

# 颗粒介质在类固-液相变过程中的时空参数特性

季顺迎 Hayley H Shen

(大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116023; Department of Civil and Environmental Engineering, Clarkson University, Potsdam, NY 13699-5710, USA. E-mail: jisy@dlut.edu.cn)

**摘要** 颗粒介质的类固-液相变过程除受材料性质影响外, 还与其运动速率和密集度有密切关系, 而接触时间数和配位数是表征该相变过程中颗粒间相互作用的重要时间和空间参量. 本文采用三维离散元方法对不同剪切速率和密集度下颗粒介质的动力学行为进行了数值模拟, 确定了颗粒材料在类固-液相变过程中接触时间数和配位数的参数特性和演化过程, 并结合宏观应力的分布特性, 进一步确定了颗粒介质在液态和固态相互转化中的动力学机理, 讨论了颗粒介质在由快速流动向慢速、准静态转化的相变过程. 通过对颗粒单元相互作用的细观数值模拟, 获取了颗粒介质在宏观上的动力学行为, 为研究其在不同相态下的本构模型提供了依据.

**关键词** 颗粒流体动力学 类固-液相变 配位数 接触时间数 宏观应力

颗粒材料广泛存在于日常生活、地球物理、交通运输、工业过程和生命科学等诸多领域. 这些颗粒材料可表现为液态的流体或坚实的固体, 并在一定条件下发生类固-液转化<sup>[1,2]</sup>. 例如, 细沙可从手指间流下并随风飞扬, 当它飞落到沙滩上时又可承起人体的重量; 河中的浮块可顺流而下, 当发生堆积时又可形成坚实的冰坝. 由于颗粒介质的固-液相变过程是一种非平衡态的动力学行为, 因此常称作类固-液相变. 颗粒介质的不同表现形式, 以及在宏观上的连续和非连续分布特性正是目前颗粒流体动力学研究中的一个重要内容. 人们也一直在通过物理实验、理论分析和数值方法等不同途径研究颗粒介质的类固-液相变特征, 并试图在宏观上建立一个用于描述不同颗粒材料的连续介质本构模型<sup>[3~5]</sup>.

颗粒介质的宏观动力学特性与其内部单个颗粒间在细观尺度(颗粒大小尺度)下的作用过程及其统计规律是密切相关的. 大量颗粒体在不同密集度和运动速率下发生碰撞, 并构成形态各异、数量不等的颗粒群, 且其内部颗粒间相互接触所形成的作用链是表征颗粒介质碰撞频率和强度的重要指标<sup>[6]</sup>. 颗粒作用过程中的配位数和接触时间数又分别是空间和时间角度定量描述作用链特征的重要参量. 当均匀颗粒密实静止排列时, 其最大密集度为 74.05%, 配位数为最大值 12, 颗粒间的接触时间也可无限延长, 此时颗粒介质表现为固体力学行为; 随着密集度的降低和运动速率的增快, 颗粒间的作用链开始断开, 并表现为配位数和接触时间的降低; 当密集度降

低到一定程度并随剪切速率的增加, 颗粒间作用链完全断开, 配位数和接触时间分别逼近于 0 和二元接触时间  $T_{bc}$ , 此时颗粒介质表现为流体力学行为. 在以上类固-液相变过程中, 颗粒介质的应力状态也分别在不同的相态下因颗粒接触时间数、配位数的不同有很大差异.

在颗粒流的实验研究中, 坡面流、剪切室、旋转筒和管道流等物理实验均通过对颗粒介质的速度分布、剪切速率和平均应力等宏观参量的直接或间接测量验证了颗粒介质的类固-液转化过程<sup>[7~10]</sup>. 然而, 由于颗粒间的接触时间数、配位数和碰撞作用力等细观参量不易测量, 以及受实验条件、测量技术的限制, 目前还不能通过实验途径全面地获得颗粒材料在不同密集度和剪切速率下的相变过程. 因此, 基于离散元的数值计算方法被广泛地应用于颗粒流体动力学的研究中<sup>[11~13]</sup>. 本研究采用三维离散元方法对具有周期边界的剪切颗粒流在不同密集度和剪切速率下的动力过程进行数值模拟, 并由此确定颗粒介质在类固-液相变过程中接触时间数和配位数两个时空参量的分布特性, 并在此基础上对颗粒介质在相变过程中的宏观相态特性进行讨论.

## 1 颗粒流体动力学的计算模型

颗粒介质的离散元方法自 20 世纪 70 年代建立以来, 目前发展已十分成熟, 其主要包括颗粒的初始排列和相邻关系、颗粒间的作用力模型、颗粒的运动方程、细观和宏观应力(应变)以及颗粒系统的能量方程等<sup>[14]</sup>. 相对于颗粒流计算的动理学和塑性模型, 离散

元方法以单个颗粒为研究对象能够详细地模拟颗粒介质在快速、慢速和准静态等不同相态下的动力学行为。这里主要对本文采用的作用力模型，以及表征颗粒介质类固-液相变过程的宏观应力、接触时间数和配位数进行简要说明。

### 1.1 颗粒碰撞的作用力模型

颗粒介质的材料性质以及相互间的物理过程是决定其碰撞中力学模型的主要因素。在干颗粒介质中，单元间的作用力一般采用满足 Mohr-Coulomb 摩擦定律的黏弹性力学模型，而该黏弹性模型又可分为线性和非线性两类。从理论上讲，Hertz-Mindlin 非线性力学模型更符合颗粒碰撞的物理过程，但在研究颗粒介质的动力学特性及其类固-液相变过程的数值计算中，线黏弹性模型应用更加方便，其计算结果也能理想地反映颗粒介质的动力学行为<sup>[4,11,13]</sup>。

本研究采用的黏弹性作用力模型如图 1 所示。这里法向和切向刚度、阻尼系数有如下关系： $K_s = \alpha K_n$ ， $C_s = \beta C_n$ ，其中  $\alpha = 0.8$  或  $1.0$ ， $\beta = 0.0$ <sup>[4,11,13]</sup>。法向阻尼系数按下式计算

$$C_n = \zeta_n \sqrt{2MK_n}; \quad (1)$$

$$\zeta_n = \frac{-\ln e}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e}}. \quad (2)$$

