



## 论文

# 颗粒物质剪切流动的类型-液转化特性及相变图的建立

季顺迎<sup>①\*</sup>, 孙其诚<sup>②\*</sup>, 严颖<sup>③</sup>

① 大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116023;

② 清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084;

③ 大连交通大学土木与安全工程学院, 大连 116028

\* 联系人, E-mail: jisy@dlut.edu.cn; qcsun@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2010-11-06; 接受日期: 2011-03-07; 网络出版日期: 2011-08-03

国家重点基础研究发展计划(编号: 2010CB731502, 2010CB731504)、国家自然科学基金(批准号: 10772041, 11034010)、清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室自主项目(编号: 2010-TC-1)和大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室开放课题(编号: GZ0903)资助项目

**摘要** 颗粒物质类固-液相态间的转化现象广泛存在于工程地质、自然环境和工业生产等诸多领域, 其力学特性在相态转化过程中会发生很大的变化, 是目前颗粒物质力学研究的热点和难点. 通过对颗粒物质类固-液转化过程中基本力学行为的研究, 可建立表征颗粒物质类固-液转化的相变图, 揭示类固-液转化的内在机理. 颗粒物质的类固-液转化过程可大体分为两种, 即阻塞与流动状态的转化, 以及在流动过程中类固态与类液态力学行为的转化. 本文以周期边界条件下的多分散颗粒系统为研究对象, 采用离散单元方法数值模拟了单剪流动过程; 分析了在不同体积分数和剪切速率下颗粒系统的平均应力、配位数、净接触时间数、有效摩擦系数、惯性指数和广义 Savage 数等宏观参数的分布规律; 讨论了类固-液转化的内在机理, 建立了一个以孔隙率、无量纲剪切应力和无量纲剪切速率为基本变量的相变图. 该相变图不仅能够表征出颗粒物质由阻塞向流动状态的转变, 同时也能够描述颗粒物质在剪切流动中发生类固-液转化的演化规律.

**关键词** 颗粒物质, 类固-液转化, 剪切流动, 相变图**PACS:** 45.70.Mg, 47.57.Gc, 83.80.Fg

## 1 前言

颗粒物质是由大量离散固体颗粒组成的复杂体系, 可在外界激励下表现出类似于固体或液体的力学特性, 并在一定条件下发生相互转化<sup>[1-4]</sup>. 颗粒物质不仅在阻塞(Jamming)和流动(Unjamming)状态间

具有明显的由静态向流动转化的固-液相变现象<sup>[5-7]</sup>, 而且在剪切流动过程中也会因体积分数或剪切速率的变化而在宏观上表现出类似固体或液体的力学行为<sup>[8-11]</sup>. 许多自然现象(雪崩、滑坡、泥石流等)和工业过程(流态化、矿石储运等)都与之有关. 例如, 工程地质灾害中, 山体滑坡的发生就是一个典型的颗

引用格式: 季顺迎, 孙其诚, 严颖. 颗粒物质剪切流动的类型-液转化特性及相变图的建立. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2011, 41: 1112-1125

Ji S Y, Sun Q C, Yan Y. Characteristics in quasi-solid-liquid phase transition of granular shear flow and its phase diagram (in Chinese). Sci Sin Phys Mech Astron, 2011, 41: 1112-1125, doi: 10.1360/132011-1064

粒物质由静态向流动状态, 即由阻塞向流动转化的演化过程; 在滑坡发展过程中, 不同高程处山体碎石的快速、慢速和准静态运动则是颗粒物质在不同流动状态中表现出的类固态或类液态的力学行为. 虽然颗粒物质的类固-液转化现象早在 19 世纪末就引起了人们的关注<sup>[12]</sup>, 但对其进行系统的研究则是从 20 世纪 90 年代初开始的<sup>[13-15]</sup>. 在国内研究中, 王光谦等人<sup>[16]</sup>较早进行了颗粒物质类固-液转化特性及相应本构模型的研究; 近几年, Hou 等人<sup>[17]</sup>通过斜面流动试验研究了颗粒密集流和稀疏流的转化规律; Jiang 等人<sup>[18]</sup>基于流体动力学方法建立了颗粒固体的本构模型. 目前, 在颗粒物质剪切流动的类固-液转化研究中, 相变的发生条件和判别依据, 以及不同相态下颗粒系统的宏观物理力学特性和本构模型仍是颗粒物质研究的一个核心问题.

颗粒物质在细观尺度(即颗粒尺度)下的材料特性、组构特征和运动规律是导致其宏观类固-液转化的内在因素. 在不同流动相态下, 颗粒物质的平均应力与剪切速率的对应关系与其细观尺度下颗粒间力链的持续时间、空间长度和作用强度等因素密切相关<sup>[19-23]</sup>. 在类液态下, 颗粒分布相对稀疏, 有足够大的空间满足颗粒自由漂移而不易形成颗粒群, 此时配位数较低, 碰撞接触以瞬时二体碰撞为主, 颗粒间的随机碰撞导致有效摩擦系数较大, 系统的平均应力与剪切速率的平方成正比而与颗粒刚度无关; 在类固态下, 颗粒的体积分数较高, 颗粒紧密接触从而形成相对稳定的力链, 此时配位数较高, 接触持续时间较长, 颗粒间因相对滚动而使有效摩擦系数较低, 系统的平均应力与颗粒刚度成正比而与剪切速率无关<sup>[8,13,16,19,23]</sup>. 此外, 有效摩擦系数和惯性数的密切关系亦可作为判别颗粒系统类固-液转化的依据<sup>[24-27]</sup>. 因此, 采用剪切速率指数、配位数、接触持续时间, 以及有效摩擦系数和惯性数等参数, 可从不同角度对颗粒系统宏观力学行为进行描述, 从而全面地揭示其发生类固-液转化的规律.

类似于胶体和玻璃等无序材料的阻塞-流动相变, 颗粒物质在静态与流动间的类固-液转化主要取决于体积分数 $\phi$ 、剪切应力 $\tau$ 和颗粒温度 $T$ 等三个因素<sup>[27-31]</sup>. 近年来, 以 Liu 等人<sup>[5]</sup>的研究为代表, 颗粒体系的 $\phi^{-1}$ - $\tau$ - $T$  三维相变图相继建立起来<sup>[5,6,7,28,29]</sup>. 特别是当 $T=0$ 和 $\tau=0$ 时, 人们对颗粒系统由阻塞向流动转化的相变点, 即  $J$  点, 进行了系统的研究<sup>[30-33]</sup>. 然而, 对

于  $T$  和  $\tau$  不为零时, 对颗粒系统在流动过程中表现出来的类固-液转化的定量分析开展的比较少. 目前, Babic 等人<sup>[13]</sup>、Campbell<sup>[19]</sup>和 Ji 等人<sup>[34]</sup>主要建立了以体积分数和剪切速率为基本参量的二维相变图. 在颗粒物质的 $\phi^{-1}$ - $\tau$ - $T$  三维相变图中, 颗粒温度是一个内禀物理参量, 可描述颗粒体系的随机脉动状态, 却不能直观地描述自然界和工程实际中颗粒物质的运动行为. Babic 等人<sup>[13]</sup>最早引入无量纲剪切速率  $B$  ( $=\dot{\gamma}\sqrt{\rho D^3/K_n}$ , 这里  $\dot{\gamma}$  为剪切速率,  $\rho$  为颗粒密度,  $D$  为粒径,  $K_n$  为颗粒刚度), 合理地描述了颗粒系统在不同体积分数下的类固-液转化特性; Lu 等人<sup>[35]</sup>也采用剪切速率  $\dot{\gamma}$  代替颗粒温度  $T$ , 用压强  $P$  代替剪应力  $\tau$  建立了颗粒物质发生类固-液转化的三维屈服面, 但尚未讨论颗粒物质发生剪切流动后的类固-液转化现象. 由此可见, 如何合理地建立颗粒物质的类固-液相态图以全面地描述其在剪切流动中的类固-液转化特性尚需进一步研究.

为此, 本文将采用三维离散元方法模拟颗粒系统的简单剪切流动过程, 研究颗粒物质发生类固-液转化的条件, 以及在相变过程中配位数、接触时间、有效摩擦系数、惯性数等宏观参量的分布特性; 在此基础上以孔隙率  $e$ 、无量纲剪切应力  $\tau$  和无量纲剪切速率  $B$  为基本参量, 建立一个既可表征颗粒物质在阻塞与流动状态间的转化规律, 又可描述颗粒物质在剪切流动中类固态与类液态力学行为转化的  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图. 通过揭示颗粒物质不同运动状态的转化机理, 可有助于深入理解并解决实际工程中的颗粒力学问题.

## 2 颗粒单剪流动的离散元模型

离散元方法(Discrete Element Method, DEM)以颗粒体系内的基本颗粒为研究对象, 在细观尺度下计算每个颗粒在不同时刻的空间位置和运动状态, 可方便地描述颗粒体系的非连续特性和非平衡状态, 并确定相应的宏观物理和力学特性, 是研究颗粒物质复杂力学问题的有力工具.

