

非均匀颗粒材料的类固 - 液相变行为及本构方程¹⁾

季顺迎²⁾

(大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116023)

摘要 以非均匀颗粒介质为研究对象, 采用三维离散元方法对其在不同密集度和剪切速率下的动力过程进行了数值模拟, 分析了其在由瞬时接触的快速流动向持续接触的准静态流动的转变过程及其行为特点. 通过对不同材料性质下相变过渡区内颗粒材料的宏观应力、接触时间数、配位数、团聚颗粒数量、有效摩擦系数等参量的计算, 更加全面地描述了非均匀颗粒材料在类固 - 液相变过程中的基本特征. 基于以上数值计算结果, 建立了一个适用于颗粒材料类固态、类液态以及其相变过程的本构方程, 并通过剪切室实验结果验证了它的合理性.

关键词 非均匀颗粒材料, 类固 - 液相变, 本构方程, 配位数, 接触时间数

中图分类号: O343.7, O369 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2007)02-0223-15

引 言

颗粒介质无论是在静态还是动态下都表现出一些独特性质, 如沙丘成拱、粮仓效应、受剪液化、振动分离、巴西果和反巴西果效应等^[1,2]. 虽然颗粒介质均不同于液态和固态材料, 但在不同条件下却又分别表现出类似于固态或液态物质的动力特性, 并可发生类固 - 液相态转变. 有关颗粒介质在不同材料特性和外界驱动条件下的固 - 液相变过程及其力学行为是目前颗粒材料研究的一个热点问题^[3,4].

颗粒材料受密集度和剪切速率影响可表现出不同的流动形式, 其内部作用力的结构形式及传播方式非常复杂, 并可在不同条件下分别符合于椭圆、抛物线或二次曲线方程, 类似于物质中的弹性应力、热传导和波动现象^[5,6]. 颗粒介质在不同流动状态下的力学性质, 以及对其描述的本构模型是不同的. 从宏观上看, 颗粒材料在准静态下发生持续接触并发生滑动摩擦, 从而表现出类似于固体材料的力学特征, 并可通过基于 Mohr-Coulomb 摩擦定律的塑性理论来描述其本构关系^[7,8]; 在快速流动下则发生瞬时接触并通过颗粒碰撞进行动量传递, 从而表现出类似于液态材料的行为特点, 并可通过基于分子动力学的颗粒动力学模型进行描述^[9,10]. 然而, 在颗粒材料由类固态向类液态的转变过程中, 颗粒间的相互作用会因剪切速度和密集度的细微变化而有明显的不同, 并引发不同的宏观表现^[11,12]. 因此, 对

颗粒材料在类固 - 液转变过程中基本行为的研究, 将有助于其在固态和液态下本构模型的连接, 进而建立不同相态下的统一本构模型.

基于离散元的数值方法是当前获取颗粒材料类固 - 液相变过程的有效手段, 其中具有周期边界条件的剪切流模拟是研究颗粒材料发生相变特征的常用方法^[11~13]. 无论在自然条件下, 还是在物理实验中, 颗粒材料中最基本的颗粒单元一般具有不同的尺寸. 然而, 在目前基于离散元的颗粒流数值计算中, 大多采用均匀颗粒进行类固 - 液相变过程的模拟^[11,12,14]. 实际上, 均匀颗粒与非均匀颗粒在单元排列、作用过程和流动形态等方面均有很大不同. 为此, 本文将采用三维离散元方法对非均匀颗粒材料的类固 - 液相变过程, 特别是其相变过渡区内的基本行为特征进行数值模拟, 以得出具有普适性的颗粒材料运动规律; 通过分析颗粒材料在相变过程中宏观应力、配位数、接触时间、颗粒群单元和有效摩擦系数等参量的变化, 较全面地揭示颗粒材料在相变过程中的基本行为特征; 在非均匀颗粒流动的离散元模拟基础上, 建立一个适用于颗粒介质类固 - 液相变过程的本构模型, 并通过剪切室的实验结果对其结构形式的合理性进行验证.

1 三维颗粒离散元的数值方法

离散元方法自 20 世纪 70 年代建立以来不断发

2005-12-01 收到第 1 稿, 2006-09-08 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (40206004, 40610104008).

2) E-mail: jisy@dlut.edu.cn

展和完善,目前已广泛地应用于岩土工程、粉尘材料、生物科学、化工过程、交通运输、地球科学等诸多领域^[15~18].本文采用三维颗粒单元对非均匀颗粒材料在具有周期边界条件下的剪切流动进行数值模拟.

1.1 三维颗粒离散元的力学模型

在颗粒相互碰撞的过程中,一般考虑单元间因相对速度和弹性变形而引起的黏弹性作用力,以及采用 Mohr-Coulomb 摩擦定律的剪切力.严格地讲, Hertz-Mindlin 非线性力学模型更加符合颗粒单元接触的物理过程.但在研究颗粒材料的动力学特性及其固-液相变过程的数值计算中,线黏弹性模型更加方便,并可直接定义颗粒碰撞的回弹系数和接触时间,且其计算结果也能合理地反映颗粒材料的动力学行为^[11,12,14,19].

在本文的三维颗粒材料动力学模拟中采用了 Cundall (1979) 的线黏弹性力学模型.球单元 A 和 B 碰撞的法向有效刚度系数为

$$K_n = \frac{k_n^A k_n^B}{k_n^A + k_n^B} \quad (1)$$

式中 k_n^A 和 k_n^B 分别为球单元 A 和 B 的刚度系数,这里下标 n 表示法向方向.法向阻尼系数按下式计算

$$C_n = \zeta_n \sqrt{2MK_n}$$

且

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

式中 C_n 为法向阻尼系数, ζ_n 为无量纲法向阻尼系数, M 为两颗粒单元的有效质量, e 为回弹系数.

法向和切向刚度、阻尼系数有如下关系: $K_s = \alpha K_n$, $C_s = \beta C_n$. 这里 $\alpha = 1.0$, $\beta = 0.0$ ^[11,12,20].

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,并由此计算颗粒材料的宏观应力.宏观应力主要由接触应力和动力应力两部分构成,即^[20,21]

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^c + \sigma_{ij}^k \quad (3)$$

这里 σ_{ij} 为颗粒材料内的宏观应力张量, σ_{ij}^c 和 σ_{ij}^k 均为接触应力张量和动力应力张量,它们可由下式计算

$$\sigma_{ij}^c = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_k} (r_i^{lk} F_j^{kl}) \quad (4)$$

$$\sigma_{ij}^k = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N M_k (u_i^k u_j^k) \quad (5)$$

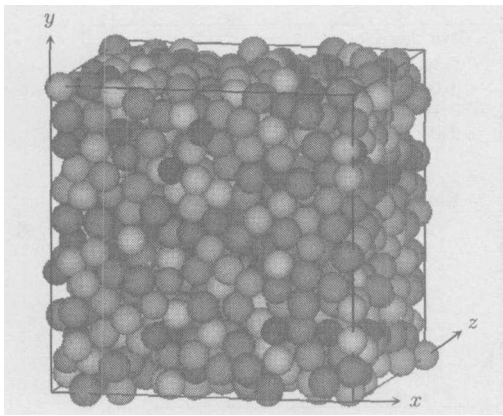
式中, V 为计算域体积, N 为颗粒单元数, N_k 为与单元 k 接触的颗粒数, M_k 为单元 k 的质量, r_i^{lk} 为颗粒 l 质心到颗粒 k 质心的位置张量, F_j^{kl} 为颗粒 l 对颗粒 k 的作用力张量, u_i^k 和 u_j^k 均为颗粒 k 的脉动速度张量.

1.2 具有周期边界条件的非均匀颗粒剪切流

在研究颗粒流体动力学的数值模拟中,具有周期边界条件的剪切颗粒流是一种广泛采用的计算方法^[11,12,21].在计算域为 $a \times b \times c$ 的剪切颗粒流模拟中,在 x 方向上的剪切速率为 $\dot{\gamma} = V/b$,而在 y 和 z 方向颗粒作随机波动.当颗粒从计算域的任一方向流出时,则会从其另一方向流入以保持颗粒系统的总体质量守恒.另外,当颗粒从上(或下)边界流出计算域,并再次从下(或上)边界流回计算域的同时,其在 x 方向上的速度 $-\frac{V}{2}$ (或 $+\frac{V}{2}$),以保持颗粒系统内速度分布梯度的稳定性.在本文的非均匀颗粒模拟中,颗粒直径的最大和最小值分别为 $D_{\min} = 0.9\bar{D}$, $D_{\max} = 1.1\bar{D}$,且满足均匀分布的概率分布函数.这里 \bar{D} 为颗粒平均直径.

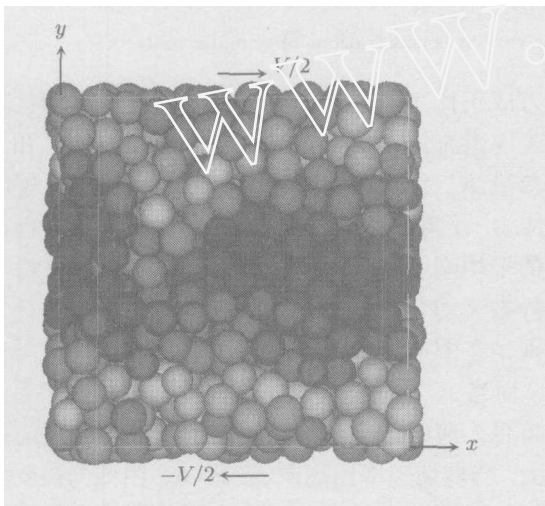
颗粒剪切流模拟中的另一个问题就是计算域大小的确定.对于均一粒径材料,一般取计算域为 $a \times b \times c = 7D \times 7D \times 7D$ 时,即可消除边界影响^[12].对于非均匀颗粒材料,由于颗粒单元大小和位置分布的随机性,其受边界影响要低于均质颗粒材料,其所需计算域也相对较小.在本文计算中,仍然选用相对较大的计算域,即 $a \times b \times c = 10\bar{D} \times 10\bar{D} \times 10\bar{D}$,以更加理想地获取颗粒流的随机运动状态.在该计算域中,当密集度 $C = 0.7$ 时的非均匀颗粒分布状态如图 1(a) 所示,颗粒进入动力平衡状态后的剪切速度分布如图 1(b) 所示,其中不同颗粒颜色分别表示颗粒的大小和速度.由此可以看到颗粒的粒径分布特性和剪切速度的分布梯度.

