

# 二维颗粒流通道宽度效应的分子动力学模拟<sup>\*</sup>

胡国琦 张训生 鲍德松 唐孝威

(浙江大学物理系 杭州 310027)

(2004 年 3 月 11 日收到, 2004 年 4 月 19 日收到修改稿)

通过用分子动力学方法对颗粒物质流的计算机模拟, 研究发现增大通道宽度可以使二维颗粒流从稀疏流转变为密集流状态. 通过对不同通道宽度下, 固定开口为  $9.5d$  的颗粒流和漏斗口以上  $9.5d \times 8d$  区域记录的模拟结果分析, 发现随通道宽度增大, 密度变大、温度降低. 当“颗粒温度” $T$  较低时 ( $T/m < 0.05 \text{ J/kg}$ ), 颗粒流内部接触数开始超过 1.2, 同时出现较为牢固的横向链状颗粒团簇, 是造成流量突变以及密集流的原因.

关键词: 颗粒物质, 颗粒流, 计算机模拟

PACC: 4630P, 4610, 8220M, 6120J

## 1. 引言

颗粒物质作为一种在自然界和工农业生产中广泛存在的物质形态, 已经引起了物理学家的浓厚兴趣<sup>[1-3]</sup>, 它不仅涉及许多自然现象和工业技术问题, 而且还涉及许多饶有兴趣的非线性开放体系的课题, 如混沌、自组织、斑图等<sup>[4-6]</sup>.

颗粒流是大量颗粒状物质的集体流动, 作为一种特殊的流体, 近来备受人们的关注. 准确地预计颗粒物质在不同条件下的流动状态, 是工业过程的一项迫切的需要. 多年来, 在这方面已做了许多的工作<sup>[6-12]</sup>, 特别是对于漏斗或管流问题. 如早期所谓的“鼠洞问题”, 以及后来 Beverloo 等<sup>[6,7]</sup>突破性地发现漏斗的颗粒流量  $Q$  与开口的大小  $D$  有关. 在二维密集状态下,  $Q \propto C\rho(D - kd)^{3/2}$ . 最近的研究也表明, 当改变颗粒的入流量、漏斗开口的大小, 存在一临界点, 可以使稀疏态的颗粒流转变为密集流<sup>[8,9]</sup>. To<sup>[10]</sup> 的实验发现, 当漏斗开口为颗粒直径的 5 倍时就会出现堵塞态. 但是对于通道宽度对流量的影响却很少被提及, Hirshfeld 等<sup>[11]</sup> 的模拟曾显示, 宽度变大时, 密集态颗粒流流量会呈类似线性地变小. 我们早些时候的实验<sup>[12]</sup> 也发现, 改变漏斗的通道宽度, 可以使稀疏态的颗粒流经过漏斗口时转变为密集流, 导致流量的突变. 本文利用分子动力学的计算机模

拟方法, 模拟了固定漏斗开口条件下, 通道改变对颗粒物质流的影响, 发现流量在通道宽度为  $24d$  ( $d$  为颗粒的直径) 左右时突变, 并且探讨了引起稀疏流到密集流变化的微观机理.

## 2. 计算模型

复杂的颗粒物质系统由众多简单的颗粒组成, 它们之间的相互作用构成了颗粒物质体系的许多物理现象, 如粮仓效应、成拱、斑图等. 对于颗粒物质系统的分子动力学模拟, 已有多种受力模型, 大致可以分为硬球(一般为事件驱动)和软球(时间驱动)两种方法<sup>[13]</sup>. 通常采用事件驱动方法在密度过大的时候有慢化的缺陷<sup>[13]</sup>, 而在我们的模型中漏斗两侧有颗粒堆积问题, 所以本文采用软球的 Hertz 模型. 此模型的优点在于可以模拟密度较大的颗粒体系, 且细致地描述颗粒的受力情况. 在我们的模型中, 颗粒采用大小相同的球珠, 模拟它们在二维空间的运动. 两个颗粒之间的法向力  $F_n$  和切相力  $F_s$  为

$$F_n = [k_n(d - r_{ij})^2 - \gamma_n(V_{ij} \cdot \hat{n}) \times (d - r_{ij})] \hat{n},$$

$$F_s = \{\min(-\gamma_s V_{ij} \cdot \hat{s}, \mu |F \cdot \hat{n}|)\} \hat{s},$$