在周期性边界条件下, 简单剪切流动允许主应力旋转, 比平面压缩或三轴压缩等其他剪切模式更具有一般性, 是分析颗粒系统类固-液转化特性的重要途径<sup>[12,13,19,24,28,36]</sup>. 颗粒系统在  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向的尺度

分别为  $a$ ,  $b$  和  $c$ , 在  $x$  方向上的剪切速率为  $\dot{\gamma} = V/b$ , 而在  $y$  和  $z$  方向做随机脉动. 这里  $V$  为颗粒系统上下边界的相对流动速度. 当颗粒从任一方向流出边界时, 同时从其相对边界流入, 以保持颗粒系统质量守恒. 特别是, 当颗粒沿  $y$  向从上(或下)边界流出计算域, 并再次从下(或上)边界流入计算域时, 其在  $x$  方向上的速度为  $-(或+)V/2$ , 以保持体系中的速度分布梯度. 为获得单剪颗粒系统在不同体积分数, 特别是低体积分数下的平衡状态, 一般不考虑重力的影响, 由此可获得系统在不同体积分数下的类固-液转化过程<sup>[8,13,15,19]</sup>. 对于不同体积分数下的初始状态, 一般有两种生成方式. 一是将缩小的颗粒先随机放置到设计的计算域内, 然后再令其缓慢生长到所需粒径; 二是将颗粒随机或规则地放置于扩大后的计算域内, 然后通过压缩边界的方式获得所需计算域. 本文分别对以上两种方法进行了尝试, 最后采用颗粒生成的方式以快速获得具有良好随机排列效果的初始样本.

本文采用多分散粒径的颗粒系统 (Polydisper-sed), 平均直径  $D=0.01$  m, 并在  $[0.9D, 1.1D]$  区间按均匀概率分布. 颗粒密度  $\rho=1.0 \times 10^3$  kg/m<sup>3</sup>, 平均刚度系数  $K_n=1.0 \times 10^4$  N/m, 体积分数  $\phi=0.2 \sim 0.7$ , 剪切速率  $\dot{\gamma}=1.0 \sim 1.0 \times 10^4$  s<sup>-1</sup>, 颗粒间的摩擦系数  $\mu=0.5$ , 回弹系数  $e=0.7$ . 颗粒接触模型采用符合 Mohr-Coulomb 摩擦定律的线性黏弹性接触模型, 可直接定义颗粒回弹系数和接触时间, 能很好地模拟颗粒物质的剪切流动<sup>[13,19,37-39]</sup>.

考虑到粗糙颗粒在随机疏松排列时的体积分数  $\phi_{RLP} \approx 0.55$ <sup>[3,33,40]</sup>, 选用该体积分数下的计算域  $a, b$  和  $c$  均为  $10D$ . 该尺寸的计算域可以消除边界的影响, 计算结果具有良好的统计意义<sup>[8,19,34]</sup>. 当取剪切速率  $\dot{\gamma}=1.0 \times 10^2$  s<sup>-1</sup> 时, 该颗粒系统的无量纲平均应力  $\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} D / K_n$  随剪切应变  $\gamma$  的变化情况如图 1 所示. 这里令剪切应变  $\gamma = \dot{\gamma}t$ , 可作为颗粒系统剪切流动时间的量度. 从图 1 中无量纲应力分量  $\sigma'_{xx}$  和  $\sigma'_{xy}$  的变化趋势可以看出, 当颗粒系统进入动态平衡状态后, 其平均应力在均值处上下波动. 在颗粒系统的动态平衡状态下, 其它各状态参量也保持相对稳定<sup>[41]</sup>. 图 2(a)所示是  $\phi=0.55$  时的颗粒分布状态, 颜色代表颗粒大小; 达到剪切流动平衡状态后, 颗粒在水平方向上的速度分布如图 2(b)所示, 其中横坐标和纵坐标采用

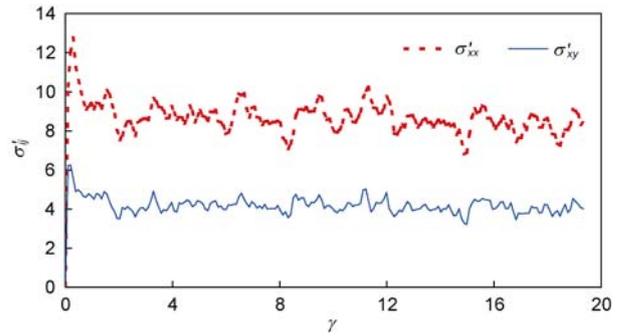


图 1 (网络版彩图) 颗粒系统在单剪流动中无量纲平均应力的动态平衡过程

Figure 1 (Color online) Dynamic equilibrium process of dimensionless stress of the granular system in simple shear.

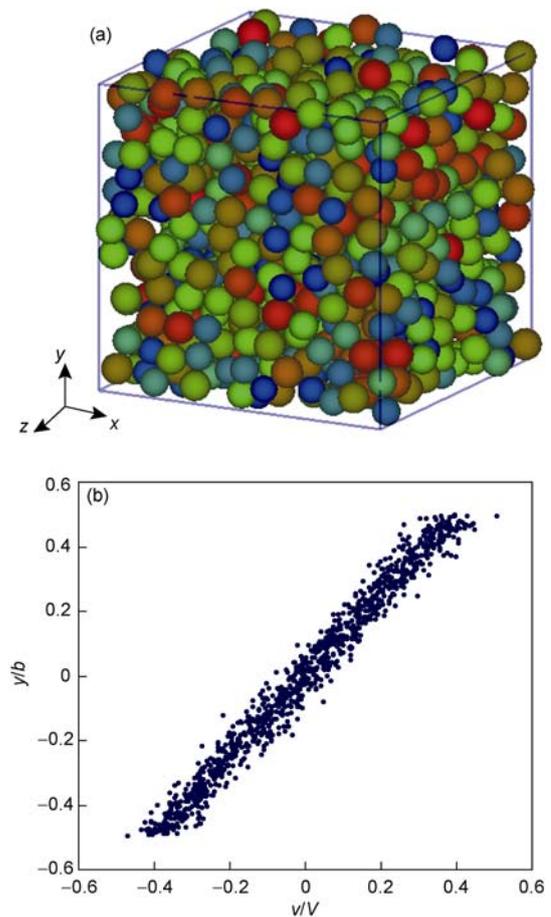


图 2 (网络版彩图) 颗粒系统的初始排列以及简单剪切流动稳定后水平速度的分布

(a) 多分散颗粒的随机排列; (b) 颗粒系统的水平流动速度分布  
Figure 2 (Color online) Initial packing and horizontal velocity distribution of the steady state flow of the granular system. (a) Random packing of the polydispered granular system; (b) horizontal velocity distribution of the granular system.

无量纲速率  $v/V$  和无量纲高度  $y/b$ . 可以看到, 在单剪流动状态下, 颗粒系统在水平方向的速度基本呈线性分布, 并保持一定的脉动速度使颗粒系统具有相应的颗粒温度.

采用以上具有周期边界的单剪流动颗粒系统, 在不同  $\phi$  和  $\dot{\gamma}$  下进行离散单元计算, 通过对无量纲平均应力、接触时间数和配位数进行分析, 并在此基础上确定系统的有效摩擦系数、惯性数、Savage 数和颗粒温度等, 可较全面地分析颗粒物质类固-液相态的转化特性. 相关宏观参数的定义和物理意义见附录 A.

### 3 颗粒流动的类型-液相态的宏观特性及转化过程

#### 3.1 类固态和类液态的宏观特性

在颗粒系统的剪切流动中, 力链的作用强度、持续时间和空间结构是其不同宏观特性的决定因素, 可从不同角度反映颗粒系统的类固态或类液态力学特性. 颗粒系统平均应力反映的是其内部力链的作用强度, 并在不同流动相态下与  $\dot{\gamma}$  呈不同的对应关系. 为分析  $\dot{\gamma}$  对平均剪切应力的影响, 这里采用两个无量纲参量, 即无量纲剪切应力  $\sigma'_{xy} = \sigma_{xy} D / K_n$  和广义 Savage 数  $N_{sav} = \rho D^2 \dot{\gamma}^2 / \sigma_{xy}$ . 通过对不同  $\phi$  和  $\dot{\gamma}$  下颗粒系统单剪流动的离散元模拟,  $\sigma'_{xy}$  与  $N_{sav}$  的对应关系如图 3 所示. 当  $\phi$  较大时(如  $\phi > 0.59$ ),  $N_{sav}$  在  $10^{-7}$  到  $10^{-1}$  范围内,  $\sigma'_{xy}$  基本保持为一个与  $\phi$  相关的常数  $C_{ij}(\phi)$ , 而与  $N_{sav}$  无关, 即  $\sigma_{ij} D / K_n = C_{ij}(\phi)$ . 这表明颗粒系统的平均应力  $\sigma_{ij}$  与颗粒刚度  $K_n$  成正比, 而与  $\dot{\gamma}$  无关; 当  $\phi$  较小时(如  $\phi < 0.45$ ),  $N_{sav} = \rho D^2 \dot{\gamma}^2 / \sigma_{xy}$  为一个关于  $\phi$  的常数  $C'_{ij}(\phi)$ , 而与  $\sigma'_{xy}$  无关, 即  $\rho D^2 \dot{\gamma}^2 / \sigma_{xy} = C'_{ij}(\phi)$ . 这表明平均应力  $\sigma_{xy}$  与  $\dot{\gamma}^2$  成正比, 而与  $K_n$  无关. 以上分析说明, 当  $\phi$  值较高时, 颗粒系统表现为类固态行为; 而当  $\phi$  值较低时, 则表现为类液态行为. 然而, 在中等  $\phi$  时(如  $\phi = 0.58$ ), 无量纲剪应力和广义 Savage 数均不为常数, 而是与  $\dot{\gamma}$  相关的函数, 此时颗粒系统呈现类固-液转化特性.