在颗粒系统的宏观应力统计计算和周期边界条件处理中,当密集度较低,特别在其趋于 0 时,系统内部颗粒分布稀疏,其碰撞频率迅速下降.此时,系统内的速度分布梯度均匀性降低,并很难达到稳定流动状态.因此,颗粒离散元在计算低密集度颗粒动力过程时有很大的局限性.本文对颗粒材料进行离散元模拟的主要计算参数列于表 1 中.



(a) 非均匀颗粒的随机排列

(a) Random packing of multi-size particles



(b) 颗粒材料的剪切速度分布

(b) Shear velocity distribution of granular materials

图 1 颗粒材料的初始排列和速度分布

Fig.1 Initial packing and velocity distribution of granular materials

表 1 颗粒材料离散元模拟中的主要计算参数

Table 1 Main computational parameters in the DEM simulation of granular materials

Symbol	Definition	Values
\bar{D}	mean particle diameter	0.01 m
D_{\max}	maximum particle diameter	0.011 m
D_{\min}	minimum particle diameter	0.009 m
ρ	particle density	$1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
$a \times b \times c$	computational domain	$0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m}$
\bar{K}_n	mean particle stiffness	$1.0 \times 10^4 \text{ N/m}$
C	concentration	0.01 ~ 0.74
$\dot{\gamma}$	shear rate	$1.0 \sim 1.0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$
μ	friction coefficient	0.0, 0.1, 0.5, 1.0
e	coefficient of restitution	0.1, 0.7, 1.0

2 颗粒材料类固 - 液相变过渡区的确定

颗粒材料的类固 - 液相变过程是其独特性质之一，并广泛地存在于自然界中同领域^[3,12]。基于颗粒流的二维离散元数值模拟结果，Babic 等^[11]首先定性地提出了颗粒材料在不同应变率和密集度下由快速向慢速至准静态转化的相变过程；王光谦等^[3]也将颗粒在不同运动形态下颗粒群间的相互作用分为持续接触、半持续接触、瞬时接触和无接触情况；Campbell^[12]基于三维离散元的计算结果，进一步讨论了颗粒材料在不同密集度和剪切速率下的相变过程。

研究颗粒材料在固 - 液相变转变区的本构模型首先要确定颗粒材料的相变过程及其在这一过程中的力学特性。为此，本文采用上节所述的颗粒接触模型、计算域和边界条件，对不同剪切速率和密集度下的颗粒流体动力学过程进行了三维离散元模型。为更加方便地探讨颗粒宏观应力与剪切速率的相互关系，这里引入两个无量纲宏观应力 $\tau'_{ij} = \tau_{ij} / \rho \bar{D}^2 \dot{\gamma}^2$ 和 $\tau''_{ij} = \tau_{ij} \bar{D} / \bar{K}_n$ 。当颗粒间的摩擦系数和回弹系数分别为 $\mu = 0.5$ 和 $e = 0.7$ 时，在不同剪切速率和密集度下的无量纲应力 τ'_{xx} 和 τ''_{xx} 的计算结果如图 2 所示。其它宏观应力分量有与其相似的分布特征。

从图 2(a) 中可以看出，在低密集度下，无量纲应力 $\tau''_{xx} (= \tau_{xx} \bar{D} / \bar{K}_n)$ 在不同剪切速率下有很大的差别，并随着密集度的增加而趋于一致。由此可见，在高密集度下宏观应力 τ_{xx} 与剪切速率基本不相关，而是刚度系数的函数。因此，在高密集度下颗粒材料符合 Mohr-Coulomb 摩擦定律，从而可通过适当的塑性力学模型建立颗粒材料的本构模型。从图 2(b) 可以看出，在 $C < 0.40$ 的低密集度条件下，无量纲应力 $\tau'_{xx} (= \tau_{xx} / \rho \bar{D}^2 \dot{\gamma}^2)$ 与剪切速率无关，但随着密集度的增加， τ'_{xx} 在不同剪切速率下的差别不断增加。图 2(b) 中还给出了采用 Lun^[9] 的动理学模型计算的不同密集度下的宏观应力解析解。如果采用分子动力学模型，在低密集度下也可得到与该动理学模型一致的数值模拟结果^[13,22]。由此看出，宏观应力 τ_{xx} 在低密集度下与剪切速率的平方 $\dot{\gamma}^2$ 呈线性关系，可满足动理学模型，但在高密集度下动理学模拟已不再适用。基于本文对颗粒系统的三维离散元模拟结果，并综合图 2(a) 和图 2(b) 所反应出来的两种情况，可以发现：颗粒材料在低密集度 ($C < 0.40$) 下符合动理学模型，并表现出类似于液态材料的快速流动；在高密集度 ($C \rightarrow 0.70$) 下符合塑性摩擦模

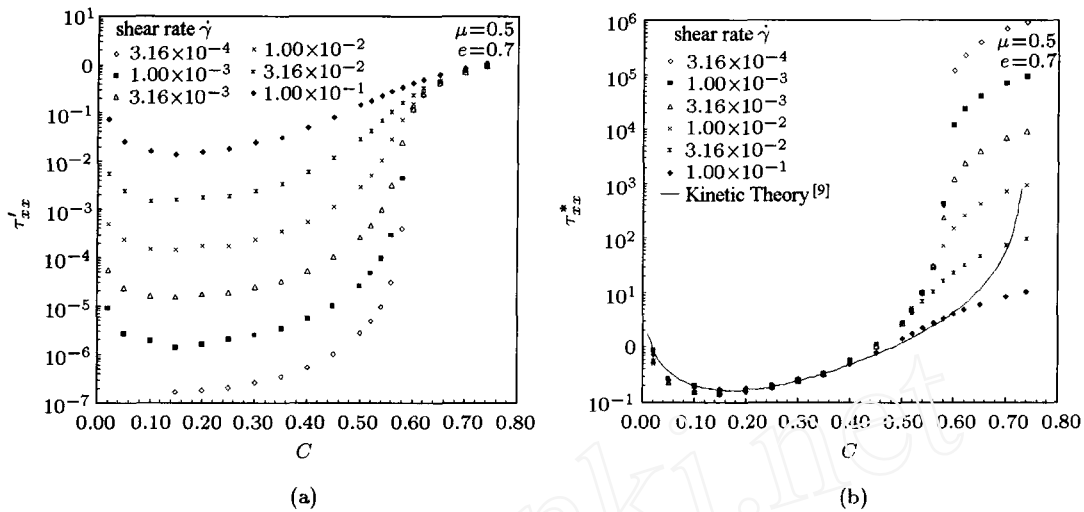


图 2 不同密集度下颗粒材料无量纲宏观应力与剪切速率的对应关系

Fig.2 Dimensionless macro-stress versus shear rate under various concentrations of granular materials

型，并表现出类似于固体物质的准静态流动；而在密集度 $C \in [0.40, 0.70]$ 范围内，颗粒材料发生类固 - 液相变，其流变特性即不符合动理学模型，又不能很好地满足塑性理论。

3 颗粒材料在类固 - 液相变过渡区的基本特征

颗粒材料的相态转变一般从宏观运动形式上进行确定，即快速流动、慢速流动和准静态流动，而以上 3 种流动形态的转变又通过宏观应力与剪切速率的相关性来判别^[11,12]。颗粒材料内部的作用链强度、接触形式和时间、颗粒群大小等参数则是诱导颗粒材料发生相变的内在因素。为此，下面将对非均匀质颗粒介质在相变过渡区内的基本行为通过以上参量进行讨论。

3.1 宏观应力的分布特征

为讨论不同密集度下宏观应力与剪切速率的对应关系，在采用无量纲应力 $\tau'_{ij} = \tau_{ij}/\rho\bar{D}^2\dot{\gamma}^2$ 的同时，再引入无量纲参量 $K_n^* = \bar{K}_n/\rho\bar{D}^3\dot{\gamma}^2$ 。这样，当颗粒摩擦系数 $\mu = 0.5$ 和回弹系数 $e = 0.7$ 时，在不同密集度和剪切速率下计算的无量纲应力分量 τ'_{xy} 和 τ'_{yy} 如图 3 所示。从中可以发现剪应力与正应力有非常相似的分布特性，但其数值大小有一定的差异。

从图 3(a) 和图 3(b) 中可以发现，在低密集度下，无量纲宏观应力 $\tau'_{ij} (= \tau_{ij}/\rho\bar{D}^2\dot{\gamma}^2)$ 与无量纲参量 $K_n^* (= \bar{K}_n/\rho\bar{D}^3\dot{\gamma}^2)$ 无关。这表明宏观应力 τ_{ij} 与材料平均刚度系数 \bar{K}_n 无关，而与其剪切速率 $\dot{\gamma}$ 的

平方成正比，此时颗粒材料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， τ'_{ij} 和无量纲参量 K_n^* 呈斜率为 1 的对数线性关系。这表明宏观应力 τ_{ij} 与剪切速率 $\dot{\gamma}$ 相关性已极为微弱，但与颗粒的平均刚度 \bar{K}_n 呈线性关系，此时颗粒材料呈现准静态流动状态，并表现出一定的固体力学行为；特别是在中密集度附近，当 K_n^* 较大时， τ'_{ij} 与其无关，而当 K_n^* 较小时， τ'_{ij} 与其呈对数线性关系。由此可见，剪切速率在中密集度下对颗粒介质的影响较大。当剪切速率由高向低，即 K_n^* 由低向高变化过程中，即颗粒材料也有一个由固体向流态的相变过程。

