

热固性保温塑料粉末离散元参数的标定与应用

何平^{1,2}, 阮浩达¹, 王丛洋¹, 范益伟³

(1. 安徽建筑大学 机械与电气工程学院, 安徽 合肥 230601;
2. 安徽建筑大学 建筑机械故障诊断与预警技术实验室, 安徽 合肥 230601;
3. 武汉科技大学 机械传动与制造工程湖北省重点实验室, 湖北 武汉 430081)

摘要: 为准确模拟热固性保温塑料粉末的混合程度, 提出了以热固性聚氨酯超细粉末堆积角为响应值, 基于响应面优化标定热固性聚氨酯粉末离散元关键接触参数的方法。引入了JKR模型的尺度变换准则, 采用了MATLAB图像处理技术与Box-Behnken试验设计相结合的方式, 对热固性聚氨酯粉末颗粒间的关键接触参数(碰撞恢复系数、静摩擦系数以及JKR表面能)进行了模拟标定。根据仿真试验结果建立了堆积角与关键接触参数的二阶回归模型并优化, 以真实堆积角为目标值仿真求得关键接触参数的最佳组合为碰撞恢复系数0.35、静摩擦系数0.74、JKR表面能 5.7 J/m^2 。将仿真得到的堆积角与真实试验值进行对比验证, 误差在 $\pm 2^\circ$ 以内, 二者无显著性差异; 将最优离散元参数应用于粉末机械混合再生制备试验。结果表明, 热固性聚氨酯塑料粉末随机混合效果接近均匀状态。获得综合性能较优的再生复合保温板, 验证了粉末细料离散元参数标定方法的可行性。

关键词: 热固性聚氨酯; 机械混合; 离散元; 堆积角; 参数标定

中图分类号: TQ323.8

文献标识码: A

文章编号: 2095-8382(2022)03-047-07

Parameter Calibration and Application of Discrete Element of Thermosetting Insulation Plastic Powder

HE Ping^{1,2}, RUAN Haoda¹, WANG Congyang¹, FAN Yiwei³

(1. School of Mechanical and Electrical Engineering, Anhui Jianzhu University, Hefei 230601, China;
2. Key Laboratory of Construction Machinery Fault Diagnosis and Early Warning Technology, Anhui Jianzhu University, Hefei 230601, China; 3. Hubei Key Laboratory of Mechanical Transmission and Manufacturing Engineering, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081, China)

Abstract: In order to accurately simulate the mixing degree of thermosetting insulation plastic powder, a method was proposed to calibrate the key contact parameters of discrete element of thermosetting polyurethane powder based on the response surface, taking the stacking angle of thermosetting polyurethane ultrafine powder as the response value. The scale transformation criterion of the JKR model is introduced, and the key contact parameters (collision recovery coefficient, static friction coefficient and JKR surface energy) between thermosetting polyurethane powder particles are simulated and calibrated using MATLAB and Box-Behnken design. With the simulation results, a second-order regression model of the stacking angle and key contact parameters is established and optimized. Taking the real stacking angle as the target value, the optimal key contact parameter combination is

收稿日期: 2021-07-26

基金项目: 国家自然科学基金项目(51877001); 安徽省教育厅高校优秀人才支持计划重点项目(gxyqZD2020034); 安徽建筑大学博士启动基金项目(2018QD14)

作者简介: 何平(1980-), 男, 副教授, 硕士生导师, 博士, 主要从事绿色设计、固体废弃物资源化利用等研究。E-mail: peace1823@163.com。

obtained when the collision recovery coefficient is 0.35, the static friction coefficient is 0.74 and the JKR surface energy is 5.7 J/m^2 . The stacking angle obtained by simulation is compared with the real test value, and the error is within $\pm 2^\circ$. The optimal parameter combination is applied to the powder mechanical mixing regeneration experiment, and the results show that the random mixing effect of thermosetting polyurethane plastic powder is close to the homogeneous state. The recycled composite insulation board with good comprehensive performance is obtained, proving the feasibility of the parameter calibration method of the discrete element for the fine powder.