在颗粒系统的不同流动状态下, 有效摩擦系数

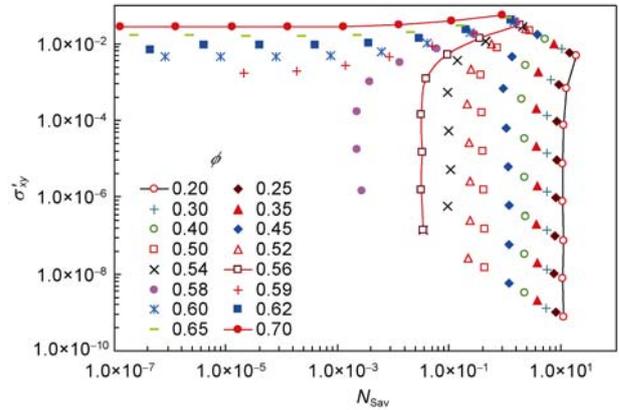


图 3 (网络版彩图) 不同广义 Savage 数下的剪切应力分布  
Figure 3 (Color online) Shear stress distribution with different generalized Savage.

$\mu_e$  也存在很大差异. Savage 等人<sup>[42]</sup>最早通过环剪试验发现,  $\mu_e$  随剪切速率的加快而增大. 目前  $\mu_e$  已成为表征颗粒系统固-液相变特性的一个重要参量<sup>[15,19,20,39]</sup>. 在类液态快速流动中, 颗粒间碰撞剧烈,  $\mu_e$  较高, 并与剪切速率成正比; 而在类固态准静态流动中, 颗粒间接触紧密,  $\mu_e$  基本保持为一个定值, 与剪切速率无关<sup>[19,20,37,39]</sup>. 由于颗粒系统的惯性数  $I$  能够合理地表征其运动状态, 可将不同流动状态下的  $\mu_e$  设为  $I$  的函数<sup>[20,24-26,40,43]</sup>, 即

$$\mu_e(I) = \mu_1 + \frac{\mu_2 - \mu_1}{I_0/I + 1}, \quad (1)$$

式中,  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  和  $I_0$  均为颗粒材料常数. 对于准静态,  $I=0$ ,  $\mu_e = \mu_1$ ; 随着  $\dot{\gamma}$  的增加, 惯性数  $I$  亦相应增加<sup>[40]</sup>, 此时  $\mu_e$  趋向于其最大值  $\mu_2$ .

在不同  $\phi$  和  $\dot{\gamma}$  下, 颗粒单剪流动中  $I$  和  $\mu_e$  的对应关系如图 4 所示, 由此对 (1) 式进行拟合有:  $\mu_1 = \tan(20.3^\circ) = 0.37$ ,  $\mu_2 = \tan(56.2^\circ) = 1.49$ ,  $I_0 = 4.5$ . 此外,  $I$  与  $\mu_e$  的对应关系还可用来判别颗粒系统的流动相态. 一般地, 当  $I < 10^{-3}$  时为类固态流动, 即准静态; 当  $I > 10^{-1}$  时为类液态流动, 即快速流动; 当  $10^{-3} < I < 10^{-1}$  时为密集流, 此时颗粒系统发生类固-液转化<sup>[20,24]</sup>.

在颗粒物质的类固-液转化中, 颗粒间力链的持续时间是表征颗粒内部作用特性的重要参量<sup>[10,19,20,37,39,44]</sup>. 颗粒系统中力链的持续时间可以通过接触时间数  $m$  来表述<sup>[8,34]</sup>. 在不同体积分数和剪切

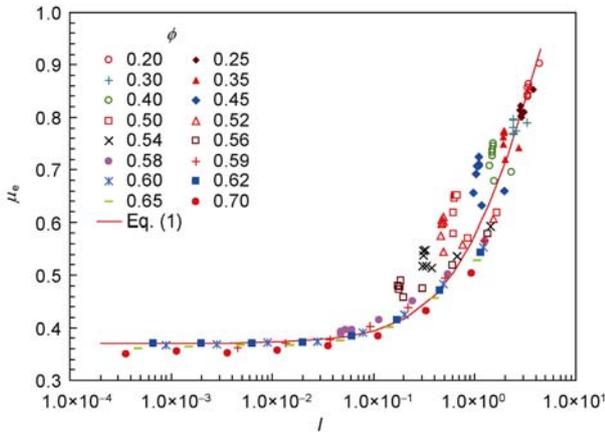


图4 (网络版彩图) 不同惯性数  $I$  与有效摩擦系数  $\mu_e$  的对应关系及拟合曲线

Figure 4 (Color online) The relationship between inertial number  $I$  and effective friction coefficient  $\mu_e$  and its fitting curve.

速率下, 净接触时间数  $m'$  的计算结果如图5所示, 其中  $m' = m - 1$ ,  $B = \dot{\gamma} \sqrt{\rho D^3 / K_n}$ . 在低体积分数下(如  $\phi = 0.20$ ), 净接触时间数  $m'$  受  $B$  影响较小, 且  $m' \rightarrow 0.1$ . 这表明颗粒在稀疏分布状态下趋于二体碰撞, 剪切速率对接触时间的影响不明显; 在高体积分数下(如  $\phi = 0.70$ ),  $m'$  随  $B$  的增加而减小, 并在双对数坐标下呈线性关系. 这表明颗粒在密集分布状态下, 剪切作用使颗粒间的力链断开, 接触时间随  $\dot{\gamma}$  的增加而降低. 在中体积分数下(如  $\phi = 0.58$ ),  $m'$  有一个随  $B$  的增加先上升后降低的过程. 这表明在中体积分数下,  $\dot{\gamma}$  的增加会加速颗粒间的接触频率和持续时间; 然而, 随着  $\dot{\gamma}$  的进一步增加, 颗粒间力链又会在快速剪切流动

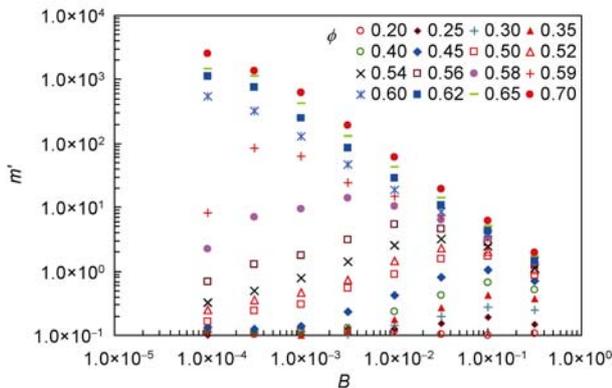


图5 (网络版彩图) 不同  $B$  和  $\phi$  下净接触时间数的分布特性  
Figure 5 (Color online) The distribution characteristics of net contact time number with different  $B$  and  $\phi$ .

中不断分开, 从而降低接触时间.

对于随机排列的颗粒体系, 其呈现类固态力学行为的主要因素是其内部能够形成相对稳定的力链结构. 对于任一颗粒, 其能够保持相对稳定的力学平衡条件是其所受约束力个数达到甚至超过其自由度. 对于  $\mu \rightarrow \infty$  的单分散颗粒系统, 其保持力学稳定并呈类固态状态的临界配位数  $Z_c = d + 1$ ; 对于  $\mu = 0$  的单分散颗粒体系, 有  $Z_c = 2d$ , 这里  $d$  为颗粒系统的维数<sup>[33,45,46]</sup>. 但对于多分散颗粒的静态体系, 不同颗粒级配下的  $Z$  有一定的差异<sup>[47]</sup>. 本文采用多分散颗粒, 摩擦系数  $\mu = 0.5$ , 由此得到的不同  $\phi$  和  $\dot{\gamma}$  下的配位数  $Z$  如图6所示. 在低体积分数下,  $Z$  值较低, 且随  $B$  的增加而增大, 并在双对数坐标下呈线性关系; 在高体积分数下,  $Z$  在低剪切速率下基本保持稳定, 有  $Z_{max} = 6.5$ , 然后随  $B$  的增大而下降. 无论是低体积分数还是高体积分数,  $Z$  均随  $B$  的增加而趋向于临界配位数  $Z_c = 4.0$ . 因此, 依据不同  $B$  和  $\phi$  时颗粒系统的  $Z$  值可判断其是否具有相对稳定的力链结构, 以确定其呈现类固态或类液态的力学行为.

### 3.2 类固-液相态的转化过程

在颗粒系统的剪切流动中, 平均应力、有效摩擦系数、净接触时间数和配位数等宏观参数不仅能够表征出类固态和类液态的统计特性, 还可以进一步描述颗粒物质在类固-液转化过程中的演化规律. 在颗粒系统发生剪切流动时, 其平均应力与剪切速率有如下关系<sup>[8,13]</sup>

$$\sigma_{ij} = a_{ij} K_n^{1-c_{ij}} (\rho \dot{\gamma}^2)^{c_{ij}} D^{3c_{ij}-1}, \quad (2)$$

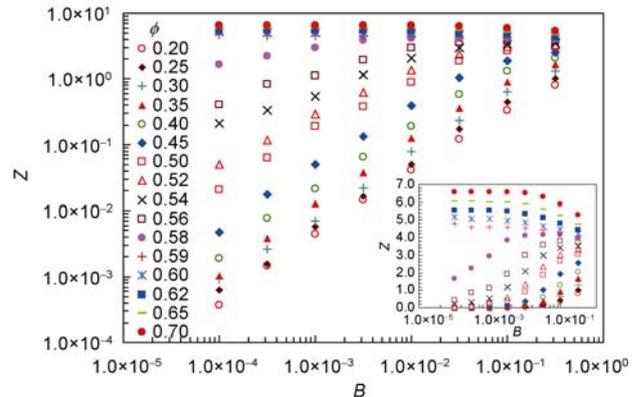


图6 (网络版彩图) 不同  $B$  和  $\phi$  下配位数的分布特性  
Figure 6 (Color online) The distribution characteristics of coordinate number with different  $B$  and  $\phi$ .

