

# 三维颗粒气体相分离现象<sup>\*</sup>

刘 锐<sup>†</sup> 李寅闯 厚美瑛

(中国科学院物理研究所北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190)

(2007 年 8 月 18 日收到, 2008 年 2 月 28 日收到修改稿)

颗粒体系是一类复杂的耗散体系. 在颗粒气体中, 耗散性质会使其内部形成局部的凝聚, 类似于真实气体中亚稳分解形成的液滴, 因此被认为是颗粒气液两相分离的过程. 零重力环境下二维颗粒气体相分离现象已有成熟的流体静力学理论解释, 将该理论模型推广到三维情形, 发现相分离现象依然存在且具有同样的不稳定性根源, 通过理论计算给出了三维相分离发生的具体条件. 同时, 用分子动力学方法模拟检验了理论结果, 并给出了三维颗粒气体相分离的新形貌.

关键词: 颗粒气体, 耗散, 相分离, 分子动力学模拟

PACC: 0320, 4610

## 1. 引 言

颗粒体系由大量离散的宏观固体颗粒组成, 其多体特性以及固体颗粒之间碰撞的非弹性本质使其成为一个复杂的耗散体系. 在不同的力学条件下, 这类体系会表现出类似于固体、液体及气体的特性<sup>[1-4]</sup>. 当颗粒体系受外力驱动而处于一种比较稀疏的分布时颗粒能够快速运动, 并且颗粒之间的相互作用以二体碰撞为主, 具有类似于气体的性质, 这通常被称为“颗粒气体”<sup>[5]</sup>. 由于颗粒之间的碰撞为非弹性, 能量的耗散使得稀疏的颗粒体系有自发凝聚的特性<sup>[6-8]</sup>. 对于颗粒气体体系, 涨落会破坏整个体系的均匀性, 从而导致某个局部密度的偶然增加, 同时也使得该处颗粒之间的碰撞概率增大, 能量耗散更加严重. 如果“热扰动”不能阻止这种趋势, 就会形成局部的高密度聚集, 使得颗粒气体中发生局部的凝聚现象, 类似于气体中形成的液滴.

对于颗粒气体中的这种相分离现象, 文献 [9, 10] 考虑到其与真实气液相分离的相似性, 给出了颗粒气体相分离的范德瓦耳斯范式, 并通过此简单模型对该体系在临界点附近的相分离行为给出了很好的解释. 文献 [11-14] 则细致地构建了一组流体静力学方程组, 研究了体系在不同本构关系和不同边

界条件(矩形和环形容器)下发生相分离的条件、不稳定性根源及相分离形貌. 这些研究结果指出, 颗粒体系的耗散特性能像气液相变中的温度一样控制相分离的发生, 而且这种相分离现象也是由于一种与气液相变相似的负压缩不稳定性引起的, 不稳定性区域由体系的耗散特性决定, 而体系的几何尺寸会影响这种不稳定性的发展. 相分离发生的具体条件, 包括耗散参数的临界值、气液两相共存线、亚稳分界线及对体系的几何尺寸要求均可以由理论计算给出, 计算结果能够与分子动力学模拟的结果很好符合. 由于重力导致的沉积作用对相分离现象的观测会产生干扰, 所有这些理论研究考虑的都是零重力环境下的二维颗粒气体.

本文将文献 [12, 13] 中的二维模型推广到零重力条件下三维颗粒气体体系中, 发现负压缩不稳定性导致的相分离现象依然存在, 通过理论计算给出了三维情形下相分离发生的具体条件. 同时, 通过分子动力学方法模拟检验了理论模型的结果, 发现两者在定性和定量上能够保持一致, 且三维体系中的相分离现象具有更丰富的表现.

