

文章编号:1006-9941(2022)02-0138-08

复合固体推进剂双螺杆挤出成型过程 DEM-CFD 耦合仿真

王建¹,刘皓¹,赵亚风²,乔晓林³,李兴刚³,赵慧³

(1.北京化工大学机电工程学院,北京 100029; 2.北京航天试验技术研究所,北京 100074; 3.西安航天化学动力有限公司,陕西 西安 710025)

摘要: 复合固体推进剂含有固体颗粒较多,传统的有限元分析方法难以准确实现复合固体推进剂在双螺杆挤出过程的仿真模拟。离散单元法(DEM)与计算流体力学(CFD)耦合是一种适合复合固体推进剂生产过程仿真的有效方法,但实现难度很大。基于标定的接触模型参数通过 DEM 实现了以铝粉和高氯酸铵为主要组分的固体推进剂固体颗粒在双螺杆挤出输送过程的模拟,利用测得液相黏度模型参数通过 DEM-CFD 耦合计算实现了固体推进剂固体颗粒与液相在双螺杆挤出过程的耦合仿真。结果表明,通过 DEM 计算得到的固体推进剂固体颗粒在双螺杆中的输送与实验规律相符;对比 DEM-CFD 耦合仿真与 DEM 中固体颗粒仿真结果,可见加入了液相的 DEM-CFD 耦合仿真物料流动性比未添加液相的 DEM 固体颗粒更好,物料在螺杆输送段的填充率从 20% 提升到 40%,固体颗粒平均输送速度提升 150%,螺杆的受力变化不大。

关键词: 复合固体推进剂;双螺杆挤出;离散单元法;计算流体力学;耦合仿真中图分类号: TJ55; V512^{+.4}

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2021102

1 引言

双螺杆挤出成型是火炸药柔性制造的核心技术,具有连续生产进而提高生产效率、减少工艺环节进而提高安全程度等优势^[1-2],在固体推进剂生产中的应用将改变传统生产模式。近年来,数值模拟技术在火炸药螺压挤出加工生产过程中应用日益突出^[3-5],在安全可靠方面可发挥重要作用。但是,由于火炸药组分的复杂性,相关模拟技术^[3-5]均把火炸药物料体系简化为流体,且只选取了部分较短螺杆结构进行模拟,仿真模拟的精度仍然很差。复合固体推进剂以铝粉和高氯酸铵氧化剂为主要组分^[6-8],由于固体颗粒含量较多,通过单纯的计算流体力学(CFD)的模拟方式难以确保计算精度。复合固体推进剂的过程仿真必须考虑固态颗粒的运动规律。离

散单元法(DEM)可实现颗粒散状物料性质的有效表征及其加工生产过程的可靠仿真^[9-10]。DEM 与 CFD 耦合可实现复合固体推进剂的过程仿真,并能获得更高的仿真精度。目前,随着 ANSYS 等计算机辅助分析软件的发展,DEM 与 CFD 耦合仿真在工业界得到了广泛应用^[11-14],但用于火炸药的双螺杆加工过程仿真的报道仍然很少。因为复合固体推进剂的双螺杆加工生产过程仿真不但需要考虑物料颗粒的特性以及流体相的流动特性,还要考虑固液两相之间的关系,通过 DEM 与 CFD 耦合实现复合固体推进剂加工过程的仿真仍然难度较大。

为了推动 DEM 与 CFD 耦合技术在固体推进剂双螺杆加工生产过程仿真中的应用,针对以铝粉和高氯酸铵氧化剂为主要组分的复合固体推进剂,采用 DEM 仿真与安息角测试相结合的标定技术^[15-17]获得铝粉、高氯酸铵及其颗粒混合物的接触模型参数,通过流变测试实验确定液相的黏度模型参数,采用 DEM 与 CFD 耦合实现复合固体推进剂双螺杆挤出成型过程的仿真。相关方法与结果可为固体推进剂的生产加工过程提供技术参考,为设备结构与工艺条件的进一步优化和生产工艺的安全可靠性评估提供理论支持。

收稿日期: 2021-04-21; 修回日期: 2021-05-19

网络出版日期: 2021-09-13

基金项目: 国防基础科研项目(JCKY2016203A008);中央高校基本科研业务费专项资金资助(buctrc202005)

作者简介: 王建(1984-),男,教授,主要从事含能材料与高分子材料加工及装备研究。e-mail: wjj_0107@163.com

引用本文: 王建,刘皓,赵亚风,等. 复合固体推进剂双螺杆挤出成型过程 DEM-CFD 耦合仿真[J]. 含能材料, 2022, 30(2):138-145.

WANG Jian, LIU Hao, ZHAO Ya-feng, et al. DEM-CFD Simulation of Twin Screw Extrusion Process of Composite Solid Propellant[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2022, 30(2):138-145.