式中,  $c_{ij}$  是表征应力与剪切速率关系的幂指数, 这里称其为速率指数.  $a_{ij}$  和  $c_{ij}$  均是体积分数  $\phi$ 、无量纲剪切速率  $B$ 、颗粒摩擦系数  $\mu$  和回弹系数  $e$  的函数, 即

$$a_{ij} = a_{ij}(\phi, B, \mu, e), \quad c_{ij} = c_{ij}(\phi, B, \mu, e).$$

在类固态流动下,  $\sigma_{ij}$  与  $K_n$  成正比, 而与  $\dot{\gamma}^2$  无关, 即  $c_{ij} \approx 0$ , 有

$$\sigma_{ij} = a_{ij}(\phi, \mu, e) K_n / D. \quad (3)$$

在类液态流动下,  $\sigma_{ij}$  与  $\dot{\gamma}^2$  成正比, 而与  $K_n$  无关, 即  $c_{ij} \approx 1$ , 有

$$\sigma_{ij} = a_{ij}(\phi, \mu, e) \rho D^2 \dot{\gamma}^2. \quad (4)$$

在颗粒物质的类固-液相态转化过程中,  $c_{ij} \in [0.0, 1.0]$ . 对于剪切应力  $\sigma_{xy}$ , 本文在不同  $\phi$  和  $B$  下确定的  $c_{xy}$  值如图 7(a) 所示. 这里不同  $B$  所对应的  $c_{xy}$  值是通过平均应力对剪切速率进行中心插值确定的. 对于快速剪切, 如  $B=0.178$  时,  $c_{xy}$  随  $\phi$  增加而缓慢降低; 当  $B$  较小时, 如  $B < 10^{-2}$  时,  $c_{xy}$  在低体积分数下保持为 1.0 左右, 而在  $\phi = 0.58$  附近随  $\phi$  增加而迅速下降, 并与快速剪切下的数值相交于一点  $\phi_t = 0.58$ , 此时有  $c_{xy} = 0.30$ . 由此,  $\phi_t = 0.58$  是颗粒系统在剪切流动中的类固-液转化点. 当  $\phi > \phi_t$  时, 颗粒系统呈类固态流动, 而当  $\phi < \phi_t$  时, 则呈类液态流动.

类似于图 7(a) 中  $c_{xy}$  随  $\phi$  和  $B$  的变化规律, 有效摩擦系数  $\mu_e$  也有相似的特性, 如图 7(b).  $\mu_e$  随  $\phi$  的增加而降低, 且在不同剪切速率下降低的速率不同, 使得其在  $\phi = 0.52$  处形成交叉点, 此时  $\mu_e = 0.61$ . 另外, 对于慢速剪切流动, 即当  $B < 1.0 \times 10^{-2}$  时, 在  $\phi = 0.58$  处,  $\mu_e$  存在一个拐点. 这里取临界体积分数  $\phi_t = 0.58$ , 其所对应的临界有效摩擦系数定义为  $\mu_t = 0.37$ . 当  $\phi > \phi_t$  时,  $\mu_e$  保持恒定, 并有  $\mu_e = \mu_t$ . Zhang 和 Campbell<sup>[15]</sup> 的研究表明, 当  $\mu_e$  不受  $\phi$  和  $\dot{\gamma}$  影响为定值时, 颗粒系统会呈现为类固态力学行为, 且该  $\mu_e$  值可作为判别颗粒系统类固-液转化的依据. 因此, 从图 7(b) 所示的  $\mu_e$  分布可以确定, 当  $\phi > \phi_t$  时, 有  $\mu_e < \mu_t$ , 颗粒系统呈类固态流动, 而当  $\phi < \phi_t$  时, 则  $\mu_e > \mu_t$ , 呈类液态流动.

此外, 作为描述颗粒系统内力链时间和空间分布特性的净接触时间数  $m'$  和配位数  $Z$ , 它们在不同  $\phi$  和  $B (= \dot{\gamma} \sqrt{\rho D^3 / K_n})$  下的分布规律如图 7(c) 和 7(d). 可

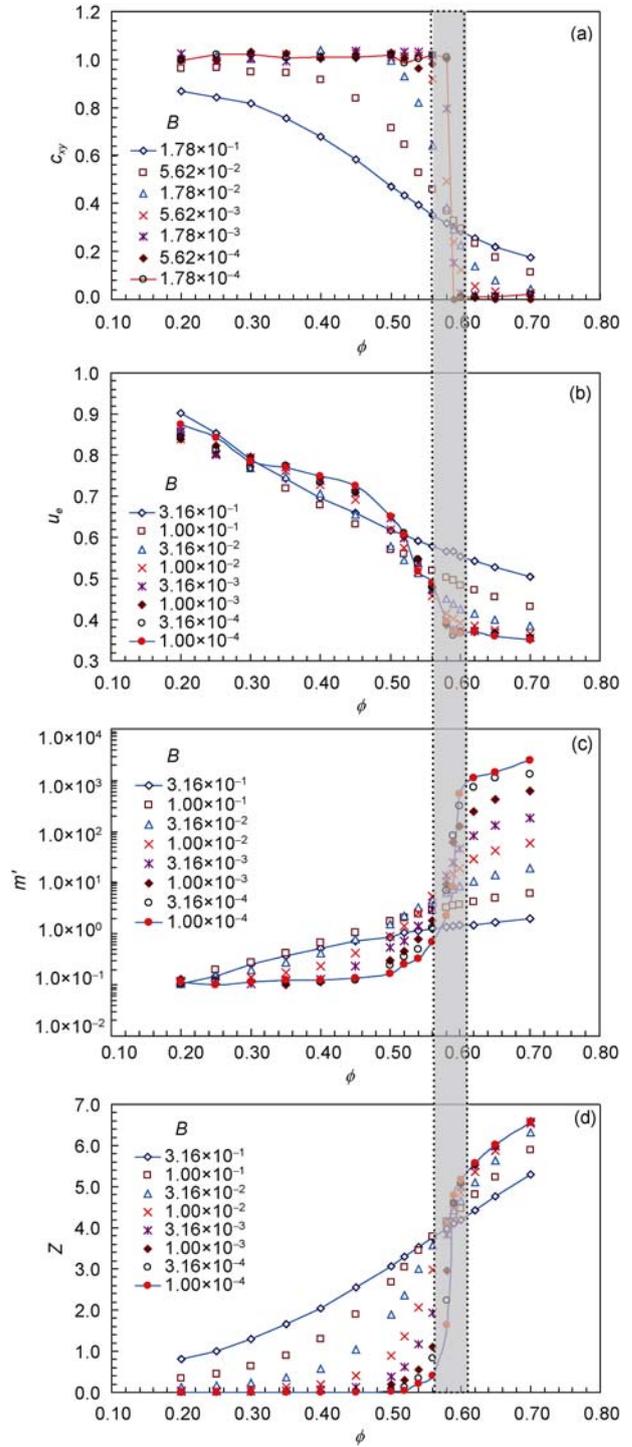


图 7 (网络版彩图) 颗粒物质在类固-液转化过程中各宏观参量的分布规律  $C_{xy}$  (a),  $\mu_e$  (b),  $m'$  (c),  $Z$  (d), 及相变转化区  
 Figure 7 (Color online) The distribution of macro parameters  $C_{xy}$  (a),  $\mu_e$  (b),  $m'$  (c),  $Z$  (d), of granular media during quasi-solid-liquid transition and phase transition zone.

以发现,  $m'$ 和  $Z$  在不同  $\dot{\gamma}$ 下均随  $\phi$ 的增加而增加. 当  $\dot{\gamma}$ 较快时均随  $\dot{\gamma}$ 呈连续渐进增长, 而当  $\dot{\gamma}$ 较低时, 均会在  $\phi_c=0.58$  附近有一个跳跃性增长, 并且不同  $\dot{\gamma}$ 下的  $m'$ 和  $Z$  均在  $\phi_c$ 处相交. 当体积分数  $\phi > \phi_c$ 时,  $m'$ 和  $Z$ 均随  $B$ 的降低而增大, 颗粒系统更多地表现为类固态的力学行为; 当体积分数  $\phi < \phi_c$ 时,  $m'$ 和  $Z$ 均随  $B$ 的降低而减小, 且有  $m' \rightarrow 0.1$ ,  $Z \rightarrow 0.0$ , 颗粒系统呈类液态流动. 在  $\phi_c$ 附近,  $\dot{\gamma}$ 对  $m'$ 和  $Z$ 的影响均不显著, 且有  $m'_c=1$ 和  $Z_c=4.1$ . 因此, 交叉点  $(\phi_c, Z_c)$ 和  $(\phi_c, m'_c)$ 均可作为判别颗粒物质类固-液转化的依据.

通过对颗粒系统单剪流动的离散元计算表明, 在不同  $\phi$ 和  $\dot{\gamma}$ 下的速率指数  $c_{ij}$ 、有效摩擦系数  $\mu_e$ 、配位数  $Z$ 和净接触时间数  $m'$ 均表征出颗粒物质的类固-液转化特性, 并存在相应的相变体积分数  $\phi_c$ . 然而, 不同参量所对应的临界体积分数并不完全相同. 这是由于颗粒系统的类固-液转化是一个渐进过程, 各参量在相变区对体积分数的敏感性存在一定的差异, 从而导致不同参量表征的相变点略有差异.