## 2. 基本模型和分子动力学模拟

颗粒体系的复杂性使得对其进行完整的理论描

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 31047124, 10720101074)和中国科学院知识创新工程(批准号: KACX2-SW-02-06)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: liurui04@mails.gucas.ac.cn

述或者数值模拟变得非常困难,通常需要做一定的简化. 颗粒之间的摩擦及由其引起的转动在颗粒气体的研究中通常可以忽略,因此这里将采用光滑的非弹性硬球颗粒. 稳定的颗粒气体体系,需要由外力驱动来维持,为简单起见,考虑无重力环境下一定数目的球形颗粒分散在一个长方体容器中,容器的某个壁以振动的方式输入能量来平衡体系的耗散. 为了减小壁的振动对体系的影响,可以认为壁以足够小的振幅及足够高的频率振动,在这种情况下可以把它简化为“热”墙,即要求运动到其附近的颗粒按给定的颗粒温度并以一定的分布规律来分配速度. 下面将介绍具体的理论模型及相应的数值模拟细节.

## 2.1. 基本模型

考虑  $N$  个直径为  $d$ , 质量  $m = 1$  的硬球颗粒在尺寸为  $L_x \times L_y \times L_z$  (体积为  $V_0$ ) 的封闭矩形容器中自由运动. 位于  $x = 0$  处的容器壁通过振动方式向系统输入能量,假设该壁仅仅只是提供颗粒动能,其运动方式对颗粒体系不产生任何影响,理论上可以处理成“热”墙,即按照一定分布随机给与之接触的颗粒以反弹速度;其余器壁为完全弹性的固壁. 在零重力条件下,颗粒在容器中运动并发生碰撞,颗粒之间的接触相互作用仅考虑法向的非弹性碰撞,法向恢复系数为  $e$ ,忽略摩擦和切向的能量损失. 对于该体系,当颗粒的粒子数密度不是特别大,并且  $1 - e \ll 1$  时,可以用颗粒流体力学方程来描述<sup>[15]</sup>. 当能量的注入和能量耗散达到平衡时,体系最终会处于一个稳态,此时颗粒流体力学的动量和能量方程可以简化为

$$p = \text{const.}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot [\kappa \nabla T(\mathbf{r})] = I, \quad (2)$$

$$\kappa = \frac{4dnT^{1/2}G}{\sqrt{\pi}} \left[ 1 + \frac{9\pi}{32} \left( 1 + \frac{5}{12G} \right)^2 \right], \quad (3)$$

$$I = \frac{2A(1-e)nT^{3/2}G}{\sqrt{\pi}d}, \quad (4)$$

$$\alpha(\nu) = \frac{\nu(1-\nu/2)}{(1-\nu)^3}. \quad (5)$$

这里  $\nu = \pi d^3 n/6$  为颗粒的体积分数,  $n$  为单位体积内的颗粒数(即粒子数密度),  $\mathbf{r}$  是空间坐标矢量,  $p$  为颗粒气体压强,  $T$  为颗粒气体温度,  $\kappa$  相当于热输运系数,  $I$  是能量耗散项. 表达式(3)和(4)可以通过 Enskog 近似方法得到<sup>[16]</sup>. Carnahan 等<sup>[17]</sup>给出颗粒气体还应满足如下的状态方程:

$$p = nT(1 + 4G). \quad (6)$$

为了将方程无量纲化,定义  $u = n_c/n$  ( $n_c = \sqrt{2}/d^3$  为面心立方密堆积的粒子数密度),同时对体系坐标做标度化处理  $\{L_x, L_y, L_z\} \rightarrow \{1, \Delta_y(L_y/L_x), \Delta_z(L_z/L_x)\}$  根据方程(1)(2)和(6)可得单一控制方程

$$\nabla \cdot (F(u)\nabla u) = \eta Q(u). \quad (7)$$

这里

$$F(u) = A(u)B(u).$$

$$Q(u) = \frac{9}{\pi} \frac{u^{1/2}G}{(1+4G)^{3/2}},$$

其中

$$\alpha(u) = \frac{qu(u-q/2)}{(u-q)^3},$$

$$q = \frac{\pi}{3\sqrt{2}},$$

$$A(u) = \frac{G}{u^{1/2}(1+4G)^{3/2}} \left[ 1 + \frac{9\pi}{32} \left( 1 + \frac{5}{12G} \right)^2 \right],$$