2 试剂与仪器

复合固体推进剂的固相颗粒物主要由铝粉和高氯酸铵按质量比 1:2 组成;复合固体推进剂液相某比例混合物,西安航天化学动力厂提供。复合固体推进剂由固相颗粒和液相混合物按质量比 5:1 混合组成。

黏度计,型号 Haake RV1,美国赛默飞世尔科技公司生产。

液体控温循环器,型号 Haake P1-C35P,美国赛默飞世尔科技公司生产。

3 实验部分

对固体推进剂中添加的液相混合物进行了黏度测试。设定温度窗口为 10~70 °C,测定混合液体的黏度变化。采用 Z31 转子,Z43 转筒,装入液体 50.5 mL,为转筒体积 2/3。降温及加热过程通过液体控温控制器控制,升温速率 2 °C·min⁻¹,测温点保温 30 min,温度精度为 ±0.1 °C,定剪切速率 0.1 s⁻¹。图 1 显示了复合固体推进剂液相混合物的黏度随温度的变化曲线。随着温度的升高,物料的黏度下降。在仿真计算时,假设液相为牛顿流体。结合实际生产工艺,取温度 40 °C 时液相混合物对应的黏度值 1.78 Pa·s 用于 DEM-CFD 耦合仿真。

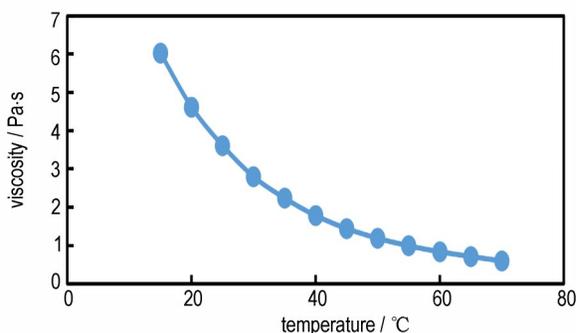


图 1 混合液体的黏度变化

Fig.1 Mixed liquid viscosity changes with temperature

4 模拟仿真

4.1 DEM 仿真

(1) 几何模型

仿真计算的几何模型为双螺杆装配模型,包含机筒、两根螺杆以及进料口。机筒一端为开口状态,进料口和出料口(机筒开口)为常压口。双螺杆中心距

43 mm,螺杆外径为 52 mm,由螺纹元件、啮合元件组成,依次包括三块螺距 64 mm 的螺纹元件、一块螺距 32 mm 的螺纹元件、三组 60°错列角厚 32 mm 的啮合元件、五块螺距 32 mm 的螺纹元件、一块螺距 32 mm 的反向螺纹元件,总长 512 mm,如图 2a 所示。螺杆之间的间隙以及外螺纹与机筒之间的间隙均为 1.2 mm。补充几何平面约束来完善 DEM 中模型的处理,如图 2b 所示,添加标红的平面作为密封面,添加标红无底长方体盒子作为颗粒工厂。根据工艺参数定义螺杆几何体转动轴及转动方向与转速。研究中涉及两根螺杆的同向转动,过大的网格数量使计算机负荷增大,最终确定用于计算的螺杆网格尺寸为 2 mm,总网格数 721548。图 2c 显示了螺杆网格划分情况。

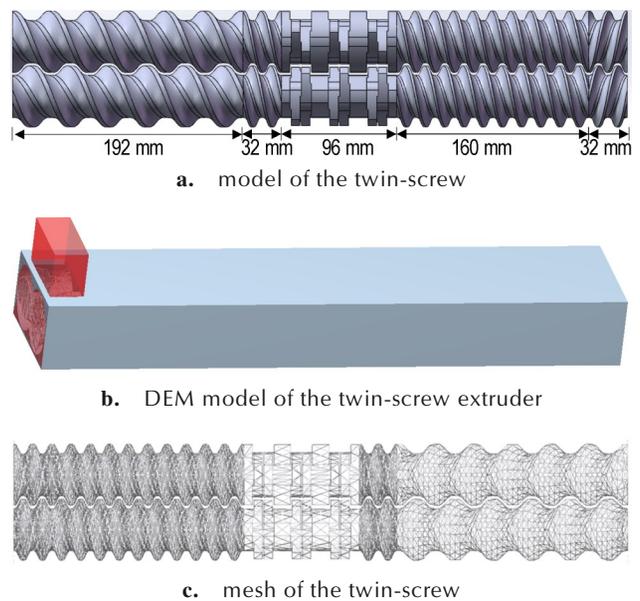


图 2 双螺杆挤出机构模型

Fig.2 Model of the twin-screw extruder

(2) 物料模型

铝粉颗粒泊松比为 0.3,密度 2700 kg·m⁻³,剪切模量 2.6×10¹⁰ Pa;高氯酸铵颗粒泊松比 0.4,密度 1500 kg·m⁻³,剪切模量 1×10⁸ Pa。物料模型中包含多种颗粒模型,离散元计算的基础是颗粒的运动。需要对颗粒形状和大小等进行定义。将颗粒定义为球形颗粒,标准颗粒半径为 0.1 mm,考虑到真实的铝粉和高氯酸铵颗粒直径分布不均匀,设置颗粒工厂中粒径在一定范围内随机产生,最大粒径为 0.3 mm,最小粒径为 0.02 mm,在颗粒工厂中的随机位置产生。物料最适宜的表面能为 5 J·m⁻²,相关用于 DEM 分析的接触模型参数如表 1 所示^[18]。

表1 接触模型参数

Table 1 Parameters of the contact model

contact relationship	static friction coefficient	dynamic friction coefficient
Al-Al	0.6	0.18
Al-NH ₄ ClO ₄	0.2	0.05
NH ₄ ClO ₄ -NH ₄ ClO ₄	0.1	0.05
NH ₄ ClO ₄ -steel	0.2	0.01
Al-steel	0.3	0.01