## 4 颗粒剪切流动中类固-液转化相变图的建立及物理内涵

### 4.1 类固-液转化相变图的建立

在以上颗粒剪切流动的类型-液转化特性中, 主要针对体积分数和剪切速率两个参量对流动状态的影响进行了分析. 这也是诸多颗粒物质类固-液相变研究的重点<sup>[13,19,37,43]</sup>. 然而, 在颗粒物质的相变过程中, 颗粒物质的平均应力是影响颗粒相变状态的另一个重要参数. 类似于胶体、玻璃等无序材料的玻璃态转化, 采用  $\phi^{-1}-\tau-T$  相变图能够清晰地表明颗粒物质在阻塞-流动过程中的转化条件, 如图 8 所示<sup>[5-7,28,35,48]</sup>. 在该相变图中, 特别针对  $T=0$ 和  $\tau=0$ 时颗粒系统在  $\phi^{-1}$ 轴上的相变点, 即  $J$ 点开展了大量的研究工作, 并给出了相应的临界体积分数  $\phi_c$ 和临界配位数  $Z_c$ <sup>[7,28,29,36,49,50]</sup>. 以往相变图主要侧重于建立颗粒物质由静态向流动状态的转化, 而对于颗粒物质在流动过程中所呈现的类型-液转化规律尚未建立.

为此, 本文借鉴  $\phi^{-1}-\tau-T$  相变图对颗粒物质剪切流动时的类固-液相变特性进行分析. 由于颗粒物质在剪切流动中的类固-液转化特性有别于其阻塞-流

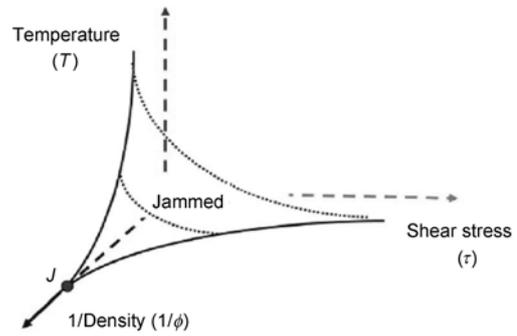


图 8 颗粒物质阻塞-流动转化的相变图<sup>[7]</sup>  
Figure 8 Jamming phase diagram of granular media [7].

动状态的相态转变<sup>[10]</sup>. 因此在借鉴颗粒物质阻塞-流动状态转化的  $\phi^{-1}-\tau-T$  相变图的同时, 需针对颗粒剪切流动的类型-液转化特性进行相应的改进.

首先, 在阻塞-流动相变图中采用了体积分数的倒数  $\phi^{-1}$ . 由于颗粒物质相变点的临界体积分数在  $\phi_c=0.58$  附近,  $\phi^{-1}$ 在该点的微小变化就会引起流动状态的显著改变. 特别在低体积分数下, 相变图在结构上对  $\phi^{-1}$ 值过于敏感. 因此, 本文采用孔隙率  $e (=1-\phi)$  表征颗粒物质的相变图, 其有更加明确的物理意义. 此外, 孔隙率  $e$ 与变量  $\phi^{-1}$ 具有相同的变化趋势, 因此采用孔隙率  $e$ 作为基本变量在一定意义上也延续了  $\phi^{-1}-\tau-T$ 相变图的基本特性.

其次, 相变图中的另一个基本变量可选用压强  $P$  (即正应力  $\sigma_{yy}$ )<sup>[35,51]</sup>或剪切应力  $\tau$  (即  $\sigma_{xy}$ )<sup>[7,28,29,52]</sup>. 考虑颗粒物质因剪切流动而发生类固-液转化时, 主要是因为剪切应力超过了相应的剪切强度, 因此选用剪切应力能够更合理地描述其相变特性. 为进一步考虑颗粒直径  $D$ 和刚度  $K_n$ 等材料性质对系统剪切流动状态的影响, 本文选用无量纲剪切应力  $\sigma'_{xy} = \sigma_{xy}D/K_n$  作为相变图的基本变量, 并简作  $\tau$ .

最后, 对颗粒物质剪切流动中类固-液转化的判别, 一般广泛地采用剪切速率, 而非颗粒温度<sup>[12,13,19,35,40,42]</sup>. 这主要是由于剪切速率是一个外界可控物理量, 而颗粒温度更多地表征颗粒系统的内在物理状态. 从本文单剪流动中无量纲剪切速率  $B (= \dot{\gamma}\sqrt{\rho D^3/K_n})$ 与无量纲颗粒温度  $T^* (=TD/K_n)$ 的对应关系 (如图 9) 可以看出, 剪切速率在一定程度上也能够代表颗粒温度. 当然, 作为颗粒体系的一个内禀物理量, 颗粒温度与剪切速率之间没有必然的联系. 由此, 图 9 表征

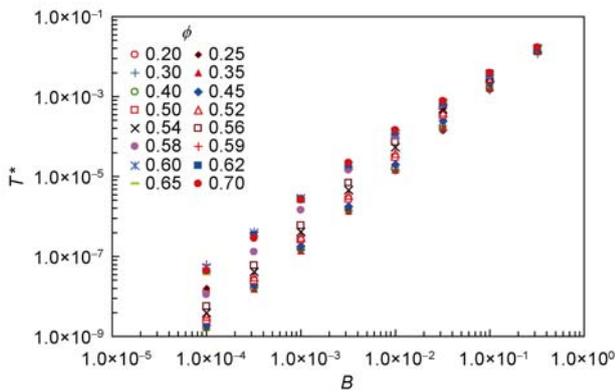


图9 (网络版彩图) 单剪流动中无量纲剪切速率  $B$  与无量纲颗粒温度  $T^*$  的对应关系

Figure 9 (Color online) The relationship between dimensionless shear rate  $B$  and granular temperature  $T^*$  of granular media in simple shear.

的  $B$  与  $T^*$  的对应关系并不适用于所有颗粒系统, 特别是非剪切流动的颗粒体系. 虽然如此, 但其可推广到其它具有剪切流动状态的颗粒体系, 如环剪、斜面流等. 因此, 剪切速率可作为描述剪切流动颗粒系统类固-液相变的一个基本参量.

为此, 本文采用孔隙率  $e$ 、无量纲剪切应力  $\tau$  和无量纲剪切速率  $B$  等三个基本参量建立颗粒物质剪切流动的类固-液相变图, 即  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图, 如图 10 所示. 该图中的  $\sigma'_{xy}$  即为无量纲剪切应力  $\tau$ , 且  $\sigma'_{xy}$  和  $B$  均采用了对数坐标. 该  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图表征了不同孔隙率和剪切速率下颗粒系统发生剪切流动所对应的剪切应力, 因此又可视作颗粒系统发生剪切流动的屈服面. 当剪切应力低于该屈服面时, 颗粒系统表现为阻塞状态; 当剪应力位于该屈服面上时, 则表现为流动状态. 由此可见, 该相变图中的屈服面能够反映出颗粒系统在阻塞与流动状态之间的转化规律. 然而, 对于颗粒物质流动时在屈服面上不同位置处所对应的力学特性, 还需要对该相变图的物理内涵进一步分析.

#### 4.2 类固-液转化相变图的物理内涵

从颗粒系统相变图中可以发现,  $e$ ,  $\tau$  和  $B$  值在准静态下均趋于各自的最小值. 因此, 为观察它们分别取最小值时相变曲面在  $e$ - $\tau$ 、 $B$ - $\tau$  和  $B$ - $e$  坐标平面上的交线, 这里对该相变曲面在三个坐标平面上进行投影, 如图 11 所示, 其中等值线为投影平面外另一坐

标变量的数值. 可以发现, 该相变图在  $B$  趋于极小值时在  $e$ - $\tau$  平面上大体呈双曲线型, 而当  $\tau$  和  $e$  分别趋于极小值时在  $e$ - $B$  面和  $\tau$ - $B$  平面上均大体呈抛物线型. 也就是说, 在高体积分数(低孔隙率)下, 平均应力随剪切速率的增加而迅速增加.

颗粒物质类固-液转化的  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图显示的是颗粒流动时  $e$ ,  $\tau$  和  $B$  等三个状态参量的空间分布情况及相互关系, 也表明了颗粒系统剪切流动的发生条件. 但是, 颗粒物质发生剪切流动后, 其流动状态并非均呈现为类液态的力学行为, 还会表现出类固态的力学行为, 并在一定区域内发生类固-液转化. 正如上节所述, 对颗粒物质的类固-液转化特性可通过速率指数  $c_{ij}$ 、有效摩擦系数  $\mu_e$ 、净接触时间数  $m'$ 、配位数  $Z$ 、惯性数  $I$  等物理量进行判别. 它们所描述的颗粒物质基本力学特性是一致的. 这里选用  $Z$ , 对其在各坐标平面上做等值线, 如图 12 所示. 依据粗糙颗粒体系的临界配位数  $Z_c=4.0$ , 可以确定该颗粒系统在剪切面上的不同流动状态.