$$B(u) = 1 + 4G + \frac{4qu[u(u+q) - q/2]}{(u-q)^4}.$$

$\eta$  为表征体系耗散性能的控制参量,

$$\eta = \frac{\pi}{3}(1-e^2) \left( \frac{L_x}{d} \right)^2.$$

求解非线性方程(7),需要给定相应的边界条件. 在“热”墙附近( $x = 0$ ),颗粒气体具有恒定的颗粒温度,即  $T$  为常数  $T_0$ . 于是根据方程(1)和(6)可知,在  $x = 0$  处  $u$  也为常数,因此有

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{x=0} = \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{x=0} = 0. \quad (8)$$

在另外五面固壁上,应用无流边界条件,即

$$\nabla_n \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (9)$$

同时,体系总的颗粒数应该守恒,即

$$\frac{1}{\Delta_y \Delta_z} \int_0^1 dx \int_0^{\Delta_y} dy \int_0^{\Delta_z} \frac{1}{u(x,y,z)} dz = f, \quad (10)$$

其中  $f$  为无量纲化的平均颗粒数密度,

$$f = N(n_c V_0).$$

方程(7)及边界条件(8)–(10)式构成一个完备的可解体系.

## 2.2. 分子动力学模拟

对于理论模型的计算结果,可以用数值模拟来进行检验. 本文采用事件驱动(event-driven)的硬球模型分子动力学模拟<sup>[18]</sup>,所有颗粒均当作硬球处理,并如理论模型中同样忽略颗粒的摩擦作用和旋

转自由度,仅考虑法向的非弹性碰撞,以碰撞事件序列作为程序运行的驱动来进行模拟.对于“热”墙”的模拟,为保证运动到墙附近的颗粒能够获得满足 Maxwell 分布律的速度,采用文献 [19] 的方法实现.在模拟过程中,用颗粒体系的动能和质心位置来判断体系是否达到一个稳定状态,运行足够长时间后,当两者均能长时间稳定在某个值或位置附近时即认为体系已经稳定.

### 2.3. 横向均匀解及分子动力学模拟结果

对于非线性偏微分方程 (7) 及给定的边界条件 (8)–(10) 式,可以通过数值方法进行完全求解.然而当  $y, z$  两个方向具有高度的对称性时,方程 (7) 有最简单的一维解.此时方程可改写为

$$[K(u)u'] = \eta Q(u), \quad (11)$$

边界条件简化为

$$u'(0) = 0, \\ \int_0^1 \frac{dx}{u(x)} = f,$$

其中上标撇号表示对  $x$  求导.总粒子数守恒的积分式可用边界条件  $u(0) = u_0$  (常数) 来代替.用数值方法求解这个一维方程,可以得到体系的一维定态解  $u = U(x)$ .这个解作为体系的基本解,可以用来检验理论模型的有效性,也可以在其基础上通过微扰的办法对体系做稳定性分析.当  $\eta = 5 \times 10^4, f = 0.02317$  时,对方程 (11) 的求解结果如图 1 中实线所示.

在保证相同的  $\eta$  和  $f$  的条件下,取体系的容器尺寸为  $L_x = 500d, L_y = L_z = 50d$ ,颗粒的恢复系数  $r = 0.9904$ ,颗粒数  $N = 40960$ ,用分子动力学模拟方法进行模拟.模拟的结果如图 1 中离散实心点所示.从图 1 可以看出,理论结果和模拟结果符合得非常好,这保证了用该理论模型来描述三维颗粒气体体系的有效性.

### 3. 三维相分离条件及稳定性

对二维颗粒气体相分离现象的研究 [9, 10, 12, 13] 指出,颗粒气体的相分离可以归结为与气液相变相似的负压压缩不稳定性,并且可以类似地给出这种不稳定性发生的区域及边界.将二维的理论推广到三维情形,相分离现象是否依然存在,相分离的条件是否能同样给出是值得关心的问题.