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) 和图 3(d) 所示。从中可以看出，在高剪切速率下，即当 K_n^* 较低时， τ'_{ij} 随密集度 C 的增加而微小增长；随着剪切速率的降低，密集度对 τ'_{ij} 的影响愈加显著。由此可见，在快速流动条件下，颗粒宏观应力 τ_{ij} 主要受剪切速率控制，而在慢速或准静态流动下， τ_{ij} 主要受刚度影响。当中密集度 C 在 $0.56 \sim 0.60$ 之间， τ'_{ij} 随密集度的变化有一个很大的跳跃。这说明此时在颗粒运动过程中，其相互碰撞同时受剪切速率和材料刚度的影响，并因剪切速率的差异表现出不同的流动状态。

在颗粒材料的流动过程中，其细观尺度下颗粒间的碰撞、摩擦和滑动是影响颗粒材料宏观表现的主要内在因素。颗粒介质的有效摩擦系数，即 $\mu_e = \tau_{xy}/\tau_{yy}$ ，也是表征固 - 液相变过程的一个重要参量^[20,23]。将本文计算的不同密集度和剪切速率下

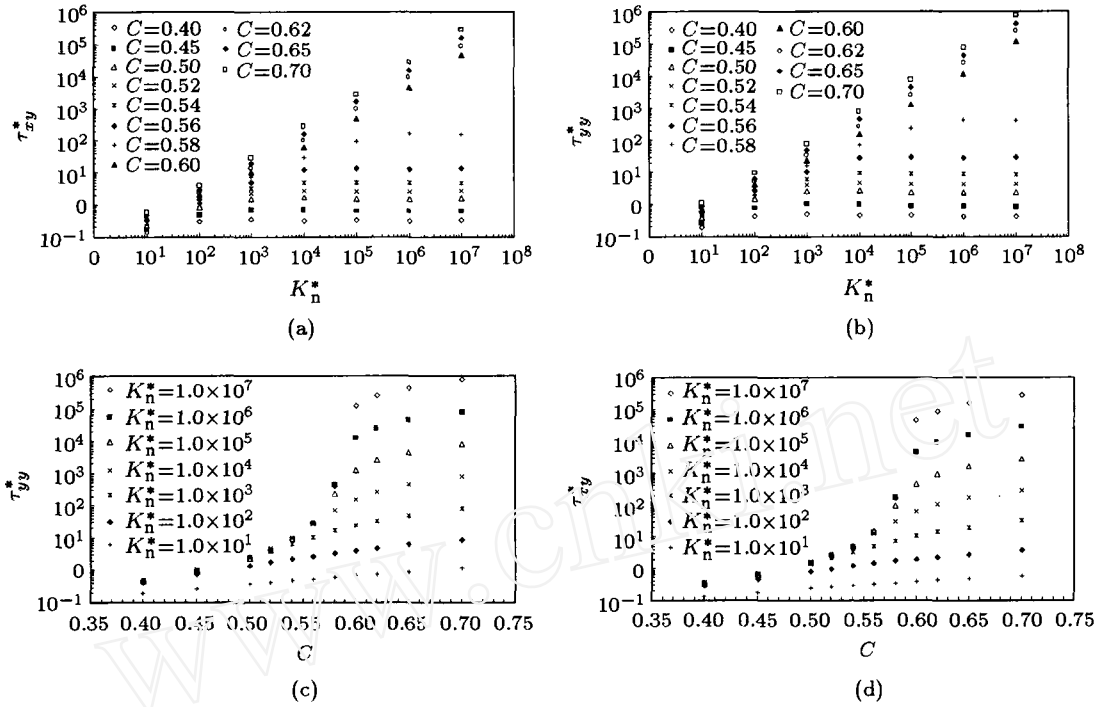


图 3 不同密集度和剪切率条件下的无量纲宏观应力分布

Fig.3 Distribution of dimensionless macro-stress under various concentrations and shear rates

的有效摩擦系数绘于图 4 中。从图 4(a) 中可以发现：随 K_n^* 的增加（即剪切速率的减小）， μ_e 分别在高密集度或低密集度下降低或升高，并分别趋近于一个常值，且 μ_e 在低密集度下明显较高；从图 4(b) 中可以更加清楚地发现，有效摩擦系数 μ_e 在不同剪切速率下与密集度的对应关系。当密集度较低时，颗粒介质的有效摩擦系数与 K_n^* 成反比，并随密集度的增加而降低，但下降速率在 K_n^* 较大时明显较快。由于下降速率的不同，高密集度下 μ_e 与 K_n^* 成

反比。由此，不同参量 K_n^* 所对应的 μ_e 在密集度 $C_e^* \sim 0.55$ 附近形成一个交叉点，且 $\mu_e^* \sim 0.54$ 。当密集度 $C > C_e^*$ 时，有 $\mu_e > \mu_e^*$ ，且 μ_e 与 K_n^* 成反比；而当密集度 $C < C_e^*$ 时，有 $\mu_e < \mu_e^*$ ，且 μ_e 与 K_n^* 成正比。从图 4(b) 中还应特别注意到，在高密集度且慢速剪切下，即 $C > 0.60, K_n^* > 1.0 \times 10^4$ 时， μ_e 趋近于一个稳定的数值，并与应变速率无关。此时即为颗粒介质的准静态流动状态，并符合固体材料的摩擦塑性本构模型。

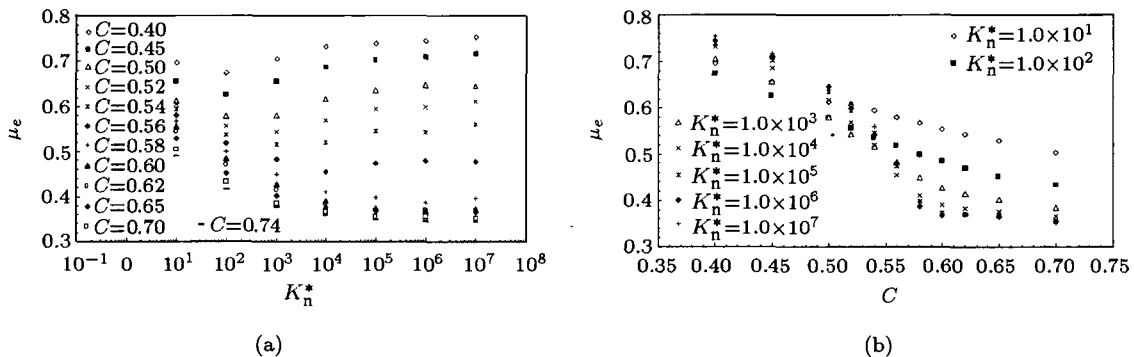


图 4 不同密集度和剪切率条件下颗粒材料的有效摩擦系数分布

Fig.4 Effective friction coefficients under various concentrations and shear rates of granular materials

3.2 接触时间的分布特征

当颗粒介质内部相互作用在不同相态下分为持续、半持续或瞬时接触时，接触时间则是表征不同碰

撞类型的最直接参量。为了方便地描述颗粒接触时间随密集度和剪切速率的变化特性，这里引入接触时间数的概念。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的比值, 即 $m = \bar{T}_c / \bar{T}_{bc}$. 这里 m 为接触时间数, \bar{T}_c 和 \bar{T}_{bc} 分别为颗粒介质的平均接触时间和二元接触时间. \bar{T}_{bc} 是一个与颗粒材料性质相关的常数, 且有

$$\bar{T}_{bc} = \frac{\pi}{\sqrt{\frac{2\bar{K}_n}{\bar{M}}(1 - \zeta_n^2)}} \quad (6)$$

式中, \bar{M} 为颗粒材料的平均单元质量. 当两个具有平均质量和平均刚度的颗粒相互碰撞时, 其接触时间即为二元接触时间 \bar{T}_{bc} , 即接触时间数 $m = 1$. 当多个颗粒相互碰撞时, 任两个颗粒的接触时间会受到其它颗粒的约束而延长, 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.

在不同密集度和剪切速率下, 颗粒材料的净接触时间数 m' 的计算结果如图 5 所示. 由图 5(a) 可以看出, 在低密集度且慢剪切速率下, 即 K_n^* 较大时, 净接触时间数 $m' \rightarrow 0$, 且随剪切速率的增快而增大, 并有 $m' \rightarrow 1$; 在高密集度的慢剪切速率下, 接触时间数最大, 可在 10^3 以上, 并随着剪切速率的增快而下降, 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

作用链也不易断开, 颗粒材料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; 在快速剪切条件下, 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高频碰撞状态.

由图 5(b) 还可发现, 净接触时间数在不同剪切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 $m' = 1$; 当密集度 $C < 0.56$ 时, 剪切速率越快, 即 K_n^* 越小, 则颗粒接触时间越长; 当密集度 $C > 0.56$ 时, 剪切速率越慢, 即 K_n^* 越大, 则颗粒接触时间越长. 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重要因素. 由此, 可引入该特征密集度 $C_m^* = 0.56$ 作为判别颗粒材料流动状态的一个特征值, 此时净接触时间数不受剪切速率的影响而保持一个特征值 $m^* = 1.0$. 当密集度 $C > C_m^*$ 时, 净接触时间数 $m' > m^*$, 颗粒材料更多地表现为准静态流动; 当 $C < C_m^*$ 时, 净接触时间数 $m' < m^*$, 颗粒材料开始表现为快速流动; 而在 $C \sim C_m^*$ 附近, 颗粒材料在不同剪切速率下发生流动状态转化, 此时净接触时间数 $m' \rightarrow m^*$. 由此可见, 净接触时间数的特征值 m^* 可作为判别颗粒流动状态的一个参数.