在颗粒物质阻塞-流动的相变图研究中, 一个典型的工作是在颗粒温度和剪应力均为 0 时对相变点, 即  $J$  点的判别, 以及对相应临界体积分数  $\phi_c$  和临界配位数  $Z_c$  的确定<sup>[7,28,30,31,33,45,52]</sup>. 以往主要侧重于对二维颗粒系统  $J$  点处  $\phi_c$  和  $Z_c$  的确定, 一般对于粗糙颗粒系统有  $\phi_c=0.84$  和  $Z_c=3.0$ <sup>[7,30,48,53]</sup>. 在三维颗粒系统中, Song 等人<sup>[33]</sup> 讨论了粗糙和光滑颗粒系统的  $\phi_c$  在 0.54~0.64 之间, 同时  $Z_c$  相应地在 4~6 之间. 在本文建立的  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图中, 当剪切速率和剪切应力趋于 0 时, 也可以清晰地确定出相应的相变点, 即  $J$  点, 如图 11 和图 12 所示, 此时有  $\phi_c=0.59$ ,  $Z_c=4.1$ . 虽然, 从严格意义上说, 本文确定的  $J$  点不完全是在  $B=0$  和  $\tau=0$  时在  $e$  轴上的坐标点, 而是在  $e$  轴对  $B \rightarrow 0$  和  $\tau \rightarrow 0$  时的推演, 但也能够很好地反应出颗粒系统在  $e$  轴上相变点的位置.

类似于在  $e$  轴上存在  $J$  点, 当剪切速率和孔隙率均趋于最小值时, 在  $\tau$  轴上也存在另一个相变点, 这里称其为  $S$  点, 如图 11 和 12 所示. 该点的物理意义是当颗粒系统处于准静态时进行剪切流动所需要的最大剪应力, 此即临界剪应力  $\tau_c$ . 对于处于准静态下的颗粒系统, 其发生剪切流动时的最大剪应力符合 Mohr-Coulomb 摩擦定律, 即  $\tau_c = \mu_e \sigma$ , 这里  $\sigma$  为颗粒系统所受到的正应力. Grebenkov 等人<sup>[36]</sup> 在固定法

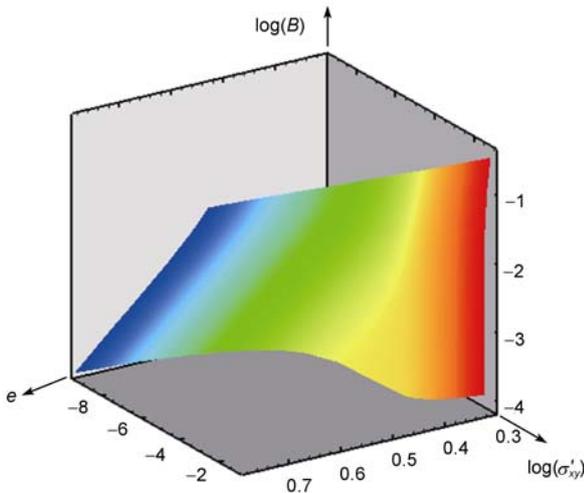


图 10 颗粒物质剪切流动中类固-液转化的  $e-\tau-B$  相变图  
 Figure 10 The  $e-\tau-B$  phase diagram of quasi-solid-liquid transition of granular media in simple shear.

向力作用下确定了颗粒系统由阻塞向流动转化的切向力, 其本质就是对  $S$  点的确定. 由于在不同  $\sigma$  下的临界剪切应力  $\tau_c$  是不同的, 因此  $\tau$  轴上的  $S$  点不是唯一的, 它会随法向力  $\sigma$  的不同而变化, 但满足  $\tau_c = \mu_c \sigma$ .

在  $e-\tau-B$  相变图中, 当颗粒系统的运动状态处于屈服面以下的阻塞状态时, 这三个基本变量(即  $e$ ,  $\tau$  和  $B$ )是相互独立的. 当其发生剪切流动而处于屈服面上时, 任何一个变量均与另外两个变量密切相关. 另外, 从这三个基本参数的取值范围来看, 孔隙率一般受颗粒的级配、粗糙度等材料性质的影响, 在不同剪切速率下有  $0.36 < e < 1.0$ . 考虑颗粒单元在密集流动状态下会有一些的重叠量, 因此取  $e$  的最小值为 0.30; 此外, 当颗粒系统的孔隙率大于 0.8 时, 其完全呈液态甚至气态, 因此颗粒系统发生类固-液转化的孔隙

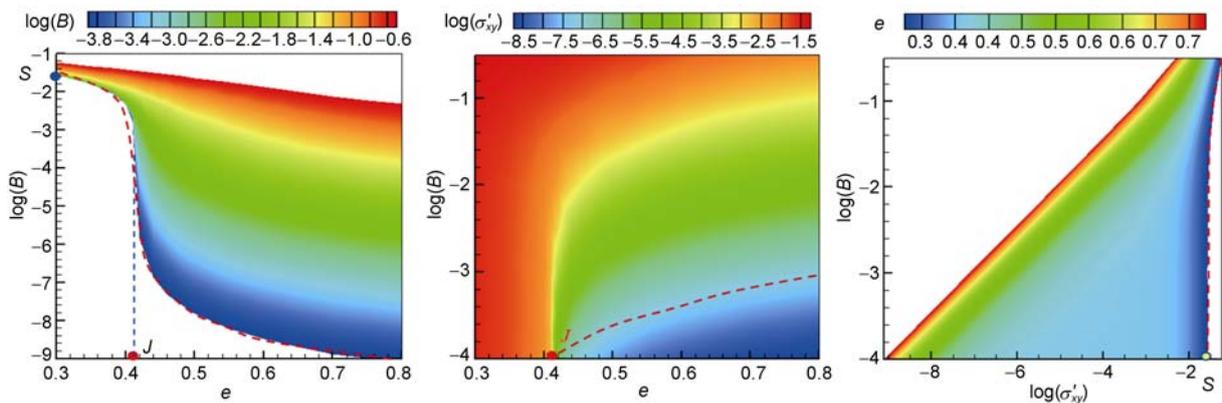


图 11  $e-\tau-B$  相变曲面在三个坐标平面上的投影及相应交线  
 Figure 11 The projection of phase transition surface on  $e-\tau-B$  coordinates and their intersection lines.

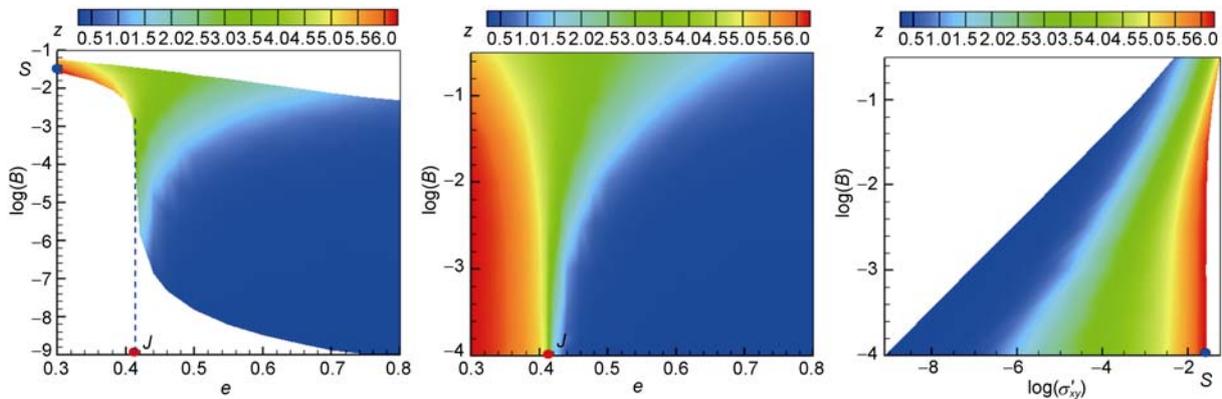


图 12 配位数在  $e-\tau-B$  相变图三个坐标平面上的投影分布  
 Figure 12 The projection of coordinate number on the  $e-\tau-B$  coordinates.

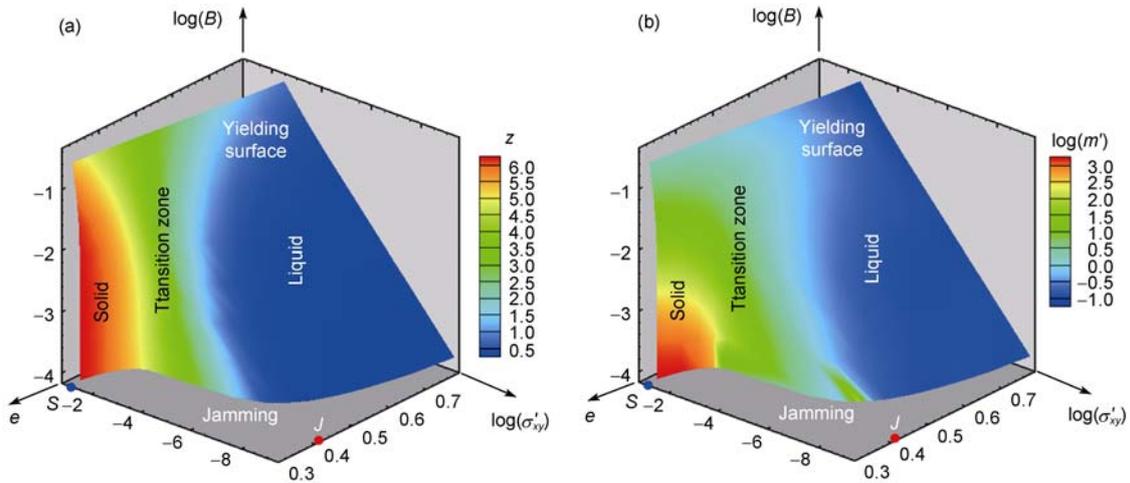


图 13 颗粒剪切流动中  $Z$  和  $m'$  表征的类固-液转化特性以及相变点 ( $J$  点和  $S$  点)

Figure 13 The characteristics of quasi-solid-liquid transition in terms of  $Z$  and  $m'$  and phase transition point (point  $J$  and point  $S$ ).