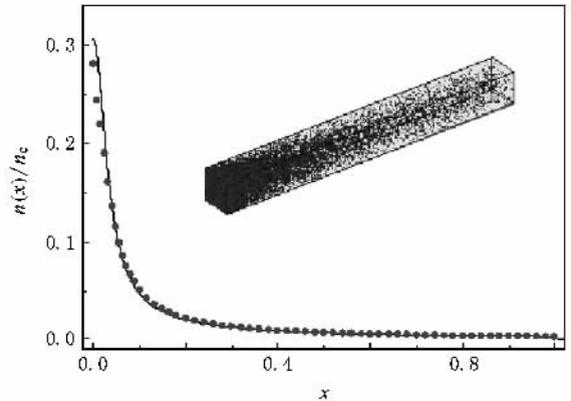


图 1  $\eta = 5 \times 10^4, f = 0.02317$  时体系的一维定态解.实线为理论计算结果,数据点为分子动力学模拟结果.内插图模拟体系对应的最终稳定状态

#### 3.1. 亚稳分界线和共存线

压强是描述气体的一个重要物理量,考虑颗粒气体体系处于不同均匀定态时的压强  $p$ ,由于气体中  $p$  可考虑为常数,为简单起见,定义约化压强

$$P = \frac{p}{n_c T_0},$$

并选取器壁  $x = 1$  附近计算,即

$$P(f, \eta) = \frac{1 + 4G[U(1)]}{U(1)}. \quad (12)$$

通过给定  $\eta$  和  $f$ ,对方程 (11) 求解得到定态解  $U(x)$ ,并通过 (12) 式即可计算得到压强  $P$ .对于  $\eta = 5000$ ,通过改变  $f$  可以计算得到  $P$ - $f$  曲线,结果如图 2 中下方的虚线所示.

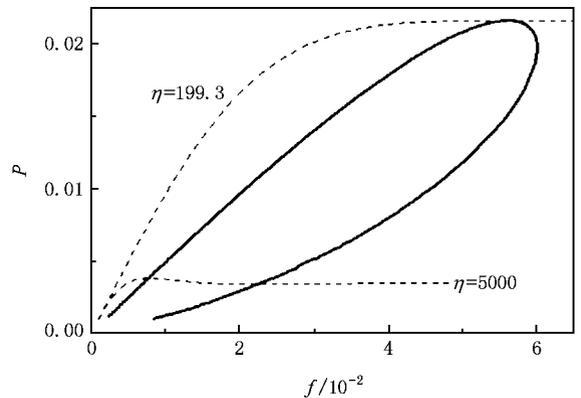


图 2  $\eta = 199.3$  和  $\eta = 5000$  时的  $P$ - $f$  曲线(虚线)及亚稳分界线(实线)

从图 2 可以看到,  $P$ - $f$  曲线有一段下降区域( $f$  越大,压强  $P$  越小),即所谓的“负压压缩”区域依然存在

在 ,它对应的就是气液共存相亚稳分解的区域. 由于负压区域在两个极值点之间 ,其边界 ,即所谓的亚稳分界线 ( spinodal curve ),可由  $\frac{\partial P}{\partial f} = 0$  确定 ,如图 2 中实线所示. 当控制参量  $\eta$  减小时负压区域会趋于消失 ,消失点(即临界点)是拐点 ,可有  $\frac{\partial P}{\partial f} = 0$  ,  $\frac{\partial^2 P}{\partial f^2} = 0$  确定. 理论计算的结果给出  $\eta$  的临界值  $\eta_c \approx 199.3$ . 当  $\eta < \eta_c$  时 , $P(f)$  呈单调递增 ,负压区域不复存在 ,因而相分离现象的发生要求  $\eta > \eta_c$ . 类比于气液相变 , $\eta$  如同温度一样控制着体系的相变行为.