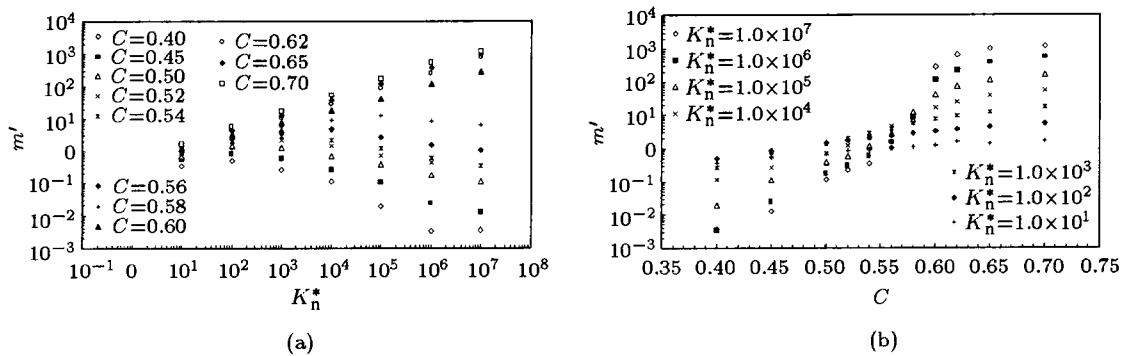


图 5 不同密集度和剪切率下的净接触时间数 m'

Fig.5 Net contact time number m' under various concentrations and shear rates

3.3 颗粒群的分布特性

在颗粒介质流动中, 作用链形成、断开的空间分布特性可通过配位数、颗粒群单元数目来表征. 配位数是指每个颗粒单元与其周围颗粒的平均接触数, 而颗粒群则是指众多颗粒单元相互作用时形成的独立群组. 它们可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. 在不同密集度和剪切速率下的配位数、颗粒群平均单元数目如图 6(a)~图 6(d) 所示.

从图 6(a) 和图 6(b) 中可以看出, 配位数也表现出类似于接触时间数的分布特性, 即在高密集度下, 配位数随剪切速率的增加而降低; 在低密集度

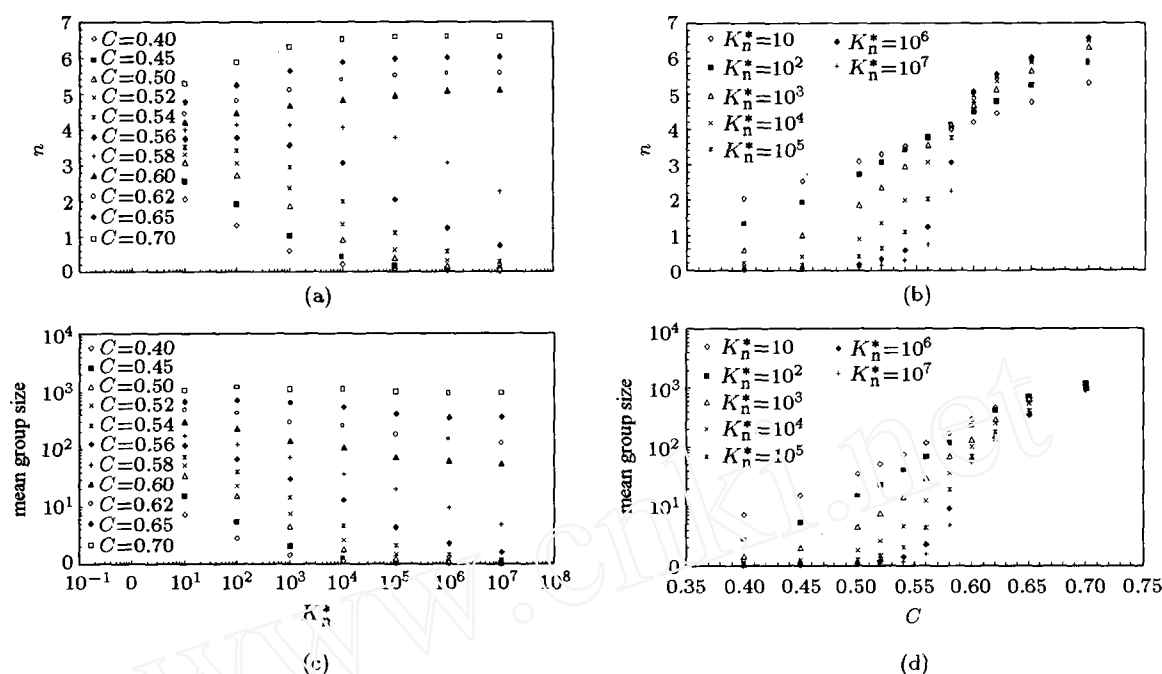


图 6 不同密集度和剪切速率下颗粒群的分布特性

Fig.6 Distribution characteristics of granular cluster under various concentrations and shear rates

下，配位数随剪切速率的增加而升高；在中密集度 ($C = 0.59$) 下，配位数基本不受剪切速率的影响，并保持为一个定值 $n^* = 4.0$ 。这与 Ball 等^[24]在颗粒系统的动力学平衡机制上建立的临界配位数的理论值相一致，即：非光滑规则颗粒处于稳定状态的临界配位数为 4。类似于特征接触时间数，将特征配位数 n^* 处的密集度定义为特征密集度 C_n^* ，且有 $C_n^* = 0.59$ ，这里下标 n 表示配位数。当 $C < C_n^*$ 时，有 $n < n^*$ ，颗粒材料呈快速流动；当 $C > C_n^*$ 时，有 $n > n^*$ 时，颗粒材料呈准静态流动；当 $C^* \sim 0.59$ 时，当配位数在其特征值 n^* 附近时，即颗粒材料受剪切速率和密集度的影响而发生类固 - 液相变过程。

与配位数在不同密集度和剪切速率的分布特性相对应，从图 6(c) 和图 6(d) 中可以发现：颗粒群的单元数目在低密集度下明显较低，并当参量 K_n^* 较大，即剪切速率较快时趋近于 1。此时，颗粒多表现为自由漂移和瞬时接触，并在宏观上表现为快速流动；随着密集度的增加，剪切速度对颗粒群的影响不断减弱，并在高密集度时计算域内的所有颗粒同时接触，颗粒群单元数不断增加。此时，细观尺度上的作用链相对持久且结构性强，并在宏观上表现为准静态流动。

综合考虑以上颗粒介质在类固 - 液相变过程中的宏观应力、有效摩擦系数、接触时间数、配位数、颗粒群单元数等参量的分布特性，可以发现它们可

分别从不同角度来描述颗粒材料的流动特性，但反映出来的运动规律是一致的。例如，在低密集度条件下，颗粒介质分布稀疏，并有足够大的空间满足颗粒自由漂移而不易形成颗粒群，此时配位数趋于 0。颗粒碰撞也以二元碰撞的瞬时接触为主，并随着剪切速度的增加而使碰撞频率和强度增加，此时宏观应力与剪切速率的平方成线性关系；在高密集度下，颗粒紧密接触从而形成相对稳定的作用链，由于移动空间相对狭小，多个颗粒单元相互接触连接从而使作用链不断延长，此时的配位数相对较高。这时的颗粒碰撞主要受颗粒刚度和变形幅度控制而与剪切速率相关性较弱；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和颗粒群的同时，又迫使一部分作用链断开和颗粒群分离，从而颗粒介质的有效摩擦系数、接触时间数和配位数保持稳定。这也正是在特征密集度处形成有效摩擦系数、接触时间数和配位数交叉点的主要原因。

4 材料性质对非均匀颗粒介质相变过程的影响

颗粒材料的单元尺寸、密度、刚度、摩擦系数和回弹系数等都是影响颗粒材料流动行为以及相变过程的重要影响因素，也是颗粒介质本构模型中的关键变量^[11,12,25]。在以上颗粒介质相变特性的分析

中, 在引入无量纲应力 $\tau_{ij}^* = \tau_{ij} / \rho \bar{D}^2 \dot{\gamma}^2$ 和无量纲参量 $K_n^* = \bar{K}_n / \rho \bar{D}^3 \dot{\gamma}^2$ 时, 可以反映出颗粒尺寸、密度和刚度的影响. 为考虑摩擦系数 μ 和回弹系数 e 的影响, 这里分别采用 $\mu = 0.0, 0.1, 0.5, 1.0$ 和 $e = 0.1, 0.7, 1.0$ 进行非均匀颗粒介质的离散元模拟. 采用以

上所述的边界条件和计算域大小, 得到的颗粒系统动态平衡下的宏观应力、有效摩擦系数、接触时间数和配位数的分布特性如图 7 和图 8 所示. 其中 $\mu = 0.5, e = 0.7$ 时的计算结果上节已经给出. 从以上计算结果可以发现, 不同材料特性下颗粒介