其中  $V_{ij} = \dot{r}_{ij} \cdot \hat{s} + d(\omega_i + \omega_j)/2$ ,  $d$  是颗粒的直径,  $r_{ij}$  是两个颗粒质心的间距,  $V_{ij}$  和  $V_s$  分别是法向和切相的相对速度,  $k_n$  决定颗粒间的碰撞强度,  $\gamma_n$  和  $\gamma_s$  分

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10274071)和国家高技术惯性约束聚变基金(批准号: 2001AA84ts06)资助的课题.

别代表了法向和切相的耗散系数,  $\mu$  即库仑摩擦系数,  $\hat{n}$  和  $\hat{s}$  分别为法向和切向的单位矢量. 模拟中采用的  $k_n$  为  $1 \times 10^5 \text{ mg}/R$ ,  $\gamma_n$  和  $\gamma_s$  分别为  $80 m \sqrt{g/d}/d$   $40 m \sqrt{g/d}$ , 步长  $\delta t = 5 \times 10^{-5} \sqrt{d/g}$ ,  $\mu = 0.4$ ,  $g = 4.9 \text{ m/s}^2$ ,  $m = 1 \times 10^{-6} \text{ kg}$ ,  $d = 2 \text{ mm}$ .  $\Delta V_{\text{前}} = 1 \text{ m/s}$  时 相应弹性恢复系数  $\epsilon = \left| \frac{\Delta V_{\text{后}}}{\Delta V_{\text{前}}} \right| = 0.82$ .

对于边界情况, 因为壁必须静止不动, 为防止颗粒“穿透”, 考虑壁应当强度较大, 同时壁和颗粒碰撞又应当和颗粒间碰撞拥有相近的弹性回复系数. 这里采用壁和颗粒的碰撞满足

$$F_{n, \text{wall}} = [k_n(d - r_{ij}) - \gamma_{\text{wall}}(V_{ij} \cdot \hat{n}) \chi(d - r_{ij})] \hat{n},$$

$$F_{s, \text{wall}} = F_s,$$

$$\gamma_{\text{wall}} = 100 \gamma_n.$$

这样  $\gamma_{\text{wall}}$  增大后, 边界弹性和颗粒之间弹性恢复系数相近,  $\Delta V_{\text{前}} = 1 \text{ m/s}$  时,  $\epsilon_{\text{wall}} = 0.83$ , 同时 Hertz 型受力变为线性后边界的承重能力增加.

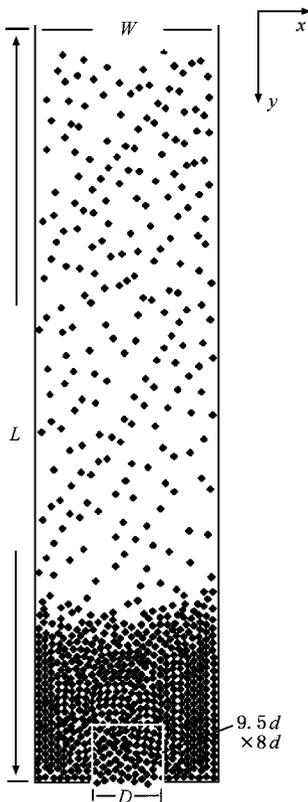


图1 计算机模拟图 漏斗长度  $L = 150d$  漏斗开口  $D = 9.5d$  漏斗通道宽度取  $20\text{--}30d$  漏斗倾斜  $30^\circ$ , 即  $g = 4.9 \text{ m/s}^2$ , 颗粒在上面以每秒 2000 个随机落下. 漏斗口以上  $9.5d \times 8d$  观察区域如图所标. 图中显示已经形成的密集流情况

模拟的空间和我们先前的实验装置<sup>[12]</sup>相似, 为长  $150d$ 、宽  $(20\text{--}30)d$  的二维矩形漏斗, 考虑临界位置的选取, 漏斗口大小设为  $D = 9.5d$ . 漏斗和水平平面夹角为  $30^\circ$ . 颗粒流在顶部保持稀疏的状态, 以  $2000/\text{s}$  的流量、 $0.4 \text{ m/s}$  的初速度持续地流下(图 1), 以观察颗粒流经过漏斗口状态改变的过程.