式中  $\zeta_n$  为无量纲法向阻尼系数， $e$  为回弹系数， $M$  为两颗粒单元的平均质量。

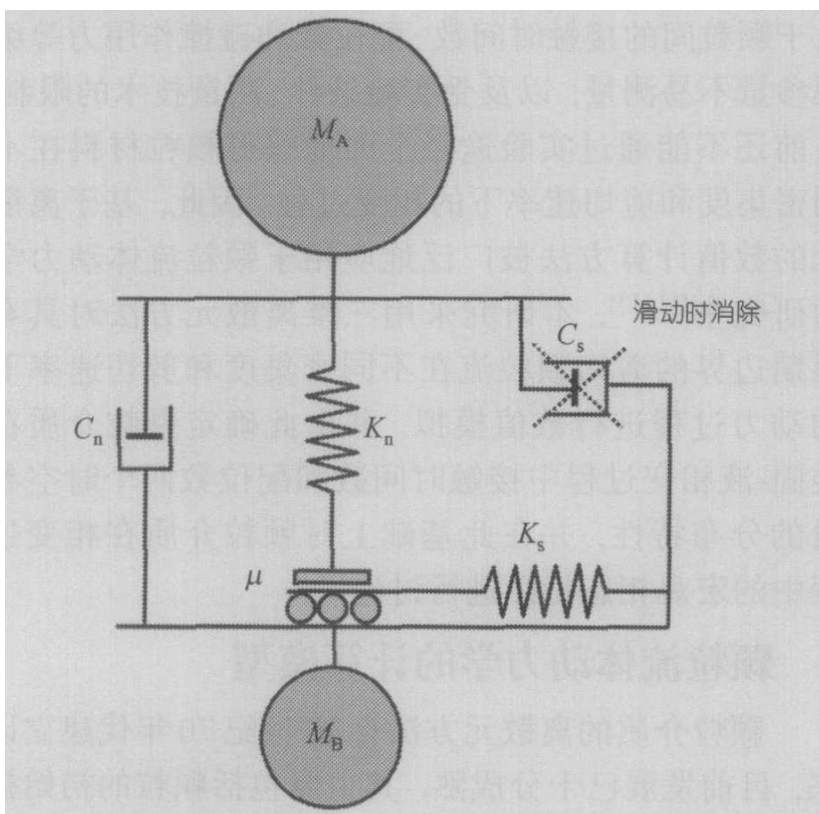


图 1 颗粒接触的力学模型

$M_A$  和  $M_B$  分别为两个球单元的质量， $K_n$  和  $K_s$  分别为法向和切向刚度系数， $C_n$  和  $C_s$  分别为法向和切向阻尼系数， $\mu$  为摩擦系数

线黏弹性作用力模型的一个优点是方便地定义两个颗粒单元碰撞的二元接触时间，即

$$T_{bc} = \frac{\pi}{\sqrt{\frac{2K_n}{M}(1-\zeta_n^2)}}. \quad (3)$$

$T_{bc}$  为二元接触时间，即两个球单元从碰撞到分离的接触时间。在线黏弹性模型中，它是一个与颗粒大小和材料性质相关的常数，并可作为描述颗粒流动特性的重要参数。在颗粒流数值模拟中，一般取时间步长为二元接触时间的  $1/50$  以对颗粒接触过程进行计算。

### 1.2 颗粒介质的宏观应力

通过对颗粒单元在细观尺度下的接触计算，可确定各单元间的作用力及其脉动速度，并由此计算颗粒介质的宏观应力。宏观应力主要由接触应力和动力应力两部分构成，即

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^c + \sigma_{ij}^k. \quad (4)$$

这里， $\sigma_{ij}$  为颗粒介质内的宏观应力， $\sigma_{ij}^c$  和  $\sigma_{ij}^k$  分别为接触应力和动力应力，其可按下式计算：

$$\sigma_{ij}^c = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_k} (r_i^{lk} F_j^{kl}); \quad (5)$$

$$\sigma_{ij}^k = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N M_k (u_i'^k u_j'^k). \quad (6)$$

式中， $V$  为计算域体积， $N$  为颗粒单元数， $N_k$  为与单元  $k$  接触的颗粒数， $M_k$  为单元  $k$  的质量， $r_i^{lk}$  为颗粒  $l$  质心到颗粒  $k$  质心的位置张量， $F_j^{kl}$  为颗粒  $l$  对颗粒  $k$  的作用力张量， $u_i'^k$  和  $u_j'^k$  为颗粒  $k$  的脉动速度张量。为研究颗粒介质在类固-液相变过程中密集度和剪切速率的影响，本研究采用无量纲化的宏观应力  $\sigma_{ij}^* = \sigma_{ij} / \rho D^2 \dot{\gamma}^2$  和切变速率  $B = \dot{\gamma} \sqrt{\rho D^3 / K_n}$ ，这里  $\dot{\gamma}$  为切变速率， $D$  为颗粒直径， $\rho$  为颗粒密度。

### 1.3 接触时间数和配位数

接触时间数是指颗粒介质的平均接触时间与二元接触时间  $T_{bc}$  的比值，即

$$m = \frac{\bar{T}_c}{T_{bc}}. \quad (7)$$

式中  $m$  为接触时间数， $\bar{T}_c$  为颗粒介质的平均接触时间。由于  $T_{bc}$  是一个与颗粒材料性质相关的常数，因此接触时间数实际上反应的就是颗粒平均接触时间。在颗粒流体动力学中，配位数指每个颗粒与其他颗

粒接触的平均数目, 可按下式计算:

$$n = \frac{\sum_{k=1}^N n_c^k}{N} \quad (8)$$

式中,  $n$  为配位数,  $n_c^k$  为颗粒  $k$  与其周围颗粒的接触点个数.

## 2 颗粒介质相变过程的数值模拟

为研究颗粒介质在不同密集度和剪切率下的相变过程, 本文采用线黏弹性作用力模型和周期边界条件, 对均质颗粒的动力过程进行离散元计算. 通过对平均应力、接触时间数和配位数的讨论, 进一步分析颗粒介质在类固-液相变过程中的时空参数特性.

### 2.1 颗粒介质初始排列、计算域和边界条件

在颗粒流体动力学的离散元模拟中, 颗粒的初始排列可分为规则排列和随机排列. 通过规则排列可获得均一颗粒的密实排列状态; 对于非均一颗粒, 特别是粒径差异较大的颗粒介质, 随机排列则有更佳的排列效果. 虽然本研究采用的是均一颗粒介质, 但为确定颗粒介质处于动态平衡状态下的随机统计特性, 这里对颗粒初始位置进行随机排列以使颗粒介质更快地进入动态平衡状态. 另外, 为解决高密度下颗粒随机排列的困难, 这里首先取用较小的颗粒直径以让其更好地在计算域内随机排列, 然后再让其生长到所需粒径. 图 2 给出了一组密集度为  $C = 0.6$  时的均匀颗粒的规则排列和非均均颗粒的随机-生长初始排列.

为对颗粒介质在不同密集度和剪切速率下的流动过程进行连续模拟, 本研究采用具有周期边界条件的颗粒剪切流. 周期边界条件类似于剪切室实验中的颗粒运动特性, 并广泛地应用于颗粒流体动力学研究中<sup>[4,11,13]</sup>. 颗粒单元在  $y$  方向上的剪切速率  $\gamma = U/b$ , 而在  $x$  和  $z$  方向作随机波动. 这里  $U$  为上下边界处的相对速度. 当颗粒从计算域的任一方向流出时, 则会从其另一侧流入以保障颗粒介质的总体质量守恒.