Keywords: thermosetting polyurethane; mechanical mixing; discrete element; stacking angle; parameter calibration

废旧热固性塑料的机械物理回收再生法是一种可实现完全回收和环境保护的较优回收再生方法。物料在机械力持续作用下,生成含大量自由活性基团的再生粉末,对粉末进行混合热压成型,制作再生品,从而实现热固性塑料的回收和循环利用^[1-2]。而粉末的机械混合是回收再生工艺的重要步骤,粉末颗粒的混合程度是描述该工艺的重要度量值,该值的准确性直接影响混合实验的效果。因此,为准确模拟计算混合程度值,需要研究分析粉末的离散元参数。

近年来,离散单元法(discrete element method, DEM)作为一种描述颗粒运动过程的模拟工具,广泛应用于制药和环保等领域^[3]。离散单元法可以分析与优化颗粒制备的工艺参数^[4],在使用 DEM 的仿真应用中,粒子间及粒子与设备间的接触特性取决于所采用的接触模型,如适用于常规颗粒接触的 Hertz-Mindlin 模型、适用于粘着材料的 JKR 模型等,需要大量接触参数才能较为准确地表征实际工况^[5-6]。国内外很多学者提出采用虚拟仿真试验法模拟标定接触参数^[7-12],但这些研究多数集中于大颗粒离散元参数的标定,而关于特殊型颗粒(含湿颗粒、超细团聚粉体)离散元参数标定方法的研究较少。

本文在归纳国内外超细粉末颗粒离散元参数标定方法的基础上,以粒径 200 目热固性聚氨酯粉末颗粒为例,采用空心筒法及改良的漏斗法获得聚氨酯粉末颗粒堆积角。基于 JKR 接触模型表征粉末颗粒间复杂力学性能,采用 Box-Behnken 试验法虚拟标定模型的关键接触参数,通过真实试验验证标定参数的准确性。选取最优的一组离散元关键接触参数输入圆锥混合器中,模拟粉末颗粒的机械混合程度,混合均匀度较高的粉末颗粒工艺参数应用于实际混合实验,最后通过热压成型,制备出再

生复合保温板。

1 实验部分

1.1 实验材料与实验仪器

B1 级硬质聚氨酯泡沫保温板、888LIB 型聚乙烯塑料(PE)、DC1102 型亚乙基双硬脂酰胺、EBS 塑料分散剂。课题组自主设计的可调速粉碎试验机,扫描电子显微镜(JSM-6510LV)、平板硫化机(XLB350X)、螺旋叶轮圆锥搅拌机(DSH0.3)、液压伺服材料试验机(E3000)、热扩散系数测试仪(HFM436)。