### 3. 模拟结果和分析

#### 3.1. 通道宽度对流量及相关参量的影响

图 2 显示了漏斗内的颗粒数目随时间的变化, 曲线从上到下对应的通道宽度依次为  $30d, 27d, 26d, 24d, 23.5d, 23d, 22d, 21d$  和  $20d$ , 漏斗底部开口  $D$  均取  $9.5d$ . 从图 2 可以看出, 颗粒流相应的状态及其对应的时间分别是: 通道宽度  $24d$  以下, 颗粒不在漏斗内积累, 说明单位时间流入的颗粒数和从漏斗口流出量相等, 是稀疏流的状态<sup>[9, 12]</sup>; 通道宽度  $24d$  以上(包括  $24d$ ), 漏斗内的颗粒数在内部堆积, 并随时间的增长而增加, 是密集流状态. 两者的根本特征是流量的明显减少. 图 1 是密集流状态下的模拟图, 在这个状态下, 由于漏斗的几何原因密度已不能增长. 由图 2 观察漏斗内的颗粒数随时间演化, 可以看到所有的曲线都经历三个过程. 以  $30d$  宽度的为例: 区间 A 是颗粒填充漏斗的过程; 区间 B 是颗粒通过漏斗口, 颗粒和漏斗所组成的系统开始转为稳定的过渡区间; 在区间 C, 颗粒流已经重新稳定. 对于不同通道宽度, 各个区间在时间上略有不同. 对于密集流状态, 通道越窄过渡区间就越长, 从

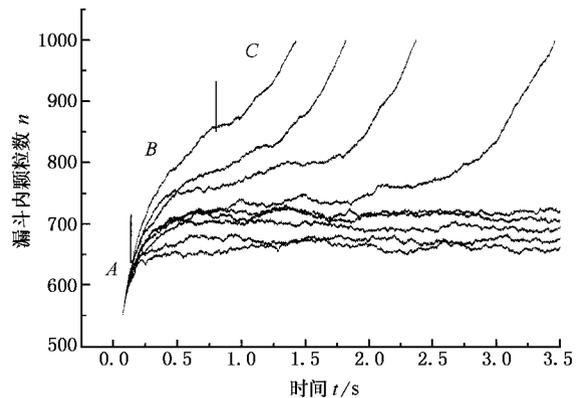


图2 不同通道宽度下漏斗内颗粒数随模拟时间的变化关系 曲线从上到下对应的通道宽度依次是  $30d, 27d, 26d, 24d, 23.5d, 23d, 22d, 21d$  和  $20d$ . 漏斗开口  $9.5d$  不变. A, B, C 是  $30d$  通道宽度下颗粒流对应的状态

稀疏流转变为密集流就越困难。

图 3 纪录了流量、漏斗口上方  $9.5d \times 8d$  区域内的密度和颗粒系统温度  $T$  随通道宽度变化的情况。对于稀疏流阶段,即通道宽度小于  $24d$  区域,可以看到流量保持在  $2000/s$ ,通道宽度的增加可以使密度变大,同时使这个区域颗粒的温度降低。颗粒温度的定义为

$$T = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{1}{2} m (V_i - \bar{V})^2 \right).$$

它代表了颗粒系统运动和扩散的能力,温度越低颗粒间速度的大小和方向就会越一致,相对碰撞产生的力就越弱,颗粒系统的结构可以更稳定。从以上分析可以看出,稀疏流阶段通道宽度的增大可以使密度变大,这和 Hou 等<sup>[14]</sup>对颗粒流的分析一致。温度的降低是由于两侧的堆积区域变大,可更有效地吸收颗粒的能量,较小的温度有利于颗粒通过内部调整形成新的结构,更有效地通过漏斗口,保证在密度变大的情况下保持流量。系统的突变发生在  $23.5d$  通道宽度以后,这时流量有一个突变。此时密度饱和,达到每单位空间( $d \times d$ ) 0.8 颗粒左右,这和一般对密集流的描述一致,温度达到对应密集流结构的