在进行颗粒介质剪切流计算中, 如果计算域太小, 边界约束将会对计算结果有很大影响. 由于目前离散元方法存在计算效率太低的缺点, 增大计算域将会成倍地增加计算量<sup>[15]</sup>. 因此, 确定一个合理的计算域大小是必要的. 计算结果表明, 当计算区域在  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向的尺度  $a \times b \times c = 10D \times 10D \times 10D$  时, 即

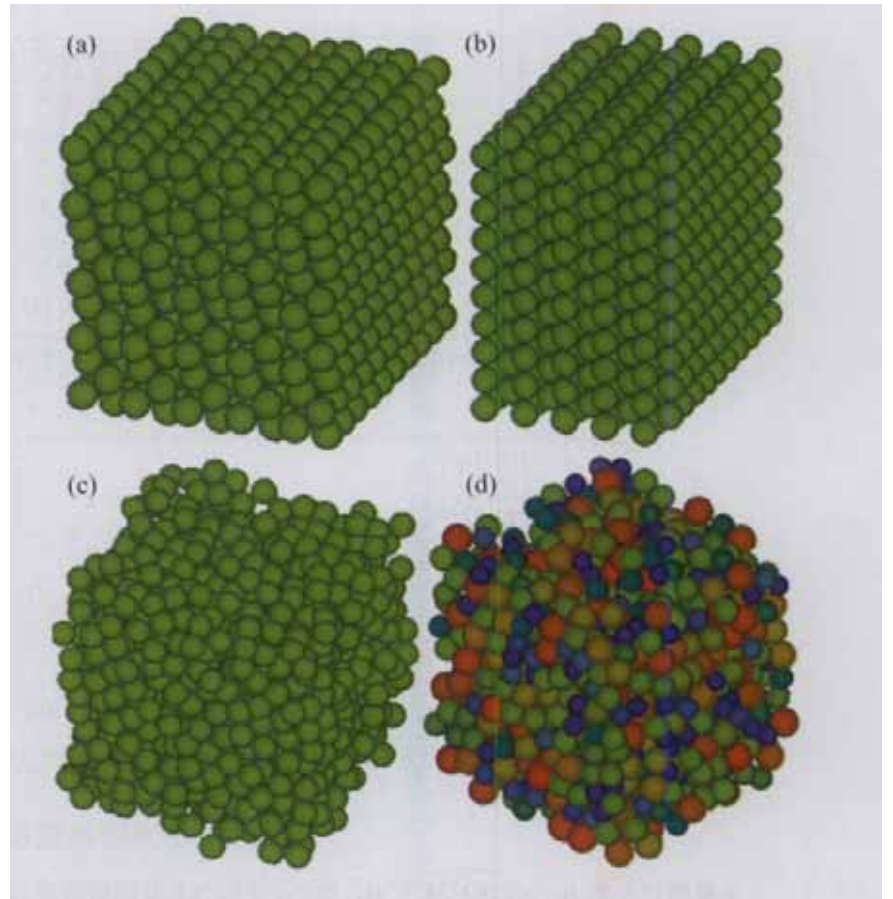


图 2 颗粒介质的初始排列

(a) 六面体闭合排列 (HCP); (b) 面心立方排列(FCC); (c) 均一颗粒的随机排列; (d) 非均一颗粒的随机排列. (a)和(b)中, 密集度  $C = 0.6$ , 颗粒数目为  $10 \times 10 \times 10$ ; (c)和(d)中, 密集度  $C = 0.6$ , 计算域为  $10\bar{D} \times 10\bar{D} \times 10\bar{D}$ , 这里  $\bar{D}$  为平均颗粒直径

可消除边界影响.

采用以上边界条件、初始条件和计算区域大小, 本研究对颗粒介质的剪切流动进行了离散元计算, 采用的主要计算参数列于表 1 中, 其中各计算参数均采用均一化物理单位, 以助于计算结果的无量纲化分析.

表 1 颗粒剪切流模拟中的计算参数

定义	数值	定义	数值
颗粒直径	$D = 1.0$	回弹系数	$e = 0.7$
密度	$\rho = 1.0$	摩擦系数	$\mu = 0.5$

### 2.2 宏观应力

在不同的密集度和剪切速率下, 对颗粒介质的动力过程进行了数值模拟, 其无量纲宏观应力张量  $\sigma_{ij}^* = \sigma_{ij} / \rho D^2 \gamma^2$  中  $x$ - $y$  平面上的剪应力  $\sigma_{12}^*$  和  $y$  方向上的正应力  $\sigma_{22}^*$  如图 3 所示. 其他应力分量  $\sigma_{11}^*$  和  $\sigma_{33}^*$  均有与  $\sigma_{12}^*$ ,  $\sigma_{22}^*$  相同的分布特性. 如果根据流动特点将颗粒流体分为快速、慢速和准静态流动 3 种运动状态, 则由以上计算结果可以得出颗粒介质的流动状态特性, 及其类固-液相变过程.