对于气液两相的共存问题 ,Maxwell 给出一个等面积的构造法 ( Maxwell 's construction ) 来确定两相共存的边界——两相共存线 ( coexisting curve 或 binodal curve ). 同样 ,对于颗粒气体体系 ,并不能导出共存线的解析表达式 ,文献 [ 9 ,10 ] 中提出可以类似地根据 Maxwell 等面积构造来确定共存边界 ( $f_1$  ,  $f_2$ ) ,

$$\int_{f_1}^{f_2} [ P(f) - P(f_1) ] df = 0 ,$$

其中  $V$  为约化体积

$$V \propto \frac{1}{f} .$$

而文献 [ 13 ] 提出在临界点附近完全可以用简单关系

$$P(f_1) = P(f_2) ,$$

$$(f_1 + f_2) / 2 = f_c$$

来近似地确定两相的共存边界. 仅考虑临界点附近的情况 ,这里也简单地采用后者提供的近似方法来给出两相共存的边界线 ,结果如图 3 所示.

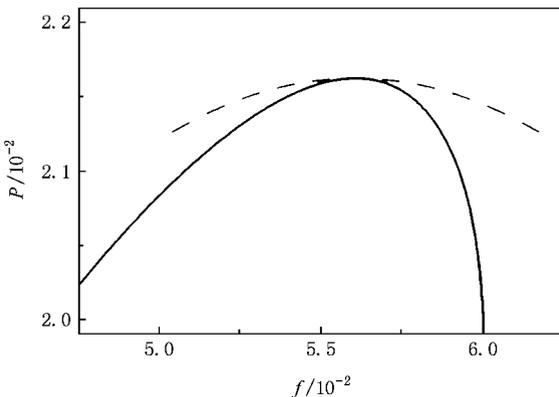


图 3 临界点附近的两相共存线(虚线)和亚稳分界线(实线) 两相共存线由文献 [ 13 ] 中的近似方法得到

### 3.2. 稳定性分析

由于整个体系在  $y, z$  两个方向具有有限的尺寸 ,某些模式的扰动可能稳定存在并导致体系产生偏离横向均匀定态的不稳定性 ,正是这种不稳定性导致相分离. 因此对体系的均匀定态解加上  $y, z$  两个方向上的微扰 ,通过稳定性分析可以确定相分离对体系几何尺寸  $\Delta_{y,z}$  的要求.

考虑对横向均匀定态解的扰动

$$u = U(x) + \varphi_k(x) \cos k_y y \cos k_z z ,$$

将其代入方程(7)并线性化 ,可以得到关于参量  $k$  ( $k^2 = k_y^2 + k_z^2$ ) 的本征方程 ,求解可以得到相应的最小本征值  $k_*(f)$  ,即对应于能够在体系中稳定存在的最小模式. 对于不同的  $\eta$  ,求解结果如图 4 中所示. 扰动模式的稳定存在会破坏体系密度均匀分布的对称性 ,类似于文献 [ 13 ] 中关于二维情形的讨论 ,在每个方向上对称性被扰动破坏的条件分别是

$$\Delta_y > \pi / k_*^y ,$$

$$\Delta_z > \pi / k_*^z ,$$

那么在两个方向上对称性同时破坏后形成三维相分离形貌至少应满足条件

$$\frac{1}{\Delta_y^2} + \frac{1}{\Delta_z^2} \leq \frac{k_*^2(f, \eta)}{\pi^2} ,$$

其中

$$k_*^2 = (k_*^y)^2 + (k_*^z)^2 .$$

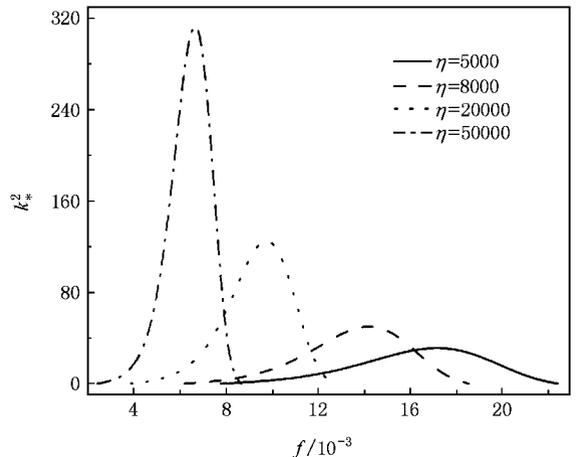


图 4  $\eta$  取不同值时 ,扰动模式参量  $k$  的最小本征值

## 4. 三维相分离形貌

根据以上理论计算及分析,可以给出零重力条件下三维颗粒气体中相分离现象发生的条件.

