

水 - 气 - 颗粒固体三相混合系统的流体动力学*

蒋亦民^{1)†} 刘佑²⁾

1) (中南大学物理与电子学院, 长沙 410083)

2) (蒂宾根大学理论物理研究所, 德国, 蒂宾根 72076)

(2013年5月10日收到; 2013年7月10日收到修改稿)

按照经典物理中处理混合物的一般热力学方法, 将近年来报道的颗粒固体流体动力学进一步推广到孔隙被水和气填充的情形, 建立了其自由能的初步模型. 水 - 气 - 颗粒三相体系是与岩土工程和地质灾害密切相关的材料, 但其经典宏观物理基础却一直未能全面澄清. 目前用于分析这类混合物力学行为的基本工程理论含 Darcy 渗流定律、Terzaghi 有效应力及其运动方程 (即本构方程) 等内容. 通过与经典物理对比, 本文澄清了渗流对应于不同相之间的质量扩散, 有效应力与这类材料特有的体积填充形式自由能有关, 这两部分内容工程与物理是一致的. 目前的分歧具体体现在材料建模对象上, 前者认为是本构方程, 而后者是自由能和迁移系数. 该分歧的解决将是建立这类材料的连续介质物理基础、突破本构方法面临的困境的一个关键.

关键词: 颗粒物质, 混合物, 应力, 流体动力学

PACS: 45.70.-n, 81.05.Rm, 83.10.Ff, 83.10.Gr

DOI: 10.7498/aps.62.204501

1 引言

近年来颗粒物理领域对孔隙水或气的动力学效应的关注和兴趣正在提高, 报道了一些实验工作, 如空气对巴西果效应和反巴西果效应的影响^[1]、液体黏性导致颗粒物质密度蠕弛弛豫时间的增加^[2]、风致沙波纹现象^[3]、颗粒受物体撞击后的流动行为在空气的影响下出现的可压缩 - 不可压缩转变^[4]等. 建立相应的连续介质理论来理解这些复杂实验结果, 无疑是一个值得开展的研究方向. 本文尝试用经典物理处理混合物的基本方法^[5], 加上近十多年来我们发展的纯颗粒物质的流体动力学理论^[6], 建立了水 - 气 - 颗粒三组元材料的连续介质方程组和初步的自由能模型. 原则上可以用它们计算分析文献上报道的实验结果, 但作为一个新提出的理论方法, 首先必须澄清它与已经存在的传统理论的关系. 出于这个考虑, 本文的讨论局限在与这类材料的传统 Biot 理论的对比上.

水 - 气 - 颗粒三相体系在工程界称作非饱和砂

土 (对没有气相的水饱和填充情形, 则称饱和砂土), 属于一类与土木工程安全和地质灾害有密切关系的材料. 所谓 Biot 方程组是工程领域用来分析其受力 - 变形行为的连续力学基本方法^[7]. 应该指出的是, 它与本文提到的经典物理之间在理论构架上尚存一定的出入. 显然无论从物理还是工程的角度看, 这都是一个需要沟通和澄清的基础问题. 我们的结果表明, 这里的关键是如何处理应力张量 σ_{ij} : 工程理论的做法是首先寻找一个合适的方法扣除应力中的水压和气压, 得到反映颗粒骨架力链宏观性质的所谓“有效应力” σ'_{ij} , 然后直接建立它的运动方程 (和屈服破坏条件), 又称本构模型. 按照经典物理, 任何材料的建模对象都可归结为一个热力学势函数和几个迁移系数. 但对建立有效应力运动方程的本构理论模式而言, 一般无法做这个回归. 这样看来, 本构模型只是在一定范围和精度内有效的唯象经验公式, 不应该是这类材料的基础物理理论. 相信如果物理与工程在该问题上达成共识, 将有助于解决长期困扰人们的非饱和砂土的一些基础问题.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274390) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: jiangyimin@aliyun.com