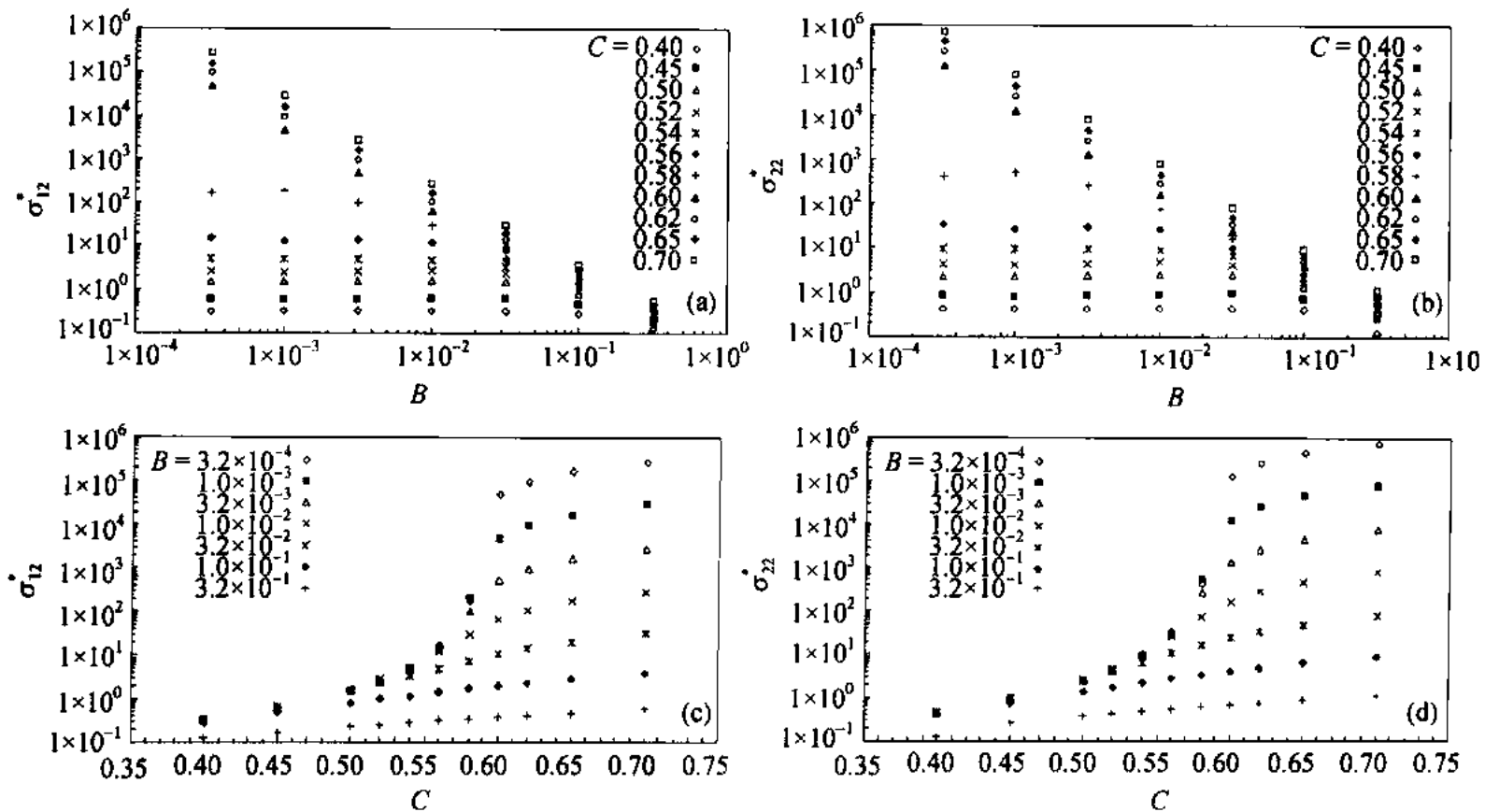


图 3 不同密集度和切变速率下的宏观应力

无量纲切变速率  $B = \gamma \sqrt{\rho D^3 / K_n}$ ,  $\sigma_{12}^*$  和  $\sigma_{22}^*$  分别为无量纲剪切应力和正应力. (a)  $\sigma_{12}^*$  与  $B$  的对应关系; (b)  $\sigma_{22}^*$  与  $B$  的对应关系; (c)  $\sigma_{12}^*$  与密集度  $C$  的对应关系; (d)  $\sigma_{22}^*$  与密集度  $C$  的对应关系

从图 3(a)和(b)中可以发现, 在低密集度下( $C = 0.40$ ), 无量纲宏观应力  $\sigma_{ij}^* (= \sigma_{ij} / \rho D^2 \gamma^2)$  是与无量纲切变速率  $B = \gamma \sqrt{\rho D^3 / K_n}$  无关的常数, 也就是说宏观应力  $\sigma_{ij}$  与材料刚度系数  $K_n$  无关, 而与其切变速率  $\gamma$  的平方成正比, 此时颗粒介质呈现出快速流动状态, 并表现出流体力学行为; 在高密集度下( $C > 0.60$ ),  $\sigma_{ij}^*$  和  $B$  有指数斜率为  $-2$  的线性关系, 这表明宏观应力  $\sigma_{ij}$  与切变速率  $\gamma$  无关, 而与刚度系数  $K_n$  呈线性关系, 此时颗粒介质呈现准静态流动状态, 并表现出一定的固体力学行为; 而在中密集度下, 即  $C = 0.58$  附近,  $\sigma_{ij}^*$  在低切变速率下与  $B$  无关, 而在高切变速率下与  $B$  呈指数线性关系, 说明颗粒介质在随  $B$  由高向低变化过程中有一个由准静态流动向快速流的转化过程, 即颗粒介质也有一个由固体向流体的相变过程.

为进一步分析密集度对宏观应力的影响, 将横坐标设为密集度  $C$ , 结果如图 3(c)~(d)所示. 从中可以看出, 在快切变速率下,  $\sigma_{ij}^*$  随密集度  $C$  的增加而呈微小增长; 随着切变速率  $B$  的降低, 密集度对  $\sigma_{ij}^*$  的影响愈加显著. 特别是在密集度  $C = 0.58$  附近,  $\sigma_{ij}^*$  随密集度的增加有一个飞跃. 由此可见, 颗粒介质在高密集度下多呈准静态流动, 在低密集度下呈快速流动, 而只有在中密集度下才会因切变速率的不同而表现

出不同的流动状态.

Shen 等人<sup>[11]</sup>和 Campbell<sup>[13]</sup>分别采用二维和三维离散元方法也得出了相近的宏观应力分布特性, 并由此讨论了颗粒介质在由惯性碰撞控制的快速流动向弹性接触主导的准静态流动的相变过程. 下面根据颗粒介质在不同流动状态下的接触时间数和配位数进一步讨论颗粒流在类固-液转化过程中的参数特性.

### 2.3 接触时间数

接触时间数表述的是颗粒介质在流动过程中的平均接触时间, 它表征作用链由形成到断开的持续时间. 当两个颗粒作用时, 其接触时间即为二元接触时间  $T_{bc}$ , 即接触时间数  $m = 1$ ; 当多个颗粒相互作用时, 任两个颗粒的接触时间会受其他颗粒的约束影响而延长, 从而使平均接触时间数  $m > 1$ . 如果将接触时间数减去 1 以消除其二元接触时间部分, 即引入净接触时间数  $m'(m-1)$  来描述颗粒的接触时间, 则可更理想地表征因多颗粒相互作用而引起的接触时间延长效果.

在不同密集度和切变速率下, 颗粒介质内的平均接触时间数  $m$  和净接触时间数  $m'$  的计算结果如图 4 所示. 由图 4(a)和(b)可以看出, 在低密集度且慢切变