1) 表征耗散的控制参量  $\eta$  决定相分离现象是否能够发生,相分离区域的存在要求它必须大于某一临界值,即  $\eta > \eta_c$ .

2) 对于  $\eta > \eta_c$ ,体系能在平均粒子数密度  $f$  处于某个范围( $f_1, f_2$ )内时发生相分离.

3) 体系的横向尺寸太小会抑制相分离的发生,

因而相分离还要求体系的尺寸比满足一定条件,对于三维情形,至少应满足

$$\frac{1}{\Delta_y^2} + \frac{1}{\Delta_z^2} \leq \frac{k_*^2(f, \eta)}{\pi^2}.$$

参照计算的具体数值结果,选择满足上述三个条件的合适的  $\eta, N$  和  $\Delta_y, \Delta_z$ ,用分子动力学方法对相分离现象进行了模拟.

当  $\Delta_y, \Delta_z$  均小于临界值时,即当三维体系的两个横向维度均严重受限时,体系是一个准一维体系,只有一种横向均匀的一维定态解,图 1 中已给出定量吻合的理论计算和分子动力学模拟结果.

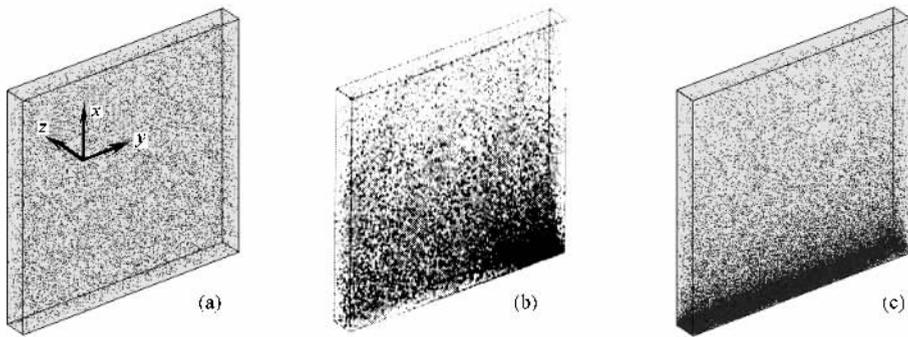


图 5 准二维体系分子动力学模拟结果 (a)  $N = 21600, f = 0.0012$  (b)  $N = 100000, f = 0.0057$  (c)  $N = 172800, f = 0.0098$