(3) DEM 仿真控制方程

考虑到研究对象为高固体含量的推进剂, 认为材料混合后固体颗粒被包裹在胶体之中, 颗粒与颗粒之间的作用力不仅存在于法向作用力, 也有较为明显的切向作用力。Hertz-Mindlin with JKR 模型^[20]优势在于存在法向力以及切向粘聚力, 无论对于前期的粉体料混合过程还是后期加入凝胶后的浆体推进剂, Hertz-Mindlin with JKR 模型均可较好的解释实际固体推进剂的物理行为。因此, 选择 DEM 中 Hertz-Mindlin with JKR 模型作为颗粒接触力模型。模型的法向作用力取决于颗粒之间的重叠量和表面能, 且存在式(1)关系:

$$F_{JKR} = -4\sqrt{\pi\eta E} a^{\frac{3}{2}} + \frac{4E}{3R} a^3 \quad (1)$$

$$\sigma = \frac{a^2}{R} - \sqrt{\frac{4\pi\eta a}{E}} \quad (2)$$

式中, F_{JKR} 为法向作用力, N; E 为杨氏模量, Pa; R 为当量半径, mm; a 为接触半径, mm, 此处与物理半径保持一致; σ 为颗粒重叠量, mm; η 为表面能, J·m⁻²。

Hertz-Mindlin with JKR 模型提供了吸引凝聚力, 即使颗粒并不是直接接触, 颗粒间仍然存在非零凝聚力的最大间隙为 σ_0 , 可以通过式(3)计算:

$$\sigma_0 = \frac{a_c^2}{R} - \sqrt{\frac{4\pi\eta a_c}{E}} \quad (3)$$

$$a_c = \left[\frac{9\pi\eta R^2 \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{\sqrt{2}} \right)}{2E} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (4)$$

式中, σ_0 为存在凝聚力的最大间隙, mm; 当 $\sigma_0 < \sigma$ 时, 模型计算返回值为 0, 此时物料颗粒之间距离过大, 不存在凝聚力。

(4) 工艺参数设置

根据实际生产情况, 螺杆转速统一设置为 70 r·min⁻¹, 两根螺杆同向转动。在 DEM 固体颗粒输送仿真过程中, 铝粉与高氯酸铵质量比为 1:2 进料, 颗粒按质量流

率生成。设置了 5 组不同喂料量的实验, 如表 2 所示。

表2 颗粒喂料量设定

Table 2 Feeding rate of the powders kg·h⁻¹

group number	Al	NH ₄ ClO ₄	total feed rate
1	10	20	30
2	15	30	45
3	20	40	60
4	25	50	75
5	30	60	90

(5) 求解器设置

考虑后续与 CFD 软件耦合时时间步长之间的联系, 将设定时间步长为 2.5e-07 s, 计算得到瑞利时间步长的 22.9%。经过多次试算, 在螺杆转速 70 r·min⁻¹ 时, 经过 15 s, 颗粒可以从右侧出料口挤出, 再经过 5 s 之后发现颗粒的运动分布情况以及基本趋于稳定, 最终设定总时长 20 s 进行仿真计算。

4.2 CFD-DEM 仿真

(1) 模型与网格划分

DEM-CFD 耦合仿真中对筒体内壁面、进料口、出料口、螺杆区域进行面划分, 对流动区域采用填充的体网格划分, 总网格数 483002, 网格模型如图 3 所示。因为计算工作量问题, CFD 模拟采用的螺杆模型只选取了螺纹输送段和啮合段, 省去了 DEM 模拟中啮合段之后的输送段。采用动网格 Porfile 文件指定网格运动。由工艺条件设定螺杆转动速度与 DEM 设置相同, 为 70 r·min⁻¹。利用 Profile 文件中的表示角速度的语句定义, 采用瞬态方式, 取时间 0、0.1、1000 s 三个数据点, 三个数据点沿 x 轴转速均为 7.33 rad·s⁻¹。代表其匀速运动, 无转动加速度。

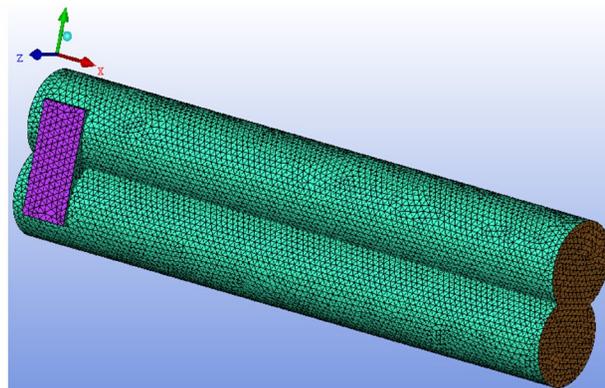


图3 DEM-CFD 仿真螺杆网格划分

Fig.3 Screw mesh generation in DEM-CFD

(2) DEM-CFD耦合仿真控制方程

颗粒流与流体进行耦合计算的主要模型有两种：拉格朗日(Lagrangian)模型和欧拉(Eulerian)模型。两种模型的选择主要取决于固体含量的多少。拉格朗日模型中只包括固液两相之间的动量交换,通常在固含量低于10%时选用该模型。对于本研究中复合固体推进剂,固含量为85%,故采用欧拉模型。欧拉模型考虑了固液间的动量交换以及固体颗粒对于流体流动状态的影响。欧拉方程是拉格朗日方程的修正方程,在描述耦合模型时在控制方程中添加流体体积分数 φ ,当 $\varphi=1$ 时,模型为拉格朗日模型,物料中无固相存在,当 $\varphi<1$ 时,模型为欧拉模型。耦合后,流体相满足连续性方程及动量守恒方程,颗粒系统则遵循牛顿第二定律。