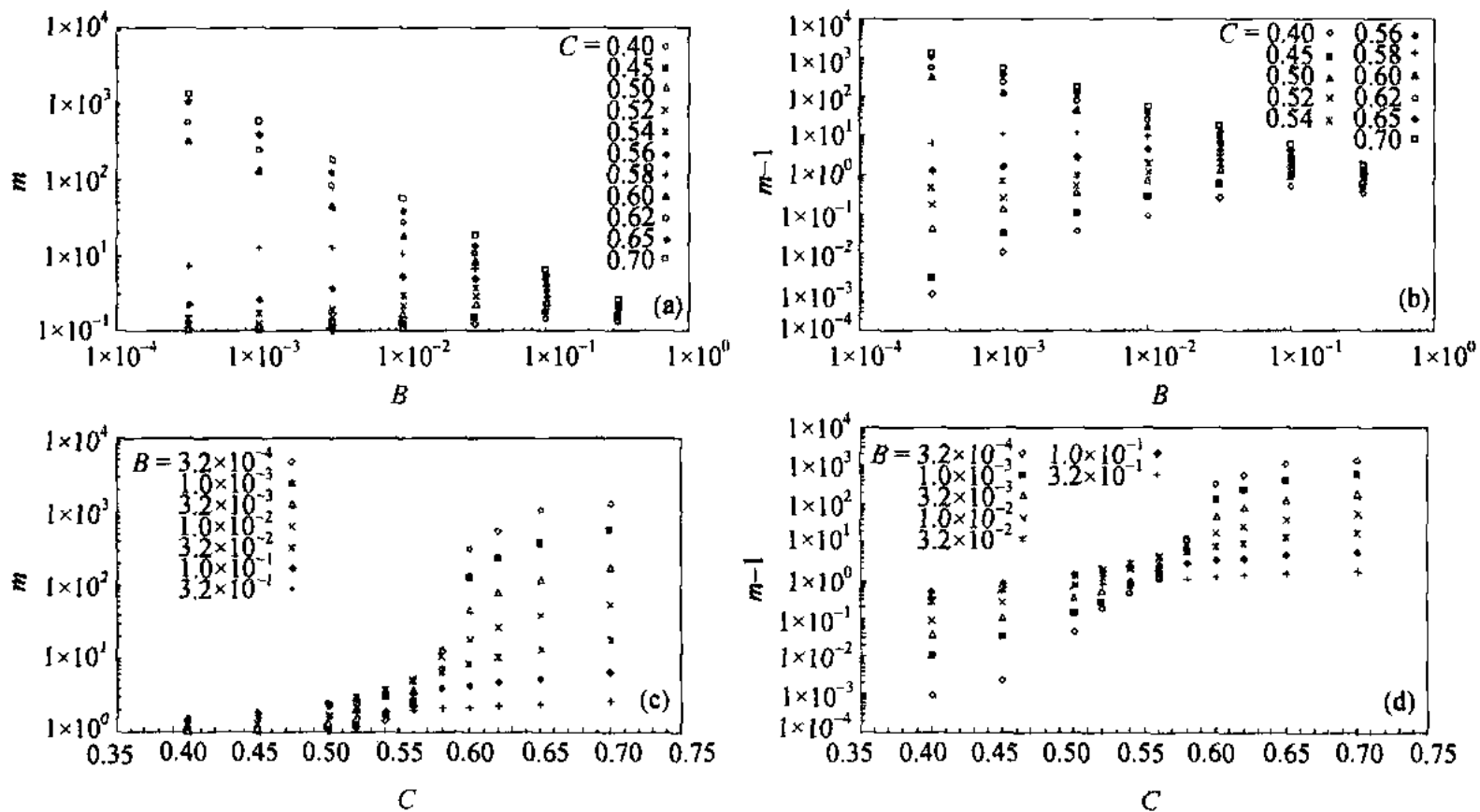


图 4 不同密集度和切变速率下的接触时间数

(a) 接触时间数  $m$  与无量纲切变速率  $B$  的对应关系; (b) 净接触时间数  $m'(m-1)$  与  $B$  的对应关系; (c) 接触时间数  $m$  与密集度  $C$  的对应关系; (d) 净接触时间数  $m'$  与  $C$  的对应关系

速率下, 净接触时间数趋近于 0, 即  $m' \rightarrow 0$ , 且接触时间数随着切变速率的增快而增大, 并有  $m' \rightarrow 1$ ; 在高密集度的慢切变速率下, 接触时间数最大, 可在  $10^3$  以上, 并随着切变速率的增快而下降, 也有  $m' \rightarrow 1$ . 由此可见, 在高密集度的慢速流状态下, 接触时间持续较长, 颗粒间的作用链也因此不易断开, 颗粒介质也更多地表现出准静态流动特点; 在低密集度的慢速流状态下, 颗粒间多表现为二元接触碰撞, 作用链因受外界约束较小而迅速断开; 在快速切变条件下, 颗粒间的接触时间与密集度相关性较小, 颗粒更多地处于一种无序的高频碰撞状态.

由图 4(c)和(d)还可发现一个有趣的现象, 即接触时间数在不同切变速率下都有随密集度  $C$  增高而增大的趋势, 但由于它们增长速率和幅度的差异, 在  $C = 0.56$  附近形成一个交叉点, 其净接触时间数  $m' = 1$ , 即接触时间数  $m = 2$ . 当密集度  $C < 0.56$  时, 切变速率越快, 颗粒接触时间则越长; 当密集度  $C > 0.56$  时, 切变速率越慢, 颗粒接触时间则越长. 由此可见, 密集度是影响颗粒作用链形成、断开进而影响颗粒间动力传递过程和形式的主要因素. 由此, 可以引入该特征密集度  $C^* = 0.56$  作为判别颗粒介质流动状态的一个特征值, 此时接触时间数  $m$  不受切变速率的影响而保持一个特征值  $m^* = 2.0$ . 当密集度  $C > C^*$  时,

接触时间数  $m > m^*$ , 颗粒介质更多地表现为准静态流动; 当  $C < C^*$  时, 接触时间数  $m < m^*$ , 颗粒介质开始表现为快速流动; 而在  $C = 0.56$  附近, 颗粒介质在不同切变速率下发生颗粒流的流动状态转化, 此时接触时间数  $m \rightarrow m^*$ . 由此可见, 接触时间数的特征值  $m^*$  可作为判别颗粒介质流动状态的一个参数.

### 2.4 配位数

颗粒流体动力学中的配位数表征的是每个颗粒单元与其周围颗粒的平均接触数, 它在空间上描述作用链的分布特性, 并与宏观应力和接触时间数有密切关系. 在不同密集度和切变速率下计算得到的配位数如图 5 所示.

从图 5(a)中可以看出, 配位数在低密集度下随切变速率的增加而迅速升高, 而在高密集度下则随切变速率的增加而降低. 由此可以推测出, 在更低密集度下的慢速切变下, 配位数将趋于零, 此时颗粒介质大多处于自由漂移状态; 在更高密集度下的慢速切变下, 配位数将会进一步升高, 颗粒间接触地更为紧密, 并表现出准静态流动特性; 在快速切变条件下, 配位数受密集度影响相对较小. 从图 5(b)中还可以看出, 当切变速率保持不变时, 配位数随密集度的增加而增大, 但其增长幅度在低切变速率下明显较大.