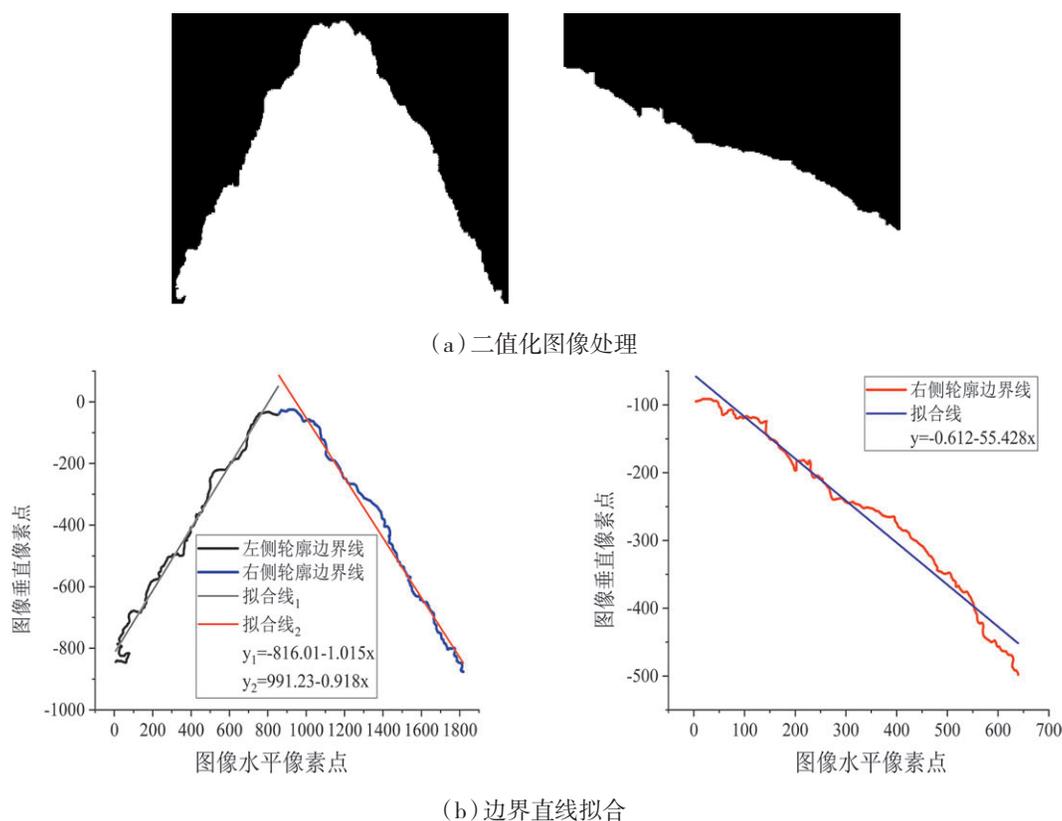
1.2 堆积角测量试验

采用自制可调速粉碎试验机将聚氨酯保温板粉碎,筛选出粒径为 200 目的粉末,质量为 10 g。为提高堆积角试验的准确性,本研究试验选用相同材料的不同堆积试验装置。空心筒法试验测量装置如图 1(a)所示,由内径 48 mm 空心筒和 150 mm × 150 mm 方形底板组合而成,以 0.1 m/s 速度提升空心筒,粉末颗粒沿开口方向自然滑落,在底板上形成一个近似锥形的粉末颗粒堆。漏斗法试验装置采用改良后的测量装置如图 1(b)所示,由口径 40 mm 漏斗、有机玻璃支架、圆形底板、搅拌毛刷等组成。为加快粉体的流动性,测试时利用一旋转毛刷搅拌漏斗中物料,待流出粉体在圆底板上堆积形成稳定物料堆时,可测量粉末颗粒堆积角。应用这两种自制试验装置对粉末颗粒堆积角进行重复试验 15 次。

为更准确地对堆积角进行量化表征,利用数码相机采集图像,并应用计算机技术对图像进行处理。具体处理方法及过程参考文献[13]中提出的方法,对粉末颗粒堆边界轮廓图像进行处理,结果如图 2 所示。通过拟合方程的斜率换算为角度^[5],该角度就是试验测量出的堆积角。



图 1 堆积角测量装置



注:空心筒法(左),漏斗法(右)
图 2 两种实验方法下堆积角图像处理

1.3 仿真模型

1.3.1 颗粒的离散元模型

在 DEM 模拟中,替代实际颗粒物的模型选取十分重要。通过粉碎筛选可获得粒径为 200 目的热固性聚氨酯粉末,其微观形貌如图 3 所示,颗粒形状不规则。从计算仿真成本的角度出发,较难采用与其实形状一致的模型^[14],一般采用近似的离散元模型替代。因此,采用长宽比 1.25 倍、粒径放大 10 倍的双球组合的近似模型,如图 4 所示。

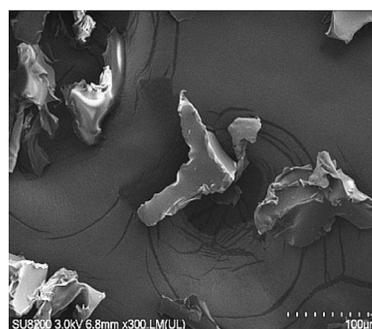


图 3 200 目的聚氨酯粉末微观形貌图

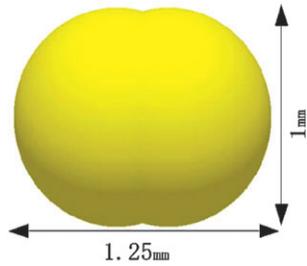


图 4 仿真模拟的近似模型

1.3.2 JKR 模型的尺度变换准则与仿真参数

在仿真模拟中,为避免颗粒间出现大量接触重叠,通常选用凝聚力(Coh)进行 JKR 模型的尺度缩放,依据一定的缩放级别^[15],扩大粒径和缩小剪切模量值,计算出等效表面能值。聚氨酯粉末颗粒凝聚力数为 0.000 622^[16],保持该值不变,粒径放大 10 倍、剪切模量缩小两个量级,计算出其等效表面能为 4.0 J/m²。为了更精准地标定该计算参数值,参考了 EDEM 软件公司提供的 GEMM 数据库中相近物料表面能值,扩大该表面能值的标定范围,从而将该值定义在 3~7 J/m² 之间。