流体连续性方程为:

$$\frac{\partial(\rho_1\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 v_1 \varphi) = 0 \quad (5)$$

动量守恒方程为:

$$\frac{\partial(\rho_1\varphi v_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 v_1 v_1 \varphi) = -\varphi \nabla p + \mu \nabla^2 (v_1 \varphi) + \rho_1 \varphi g - S \quad (6)$$

$$S = \frac{\sum_i^n F_{d,i}}{V} \quad (7)$$

颗粒运动方程满足:

$$m \frac{d u}{d t} = \sum F \quad (8)$$

式中, ρ_1 为液体密度, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$; φ 为液相体积分数; v_1 为液相速度, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$; g 为重力加速, $9.81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$; p 为压力,Pa; μ 为液体黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$; S 为两相动量交换源项, $\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$; V 为CFD网格单元体积, m^3 ; $F_{d,i}$ 表示作用在网格单元的流体阻力,N; $\sum F$ 为颗粒所受的合力,N。

(3) 耦合计算条件

首先设置DEM模型以及物料参数,通过读取UDF耦合文件进行耦合。DEM与CFD软件进行耦合后,CFD软件自动读取DEM中的各项参数作为计算参数。计算方式为瞬态计算,重力设定为z轴 $9.81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$,与DEM中设定保持一致。螺杆转速为 $70 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$,流体进入流量设定为 $15 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$,固体颗粒进料质量流量设置为 $75 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 。出口设置为常压出口。温度设定为 $40 \text{ }^\circ\text{C}$,流体粘度为常数黏度 $1.78 \text{ Pa}\cdot\text{s}$,密度为 $920 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。

求解器设置主要注意时间步长。耦合计算需要根据DEM中的求解器关联设置,CFD耦合计算时的时间步长为DEM计算时间步长的100倍,最大迭代次数为40次,总时间步10000次。

5 结果与讨论

5.1 DEM模拟结果分析

(1) 总进料量选择

在DEM模拟中,设置五组混合进料来判断颗粒工厂产生颗粒的适宜的喂料速率,分别为 30 、 45 、 60 、 75 、 $90 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$,螺杆转速均为 $70 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$,其它颗粒属性设置与计算边界条件设定都相同,物料填充结果如图4所示。图4a中,物料主要分布在螺杆的机筒壁面以及螺杆啮合处,综合图4a中的粒子分布,不难发现此时进料量过低。分析图4中物料分布,低喂料量进料情况下,固体颗粒在进料过程较为分散,表现为小颗粒的局部团聚,物料整体不连续。这是由于物料进料量过低,颗粒较少,多数颗粒与颗粒之间距离较大,远远大于JKR计算模型中存在粒子间粘结力的最大距离^[20]。另一现象为物料容易沉降在机筒底部,运动缓慢。这是由于物料受到重力作用的影响,与周围颗粒

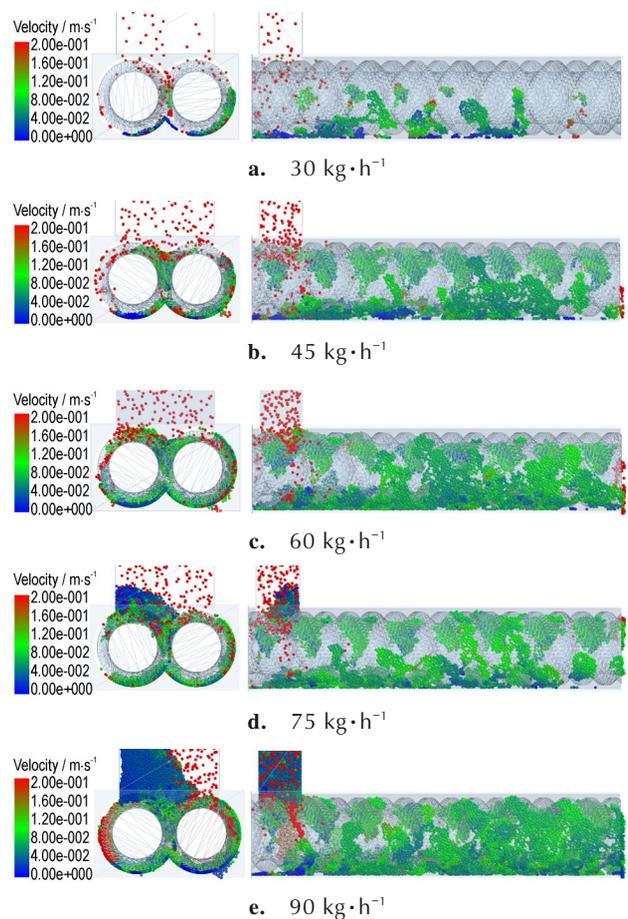
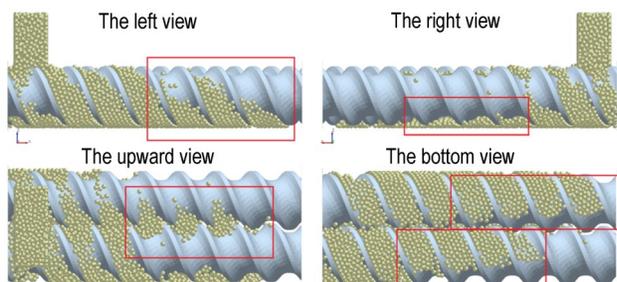