在不同的密集度和切变速率下, 配位数也表现

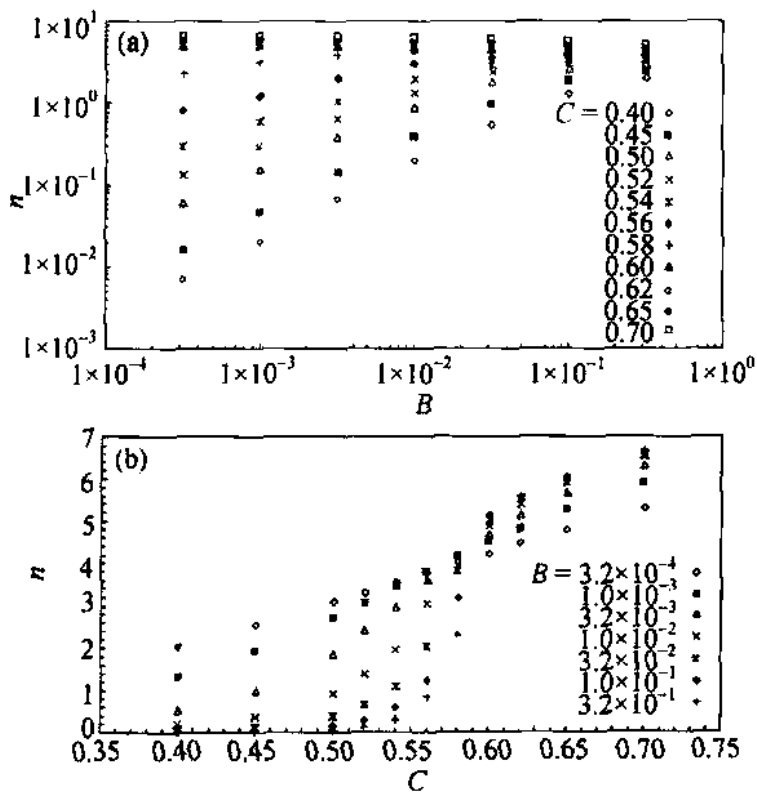


图5 不同密集度和切变速率下的配位数  
(a) 配位数  $n$  与无量纲切变速率  $B$  的对应关系; (b) 配位数  $n$  与密集度  $C$  的对应关系

出类似于接触时间数的分布特性, 即在高密集度下, 配位数随切变速率的增加而降低; 在低密集度下, 配位数随切变速率的增加而升高; 在中密集度 ( $C = 0.59$ ) 下, 配位数基本不受切变速率的影响, 并保持为一个定值  $n^* = 4.0$ . Ball 和 Blumenfeld<sup>[16]</sup> 从颗粒系统的动力学平衡机制上讨论了配位数的理论值, 并指出非光滑规则颗粒处于稳定状态的临界配位数为 4, 光滑颗粒则为 6. 在本文计算中颗粒介质为非光滑, 其摩擦系数  $\mu = 0.5$ , 计算得到的特征配位数为 4. 这与临界配位数的理论值是一致的. 由此可以将该特征配位数  $n^*$  引入到颗粒流的相变状态判别中. 当  $n < n^*$  时, 颗粒介质密集度较低且呈快速流动, 并表现为流体力学行为; 当  $n > n^*$  时, 颗粒介质密集度较高且呈准静态流动, 并表现为固体力学行为; 而当配位数在其特征值  $n^*$  附近时, 即颗粒介质在中密集度  $C^* = 0.59$  附近的慢速流动区发生类固-液相变过程.

### 3 接触时间数和配位数表征的颗粒介质相变过程

研究颗粒介质在类固-液相变转变区的本构行为首先要确定颗粒介质的相变过程及其在这一过程中所表现出来的宏观和细观力学特性. 在颗粒介质由快速向慢速、准静态流动的转变过程中, 一般通过宏观应力与剪切速率的相关性来识别其所处的相

态<sup>[4,11,13,17,18]</sup>. 当宏观应力与应变率的平方呈线性增长时, 表现为快速流动, 可通过引入颗粒温度的概念采用颗粒动力学模型进行模拟; 当宏观应力与应变率的相关性降低, 甚至完全不相关时, 颗粒介质呈现为准静态流动, 则可采用塑性力学模型进行研究; 但颗粒介质在由快速流向准静态转变过程中的力学模型目前还尚未得到很好地解决<sup>[1,9,13,17,18]</sup>.

基于颗粒流的二维离散元数值模拟结果, Babic 等人<sup>[17]</sup> 首先定性地提出了颗粒介质在不同应变率和密集度下由快速向慢速、准静态转化的相变过程, 并讨论了颗粒流在相变转化区的特征(如图 6 所示, 其中无量纲剪切速率  $B^* = \gamma \sqrt{M/K_n}$ ). 在颗粒介质由快速流向慢速流转化的相变 A 区, 颗粒单元由快速流动中的二元惯性碰撞向多个单元共同作用演变, 并初步形成作用链, 但较易断开; 在由慢速流向准静态转化的相变 B 区, 颗粒介质较稳定地形成团聚, 且作用链比较稳定不易断开. 最近, Campbell<sup>[13]</sup> 基于三维离散元的计算结果, 引入无量纲参量  $K_n / \rho D^3 \gamma^2$  也得到了与图 6 相近的相变特性, 但其并未将相变区细分为两个区讨论. 在相关的物理实验中, 颗粒流在一定条件下会发生稀疏流-密集态和密集态-堵塞的转变, 并类似于图 6 所示的快速-慢速-准静态的相变过程<sup>[10,19]</sup>.

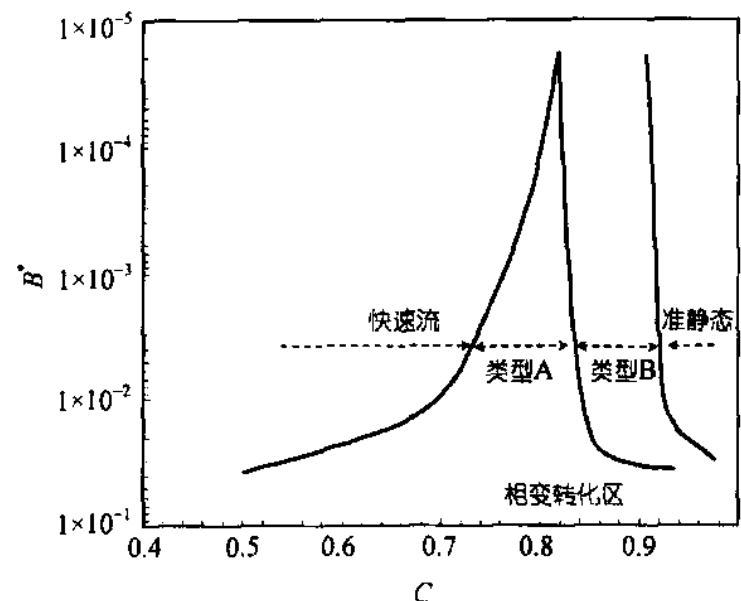


图6 二维颗粒介质在快速流向准静态流转化的相变过程<sup>[17]</sup>

在颗粒介质的类固-液相变过程中, 接触时间数和配位数在描述颗粒单元在作用链的形成和断开、颗粒的聚团和分离方面更为直观具体. 为进一步分析颗粒介质的相变过程, 这里将上节不同密集度  $C$  和

无量纲剪切率  $B$  下计算的净接触时间数  $m'$  ( $m-1$ ) 和配位数  $n$  的三维及二维等值线绘于图 7 和 8 中. 它们在分别反应出与图 4 和 5 中不同密集度和剪切率变化的基本特征外, 还可清晰地显示出颗粒介质由快速向慢速、准静态转化的发展过程, 且与图 6 所示的相变趋势非常相似. 在低密集度条件下接触时间数和配位数分别小于其特征值  $m^* = 2.0$  (即  $m' = 1.0$ ) 和  $n^* = 4.0$ , 并随剪切率的增加而减小, 而在高密集度下它们则分别大于  $m^*$  和  $n^*$ , 并随剪切率的增加而增加. 这是由于在低密集度快速流动下颗粒间的接触频率较低, 接触时间较短, 聚团单元数目也较少, 但随着剪切速率的增加, 颗粒运动变得较为剧烈, 并由此加剧了颗粒间的撞击频率并促进了作用链的形成; 在

高密集度的准静态条件下, 颗粒间的作用链较为稳定, 但剪切率的增加会打断这些作用链, 使聚团颗粒分离, 进而使接触时间数和配位数降低; 在中密集度下, 颗粒流动及其相互作用则恰好处于一种动态平衡状态. 剪切速率的增加在加剧颗粒运动形成新的作用链的同时, 又促使一部分作用链断开, 从而颗粒介质的平均接触时间数和配位数保持稳定.