堆积角是用于表征粉末颗粒物料流动、摩擦和表面能等特性的宏观参数,它与物料本身、接触材料的物理属性有关^[17]。基于 JKR 接触模型,将聚氨酯粉末接触参数与其他颗粒物料进行宏观对比,参考物性参数相近的膨胀石墨颗粒^[14]及相关物料数据库,筛选出需要标定的关键接触参数。

表 1 试验因素水平表

水平	A	B	C (J/m ²)
-1	0.1	0.3	3
0	0.3	0.53	5
1	0.5	0.75	7

注:A-颗粒间碰撞恢复系数;B-颗粒间静摩擦系数;C-等效表面能

仿真计算出 3 种关键接触参数数值范围,在取值范围内进行两水平因子的试验设计,如表 1 所示,表中 A 表示颗粒间碰撞恢复系数,B 表示颗粒间静摩擦系数,C 表示等效表面能。采用 EDEM 软件进行虚拟试验模拟仿真^[13],仿真参数取值如表 2 所示。

表 2 热固性聚氨酯粉末颗粒仿真参数值

离散元仿真参数	符号	数值
聚氨酯泊松比	V_p	0.252
聚氨酯剪切模量 (P_a)	G_p	1.837×10^6
聚氨酯密度 ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	ρ_p	28~60
有机玻璃泊松比	V_w	0.4
有机玻璃剪切模量 (P_w)	G_w	1.6×10^{10}
有机玻璃密度 ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	ρ_w	1 385
滚动摩擦系数(颗粒-颗粒)	μ_{pp}^r	0.001
碰撞恢复系数(颗粒-有机玻璃)	e_{pw}	0.5
静摩擦系数(颗粒-有机玻璃)	μ_{pw}	1.5
滚动摩擦系数(颗粒-有机玻璃)	μ_{pw}^r	0.001

1.3.3 堆积角仿真试验模型

仿真试验中,空心筒内径和高度与试验中设置一致,如图 5(a),内径为 48 mm,高度为 15 mm。颗粒工厂通过 EDEM API 开源接口编译,以快速填充方式生成颗粒,生成时间 0.01 s。待筒内填满颗粒群时,空心筒以 0.1 m/s 匀速上升,颗粒群以重力加速度 9.81 m/s² 自由下落。为克服先下落的颗粒间存在较大的力矩,设置最大下落速度为 0.7 m/s,获得稳定的粉末颗粒堆,总模拟时间为 25 s。漏斗法的仿真设置参数基本与空心筒法相似,如图 5(b)所示,颗粒生成也应用了开源接口编译。考虑到漏斗口径偏小,降低了颗粒下落的速度,在重力加速度基础上添加了 Linear Translation 传动类型加快颗粒群流动,速度为 0.7 m/s,同时也设置先