率可在 0.3~0.8 之间. 对于剪切应力, 颗粒系统在不同的工程背景和流动状态下会有很大的差异. 本文采用了无量纲剪切应力  $\sigma'_{xy} = \sigma_{xy}D/K_n$ , 当其在  $10^{-9}$ ~ $10^{-1}$  范围内变化时, 颗粒系统会发生完整的类固-液转化过程. 对于无量纲剪切速率亦是如此, 当  $B (= \dot{\gamma}\sqrt{\rho D^3/K_n})$  的取值在  $10^{-4}$ ~ $10^0$  之间时, 其覆盖了颗粒系统发生类固-液转化的范围.

如果进一步以  $Z$  和  $m'$  为参量作等值线, 将该  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图绘于图 13 中, 可更加清楚地发现该相变图能够合理地描述颗粒物质发生阻塞-流动转化以及在流动过程中表现出的类固-液转化过程, 同时还可确定相应的临界相变点  $J$  点和  $S$  点, 以及分别对应的临界体积分数  $\phi_c$  和临界剪切应力  $\tau_c$ . 由此可见, 针对颗粒物质剪切流动而建立的类固-液转化的  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图不仅可以表征出颗粒由阻塞向流动状态转化的条件以及相应的转变点 ( $J$  点和  $S$  点), 同时通过配位数、净接触时间数等参量还可对其在流动时的类固-液转化特性进行判别.

## 5 结语

颗粒物质在不同外界激励条件下可呈现出类固态或类液态的力学行为, 并发生相互转化. 本文着重

研究了颗粒系统在简单剪切条件下的流动特性及类固-液转化规律, 分析了有效摩擦系数、配位数、净接触时间数和惯性数等参量的分布规律; 借鉴颗粒物质在阻塞-流动转化的  $\phi^1$ - $\tau$ - $T$  相变图, 采用孔隙率  $e$ 、无量纲剪切应力  $\tau$  和无量纲剪切速率  $B$  为状态参量, 建立了颗粒物质剪切流动中类固-液转化的  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图. 由于该相变图用颗粒系统的宏观可测状态变量  $B$  代替了系统的内禀物理量  $T$ , 因此, 它能够更好地适用于具有剪切流动状态的颗粒物质. 该  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图不仅可以表征出颗粒物质发生阻塞-流动转化的基本条件, 同时也能够确定颗粒系统在流动中的类固-液转化特性. 通过  $e$ - $\tau$ - $B$  相变图还可以确定在准静态下的两个特殊相变点, 即  $J$  点和  $S$  点, 以及所对应的临界体积分数  $\phi_c$  和临界剪切应力  $\tau_c$ .

通过在定常体积分数和剪切速率下对平均应力的确定, 本文主要研究了颗粒物质在剪切流动中的类固-液转化特性以及相应的相变图. 此外, 对于颗粒系统由静态向流动状态转化的特性, 可在定常法向应力下施加不同的剪切应力, 确定颗粒系统在不同体积分数下发生剪切流动的条件. 综合以上两种情况, 可建立一个能够更加全面地反映颗粒物质由静态向流动状态转化, 以及在流动过程中类固-液转化的相变图, 从而有力地揭示颗粒系统在不同流动状态下的内在规律以及转化条件.

**致谢** 美国 Clarkson 大学 Hayley H Shen 教授和中南大学蒋亦民研究员对本文工作给予了很好的建议, 大连理工大学工程力学系孙珊珊、狄少丞和王安良等研究生协助开展了部分数值计算工作, 在此表示感谢。

## 参考文献

---

- 1 Jaeger H M, Nagel S R. Physics of the granular state. *Science*, 1992, 255: 1523–1531
- 2 Wu Q S, Hu M B. Advances on dynamic modeling and experimental studies for granular flow (in Chinese). *Adv Mech*, 2002, 32(2): 250–258 [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]
- 3 Wang D, Zhou Y. Particle dynamics in dense shear granular flow. *Acta Mech Sin*, 2010, 26: 91–100
- 4 Reichhardt C J O, Reichhardt C. Fluctuations, jamming, and yielding for a driven probe particle in disordered disk assemblies. *Phys Rev E*, 2010, 82: 051306
- 5 Liu A J, Nagel S R. Jamming is not just cool any more. *Nature*, 1998, 396: 21–22
- 6 O'Hern C S, Lander S A, Liu A J, et al. Random packings of frictionless particles. *Phys Rev Lett*, 2002, 88(7): 075507
- 7 Cheng X. Experimental study of the jamming transition at zero temperature. *Phys Rev E*, 2010, 81: 031301
- 8 Ji S Y. The quasi-solid-liquid phase transition of non-uniform granular materials and their constitutive equation (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2007, 39(2): 223–237 [季顺迎. 非均匀颗粒介质的类固-液相变行为及其本构方程. *力学学报*, 2007, 39(2): 223–237]
- 9 Sun Q C, Wang G Q. Review on granular flow dynamics and its discrete element method (in Chinese). *Adv Mech*, 2008, 38(1): 87–100 [孙其诚, 王光谦. 颗粒流动力学及其离散模型评述. *力学进展*, 2008, 38(1): 87–100]
- 10 Biroli G. Jamming-A new kind of phase transition? *Nat Phys*, 2007, 3: 222–223
- 11 Candelier R, Dauchot O. Journey of an intruder through the fluidization and jamming transitions of a dense granular media. *Phys Rev E*, 2010, 81: 011304
- 12 Aharonov E, Sparks D. Rigidity phase transition in granular packings. *Phys Rev E*, 1999, 60(6): 6891–6896
- 13 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
- 14 Savage S B, Hutter K. The dynamics of avalanches of granular materials from initiation to runout. Part I: Analysis. *Acta Mech*, 1991, 86: 201–223
- 15 Zhang Y, Campbell C S. The interface between fluid-like and solid-like behaviour in two-dimensional granular flows. *J Fluid Mech*, 1992, 237: 541–568
- 16 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: 技术科学*, 1998, 28(3): 282–288
- 17 Hou M Y, Chen W, Zhang T, et al. Global property of the dilute-to-dense transition of granular flows in a 2D channel (in Chinese). *Physics*, 2004, 33(7): 473–476 [厚美瑛, 陈唯, 张彤, 等. 颗粒物质从稀疏流到密集流转变的普适规律. *物理*, 2004, 33(7): 473–476]
- 18 Jiang Y M, Liu Y. A granular constitutive relation derived from hydrodynamics (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2009, 54(11): 1504–1510 [蒋亦民, 刘佑. 基于流体动力学理论的颗粒物质本构关系. *科学通报*, 2009, 54(11): 1504–1510]
- 19 Campbell C S. Granular shear flows at the elastic limit. *J Fluid Mech*, 2002, 465: 261–291
- 20 MiDi G D R. On dense granular flows. *Euro Phys J E*, 2004, 14: 341–365
- 21 Keys A S, Abate A R, Glotzer S C, et al. Measurement of growing dynamical length scales and prediction of the jamming transition in a granular material. *Nat Phys*, 2007, 3: 260–264
- 22 孙其诚, 王光谦. 颗粒物质力学导论. 北京: 科学出版社, 2009
- 23 Jaeger H M, Nagel S R, Behringer R P. Granular solids, liquids, and gases. *Rev Modern Phys*, 1996, 68: 1259–1273
- 24 da Cruz F, Emam S, Prochnow M, et al. Rheophysics of dense granular materials: discrete simulation of plane shear flows. *Phys Rev E*, 2005, 72: 021309
- 25 Renouf M, Bonamy D, Dubois F, et al. P. Numerical simulation of two-dimensional steady granular flows in rotating drum: on surface flow rheology. *Phys Fluids*, 2005, 17: 103303
- 26 Forterre Y, Pouliquen O. Flows of dense granular media. *Annu Rev Fluid Mech*, 2008, 40: 1–24
- 27 Lois G, Lemaitre A, Carlson J. Numerical tests of constitutive laws for dense granular flows. *Phys Rev E*, 2005, 72: 051303
- 28 O'Hern C S, Langer S A, Liu A J, et al. Force distributions near jamming and glass transitions. *Phys Rev Lett*, 2001, 86(1): 111–114
- 29 Zhang Z, Xu N, Chen D T N, et al. Thermal vestige of the zero-temperature jamming transition. *Nature*, 2009, 459: 230–233