从图 4 和 5 中可以得到在密集度  $C = 0.56$  和  $0.59$  处, 分别有特征接触时间数  $m^* = 2.0$  和特征配位数  $n^* = 4.0$ , 它们均可做为识别颗粒介质流动相态的重要参数. 考虑特征值  $m^*$  和  $n^*$  发生的密集度  $C^*$  的差异, 再从图 7 和 8 的净接触时间数和配位数的等值线分布及其与图 6 相变过程的对比可得出: 颗粒介质在

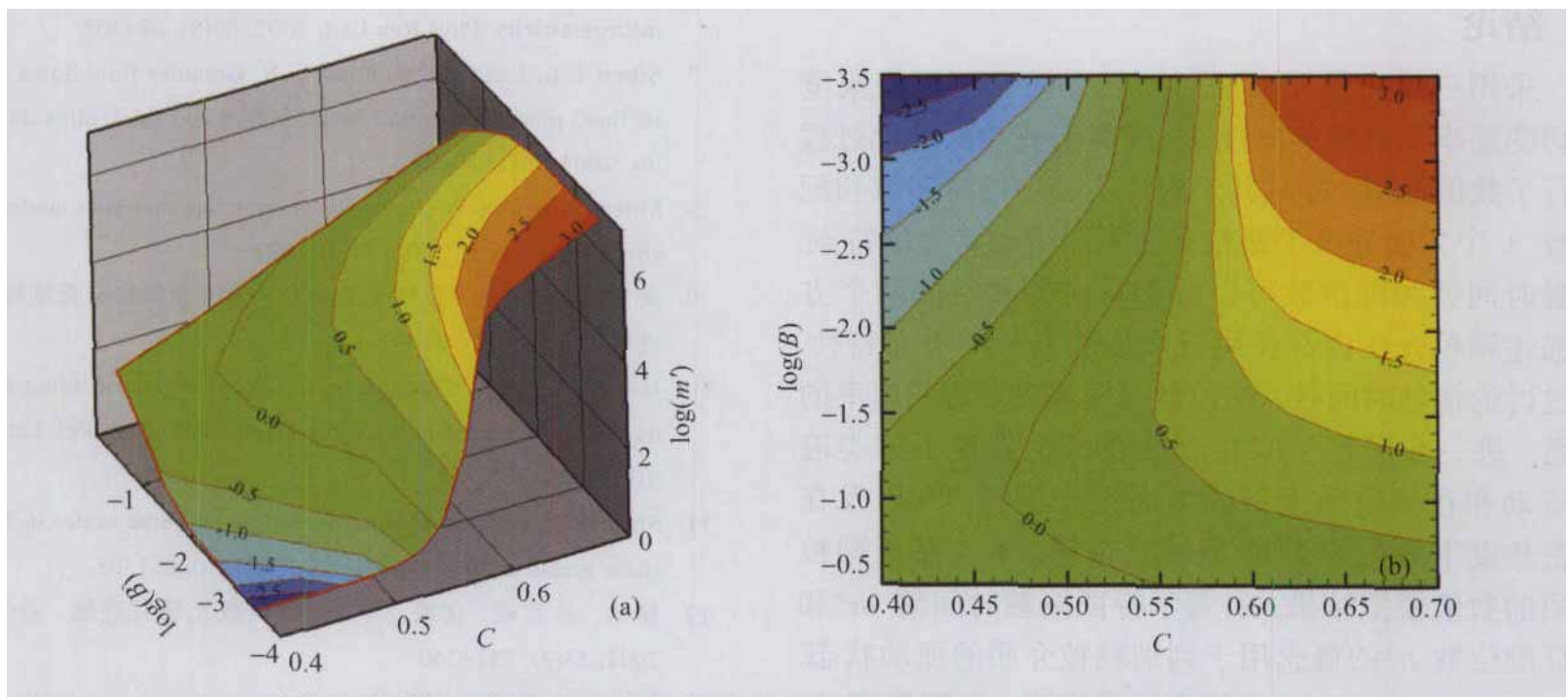


图 7 颗粒介质相变过程中的净接触时间数对数  $\log(m')$  的等值线分布

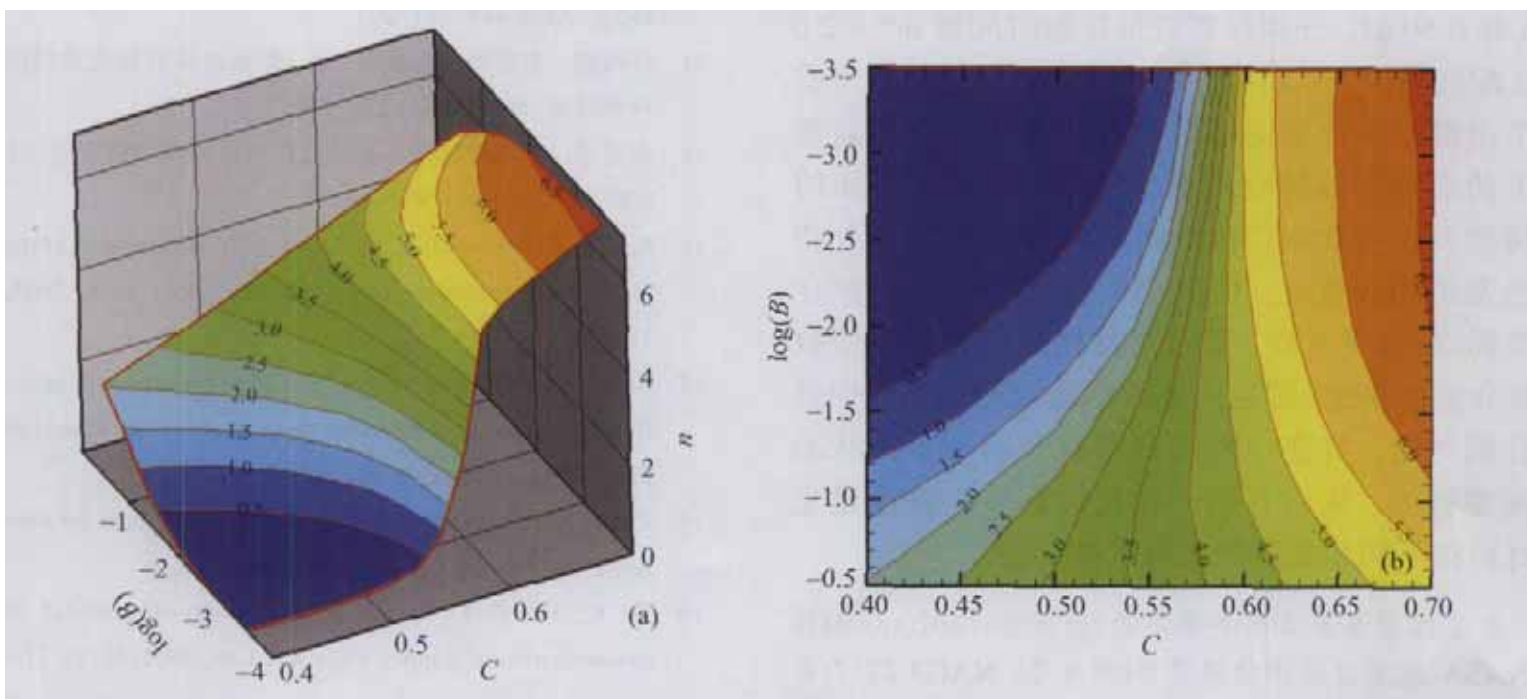


图 8 颗粒介质相变中配位数  $n$  的等值线分布



由快速向准静态的转变中有一个很明显的过渡区,即密集度  $C \in [0.56, 0.59]$  的慢速流动区. 在该过渡区内快速流、准静态流分别向慢速流的转化过程中,接触时间数和配位数均有一个向其特征值逼近的过程,且在低剪切率下的转化过程明显较快. 由此可见,不同密集度和剪切率下的应力状态(图 3)可确定颗粒介质的相态特性及其内部作用强度,接触时间数和配位数的分布状态(图 7 和 8)则可进一步从时间和空间角度描述颗粒介质在由快速流向慢速、准静态转化中作用链的存在方式和持续时间,从而更加全面地表述不同相态下颗粒介质内部的作用特性,为建立颗粒介质在慢速区的类固-液相变过程的本构模型提供更为充分的依据.

#### 4 结论

采用三维离散元方法对颗粒介质在不同密集度和切变速率下由快速向慢速、准静态流动的转化过程进行了数值模拟,并从其宏观应力、接触时间数和配位数 3 个方面分析了颗粒介质不同流动状态的特点. 接触时间数和配位数可以分别从时间和空间两个方面描述颗粒介质内部作用链产生和断开的分布特性. 通过讨论接触时间数、配位数与密集度、切变速率的关系,进一步验证了颗粒介质在低密集度下的类液态流动和在高密集度下的类固态行为特点,以及在中密集度下发生的类固-液转化过程. 本文基于颗粒介质的数值模拟结果,引入了特征接触时间数  $m^*$  和特征配位数  $n^*$  的概念用于判别颗粒介质的流动状态. 当  $\mu = 0.5$ ,  $e = 0.7$  时,本研究结果表明,在密集度  $C^* = 0.56$  和  $0.59$  时,分别存在特征接触时间数  $m^* = 2.0$  和特征配位数  $n^* = 4.0$ . 在该中密集度区,颗粒介质有一个由慢速流分别向低密集度下的快速流和高密集度下的准静态流转化的渐变过程. 当颗粒介质的材料特性发生变化时,接触时间数和配位数的分布特征会发生相应变化,但其仍然能够表征出颗粒介质的类固-液相变过程. 通过对接触时间数和配位数在颗粒介质由快速、慢速向准静态流动转变过程中分布特性的讨论,可进一步确定颗粒介质在不同状态下的流变行为,从而有助于在连续介质基础上建立颗粒材料在不同相态下的宏观本构模型.

致谢 本工作受国家自然科学基金(批准号: 40206004)和美国 NASA 微重力流体物理项目(批准号: NAG3-2717)资助.

#### 参 考 文 献

- Orpe A V, Khakhar D V. Solid-fluid transition in a granular shear flow. *Phys Rev Lett*, 2004, 93(6): 068001
- Metcalfe G, Tennakoon S G K, Kondic L, et al. Granular friction, Coulomb failure, and the fluid-solid transition for horizontally shaken granular materials. *Phys Rev E*, 2002, 65: 031302
- Hartley R R, Behringer R P. Logarithmic rate dependence of force networks in sheared granular materials. *Nature*, 2003, 421: 928~931