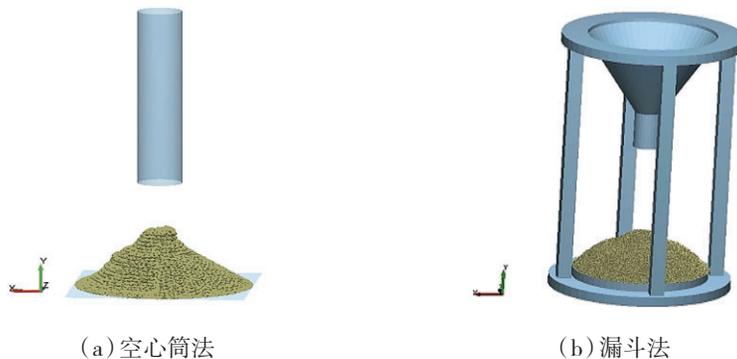


图 5 堆积角仿真试验

表 3 Box-Behnken 仿真试验设计及结果

Run	Factor1	Factor2	Factor3	Response	Run	Factor1	Factor2	Factor3	Response
	A	B	C (J/m ²)	AOR(°)		A	B	C (J/m ²)	AOR(°)
1	0.5	0.53	3	31	1	0.3	0.53	5	44
2	0.3	0.75	7	35	2	0.1	0.3	5	38
3	0.3	0.53	5	32	3	0.5	0.3	5	38
4	0.3	0.3	3	29	4	0.3	0.3	3	36
5	0.5	0.75	5	34	5	0.3	0.3	7	39
6	0.1	0.53	3	30	6	0.1	0.53	3	41
7	0.1	0.75	5	32	7	0.3	0.53	5	45
8	0.1	0.53	7	32.5	8	0.1	0.53	7	47
9	0.3	0.53	5	33	9	0.5	0.53	3	42
10	0.1	0.3	5	30	10	0.1	0.75	5	47
11	0.3	0.53	5	32	11	0.5	0.53	7	48
12	0.5	0.53	7	34.5	12	0.3	0.75	3	44
13	0.3	0.3	7	31	13	0.3	0.53	5	44
14	0.5	0.3	5	29.5	14	0.3	0.75	7	48
15	0.3	0.75	3	31	15	0.5	0.75	5	46

注:漏斗法(左),空心筒法(右)

堆积的颗粒限制最大速度为 0.5 m/s,最终在圆形底板上形成稳定的粉末颗粒堆。两种仿真试验方法均引入前文提出的 JKR 模型尺度变换准则。

2 结果与讨论

2.1 堆积角测量结果

热固性聚氨酯粉末堆积角的真实测量试验结果表明,在水平方形底板和圆形底板上均能形成较好的颗粒堆。经测量得到 15 次测量结果如图 6 所示,求得空心筒法和改良的漏斗法测量的颗粒堆积角平均值分别为 45°、31.8°。

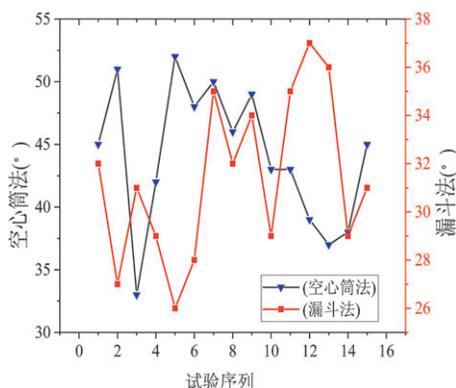


图 6 堆积角测量结果

2.2 接触参数的响应面设计

依据 Box-Behnken 中心组合设计原理,空心筒法与漏斗法试验均以堆积角(AOR)为响应值,采用 Design-Expert 软件设计响应面法试验,设置 15 个试验点,仿真试验结果如表 3 所示。

两种堆积角试验仿真结果如图 7 所示,其中前文所述的真实试验堆积角:漏斗法堆积角 31.4°、空

心筒法堆积角 44.1°,已包含在仿真试验结果中,表明仿真试验的因素水平选取合理。

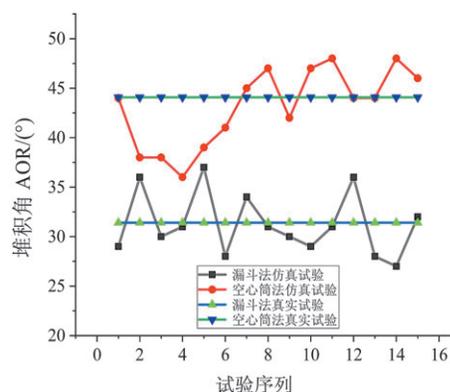


图 7 仿真试验与真实试验结果对比

利用 Design-Expert 统计学软件对仿真结果进行多元回归分析,分别用三种回归模型(一次项、二次项、交互作用项)对堆积角求解回归方程如下:

(1) 漏斗法

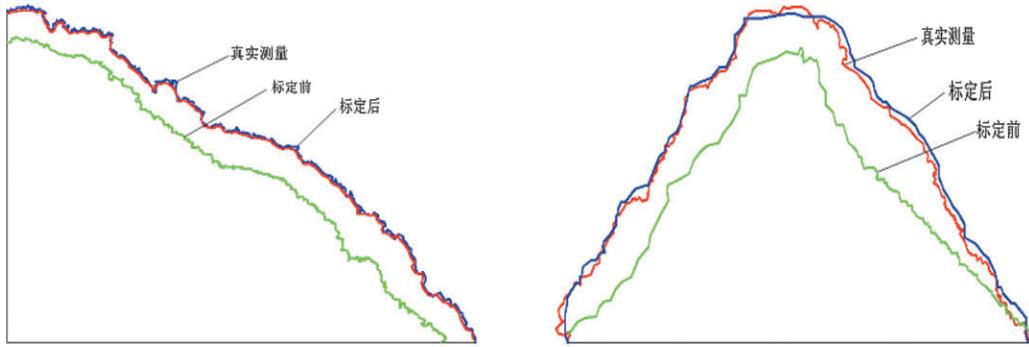
$$AOR=24.99-4.17A+12.35B+0.24C+13.88AB+0.63AC+1.11BC-5.73A^2-14.40B^2-0.03C^2 \quad (1)$$