图4 不同颗粒喂料量条件下在4 s时刻的物料颗粒分布
Fig.4 Material powder distribution at 4 s for different feeding rate of powders

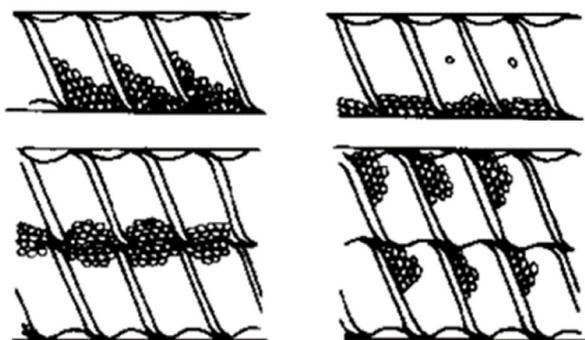
粘结后沉降在螺杆底部,而颗粒的堆积高度小于螺杆与机筒之间的间隙,螺杆的旋转产生的对物料的推动力、摩擦力、剪切力等无法作用到团聚的颗粒上。只有在堆积高度大于螺杆与机筒间隙时才会有一小部分向前运动。这也是靠近进口口的物料明显多于靠近出口口的螺杆段的物料的原因。图4b与图4c中,物料随着进料的增加在螺杆上分布有了较大改善。图4d与图4e中进料口都存在物料堆积,满足了颗粒之间相互接触、连续进料的要求。鉴于过大的进料会给设备造成较大的负荷,因此最终选用的适宜固体颗粒进料量为 $75 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 。

(2) 颗粒分布

为确保固体推进剂双螺杆挤出成型过程仿真在DEM中的正确性,将仿真结果进行处理。分析了达到稳定状态时候,物料在双螺杆中的分布状况如图5a所示。耿孝正^[19]在1993年研制成功国内第一台可视化双螺杆挤出实验装置,通过此装置做了固体粒料的双螺杆输送实验,图5b为螺杆粒料输送的实际分布情况。观察仿真结果图5a,红框区域分别与图5b中视角对应,可以发现DEM仿真计算的结果与耿孝正聚丙烯颗粒料输送结果描述的分布情况相符。在上输送区内物料聚集,在左输送区内物料堆积偏左下方堆积。



a. simulated material distribution



b. experimental material distribution^[19]

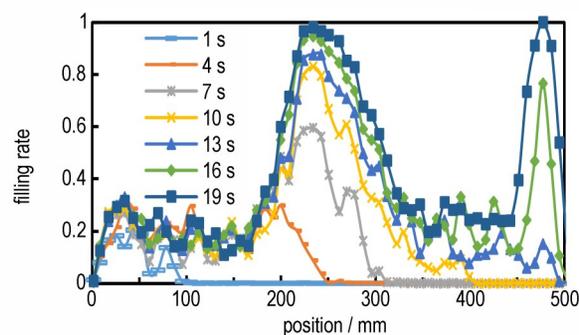
图5 固体颗粒物料在双螺杆中的分布

Fig.5 Solid powder material distribution in the twin-screw extruder

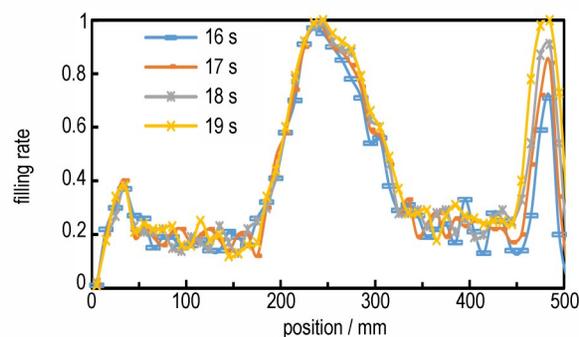
由于螺杆的上旋,旋转的螺杆对物料的摩擦拖拽,使得物料有上爬行为。当重力大于摩擦力时,物料下滑,最终在斜面位置保持平衡。螺杆的正右侧方向基本上看不到物料,右输送区的物料运动在下啮合区处,在机筒隆起的部受阻。DEM仿真结果与可视化双螺杆固体混合试验结果吻合,证明了DEM仿真结果的正确。因为传统计算流体力学软件等对双螺杆的模拟无法得出固体分布情况。对比这一情况,反映出利用DEM方法分析双螺杆固体粒料的输送是可行的,也证明了DEM中内嵌的物理模型适用性较强,在参数设置得当的情况下,可以计算出接近双螺杆试验真实情况的结果。

(3) 固体粒料在双螺杆中不同位置的填充率

通过总时长20 s的计算,在螺杆的径向方向划分150个统计网格单元组,统计每个网格中的粒子数目。结合螺杆的位置关系,统计了填充率随时间的变化关系,如图6a所示。特别分析了16,17,18,19 s的双螺杆的固体颗粒的填充情况,如图6b所示。通过分析填充率分布图,可以发现,随着时间推移,啮合区填充率逐渐升高。在19 s时,啮合区和螺杆末端反向螺纹元件位置处的物料填充率接近100%;在输送端位置处的物料填充率较低,大概为20%左右;而在啮合区后



