度 6260 kg/m^3,休止角 54.73°。

2. 通过 Box-Behnken 试验发现除了氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数、JKR 表面能系数、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数这三种显著性参数,氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数、JKR 表面能系数的交互项、氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数的二次项对休止角影响也较显著。

3. 以氧化镨钕粉末休止角实际值为目标值,其显著性参数最佳组合为:氧化镨钕颗粒间滚动摩擦系数 0.242、JKR 表面能参数 0.148 J/m^2、氧化镨钕-不锈钢滚动摩擦系数 0.397。使用上述参数进行离散元仿真休止角试验,仿真试验休止角测量值为 54.15°,与实际试验测量值间的相对误差为 1.06%。表明基于颗粒缩放理论氧化镨钕粉末离散元仿真参数真实有效,标定的氧化镨钕粉末颗粒参数结果可靠,能为后续粉末传输下料仿真过程提供参考。

参考文献:

[1] 李平, 卢博, 周峻, 等. 中国稀土产品追溯体系建设现状、问题及建议[J]. 稀土, 2023, 44(3): 150-158.
Li P, Lu B, Zhou J, et al. Current situation, problems and suggestions of rare earth product traceability system construction in China[J]. Chinese Rare Earths, 2023, 44(3): 150-158.

[2] 柳云龙, 聂仲文, 罗启顺, 等. 镨钕氧化物的物理性质对其电解生产的影响及改善措施[J]. 稀有金属与硬质合金, 2016, 44(2): 50-53,84.
Liu Y L, Nie Z W, Luo Q S, et al. Effects of physical properties of Pr-Nd oxide on its electrolysis preparation and improvement measures[J]. Rare Metals and Cemented Carbides, 2016, 44(2): 50-53,84.

[3] 陆海峰, 曹嘉琨, 郭晓镭, 等. 基于颗粒间相互作用的细颗粒粉体料仓下料过程分析[J]. 化工学报, 2021, 72(8): 4047-4054.
Lu H F, Cao J K, Guo X L, et al. Study on fine powders discharged from hopper based on interparticle interactions analysis[J]. CIESC Journal, 2021, 72(8): 4047-4054.

[4] Hou Q F, Dong K J, Yu A B. DEM study of the flow of cohesive particles in a screw feeder[J]. Powder Technology, 2014, 256: 529-539.

[5] 闫小江, 方飞飞, 刘应科, 等. 基于煤粉堆积角的 EDEM 颗粒接触参数标定[J]. 中国安全科学学报, 2020, 30(7): 114-119.
Wen X J, Fang F F, Liu Y K, et al. Research on stacking angle of coal particles and parameter calibration on EDEM[J]. China Safety Science Journal, 2020, 30(7): 114-119.

[6] 闫建伟, 魏松, 胡冬军, 等. 白萝卜种子颗粒模型离

散元接触参数标定与试验[J]. 中国农业科技导报, 2022, 24(5): 119-128.
Yan J W, Wei S, Hu D J, et al. Parameter calibration of radish seeds with different filling particle radius by DEM [J]. Journal of Agricultural Science and Technology, 2022, 24(5): 119-128.

[7] 张荣芳, 周纪磊, 刘虎, 等. 玉米颗粒粘结模型离散元仿真参数标定方法研究[J]. 农业机械学报, 2022, 53(增刊 1): 69-77.
Zhang R F, Zhou J L, Liu H, et al. Determination of interspecific contact parameters of corn and simulation calibration of discrete element[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2022, 53(Sup 1): 69-77.

[8] Feng Y T, Owen D R J. Discrete element modelling of large scale particle systems—I: Exact scaling laws[J]. Computational Particle Mechanics, 2014, 1(2): 159-168.

[9] 任建莉, 周龙海, 韩龙, 等. 基于颗粒缩放理论的垂直螺旋输送离散模拟[J]. 过程工程学报, 2017, 17(5): 936-943.
Ren J L, Zhou L H, Han L, et al. Discrete simulation of vertical screw conveyor based on particle scaling theory [J]. The Chinese Journal of Process Engineering, 2017, 17(5): 936-943.

[10] 白玉菱, 谢文影, 赵孟涛, 等. 基于 MATLAB 的 BP 神经网络的淀粉离散元接触参数标定[J]. 中国药学杂志, 2022, 57(15): 1268-1277.
Bai Y L, Xie W Y, Zhao M T, et al. Contact parameter calibration of starch discrete element method based on BP neural network of MATLAB[J]. Chinese Pharmaceutical Journal, 2022, 57(15): 1268-1277.