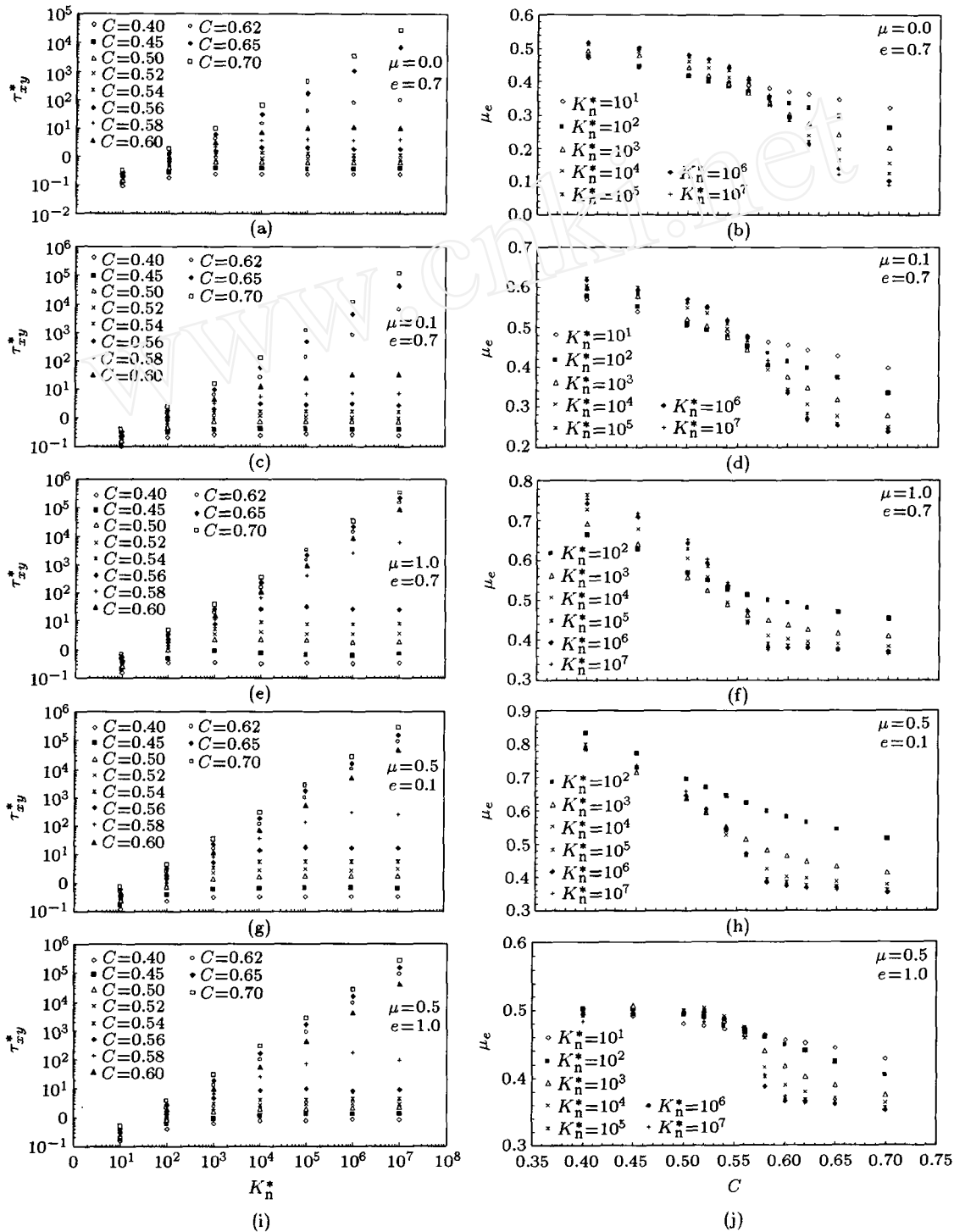


图 7 不同材料性质下颗粒介质的无量纲应力和有效摩擦系数分布特性

Fig.7 Dimensionless macro-stress and effective friction coefficients of granular materials under various materials properties

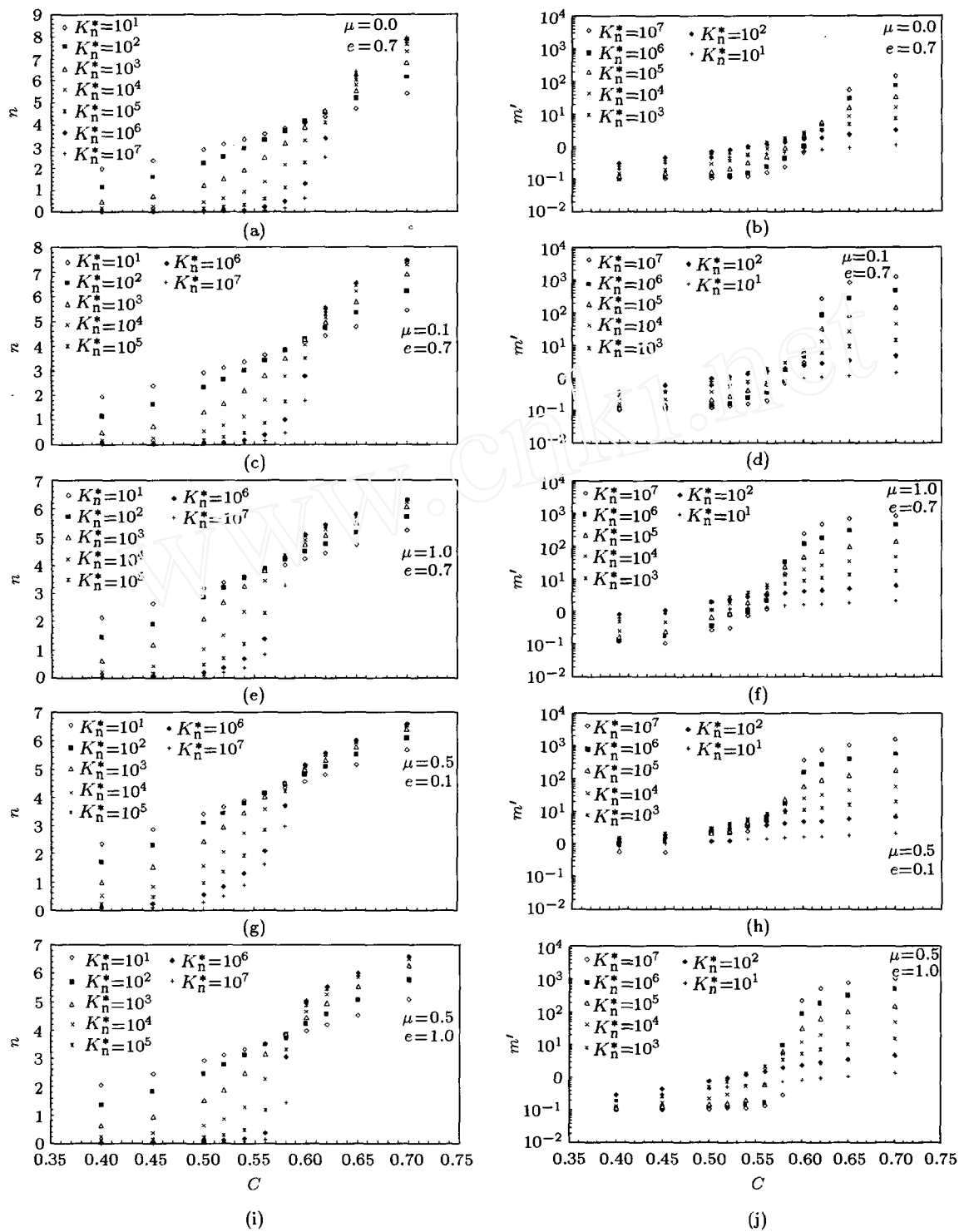


图 8 不同材料性质下颗粒介质的配位数和净接触时间数的分布特性

Fig.8 Distributions of coordination number and net contact time number of granular materials under various materials properties

质的类固 - 液相变过程有非常相似的转变规律，但其数值大小以及相变转化点的特征密集度还是有一定的差别。下面对颗粒介质的材料性质对类固 - 液相变区的影响进行简单讨论。

(1) 摩擦系数的影响。随着摩擦系数的增加，有

效摩擦系数不断增加，相变转换点处的特征密集度不断下降。从图 7 中可以看出，当摩擦系数 $\mu = 0.0, 0.1, 0.5$ 和 1.0 时，特征密集度分别为 $C_e^* = 0.58, 0.56, 0.55$ 和 0.54 。从图 8 中配位数和净接触时间数的变化趋势来看，其特征密集度也有下降的趋势，即

$C_n^* = 0.63, 0.61, 0.60, 0.59$ 和 $C_m^* = 0.61, 0.60, 0.56$ 和 0.55 . 特征密集度的降低表明颗粒介质随摩擦系数的增加更容易在低密集度下呈现固体介质的力学行为, 即粗糙颗粒更易固结, 而光滑颗粒更易发生流动.

(2) 回弹系数的影响. 回弹系数对颗粒材料的相变过程影响不十分显著, 但它们又分别在不同密集度和剪切速率下受能量消耗、空间分布等因素影响, 这些影响存在一些微小的差别, 并在低密集度颗粒的瞬时接触状态下更为明显. 从图 7 中可以发现, 弹性颗粒 (即 $e = 1.0$) 在低密集度下的有效摩擦系数明显较低, 且对密集度不敏感, 而在高密集度下, 有效摩擦系数有较高的数值. 因此, 弹性颗粒材料的有效摩擦系数有着较小的分布范围; 从图 8 中可以发现, 弹性颗粒的配位数在不同剪切速率下有相对较大的分布范围. 这可以从颗粒碰撞中的能量角度来解释. 由于颗粒间的粘接力与相对碰撞速率成正比, 从而在高剪切速率下消耗更多的能量, 更多地抑制了颗粒运动; 而在低剪切速率下, 粘接力这种耗能效果会明显减弱. 由此, 黏性颗粒的宏观表现特征对速率的敏感性要弱于弹性颗粒. 另外, 不同回弹系数下的特征密集度基本是一样的, 但其分布特性在低密集度下有明显的差异, 即弹性颗粒的配位数相对较高, 而在高密集度下不同回弹系数的配位数分布比较一致. 这是因为在高密集度下颗粒之间多为持续接触, 虽然不同回弹系数下的宏观应力有一定的差别, 但其对颗粒空间分布的影响不明显.

(3) 颗粒材料密度、粒径和刚度系数的影响. 本文在进行颗粒系统的宏观参数特性讨论时, 均采用了无量纲参数 $K_n^* (= \tilde{K}_n / \rho \tilde{D}^3 \dot{\gamma}^2)$, 并由此可确定密度、粒径和刚度对颗粒系统行为特性的影响. 从图 7 和图 8 的计算结果来看, 不同 K_n^* 条件下的有效摩擦系数、净接触时间数和配位数都会交叉于特征密集度处. 这表明类固 - 液相变发生区的位置基本不受颗粒密度、粒径和刚度的影响, 而与密集度有密切关系. 但从相变区两侧不同参数 K_n^* 下的宏观参数分布来看, 刚度系数越大、密度和粒径越小, 颗粒系统在高密集度下则更好地表现出固体材料的力学行为, 而在低密集度下则更好地表现出液态材料的力学行为.