a. filling rate changes with time



b. filling rate changes from 16 s to 19 s

图6 沿双螺杆的物料填充率随时间变化情况

Fig.6 Filling rate along the twin-screw at different time

的螺纹输送区域的物料填充率较大,约为 30%。随着时间的推移,螺杆前半部分螺纹输送端的物料填充率变化不大,而经过啮合段后的螺纹输送区域的物料填充率逐渐上升。这是由于在到达 16 s 之前,前部分螺杆螺纹输送段的物料分布已经处于稳定状态;在时间达到 19 s 后,螺杆啮合去后的螺纹输送段的物料填充率也逐渐达到了稳定状态。机筒各处填充率不同是由于不同的螺杆构型对颗粒的作用力不同。不同于螺杆螺纹输送段螺纹元件的摩擦拖拽,固体颗粒在啮合区的输送动力主要来源于啮合块的挤压。在啮合段的物料只有一个沿螺杆轴向的初速度,不存在直接向前运输的动力,受到啮合块的挤压作用,容易在啮合区处形成堆积。而反向螺纹元件位置处的物料颗粒速度受到螺杆作用改变运动方向,也会产生大量物料堆积。

5.2 DEM-CFD 耦合模拟结果分析

(1) 填充率分布

经瞬态分析发现 19 s 物料在螺杆中的输送已达到稳定状态,DEM-CFD 耦合模拟均采用 19 s 时刻 DEM 稳定状态的结果进行。图 7 为 DEM 法和 DEM-CFD 耦合模拟得到的固体颗粒在螺杆中的填充率分布曲线对比。在相同的工艺条件下,与 DEM 得到的结果相比较,发现加入质量分数为 15% 的液相成分后,固体颗粒的分布填充情况大为改善,填充速率更快。前段螺纹元件输送段的填充率由 20% 提升到 40%,提升了将近一倍。结果反映液相的加入极大地改善了固体推进剂的流动性。啮合段的填充率接近于 100%,加入液相后啮合段向下一段的输送能力明显得到了提高。

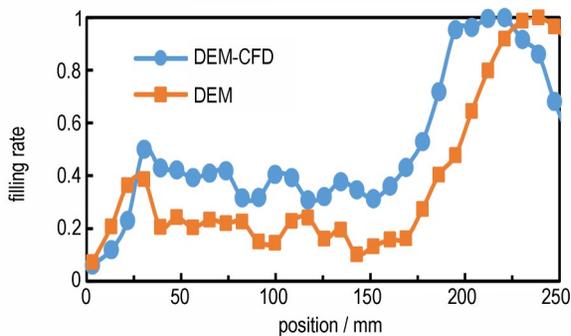
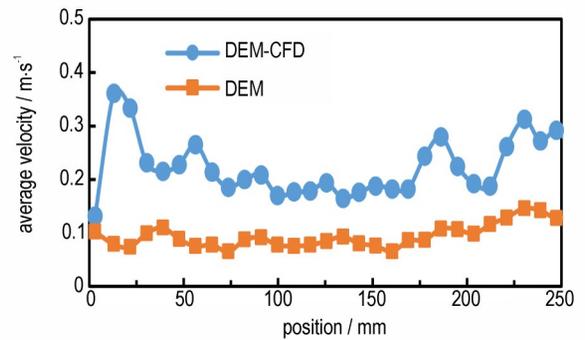


图 7 沿螺杆方向的填充率分布图对比
Fig.7 Comparison of filling rate distribution diagram in screw direction

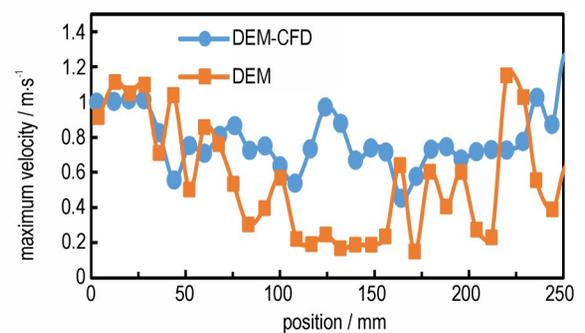
(2) 颗粒平均速度

图 8a 为颗粒平均速度沿螺杆方向的分布曲线。加入液相的固体推进剂颗粒的平均速度远大于纯固体颗

粒的平均速度。整体颗粒的平均速度由 DEM 模拟得到的 $0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 提升到 DEM-CFD 耦合得到的 $0.25 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。未加液相的固体推进剂颗粒与螺杆的摩擦主要为滑动摩擦,螺杆较难带动物料运输;颗粒的输送主要依靠螺杆的推力。而由液相包裹的颗粒形成浆体,有利于物料对螺杆的黏附,受到的螺杆剪切和摩擦力相对变大,利于物料的输送,运动速度也相对变大。而且,物料在啮合处受到啮合块的挤压作用,速度进一步上升。在进料口位置处,耦合计算时的物料平均速度突然上升,可能是由于进料量过大,在进料口大小不变的情况下,液体要达到设定进料速度必须有足够大入口速度。图 8b 显示了颗粒最大速度沿螺杆方向的分布曲线。颗粒最大速度分布规律并不明显,耦合前后速度峰值变化不大,但是 DEM-CFD 耦合计算得到的最大速度的平均值高于耦合前 DEM 计算得到的最大速度平均值,说明液相的加入对颗粒最大速度的提高也有促进作用。



a. distribution of the average velocity of material particles



b. distribution of maximum velocity of material particles

图 8 沿螺杆方向的颗粒速度分布图

Fig.8 Particle velocity distribution along the screw direction

(3) 螺杆受力情况

图 9 为 DEM 和 DEM-CFD 耦合计算得到的螺杆受力分布云图。图 10 为 DEM 和 DEM-CFD 耦合计算得到的两根螺杆分别沿螺杆方向的受力曲线。两螺杆受