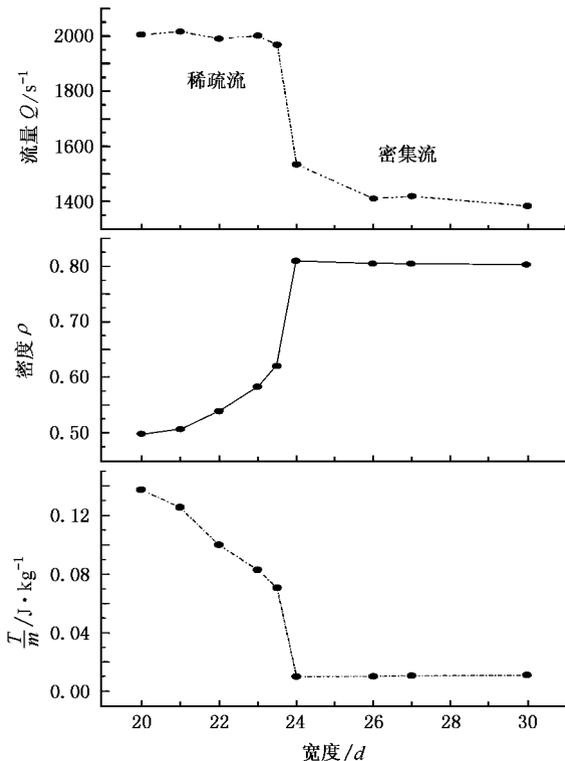


图 3 流量、漏斗口区域密度和温度与通道宽度的关系 入流量为  $2000/s$ , 漏斗开口为  $9.5d$

$$T/m = 0.01 \text{ J/kg}.$$

### 3.2. 结构对颗粒流转变的影响及讨论

为了了解不同通道宽度对颗粒流内部结构的影响,我们对  $23.5d$  和  $24d$  的情况作了比较和分析。图 4(a) 记录了漏斗口上方区域颗粒的平均接触数  $N$  随温度  $T$  的变化情况,这个区域内的颗粒流状态将直接决定颗粒流动的状态。利用平均接触数,可以推测颗粒流内部成链数目的情况。

另外,我们也纪录了漏斗口上方区域内  $P$  随时间的变化情况(图 4(b)(c))。这里  $P = \langle \sin^2 \alpha \rangle$ , 其中  $\alpha$  为漏斗口上方区域内接触颗粒中心连线与水平线间的夹角。通过观察  $P$  的变化,可以得到颗粒流内部这些链的平均取向和生成(破碎)的频率。如果角度的取向是各向同性,求平均后  $P = 0.5$ ; 如果链以横向为主,那么  $P < 0.5$ 。

从图 4(a) 可见,对于稀疏流的  $23.5d$  情况(圆点),颗粒流保持在接触数  $0.5-1.2$  和  $T/m$  在  $0.05-0.15 \text{ J/kg}$  的区间内,形成一个自组织的状态,说明在此状态下颗粒流有能力在结构上进行小范围的调整,以适合不同的情况。图 4(b) 则是在稀疏流状态下的  $\langle \sin^2 \alpha \rangle$  随时间变化的情况,可以看到此时链以纵向为主的概率较高。同时由于温度较高,从  $\langle \sin^2 \alpha \rangle$  值可以看出力链横向纵向转换的频率相对于图 4(c) 要大得多,相当于链的生成(破碎)的频率相对较高,从而保证了稀疏态颗粒流动的畅通。相比较而言,对于图 4(a) 的  $24d$  通道宽度的密集流状态(三角点),由于两侧堆积耗散区域变大,  $T/m$  可以小于  $0.05 \text{ J/kg}$ , 接触数  $N$  可以进一步变大。这就破坏了颗粒流的自我调整能力,最后曲线呈指数衰减:  $T = 0.38m \cdot e^{-1.55N}$ , 系统稳定在  $N = 3$ ,  $T/m = 0.01 \text{ J/kg}$  的状态。形成密集流后链的角度就以横向为主(图 4(c)), 且由于温度变低链的变化频率相应减小,使得颗粒的流动受到阻碍。