5 非均匀颗粒材料在类固 - 液相变过程中的本构方程及其实验验证

在颗粒介质的不同流动状态下, 其宏观应力与

剪切速率的相关性有很大的差异. 目前虽然有关颗粒介质的本构模型已有广泛研究, 但大多建立在塑性或黏塑性力学模型基础上^[26]. 它们尚不能合理地描述颗粒介质在相变过程中宏观应力与密集度、应变速率的对应关系. 为此, 基于以上非均匀颗粒流的离散元模拟结果, 建立一个颗粒介质在类固 - 液相变中的本构方程则是本文的主要研究目标.

考虑影响颗粒介质流动特性的密集度、剪切速率、密度、颗粒大小、刚度、摩擦系数和回弹系数等主要影响因素, 可建立一个与其对应的广义本构模型, 即^[19,20]

$$\tau_{ij} = f_{ij}(\dot{\gamma}, C, D, \rho, K_n, \mu, e) \quad (7)$$

在非均匀颗粒介质中, 可分别取用平均粒径 \tilde{D} 和平均刚度 \tilde{K}_n 代替上式中的 D 和 K_n . 如果采用无量纲宏观应力 $\tau_{ij}^* = \tau_{ij} / \rho \tilde{D}^2 \dot{\gamma}^2$ 和无量纲参量 $K_n^* = \tilde{K}_n / \rho \tilde{D}^3 \dot{\gamma}^2$, 则式 (7) 可写作

$$\tau_{ij}^* = f_{ij}^*(K_n^*, C, \mu, e) \quad (8)$$

通过本文建立的不同材料性质下宏观应力与密集度、剪切速率的对应关系, 式 (8) 可写作

$$\tau_{ij}^* = a_{ij}(C, K_n^*, \mu, e) K_n^{*b_{ij}}(C, K_n^*, \mu, e) \quad (9)$$

式中 $a_{ij}(C, K_n^*, \mu, e)$ 和 $b_{ij}(C, K_n^*, \mu, e)$ 分别是与密集度、无量纲参量 K_n^* 、摩擦系数和回弹系数相关的变量. 在式 (9) 以及下文式 (10) 和式 (13) 中, 同时具有下标 ij 的变量 a_{ij} 和 b_{ij} 均不作求和计算.

将 $\tau_{ij}^* = \tau_{ij} / \rho \tilde{D}^2 \dot{\gamma}^2$ 和 $K_n^* = \tilde{K}_n / \rho \tilde{D}^3 \dot{\gamma}^2$ 代入式 (9), 可得出颗粒介质本构模型的一般表述形式, 即

$$\tau_{ij} = a_{ij} \tilde{K}_n^{b_{ij}} (\rho \dot{\gamma}^2)^{1-b_{ij}} \tilde{D}^{2-3b_{ij}} \quad (10)$$

式中 $a_{ij} = a_{ij}(C, \tilde{K}_n / \rho \tilde{D}^3 \dot{\gamma}^2, \mu, e)$ 和 $b_{ij} = b_{ij}(C, \tilde{K}_n / \rho \tilde{D}^3 \dot{\gamma}^2, \mu, e)$.

本文计算结果表明, 在准静态流动中, τ_{ij}^* 和 K_n^* 呈斜率为 1 的对数线性关系, 即有 $b_{ij} = 1$; 在快速流动中, τ_{ij}^* 为与 K_n^* 无关的常量, 即有 $b_{ij} = 0$. 在以上两种流动相态下, 参量 a_{ij} 均与 K_n^* 无关. 由此可得到颗粒介质在类固态和类液态流动中的本构模型为

$$\tau_{ij} = a_{ij}(C, \mu, e) \frac{\tilde{K}_n}{\tilde{D}}, \text{ 类固态流动} \quad (11)$$

$$\tau_{ij} = a_{ij}(C, \mu, e) \rho \tilde{D}^2 \dot{\gamma}^2, \text{ 类液态流动} \quad (12)$$

这里 a_{ij} 是仅与颗粒介质的密集度、摩擦系数和回弹系数相关的参量.

对于颗粒介质的类固 - 液相变过程，在不同密集度、剪切速率以及摩擦系数、回弹系数等材料性质影响下对式 (10) 中参量 a_{ij} 和 b_{ij} 的确定是一个关键内容。这里，对式 (10) 取对数可得

$$\log(\tau_{ij}^*) = \log a_{ij} + b_{ij} \log(K_n^*) \quad (13)$$

这样， b_{ij} 即为无量纲应力 τ_{ij}^* 与参量 K_n^* 的对数斜率， a_{ij} 则是其在对数坐标中的截距。

这样，基于本文对不同材料参数 (摩擦系数、回弹系数、密度、粒径和刚度) 条件下颗粒系统的离散元模拟结果，通过确定式 (13) 中参数 a_{ij} 和 b_{ij} 在不同密集度和剪切速率下的数值，可建立起颗粒材料在类固 - 液相变过程中的本构模型。由图 7 中无量纲宏观剪切应力 τ_{ij}^* 的对数分布情况，可确定出不同

应力分量在不同密集度下与无量纲参量 K_n^* 的对应关系。以剪切应力分量 τ_{xy} 为例，确定出的 $\log(a_{xy})$ 和 b_{xy} 的分布特性如图 9 和图 10 所示。根据图 10 中 b_{xy} 在不同密集度和 K_n^* 条件下的分布规律，可以发现不同材料性质影响下的颗粒介质类固 - 液相变过程。同样，可对其它应力分量中的参数 a_{ij} 和 b_{ij} 进行确定，并得出颗粒介质在类固 - 液相变过程中的本构模型。

另外，考虑颗粒在不同流动状态下宏观应力与剪切速率的对应关系，还可将式 (7) 中函数 f_{ij} 设为剪切速率 (流速梯度) 零次项、线性项和二次项的组合^[3,13]。无论是采用类似于式 (10) 的指数形式，还是采用线性组合形式的颗粒介质本构模型，其剪切速率项部分都应与密集度、剪切速率有密切关系，

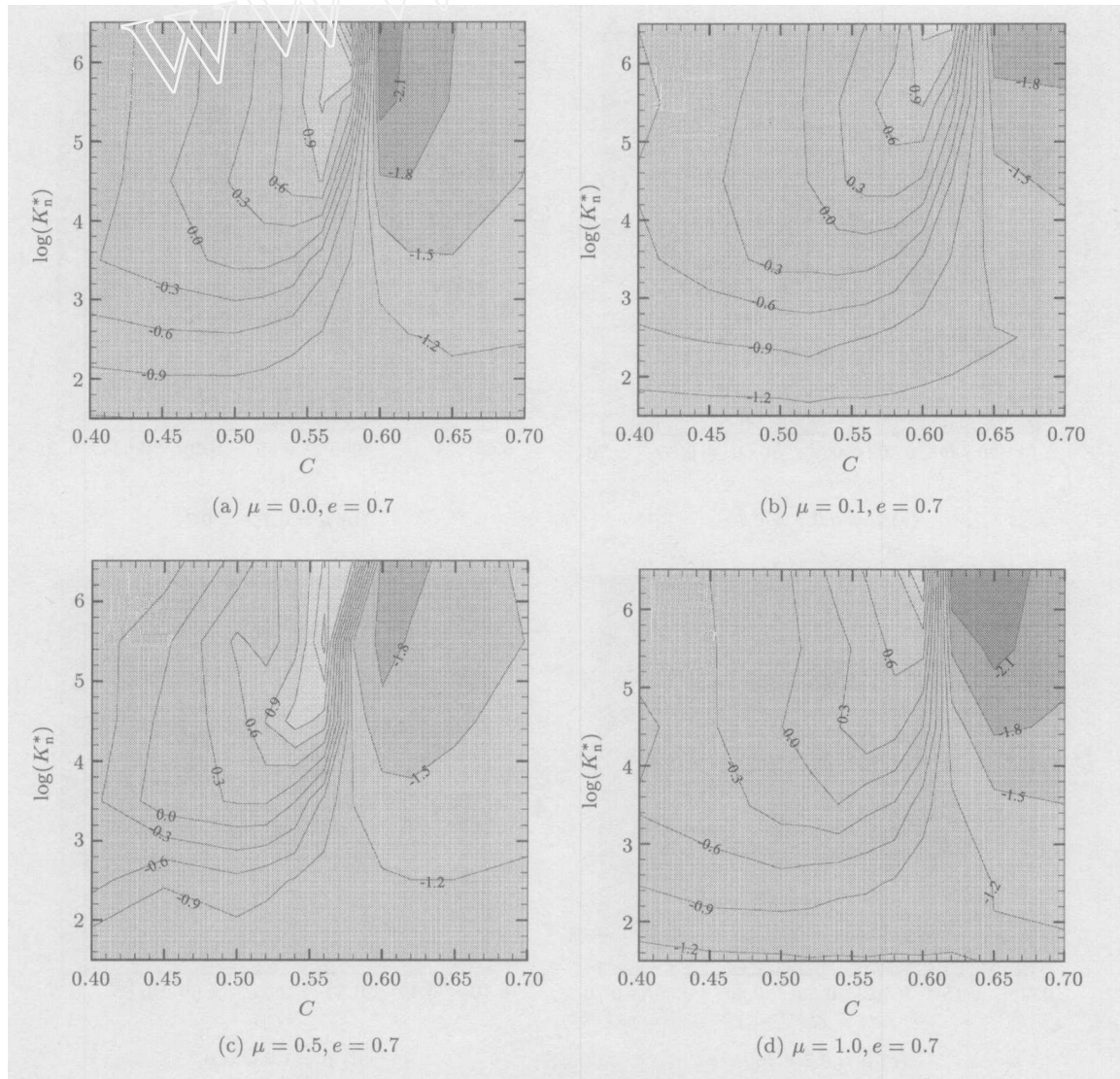


图 9 颗粒介质类固 - 液相变本构模型中 $\log(a_{xy})$ 的等值线分布特性

Fig.9 Contour of $\log(a_{xy})$ in the constitutive model for quasi-solid-liquid phase transition of granular materials