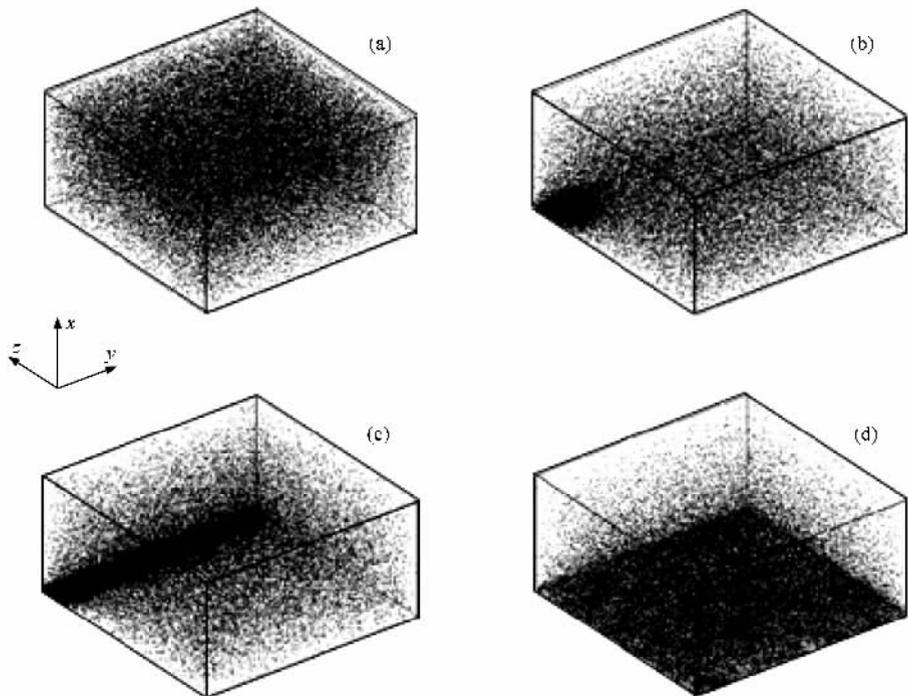


图 6 三维体系分子动力学模拟结果 (a)  $N = 256000, f = 0.0056$  (b)  $N = 340736, f = 0.0075$  (c)  $N = 500000, f = 0.0110$  (d)  $N = 1048576, f = 0.0232$

当体系的某一个横向维度严重受限时,即在一个准二维体系中,体系应完全展现类似于二维颗粒气体中的相分离形貌.考虑容器尺寸为  $L_x = L_y = 500d$ ,  $L_z = 50d$  这样一个准二维体系,颗粒的恢复系数取为  $r = 0.89945$ ,此时  $\eta = 5 \times 10^4$ ,三维相分离模型计算给出的亚稳分解边界为  $f_1 = 0.00238$ ,  $f_2 = 0.00838$ .选择合适的颗粒数  $N$ ,分别使得  $f < f_1$ ,  $f_1 < f < f_2$ ,  $f > f_2$ ,进行硬球分子动力学模拟,模拟结果如图 5 所示.从图 5 可以看到,模拟结果与二维情形完全类似,体系在  $f_1 < f < f_2$  时发生相分离,形成颗粒气体和“液滴”共存的形貌.

当横向维度  $y, z$  都不严重受限时,不稳定性得以在这两个维度上发展,并形成密度不均匀的分布结构.考虑容器尺寸为  $L_x = 200d$ ,  $L_y = L_z = 400d$  这样一个真正意义上的三维体系,假设颗粒的恢复系数  $r = 0.89945$ ,则表征体系的耗散性能的参数  $\eta = 8 \times 10^3$ ,理论计算结果给出此时的亚稳边界为  $f_1 = 0.00608$ ,  $f_2 = 0.01864$ .同样选择不同的颗粒数  $N$  进行分子动力学模拟,结果如图 6 所示.当  $f < f_1$ ,  $f > f_2$  时体系均处于一种横向均匀的稳定状态.在理论预期能够发生相分离的体积分数范围( $f_1, f_2$ )内,相分离现象确实被观察到,但是由于横向维度有两个,三维相分离可以展现出图 (a, b) 中的二维形貌和图 (c) 中的三维形貌.当体系的体积分数  $f$  较大时,即接近  $f_2$  时,体系会出现二维形貌.这是由于颗粒数较多时体积排斥使得它们不能完全聚集在一个角落,阻碍了对称性在两个方向上同时破缺,因此形

成条带状的相分离形貌.

## 5. 结 论

本文将二维颗粒体系的相分离理论推广到了三维情形,发现在三维颗粒体系中,由负压缩率不稳定性引起的相分离现象依然存在,这种现象与气液体系范德瓦耳斯理论描述的亚稳分解极其相似.同时,本文用分子动力学方法对三维颗粒体系的相分离现象进行了模拟.

通过建立的三维模型,求解出了三维颗粒体系对应的基本定态——横向均匀解,数值求解的结果和分子动力学模拟的结果在定量上能够很好符合.根据考察颗粒气体处于均匀定态时体系气压的变化,确定了体系的负压缩区域,即发生亚稳分界的区域.在临界点附近,利用文献 [13] 中给出的近似方法确定了体系的两相共存线.通过对定态解加上横向的微扰,并作线性稳定性分析,得到发生相分离对体系尺寸比的最低要求.