[11] Sakai M, Abe M, Shigeto Y, et al. Verification and validation of a coarse grain model of the DEM in a bubbling fluidized bed[J]. Chemical Engineering Journal, 2014, 244: 33-43.

[12] Bierwisch C, Kraft T, Riedel H, et al. Three-dimensional discrete element models for the granular statics and dynamics of powders in cavity filling[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2009, 57(1): 10-31.

[13] 石辰风, 杨茂蕊, 唐正馨, 等. 中药浸膏粉离散元模拟参数标定方法研究[J]. 中草药, 2020, 51(24): 6205-6212.
Shi C F, Yang M R, Tang Z X, et al. Calibration of discrete element simulation parameters of Chinese medicine extract powders[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2020, 51(24): 6205-6212.

[14] 李承明, 张斌, 夏雨阳, 等. 胶园植保硫磺粉颗粒离散元模型参数标定[J]. 江西农业大学学报, 2022, 44(3): 605-613.
Li C M, Zhang B, Xia Y Y, et al. Parameter calibration of discrete element model of sulfur powder particles for rubber plantation protection[J]. Acta Agriculturae Universitatis Jiangxiensis (Natural Sciences Edition), 2022, 44(3): 605-613.

[15] Just M, Medina P A, Hippe F, et al. Determination of the angle of repose of hard metal granules[J]. Powder Technology, 2022, 407: 117695.

[16] Alizadeh M, Asachi M, Ghadiri M, et al. A methodology for calibration of DEM input parameters in simulation of segregation of powder mixtures, a special focus on adhesion[J]. Powder Technology, 2018, 339: 789-800.

[17] Lu H F, Guo X L, Jin Y, et al. Effect of moisture on flowability of pulverized coal[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2018, 133: 326-334.

[18] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D. Surface energy and the contact of elastic solids[J]. Proceedings of the Royal Society of London Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1971, 324(1558): 301-313.

[19] Hertz By H. On the contact of elastic solids[J]. Crelle's Journal, 1882, 92: 156-171.

[20] 张锐, 韩佃雷, 吉巧丽, 等. 离散元模拟中沙土参数标定方法研究[J]. 农业机械学报, 2017, 48(3): 49-56.
Zhang R, Han D L, Ji Q L, et al. Calibration methods of sandy soil parameters in simulation of discrete element method[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(3): 49-56.

Calibration of Parameters for Discrete Element Model for Neodymium-praseodymium Oxide Powder Particles

LI Chen-hui[1], *TAO Li-ke*[2], *LIU Shi-qi*[1*], *ZHAO Guo-yu*[1], *XU Jin-yong*[1]

(1. *School of Mechanical and Electrical Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin* 541004, *China*;
2. *Hezhou Jinli New Material Co., Ltd., Hezhou* 542829, *China*)

Abstract: In the process of rare earth metal molten salt electrolysis preparation, exceptionally fine particle size of rare earth powder tends to induce phenomena such as powder bridging and dead zones in flow. To ensure the accuracy of discrete element simulation in the powder conveying and feeding process, accurate contact parameters for neodymium-praseodymium oxide particles need to be obtained. Prior to the conducting simulation experiment, experimental measurements of the particle size, density, and angle of repose parameters of neodymium-praseodymium oxide powder were conducted. In the discrete element simulation experiment, the Hertz-Mindlin contact model with JKR cohesion and the particle contact scaling principle were chosen as the basis for contact parameter calibration. Key factors significantly affecting the angle of repose simulation experiment were selected through Plackett-Burman tests. The best significant parameter range was determined through steepest ascent experiments. Based on Box-Behnken tests and response surface design, the design and optimization of a second-order regression model for the angle of repose and significant parameters were completed, resulting in the optimal parameter combination: The rolling friction coefficient between neodymium-praseodymium oxide particles is 0.242, the JKR coefficient is 0.148 J/m^2, and the rolling friction coefficient between neodymium-praseodymium oxide and stainless steel is 0.397. The validation results showed that the relative error between the simulated and measured values of the angle of repose was 1.06%. The calibrated parameters for neodymium-praseodymium oxide powder particles are reliable and can provide a reference for subsequent powder conveying and feeding process simulations.

Key words: neodymium-praseodymium oxide; discrete element method; repose angle; calibration of parameters; model