(2) 空心筒法

$$AOR=15.43-1.46A+67.9B+1.31C-5.56AB+2.78 \times 10^{-16}AC+0.56BC+8.33A^2-47.74B^2-0.04C^2 \quad (2)$$

3 最优参数组合的确定

在 Design-Expert 软件中进行回归模型计算,得到颗粒间碰撞恢复系数为 0.35,颗粒间滚动摩擦系



注:漏斗法(左),空心筒法(右)

图 8 堆积角标定前后对比图

数为 0.74,JKR 表面能为 5.7 J/m^2 。为验证计算结果的准确性,分别将标定前后的参数值输入至 EDEM 软件中,仿真获得颗粒堆边界轮廓的二维形态图,如图 8 所示。结果表明,标定前的仿真结果与真实试验的测量值偏差较大;标定后的仿真结果与真实试验的测量值偏差较小,误差范围在 $\pm 2^\circ$ 内。表明采用最优参数值仿真的结果与真实试验值无显著性差异。

4 优化后离散元参数的工程应用

废旧热固性聚氨酯保温板粉碎再生粉末的机械混合仿真采用双螺旋叶轮圆锥搅拌模拟设备,粉末的离散元参数选择上述确定的最优参数组。仿真计算的初始状态设置为上下分层填料,分别为热聚乙烯塑料(PE)粉末、聚氨酯塑料(PF)粉末^[1],其质量比为 3:7,假设忽略其他添加剂,如图 9(a)所示。当模拟计算时间为 1.6 s 时,出现初步混合状态,如图 9(b)所示;当模拟计算时间为 5 s 时,模拟结果接近混合均匀状态,如图 9(c)所示。

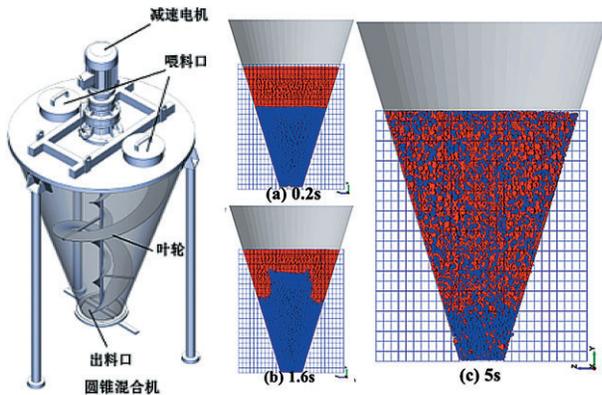


图 9 混合搅拌机的简易结构及仿真结果

最后将粉碎获得的粒径 200 目的聚氨酯保温板粉末与聚乙烯塑料等物料,按仿真较优的质量配比进行真实混合实验^[13]。在 $180\sim 200^\circ\text{C}$ 的环境下预热约 9 min,然后在高于 200°C 、 $14\sim 16 \text{ MPa}$ 的条件下,采用平板硫化机设备对混合料热压成形,获得性能较优的再生复合保温板。

通过液压伺服材料试验机测试其拉伸与抗弯强度,参照 GB/T 1040.1—2006,加载速率 5 mm/min ,试验环境温度 21°C ,湿度 46%,测得拉伸强度最大可达到 13 MPa ;参照 GB/T 9341—2008,加载速率 1 mm/min ,加载上压头圆弧半径 5 mm ,试验环境温度 21°C ,相对湿度 42%,测得抗弯强度最大可达到 17 MPa ;通过热扩散系数测试仪对导热系数进行测试,参照 GB/T 10295—2008,采用探针式传感器,测试时间约为 50 min,试验环境温度为 25°C ,导热系数平均稳定在 $0.057 \text{ W/(m}\cdot\text{k)}$ 左右。

5 结论

(1) 本文提出了一种超细团聚粉体堆积角获取方法,即提取真实粉末颗粒堆积体的轮廓,利用最小二乘法对轮廓曲线进行拟合,以拟合曲线线性方程的斜率换算的角度作为静止堆积角。选用重复性较好的试验装置(空心筒、漏斗法)进行试验,结果表明该方法拟合效果良好、精度较高、计算成本较低,为测定堆积体轮廓与热固性树脂基复合材料相似的超细粉体堆积角提供了一种思路。