通过上述分析可知,通道宽度对颗粒流微观结构的影响表现为两个方面。首先,可以使颗粒流内部链的数目增多;再就是使链的取向有更多的横向排列,同时温度的降低使颗粒碰撞剧烈程度减弱,横向链破碎的频率更小。结果是使得颗粒流通过漏斗口时,内部出现横向链状颗粒的概率更高。这相当于有效通道宽度变小,成拱概率变大,导致了颗粒流从稀疏流到密集流的转变。图 5 给出了对应  $24d$  通道宽度的模拟结果,时间是模拟开始后  $2.2s$ , 接触数  $N$

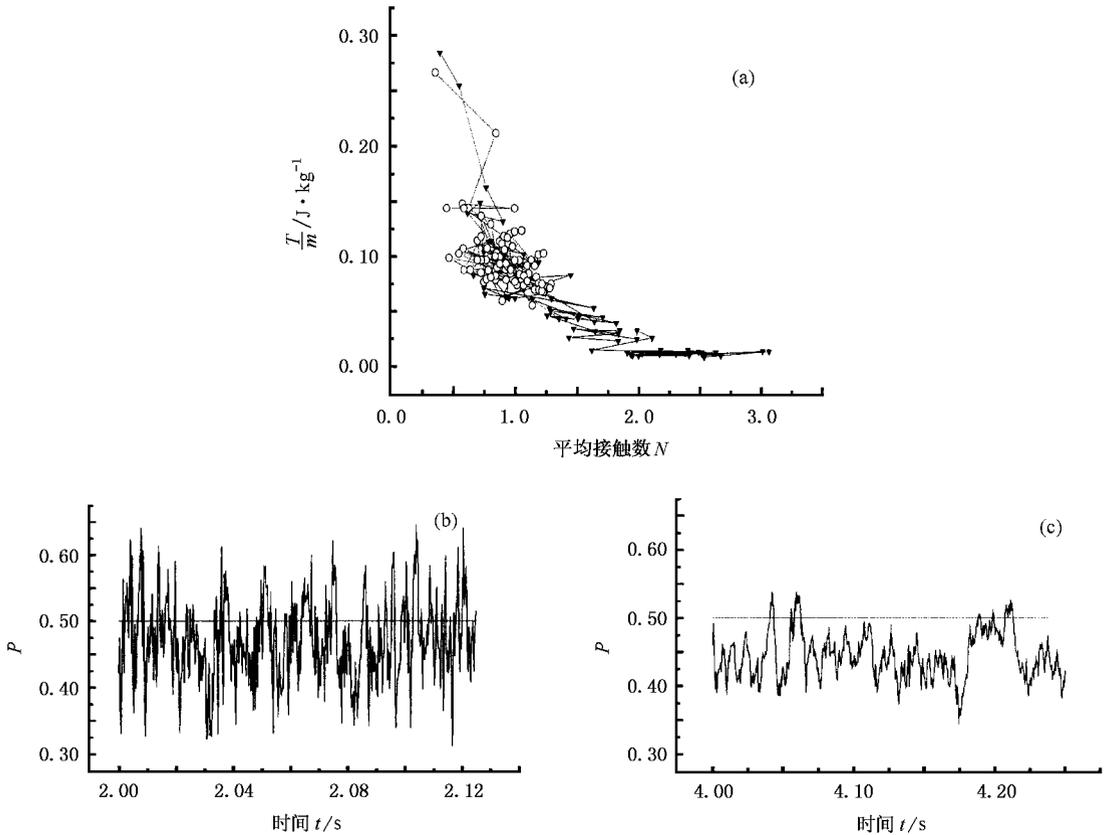


图4 漏斗口上方  $9.5d \times 8d$  区域接触数随温度的变化情况(a)和稀疏流(b)密集流(c)状态下与链的取向有关的量  $\langle \sin^2 \alpha \rangle$  随时间的变化情况 (a)图中圆点是通道宽度  $23.5d$  稀疏流的情况,三角点是  $24d$  密集流的情况