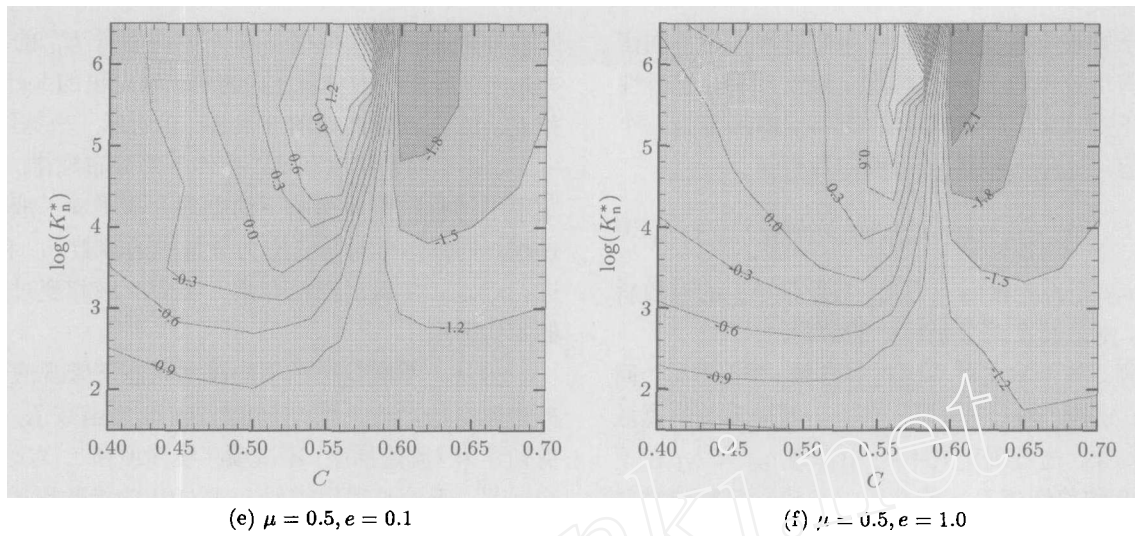


图 9 颗粒介质类固 - 液相变本构模型中 $\log(a_{xy})$ 的等值线分布特性 (续)

Fig.9 Contour of $\log(a_{xy})$ in the constitutive model for quasi-solid-liquid phase transition of granular materials (continued)

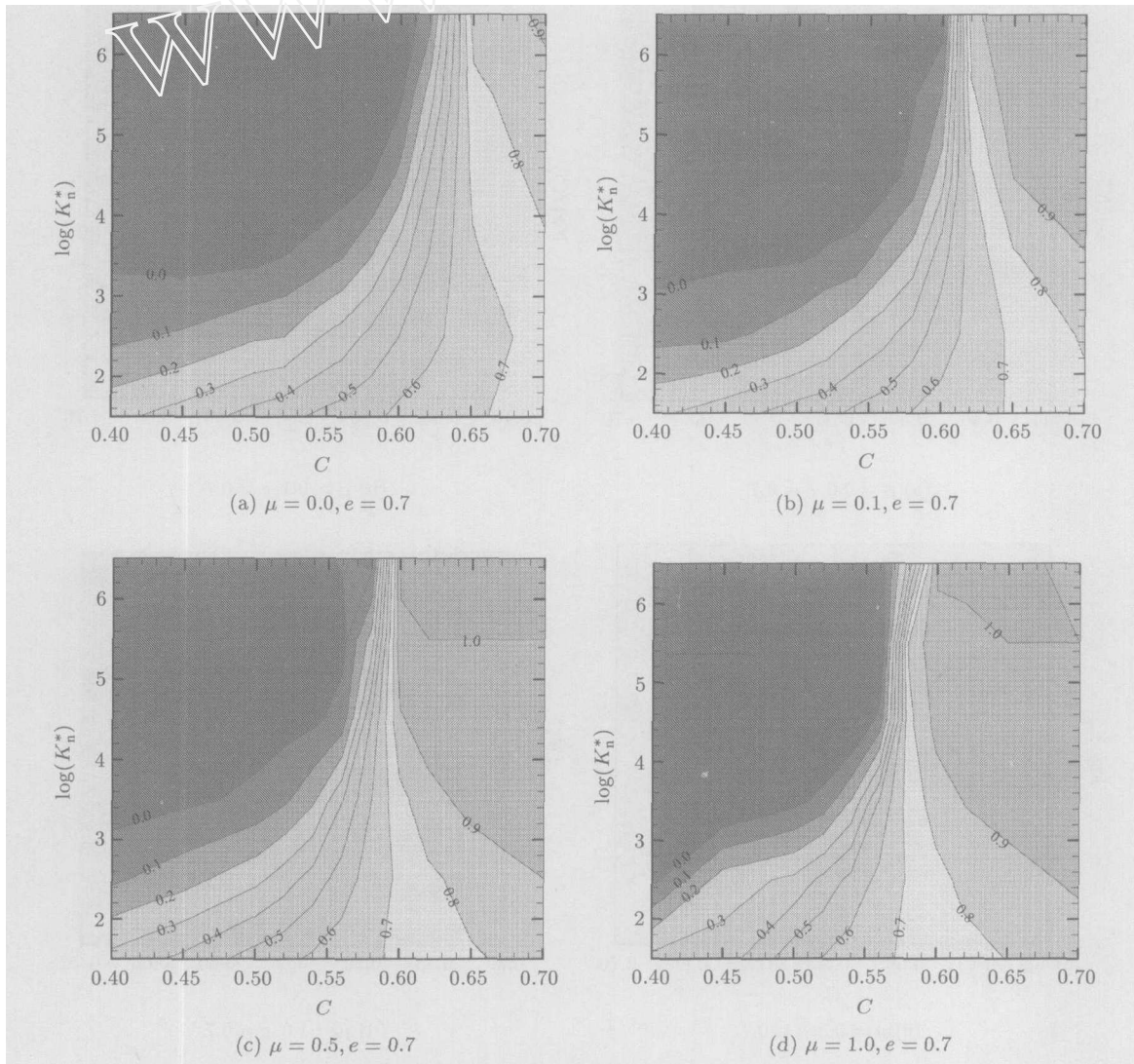
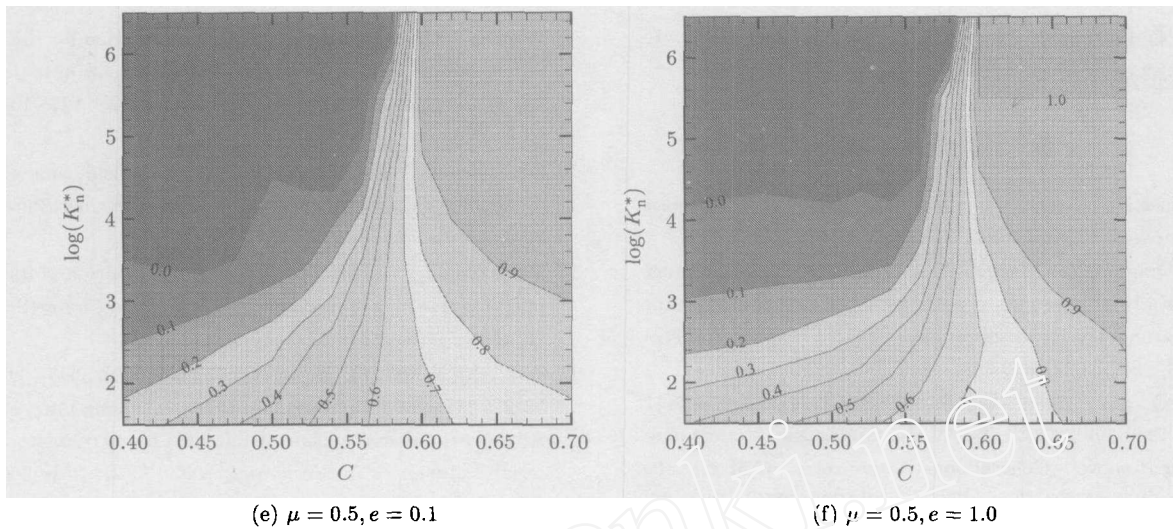


图 10 颗粒介质类固 - 液相变过程中 b_{xy} 的等值线分布特性

Fig.10 Contour of b_{xy} in the constitutive model for quasi-solid-liquid phase transition of granular materials

图 10 颗粒介质类固 - 液相变过程中 b_{xy} 的等值线分布特性 (续)Fig.10 Contour of b_{xy} in the constitutive model for quasi-solid-liquid phase transition of granular materials (continued)

并在不同流动相态下有很大的差异。这不但从本文的离散元数值模拟结果可以得出，同时在剪切室实验中也得到相应验证^[27~29]。在剪切室实验中，宏观应力在高剪切速率下与剪切速率的二次方有密切的关系，而在低剪切速率下与剪切速率的相关性有弱化趋势^[29]；另外，从密集度的影响来看，高密集度下的宏观应力要明显高于低密集度下的宏观应力。以上实验结果与本文模拟结果反应出来的宏观应力与密集度、剪切速率的对应关系是一致的。

这里通过离散元数值模拟结果对颗粒介质在不同相态下的应力 - 剪切速率对应关系进行了确定，得到了非均匀颗粒在类固 - 液相变过程中的本构模型的基本形式。但在颗粒材料的连续介质模拟中，更为公式化的本构模型是必要的。因此，在本文研究基础上进一步确定函数化的参量 a_{ij} 和 b_{ij} 是下一步工作的研究内容。