(2) 根据 Box-Behnken 试验结果,建立了堆积角与 3 个关键离散元参数之间的二次多项式回归模型,通过对回归模型的仿真计算得到一组最优组合参数值,即颗粒间碰撞恢复系数为 0.35,静摩擦

系数为 0.74,JKR 表面能为 5.7 J/m^2 。

(3) 优化后的离散元参数应用于粉末物料混合仿真和真实混合试验,得到较优的混合质量比,后通过热压成型获得性能较优的再生复合保温板,验证了所提出的离散元参数标定方法的可行性。

参考文献:

- [1] 吴仲伟,刘光复,成焕波. 基于热力耦合模型的热固性聚氨酯再生材料制备与性能分析[J]. 中国机械工程, 2016, 27(18): 2540–2546, 2555.
- [2] 何平,梅加化,范益伟,等. 废旧热固性保温塑料再生材料的制备与性能[J]. 塑料, 2018, 47(6): 75–78, 84.
- [3] Barrios G K P, de Carvalho R M, Kwade A, et al. Contact parameter estimation for DEM simulation of iron ore pellet handling[J]. Powder Technology, 2013, 248: 84–93.
- [4] Zhou H L, Hu Z Q, Zhang Q L, et al. Numerical study on gas–solid flow characteristics of ultra–light particles in a cyclone separator[J]. Powder Technology, 2019, 344: 784–796.
- [5] 罗帅,袁巧霞,GOUDA Shaban,等. 基于 JKR 粘结模型的蚯蚓粪基质离散元法参数标定[J]. 农业机械学报, 2018, 49(4): 343–350.
- [6] Hærvig J, Kleinhans U, Wieland C, et al. On the adhesive JKR contact and rolling models for reduced particle stiffness discrete element simulations[J]. Powder Technology, 2017, 319: 472–482.
- [7] Marigo M, Stitt E. Discrete Element Method (DEM) for Industrial Applications: Comments on Calibration and Validation for the Modelling of Cylindrical Pellets[J]. Kona Powder and Particle Journal, 2015, 32: 236–252.
- [8] 韩燕龙,贾富国,唐玉荣,等. 颗粒滚动摩擦系数对堆积特性的影响[J]. 物理学报, 2014, 63(17): 174501.
- [9] Santos K G, Campos A V P, Oliveira O S, et al. Dem simulations of dynamic angle of repose of acerola residue: a parametric study using a response surface technique[C]// Anais do XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química. October 19–22, 2014. Florianópolis, Brasil. Sao Paulo: Editora Edgard Blücher, 2015.
- [10] 刘凡一,张舰,李博,等. 基于堆积试验的小麦离散元参数分析及标定[J]. 农业工程学报, 2016, 32(12): 247–253.
- [11] Xu G L, Chen X P, Liang C, et al. Experimental investigation on the flowability properties of cohesive carbonaceous powders[J]. Particulate Science and Technology, 2017, 35(3): 322–329.
- [12] Hu Z, Liu X Y, Wu W N. Study of the critical angles of granular material in rotary drums aimed for fast DEM model calibration[J]. Powder Technology, 2018, 340: 563–569.
- [13] 何平,范益伟,杜淑华,等. 热固性聚氨酯粉末物性参数的测定及应用[J]. 塑料工业, 2019, 47(6): 92–97.
- [14] Zhou H L, Hu Z Q, Chen J G, et al. Calibration of DEM models for irregular particles based on experimental design method and bulk experiments[J]. Powder Technology, 2018, 332: 210–223.
- [15] Imole O I, Krijgsman D, Weinhart T, et al. Experiments and discrete element simulation of the dosing of cohesive powders in a simplified geometry[J]. Powder Technology, 2016, 287: 108–120.
- [16] 赵林林,于敏,戴振东. 粗糙聚氨酯表面微接触状态下粘着力模拟[J]. 南京航空航天大学学报, 2007, 39(4): 471–474.
- [17] Li C Z, Honeyands T, O’Dea D, et al. The angle of repose and size segregation of iron ore granules: DEM analysis and experimental investigation[J]. Powder Technology, 2017, 320: 257–272.