力情况基本一致,最大受力点都出现于啮合区域及啮合块与螺纹元件连接位置处。加入液相前后螺杆受力变化不大。虽然液相的加入增加了物料的流动性,理论上能够降低螺杆的受力;但是较好的流动性也使得物料在螺杆中的填充率变大,物料堆积更多。因此,流动性的增强和物料的增多对螺杆产生的影响几乎相互抵消。

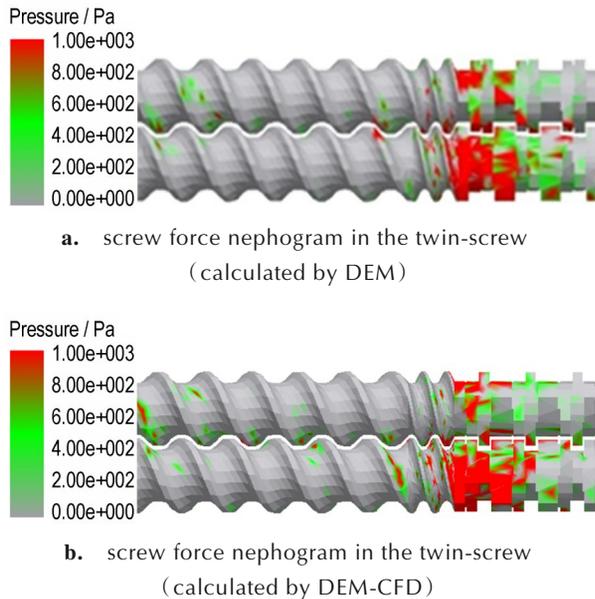


图9 螺杆受力云图

Fig.9 Screw force nephogram

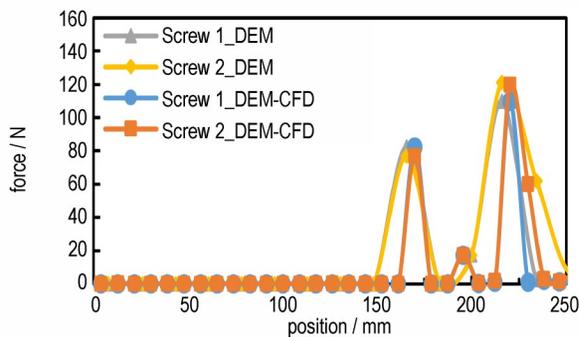


图10 沿螺杆方向的螺杆受力曲线

Fig.10 Screw force curves along screw direction

6 结论

为了解决复合固体推进剂双螺杆挤出仿真中固液相性质差距较大的问题,首先通过DEM方法对固体推进剂的主要固相颗粒物(铝粉和高氯酸铵)在双螺杆中的挤出过程进行了仿真分析,然后用DEM-CFD耦合的方法对固液两相流的复合固体推进剂在双螺杆中的

挤出过程进行了仿真分析,与DEM计算得到的纯固体颗粒挤出过程进行对比,得到以下结论:

(1)对复合固体推进剂固相颗粒在双螺杆中挤出过程的DEM模拟分析发现,DEM法对于固体推进剂粉料的挤出混合过程得到的固体颗粒分布规律与双螺杆可视化实验结果相符,这是传统有限元分析方法难以实现的。考虑液相的加入,采用DEM与CFD相结合的耦合计算方法可实现更准确的模拟。

(2)DEM模拟分析了不同喂料量条件下固相颗粒在螺杆中的分布情况,确定了螺杆转速 $70 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 条件下最优的固体颗粒喂料量为 $75 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 。

(3)采用流变测试得到 40°C 时复合固体推进剂液相的黏度为 $1.78 \text{ Pa}\cdot\text{s}$,该黏度值用于CFD及DEM-CFD耦合仿真。在固体颗粒喂料量 $75 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 和转速 $70 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 的工艺条件下,采用DEM-CFD耦合模拟分析计算了固含量质量分数75%的复合固体推进剂在双螺杆挤出过程中的填充率、速度和螺杆受力情况。

(4)比对DEM和DEM-CFD耦合计算结果发现:加入液相物料后,颗粒平均速度由 $0.1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 提升到 $0.25 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$;液相的加入增加了物料在输送段的填充率,由20%提升到40%,物料的输送效率也得到提升;螺杆的受力变化不大;在实际生产中应当着重注意啮合段螺杆及物料的受力情况。

参考文献:

- [1] Dombe G, Mehilal D, Bhongale C, et al. Application of twin screw extrusion for continuous processing of energetic materials [J]. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2015, 12(3): 507-522.
- [2] Gallant F M, Bruck H A, Prickett S E, et al. Effects of twin-screw extrusion processing on the burning rate of composite propellants [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2006, 31(6): 456-465.
- [3] Ji D, Xiao Y, Huang Q, et al. Safety design and numerical simulation of twin screw extruder for energetic materials[C]// *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, 1507: 022027.
- [4] Zhou K, He Z, Yin S, et al. Numerical simulation for exploring the effect of viscosity on single-screw extrusion process of propellant[J]. *Procedia Engineering*, 2014, 84: 933-939.
- [5] Zhong T, Rao G, Peng J. Numerical simulation of three dimensional flow fields for extrusion process of GR-35 double-base propellant[J]. *Procedia Engineering*, 2014, 84: 920-926.
- [6] 张端庆. 固体火箭推进剂[J]. *兵器知识*, 2004(3): 70-71. ZHANG Duan-qing. Solid rocket propellant [J]. *Ordnance Knowledge*, 2004(3): 70-71.
- [7] 谭惠民. 固体推进剂化学与技术[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2015: 1-542. TAN Hui-min. Solid propellant chemistry and technology[M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 2015: 1-542.
- [8] 李广超. 基于气流粉碎法的钝感超细球形高氯酸铵的制备及