6 结 论

针对自然条件下颗粒介质非均匀分布的特点，本文对直径符合均匀概率分布的颗粒介质剪切流进行了三维离散元数值计算，得到了颗粒介质在类固 - 液相变过程中的基本行为。通过在不同密集度下无量纲宏观应力 $\tau_{ij}^* = \tau_{ij}/\rho\tilde{D}^2\dot{\gamma}^2$ 和无量纲参量 $K_n^* = \tilde{K}_n/\rho\tilde{D}^3\dot{\gamma}^2$ 的对应关系，得出：宏观应力在类固态持续接触中与剪切速率大小无关，在类液态瞬时接触中与剪切速率的平方成正比，而在发生相变的半持续接触中则与剪切速率有更加复杂的对应关系。有效摩擦系数、配位数和接触时间数均在不同

密集度下与剪切速率有不同的对应关系，并可在中密集度下形成与剪切速率无关的交叉点。特征密集度的存在表明颗粒介质在该密集度处基本完成类固 - 液相变转变，并在其两侧分别表现出类似于固体或液体的材料性质。

为研究材料性质对非均匀颗粒介质相变过程的影响，本文分别采用不同摩擦系数和回弹系数对颗粒的流动过程进行了模拟。结果表明：不同材料性质下，颗粒介质均存在相对一致的类固 - 液相变过程，但表征相变转变点的特征密集度存在一定的差别。光滑颗粒介质更容易发生流动，粗糙颗粒介质则更容易表现为类固态的流变特性；在低密集度下，回弹系数有较明显的影响，且弹性颗粒的流动特性更易受剪切速率的影响。

针对不同相态下颗粒介质的运动特性，特别是宏观应力与剪切速率的对应关系，本文建立了一个指数形式的颗粒介质本构模型，即 $\tau_{ij} = a_{ij}\tilde{K}_n^{b_{ij}}(\rho\dot{\gamma}^2)^{1-b_{ij}}\tilde{D}^{2-3b_{ij}}$ 。当颗粒介质在高密集度下表现为类固态流动时，该本构模型可演化为与剪切速率无关的函数，即 $\tau_{ij} = a_{ij}\tilde{K}_n/\tilde{D}$ ；当颗粒介质在低密集度下表现为类液态流动时，它又演化为与剪切速率平方相关的函数，即 $\tau_{ij} = a_{ij}\rho\tilde{D}^2\dot{\gamma}^2$ ；在颗粒介质发生类固 - 液相变时，其参数量 a_{ij} 和 b_{ij} 是依赖于密集度和剪切速率的函数。通过剪切室实验结果对该本构方程的构成形式进行了检验，进而验证了本文建立的指数型本构模型中宏观应力与剪切速率对应关系的合理性。

致谢 本文工作得到美国 Clarkson 大学土木与

环境工程系 Hayley H. Shen 教授的指导和帮助, 在此深表感谢.

参 考 文 献

- 1 Gennes PG. Granular matter: a tentative view. *Reviews of Modern Physics*, 1999, 71(2): s374~382
- 2 Shi Qingfan, Yan Xuequn, Hou Meiyang, et al. Experimental study of segregation patterns in binary granular mixtures under vertical vibration. *Chinese Science Bulletin*, 2003, 48(7): 627~629
- 3 王光谦, 熊刚, 方红卫. 颗粒流动的一般本构关系. 中国科学 (E 辑), 1998, 28(3): 282~288 (Wang Guangqian, Xiong Gang, Fang Hongwei. General constitutive relations of granular flow. *Science in China (Series E)*, 1998, 28(3): 282~288 (in Chinese))
- 4 Anand L, Guo C. Granular materials: constitutive equations and strain localization. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 43: 1701~1733
- 5 Blumenfeld R. Stresses in isostatic granular systems and emergence of force chains. *Physical Review Letters*, 2004, 93(10): 108301
- 6 Luding S. Granular media: Information propagation. *Nature*, 2005, 435: 159~160
- 7 Eelaskar SA, Godoy LA, Gray DD, et al. A viscoplastic approach to model the flow of granular solids. *International Journal of Solids and Structures*, 2000, 37: 2185~2214
- 8 Nemat-Nasser S, Zhang J. Constitutive relations for cohesionless frictional granular materials. *International Journal of Plasticity*, 2002, 18: 531~547
- 9 Lun CKK. Kinetic theory for granular flow of dense, slightly inelastic, slightly rough spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 1991, 233: 539~559
- 10 Volfson D, Tsimring LS, Aranson IS. Partially fluidized shear granular flows: Continuum theory and molecular dynamics simulations. *Physical Review E*, 2003, 68: 021301
- 11 Babic M, Shen HH, Shen HT. The stress tensor in granular shear flows of uniform, deformable disks at high solids concentrations. *Journal of Fluid Mechanics*, 1990, 219: 81~118
- 12 Campbell C. Granular shear flows at the elastic limit. *Journal of Fluid Mechanics*, 2002, 465: 261~291
- 13 Lun CKK, Bent AA. Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, 258: 335~353
- 14 Zhang DZ, Rauenzahn RM. A viscoelastic model for dense granular flows. *Journal of Rheology*, 1997, 41(6): 1275~1298
- 15 刘凯欣, 郑文刚, 高凌天. 脆性材料动态破坏过程的数值模拟. 计算力学学报, 2003, 20(2): 127~132 (Liu Kaixin, Zheng-wengang, Gao Lingtian. Numerical simulation for the dynamic failure process in brittle materials. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2003, 20(2): 127~132 (in Chinese))
- 16 Sun Qicheng, Wang Guangqian. Numerical simulation of Aeolian sediment transport. *Chinese Science Bulletin*, 2001, 46(9): 786~789
- 17 Tang Zhiping. Three-dimensional DEM theory and its application to impact mechanics. *Science in China (Series E)*, 2001, 44(6): 561~571
- 18 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 (Xu Yong, Sun Qicheng, Zhang Ling, et al. Advances in discrete element methods for particulate materials. *Advances in Mechanics*, 2003, 33(2): 251~260 (in Chinese))
- 19 Zhang DZ, Rauenzahn RM. Stress relaxation in dense and slow granular flows. *Journal of Rheology*, 2000, 44(5): 1019~1041
- 20 Shen HH, Sankaran B. Internal length and time scales in a simple shear granular flow. *Physical Review E*, 2004, 70: 051308
- 21 Luding S, Latzel M, Volk W, et al. From discrete element simulations to a continuum model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2001, 191: 21~28
- 22 Johnson PC, Jackson R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing. *Journal of Fluid Mechanics*, 1987, 176: 67~93
- 23 Goldenberg C, Goldhirsch I. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. *Physical Review Letters*, 2002, 89(8): 084302
- 24 Ball RC, Blumenfeld R. Stress field in granular systems: loop forces and potential formation. *Physical Review Letters*, 2002, 88(11): 115505
- 25 Goldenberg C, Goldhirsch I. Friction enhances elasticity in granular solids. *Nature*, 2005, 435: 188~191
- 26 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 (Wu Qingsong, Hu Maobin. Advances on dynamic modeling and experimental studies for granular flow. *Advances in Mechanics*, 2002, 32(2): 250~258 (in Chinese))
- 27 Hanes DM, Inman DL. Observations of rapidly flowing granular-fluid materials. *Journal of Fluid Mechanics*, 1985, 150: 357~380
- 28 Savage SB, Sayed M. Stresses developed by dry cohesionless granular materials sheared in an annular shear cell. *Journal of Fluid Mechanics*, 1984, 142: 391~430
- 29 Qin H. Flow behavior of granular materials: quasi-static to inertial transition. [Master Thesis]. University of Florida, 2000

THE QUASI-SOLID-LIQUID PHASE TRANSITION OF NON-UNIFORM GRANULAR MATERIALS AND THEIR CONSTITUTIVE EQUATION¹⁾

Ji Shunying²⁾

(State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China)

Abstract Granular materials can be regarded neither as solid media, nor as liquid media, but behave as solid or liquid media under some conditions, and even there is a quasi-solid-liquid phase transition. Granular materials can be modeled with a plastic constitutive model or the kinetic theory of molecular dynamics in the quasi-static or fast flow state, respectively. However, in the quasi-solid-liquid phase transition, how to build the constitutive model is still an open problem. To develop an effective constitutive model for granular materials in the phase transition, the basic dynamic characteristics of granular materials should be determined in details. In this study, a simple shear flow of granular materials is simulated with a 3D discrete element model (DEM) in various concentrations and shear rates, and the phase transition between fast flow and quasi-static flow is obtained. Since the granular materials are normally of various sizes under natural conditions, the particles of granular flow modeled here are in a multi-size state. Based on the simulated results, it is found that the macro-stress is independent of shear rate in the solid phase, and is a linear function of the square of the shear rate in the liquid phase. In the quasi-solid-liquid phase transition, the macro-stress shows a complex correlation with the shear rate. Based on the simulated variables of macro-stress, contact time number, coordination number, and particle number of clusters, etc., the basic characteristics of granular materials in the phase transition are analyzed in details. The effective friction coefficient, net contact time number and coordination number at some medium concentrations can be treated as the phase transition point. Adopting various friction and restitution coefficients, the granular systems still have apparent quasi-solid-liquid phase transition, but their transition points are different.

Based on the dynamic behaviors of granular materials in different phases, especially from the relationship between macro-stress and shear rate, an exponential constitutive model for multi-size granular materials is developed, and some parameters are determined based on the simulation data. With the physical experimental results measured in a shear cell, the form of this constitutive model, i.e. the relationship between macro-stress and shear rate in different flow states, is validated.

Key words multi-size granular materials, quasi-solid-liquid phase transition, constitutive equation, coordination number, contact time number

Received 1 December 2005, revised 8 September 2006.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (40206004, 40610104008).

2) E-mail: jisy@dlut.edu.cn