- 30 Somfai E, van Hecke M, Ellenbroek W G, et al. Critical and noncritical jamming of frictional grains. *Phys Rev E*, 2007, 75: 020301
- 31 Majmudar T S, Sperl M, Luding S, et al. Jamming transition in granular systems. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 058001
- 32 Berthier L, Witten T A. Glass transition of dense fluids of hard and compressible spheres. *Phys Rev E*, 2009, 80: 021502
- 33 Song C, Wang P, Makse H A. A phase diagram for jammed granular matter. *Nature*, 2008, 453: 629–632
- 34 Ji S Y, Shen H H. Characteristics of temporal-spatial parameters in quasi-solid-fluid phase transition of granular materials. *Chin Sci Bull*, 2006, 51(6): 646–654
- 35 Lu K, Brodsky E E, Kavehpour H P. A thermodynamic unification of jamming. *Nat Phys*, 2008, 4: 404–407
- 36 Grebenkov D S, Ciamarra M P, Nicodemi M, et al. Flow, ordering, and jamming of sheared granular suspensions. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 078001
- 37 Campbell C S. Stress-controlled elastic granular shear flows. *J Fluid Mech*, 2005, 539: 273–297
- 38 Zhang D Z, Rauenzahn R M. A viscoelastic model for dense granular flows. *J Rheo*, 1997, 41(6): 1275–1298
- 39 Ji S, Shen H H. Internal parameters and regime map for soft polydispersed granular materials. *J Rheol*, 2008, 52(1): 87–103
- 40 Jop P, Forterre Y, Pouliquen O. A constitutive law for dense granular flows. *Nature*, 2006, 441(8): 727–730
- 41 Yan Y, Ji S Y. Energy conservation in a granular shear flow and its quasi-solid-liquid transition. *Part Sci Tech*, 2009, 27(2): 126–138
- 42 Savage S B, Sayed M. Stresses developed by dry cohesionless granular materials sheared in an annular shear cell. *J Fluid Mech*, 1984, 142: 391–430
- 43 Pouliquen O, Cassar C, Jop P, et al. Flow of dense granular material: towards simple constitutive laws. *J Stat Mech Theor Exp*, 2006, P07020
- 44 Shen H H, Sankaran B. Internal length and time scales in a simple shear granular flow. *Phys Rev E*, 2004, 70: 051308
- 45 Rothenburg L, Kru N P. Critical state and evolution of coordination number  $n$  simulated granular materials. *Int J Solids Struct*, 2004, 41: 5763–5774
- 46 Wang P, Song C, Briscoe C, et al. From force distribution to average coordination number in frictional granular matter. *Physica A*, 2010, 389: 3972–1977
- 47 Lochmann K, Oger L, Stoyan D. Statistical analysis of random sphere packings with variable radius distribution. *Solid State Sci*, 2006, 8: 1397–1413
- 48 Shokef Y, Liu A J. Jamming mechanisms and density dependence in a kinetically constrained model. *Europhys Lett*, 2010, 90: 26005
- 49 Arevalo R, Zuriguel I, Maza D. Topology of the force network in the jamming transition of an isotropically compressed granular packing. *Phys Rev E*, 2010, 81: 041302
- 50 Majmudar T S, Behringer R P. Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, 2005, 435: 1079–1082
- 51 Trappe V, Prasad V, Cipelletti L, et al. Jamming phase diagram for attractive particles. *Nature*, 2001, 411: 772–775
- 52 O'Hern C S, Silbert L E, Liu A, et al. Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder. *Phys Rev E*, 2003, 68: 011306
- 53 Olsson P. Diffusion and velocity autocorrelation at the jamming transition. *Phys Rev E*, 2010, 81: 040301
- 54 Lu K, Brodsky E E, Kavehpour H P. Shear-weakening of the transitional regime for granular flow. *J Fluid Mech*, 2007, 587: 347–372
- 55 Colizza V, Barrat A, Loreto V. Definition of temperature in dense granular media. *Phys Rev E*, 2002, 65: 050301
- 56 Potiguar F Q, Makse H A. Effective temperature and jamming transition in dense, gently sheared granular assemblies. *Eur Phys J E*, 2006, 19: 171–183

## 附录 A 颗粒系统宏观表征参数

为描述颗粒系统的宏观物理力学特性, 人们提出了平均应力、有效摩擦系数、颗粒温度、接触时间数、配位数、惯性数和 Savage 数等宏观参数. 在本附录中做一简单归纳, 相关参数应用于本文的分析中.

颗粒材料的平均应力  $\sigma_{ij}$  的细观定义为<sup>[13,34]</sup>

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^c + \sigma_{ij}^k, \quad (\text{a1})$$

这里,  $\sigma_{ij}^c$  和  $\sigma_{ij}^k$  分别为接触应力张量和动力应力张量,

$\sigma_{ij}^c = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_k} (r_i^{lk} F_j^{kl})$ ,  $\sigma_{ij}^k = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N M_k (u_i^k u_j^k)$ .  $V$  为试样体积,  $N$  为颗粒数目,  $N_k$  为与颗粒  $k$  接触的颗粒数目,  $M_k$  为颗粒  $k$  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  $u_j^k$  分别为颗粒  $k$  的脉动速度张量.

为表征颗粒平均应力与剪切速率的相互关系, Campbell<sup>[19,37]</sup>对  $\sigma_{ij}$  无量纲化, 即

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} D / K_n. \quad (a2)$$

颗粒材料的有效摩擦系数  $\mu_e$  是细观层次颗粒间相互滑动和滚动, 以及结构演变的体现, 人们曾针对某些理想颗粒的简单堆积状态, 推导出了一些解析关系, 建立了理想颗粒试样宏观摩擦角与颗粒间摩擦角的相似关系.  $\mu_e$  定义为

$$\mu_e = \tau_{xy} / \tau_{yy}. \quad (a3)$$

配位数  $Z$  是表征颗粒空间排布密实程度的平均量化参数之一, 即<sup>[33]</sup>

$$Z = 2M_c / N, \quad (a4)$$

式中,  $M_c$  为颗粒系统内的接触点数目,  $N$  为颗粒数目.

接触时间数是指颗粒介质的平均接触时间与二体碰撞时间  $T_{bc}$  的比值:

$$m = \bar{T}_c / T_{bc}, \quad (a5)$$

式中,  $m$  为接触时间数,  $\bar{T}_c$  为颗粒单元的平均接触时间,  $T_{bc}$  为二体碰撞时间, 且有

$$T_{bc} = \sqrt{[M(\pi^2 + \ln^2 e)] / (4K_n)},$$

其中  $e$  为回弹系数. 因此,  $m$  反映了颗粒的平均接触时间. 如果将接触时间数减去 1 以消除其二体碰撞时间部分, 即引入净接触时间数  $m' (=m-1)$  来描述颗粒的接触时间, 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.

为研究颗粒的流动特性, 引入惯性数的概念, 即<sup>[19,21,23,37,38]</sup>

$$I = \frac{\dot{\gamma} d}{\sqrt{P} / \rho}, \quad (a6)$$

式中,  $\rho$  是颗粒材料密度. 其物理意义是两个时间尺度  $T_i$  和  $T_s$  的比值, 即  $I = T_i / T_s$ .  $T_i = D\sqrt{\rho/\sigma}$  是指颗粒在竖向应力  $\sigma$  作用下移动距离  $d$  所需的时间(不考虑颗粒间的作用), 称为惯性时间 (Inertial Time) 或约束时间 (Confinement Time);  $T_s = 1/\dot{\gamma}$  是单层颗粒受剪切作用沿剪切方向移动颗粒粒径  $D$  所需要的时间, 称为剪切时间 (Shear Time) 或变形时间 (Deformation Time).

此外, Babic 等人<sup>[13]</sup>引入无量纲的剪切速率, 即

$$B = \dot{\gamma} \sqrt{\rho D^3 / K_n}, \quad (a7)$$

$B$  与 Campbell<sup>[19]</sup>引入的无量纲参量  $K_n^* = K_n / \rho D^3 \dot{\gamma}^2$  的关系为  $B = K_n^{*-1/2}$ .

无量纲 Savage 数  $N_{sav}$  表征了颗粒间碰撞和摩擦的相对重要性, 其定义为<sup>[52,54]</sup>

$$N_{sav} = \frac{\rho D^2 \dot{\gamma}^2}{\sigma}, \quad (a8)$$

式中,  $\rho D^2 \dot{\gamma}^2$  表示的是颗粒二体碰撞引起的 Bagnold 应力,  $\sigma$  为平均正应力. 为分析平均剪应力与剪切速率的对应关系, 这里可以将  $N_{sav}$  进一步引伸为广义  $N_{sav}$  数, 即  $N_{sav} = \rho D^2 \dot{\gamma}^2 / \sigma_{xy}$

类比分子热运动, 颗粒运动的随机波动特性可用颗粒温度  $T$  表征<sup>[6,55,56]</sup>. 类似于动应力的计算, 单位体积内颗粒系统的颗粒温度为

$$T = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} M_k \langle u_k^2 \rangle, \quad (A9)$$

式中,  $\langle u_k^2 \rangle$  为颗粒  $k$  的脉动速度.

## Characteristics in quasi-solid-liquid phase transition of granular shear flow and its phase diagram

JI ShunYing<sup>1\*</sup>, SUN QiCheng<sup>2\*</sup> & YAN Ying<sup>3</sup>

<sup>1</sup> State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China;

<sup>2</sup> State Key Laboratory for Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

<sup>3</sup> School of Civil and safety Engineering, Dalian Jiaotong University, Dalian 116028, China

The quasi-solid-liquid phase transition of granular materials exists widely in the fields of engineering geology, nature environments and industry production, etc. The mechanical properties of granular system are quite different during the phase transition, which has been the hot and difficult problem in granular mechanics recently. With the mechanical behaviors investigation of granular quasi-solid-liquid transition, the phase diagram can be established to determine the transition conditions and to understand the transition mechanism. The quasi-solid-liquid phase transition can be divided in the two kinds following. The one is the transition between jamming and unjamming, and the other one is the transition between solid phase and liquid phase under flow conditions. According to the second phase transition, the simple shear flow of polydispersed granular materials with periodic boundary are simulated numerically with discrete element method (DEM). The macro parameters, such as averaged stress, coordination number, contact time number, effective friction coefficient, inertia number and generalized Savage number etc., are discussed to understand the intrinsic mechanism of quasi-solid-liquid phase transition under various volume fractions and shear rates. Finally, the  $e-\tau-B$  phase transition diagram is established with the three basic parameters of porosity, dimensionless shear rate and macro shear stress.

**granular matter, quasi-solid-liquid transition, shear flow, phase transition diagram**

**PACS:** 45.70.Mg, 47.57.Gc, 83.80.Fg

**doi:** 10.1360/132011-1064