- 性能研究[D]. 南京:南京理工大学, 2018.
- LI Guang-chao. Preparation and performance study of insensitive superfine spherical ammonium perchlorate based on air-flow crushing method[D]. Nanjing University of Science and Technology, 2018.
- [9] Wu Y, An X, Yu A B. DEM simulation of cubical particle packing under mechanical vibration [J]. *Powder Technology*, 2017, 314: 89-101.
- [10] Tangri H, Guo Y, Curtis J S. Packing of cylindrical particles: DEM simulations and experimental measurements[J]. *Powder Technology*, 2017, 317: 72-82.
- [11] Li H, Li Y, Gao F, et al. CFD - DEM simulation of material motion in air-and-screen cleaning device [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2012, 88: 111-119.
- [12] Huang S, Su X, Qiu G. Transient numerical simulation for solid-liquid flow in a centrifugal pump by DEM-CFD coupling [J]. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 2015, 9(1): 411-418.
- [13] Zhao T, Utili S, Crosta G B. Rockslide and impulse wave modelling in the vajont reservoir by DEM-CFD analyses [J]. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 2016, 49(6): 2437-2456.
- [14] Wang C J, Zheng Y, Liu K. Research on metamorphic vibration casting process based on EDEM-FLUENT coupling [J]. *Key Engineering Materials*, 2018, 764: 361-369.
- [15] 余学闯, 谌炎辉, 谢国进. 基于 EDEM 的不同颗粒粒径对物料安息角的影响研究 [J]. *机械研究与应用*, 2017, 30(6): 7-11.
- YU Xue-chuang, CHEN Yan-hui, XIE Guo-jin. Research on influences of the particle size on the reposed angle based on EDEM [J]. *Mechanical Research and Application*, 2017, 30(6): 7-11.
- [16] 王猛, 韩刚. 散状物料流动特性测定理论与数值模拟 [J]. *太原科技大学学报*, 2017, 38(2): 162-166.
- WANG Meng, HAN Gang. Theoretical study and numerical simulation of the measurement of the flow characteristics of bulk materials [J]. *Journal of Taiyuan University of Science and Technology*, 2017, 38(2): 162-166.
- [17] 刘万锋, 徐武彬, 李冰, 等. 滚动摩擦系数的测定及 EDEM 仿真分析 [J]. *机械设计与制造*, 2018(9): 132-135.
- LIU Wan-feng, XU Wu-bin, LI Bing, et al. Measurement and simulation of rolling friction coefficient [J]. *Mechanical Design and Manufacturing*, 2018(9): 132-135.
- [18] 王建, 赵亚风, 乔晓林, 等. 复合固体推进剂中固体填料的安息角测试与仿真 [J]. *化工进展*, 2020(增刊 2): 312-318.
- WANG Jian, ZHAO Ya-feng, QIAO Xiao-lin, et al. Measurement and simulation of the angle of repose of solid filler in composite solid propellant [J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2020(Suppl.2): 312-318.
- [19] 耿孝正. 双螺杆挤出机及其应用 [M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2003: 69-73.
- GENG Xiao-zheng. Twin screw extruder and its application [M]. Beijing: China Light Industry Press, 2003: 69-73.
- [20] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D. Surface energy and the contact of elastic solids [J]. *Proceedings of the Royal Society*, 1971, 324(1558): 301-313.

DEM-CFD Simulation of Twin Screw Extrusion Process of Composite Solid Propellant

WANG Jian¹, LIU Hao¹, ZHAO Ya-feng², QIAO Xiao-lin³, LI Xing-gang³, ZHAO Hui³

(1. Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China; 2. Beijing Institute of Aerospace Testing Technology, Beijing 100074, China; 3. Xi'an Aerospace Chemical Propulsion Co., Ltd, Xi'an 710025, China)

Abstract: Composite solid propellant contains more solid particles, so it is difficult to accurately simulate the extrusion process of the propellant in twin-screw extruder with traditional finite element analysis method. Whereas, the coupling of discrete element method (DEM) and computational fluid dynamics (CFD) is an effective method for simulation the production process of composite solid propellant, but it is very difficult to implement. In this paper, based on the calibrated contact model parameters, the simulation of solid particles in solid propellant with aluminum powder and ammonium perchlorate as main components in twin-screw extrusion process was realized with DEM, and then the DEM-CFD coupling calculation of the solid propellant solid particles and the liquid phase was realized. The results show that the transportation of solid propellant particles in twin-screw calculated by DEM is consistent with the experimental law. Comparing the results between DEM-CFD coupled simulation and DEM for solid particles, it can be seen that the fluidity of materials was significantly improved by adding the liquid phase. The filling rate of materials in the screw conveying section increases from 20% to 40%, and the average conveying speed of solid particles increases by 150%, but the stress of screw does not change much.

Key words: composite solid propellant; twin screw extrusion; discrete element method; computational fluid dynamics; coupling simulation

CLC number: TJ55; V512⁺.4

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2021102

(责编: 王艳秀)