根据理论计算的结果,选取满足相分离条件的模拟参数,用分子动力学对三维颗粒气体中相分离现象进行了模拟.模拟结果给出了在准二维体系和三维体系中相分离的形貌.在三维相分离体系中,较多的维度允许体系在不同的密度条件下能够展现液滴状的相分离形貌和条带状的相分离形貌.

感谢以色列 Hebrew 大学 Baruch Meerson 教授对本文工作的指导与有益交流.

- [ 1 ] Jaeger H M, Nagel S R, Behringer R P 1996 *Rev. Mod. Phys.* **68** 1259
- [ 2 ] Mehta A, Barker G C 1994 *Rep. Prog. Phys.* **57** 383
- [ 3 ] Zhong J, Peng Z, Wu Y Y, Shi Q F, Lu K Q, Hou M Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6691 ( in Chinese ) [ 钟 杰、彭 政、吴耀宇、史庆藩、陆坤权、厚美瑛 2006 物理学报 **55** 6691 ]
- [ 4 ] Peng Z, Hou M Y, Shi Q F, Lu K Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **56** 1195 ( in Chinese ) [ 彭 政、厚美瑛、史庆藩、陆坤权 2006 物理学报 **56** 1195 ]
- [ 5 ] Campbell C S 1990 *Ann. Rev. Fluid Mech.* **22** 57
- [ 6 ] Kadanoff L P 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 435
- [ 7 ] Goldhirsch I, Zanetti G 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1619
- [ 8 ] McNamara S, Young W R 1994 *Phys. Rev. E* **50** R28
- [ 9 ] Argentina M, Clerc M G, Soto R 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89**

044301

- [ 10 ] Cartes C, Clerc M G, Soto R 2004 *Phys. Rev. E* **70** 031302
- [ 11 ] Livne E, Meerson B, Sasorov P V 2002 *Phys. Rev. E* **65** 021302
- [ 12 ] Khain E, Meerson B 2002 *Phys. Rev. E* **66** 021306
- [ 13 ] Khain E, Meerson B, Sasorov P V 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051310
- [ 14 ] Diez-Minguito M, Meerson B 2007 *Phys. Rev. E* **75** 011304
- [ 15 ] Brey J J, Dufty J W, Kim C S, Santos A 1998 *Phys. Rev. E* **58** 4638
- [ 16 ] Jenkins J T, Richman M W 1985 *Arch. Rat. Mech. Anal.* **87** 355
- [ 17 ] Carnahan N F, Starling K E 1969 *J. Chem. Phys.* **51** 635
- [ 18 ] Rapaport D C 1997 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* ( Cambridge : Cambridge University Press )
- [ 19 ] Poeschel T, Schwager T 2005 *Computational Granular Dynamics : Models and Algorithms* ( Berlin : Springer )

# Phase separation in a three-dimensional granular gas system<sup>\*</sup>

Liu Rui<sup>†</sup> Li Yin-Chang Hou Mei-Ying

( *Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China* )

( Received 18 August 2007 ; revised manuscript received 28 February 2008 )

## Abstract

Granular systems, without any energy injection, tend to be clustered or condensed due to inelasticity of the particle collisions. Even in a driven granular gas, this notable phenomenon would be present locally and lead to a spatial inhomogeneity, just like the forming of liquid droplets in gases. The present work, by extending an existing two-dimensional theory, offers a three-dimensional model for such a phase-separation phenomenon in a driven granular gas under zero gravity. According to the model, exact conditions for phase separation are obtained through numerical calculations. Event-driven molecular dynamics simulations confirm the theoretical results, and show new morphologies of phase separation in three-dimensional granular gases.

**Keywords** : granular gas, dissipation, phase separation, molecular-dynamics simulations

**PACC** : 0320, 4610

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10474124, 10720101074 ) and the Knowledge Innovation Program of Chinese Academy of Sciences ( Grant No. KACX2-SW-02-06 ).

<sup>†</sup> E-mail : liurui04@mails.gucas.ac.cn