= 1.24,即从稀疏流开始到密集流转变的时刻(对应图2)。从图5可以看到,中间部分是一些横向的链状颗粒通过漏斗口,阻碍了颗粒的流通。

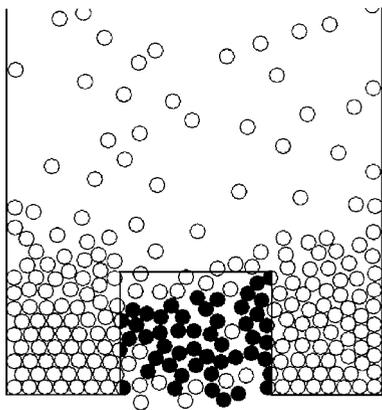


图5  $24d$  通道宽度的模拟结果 时间为模拟开始后  $2.2s$ ,接触数  $N = 1.24$ .其中黑圆点表示有接触的颗粒

### 4. 结 论

我们通过不同通道宽度下漏斗内颗粒流的分子动力学模拟,研究了通道宽度对颗粒物质稀疏流到密集流转变的影响。模拟显示,在我们的条件下存在  $24d$  的临界通道宽度。在这个宽度以下颗粒流保持稀疏状态,流量始终与初始流量  $2000/s$  一致。大于这个宽度后颗粒流密度变大,转变为密集流状态,流量下降。模拟的结果与实验结果<sup>[12]</sup>定性一致。通过漏斗口颗粒行为的模拟结果,发现通道宽度增大的作用是使颗粒流温度变小、密度变大。当宽度达到约  $24d$ ,存在临界值  $T/m = 0.05 J/kg$ 。在这个温度下,颗粒流内部开始出现横向链状颗粒、阻挠颗粒流动,从而使流量减少。随着漏斗内颗粒的堆积,力链开始形成,颗粒流同时转变为密集流。这些结果有助于颗粒流的性质研究。

- [ 1 ] Jaeger H M , Nagel S R , Behringer R P 1996 *Rev. Mod. Phys.* **68** 1259
- [ 2 ] de Gennes P G 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** S374
- [ 3 ] Kadanoff L P 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 435
- [ 4 ] Shinbort T , Alexander A , Moakber M *et al* 1996 *Chaos* **9** 611
- [ 5 ] Bak P , Tang C , Wiesenfeld K 1988 *Phys. Rev. A* **38** 368
- [ 6 ] Ristow G H 2000 *Pattern Formation in Granular Material* ( New York : Springer )
- [ 7 ] Beverloo W A *et al* 1961 *J. Chem. Eng. Sci.* **15** 260
- [ 8 ] Chen W , Hou M Y , Lu K Q *et al* 2001 *Phys. Rev. E* **64** 61305
- [ 9 ] Chen W , Hou M Y , Lu K Q *et al* 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2213
- [ 10 ] To K , Lai P Y , Pak H K 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 71
- [ 11 ] Hirshfeld D , Radzyner Y , Rapaport D C 1997 *Phys. Rev. E* **56** 4404
- [ 12 ] Xu G L , Hu G Q , Zhang X S *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 875  
( in Chinese ) 徐光磊、胡国琦、张训生等 2003 物理学报 **52** 875 ]
- [ 13 ] Duan J 1999 *Sands , Powders and Grains* ( New York : Springer )
- [ 14 ] Hou M Y , Chen W , Zhang T *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 20

## The molecular dynamics simulation of the effect of channel width on two-dimensional granular flow<sup>\*</sup>

Hu Guo-Qi Zhang Xun-Sheng Bao De-Song Tang Xiao-Wei

( Department of Physics , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China )

( Received 11 March 2004 ; revised manuscript received 19 April 2004 )

### Abstract

In this paper , we use the molecular dynamics simulation to study the phenomena that the granular flow changes from dilute flow to dense flow by increasing the channel width at a fixed orifice of  $9.5d$  (  $d$  is the diameter of grains ). In the area over the orifice , the density of flow increases and the granular temperature decreases with the increase of channel width. The change from dilute flow to dense flow begins at a channel width of  $24d$  , a lower granular temperature (  $T/m = 0.05$  J/kg ) and a larger coordination number of 1.2. The mechanism is a structural change in the granular flow , since a wider channel results in more horizontal chains of particles and a lower temperature makes these chains more stable.

**Keywords** : granular matter , granular flow , computer simulation

**PACC** : 4630P , 4610 , 8220M , 6120J

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10274071 ) and the National High-Technology Inertial Confinement Fusion Foundation of China ( Grant No. 2001AA84ts06 ).