- Zhang D Z, Rauenzahn R M. Stress relaxation in dense and slow granular flows. *J Rheo*, 2000, 44(5): 1019~1041
- Miehe C, Dettmar J. A framework for micro-macro transitions in periodic particle aggregates of granular materials. *Comp Meth Appl Mech Engng*, 2004, 193: 225~256
- Goldenberg C, Goldhirsch I. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. *Phys Rev Lett*, 2002, 89(8): 084302
- Sibert L E, Landry J W, Grest G S. Granular flow down a rough inclined plane: Transition between thin and thick piles. *Phys Fluids*, 2003, 15(1): 1~10
- Mueggenburg N W. Behavior of granular materials under cyclic shear. *Phys Rev E*, 2005, 71: 031301
- 吴清松, 胡茂彬. 颗粒流的动力学模型和实验研究进展. *力学进展*, 2002, 32(2): 250~258
- Hou M, Chen W, Zhang T, et al. Global nature of dilute-to-dense transition of granular flows in a 2D channel. *Phys Rev Lett*, 2003, 91(20): 204301
- Shen H H, Sankaran B. Internal length and time scales in a simple shear granular flow. *Phys Rev E*, 2004, 70: 051308
- 徐泳, 孙其诚, 张凌, 等. 颗粒离散元研究进展. *力学进展*, 2003, 33(2): 251~260
- Campbell C. Granular shear flows at the elastic limit. *J Fluid Mech*, 2002, 465: 261~291
- 孙国刚, 李静海, 巩馥洲, 等. 颗粒流体两相流动的随机分析. *科学通报*, 2000, 45(3): 256~259
- 唐志平. 三维离散元方法及其在冲击力学中的应用. *中国科学, E 辑*, 2003, 33(11): 989~998
- Ball R C, Blumenfeld R. Stress field in granular systems: loop forces and potential formation. *Phys Rev Lett*, 2002, 88(11): 115505
- Babic M, Shen H H, Shen H T. The stress tensor in granular shear flows of uniform, deformable disks at high solids concentrations. *J Fluid Mech*, 1990, 219: 81~118
- Zhang D Z, Rauenzahn R M. A viscoelastic model for dense granular flows. *J Rheo*, 1997, 41(6): 1275~1298
- To K, Lai P Y, Pak H K. Jamming of granular flow in a two-dimensional hopper. *Phys Rev Lett*, 2001, 86(1): 71~74

(2005-03-30 收稿, 2005-09-23 接受)