为简单起见, 本文假设没有颗粒破碎和表面磨损改性、粒间胶结等结构复杂性出现。

2 流体动力学方程

本文中的“流体动力学”一词泛指任何材料的、基于经典物理的连续介质理论。该称呼可能是为了纪念这个理论方法最早源自人类对牛顿流体的研究, 至少可追溯到 Martin, Parodi 和 Pershan 的文章 [8]。值得注意的是不要将这里的“流体”误解为仅局限于牛顿流体。

最早的颗粒物质流体动力学研究是 Haff 对密度相对稀疏、粒子间做碰撞相互作用的颗粒气体开展的工作 [9]。现在 Haff 理论可用动理学 (kinetics) 解释、推导和完善其中的迁移系数等 [10]。近十多年来我们考虑了高密度情况的、颗粒间通过摩擦接触作用形成弹性骨架的颗粒固体流体动力学 (granular solid hydrodynamics, GSH [6]), 主要思路是进一步引入弹性应变热力学变量 u_{ij} , 然后建立热力学势和迁移系数模型。在这个基础上, 继续发展孔隙有水气填充的理论并不困难, 因为经典物理中已有处理这类混合物的标准方法 [5], 另外水或气这类牛顿流体的流体动力学也是熟知的。

在所关心的实验现象范围内, 一个材料是否视作混合物, 取决于材料内是否出现质量的相互扩散流动, 如有则必须用混合物的理论方法来处理。注意这个混合物的定义不是以化学组成来划分的 (例如空气是多种化学元素的混合物, 但如没有明显的质量扩散或偏析现象时, 其力学行为仍可用单相气体的 Navier-Stokes 方程处理); 另外对单相材料, 质量流动只能是对流型 (convective) 的, 没有扩散型的流动 (这里不考虑超导超流之类的量子现象)。根据 Darcy 实验观测的孔隙水渗流现象, 以及气体也能在孔隙或水中 (例如以气泡的形式) 渗透这个事实, 不难认定“水 - 气 - 颗粒”体系必须视作三元混合物。下面我们建立它的流体动力学。本文采用重复脚标自动求和的爱因斯坦约定; 另外根据物理要求, 文中出现的二阶张量都是对称张量; 符号 δ_{ij} 是二阶单位张量。

2.1 一般方程

一般方程指与材料特性无关的物理原理性方程, 诸如守恒方程、熵增加方程、热力学恒等式等。

由于这些一般方程的存在, 我们即可意识到: 任何材料的连续介质力学问题的解决, 最终都可归结为对热力学势和迁移系数表达式的研究和揭示。

记水、气、颗粒组元的质量密度分别为 $\rho^{(w)}, \rho^{(a)}, \rho^{(s)}$, 材料的总密度为

$$\rho = \rho^{(w)} + \rho^{(a)} + \rho^{(s)}. \quad (1)$$

各组元的质量百分比, 即浓度为

$$c^{(w,a,s)} = \frac{\rho^{(w,a,s)}}{\rho}, \quad (2)$$

并且满足归一条件

$$c^{(w)} + c^{(a)} + c^{(s)} = 1. \quad (3)$$

为简单起见, 忽略组元之间的相互溶解现象, 考虑每个组元的密度都满足质量守恒方程 (又称连续方程):

$$\partial_t \rho^{(w,a,s)} + \nabla_k \rho^{(w,a,s)} \cdot v_k^{(w,a,s)} = 0, \quad (4)$$

这里按照惯例, 将各组元的质量流量写成了分量密度 $\rho^{(w,a,s)}$ 和分速度 $v_k^{(w,a,s)}$ 的乘积。由 (1) 和 (4) 式可得总密度的连续方程:

$$\partial_t \rho + \nabla_k \rho v_k = 0, \quad (5)$$

其中的速度场定义为

$$v_k = c^{(a)} \cdot v_k^{(a)} + c^{(w)} \cdot v_k^{(w)} + c^{(s)} \cdot v_k^{(s)}. \quad (6)$$

值得指出的是, 假设各个组元的质量守恒意味着忽略了气体在水中的、满足 Henry 定律的溶解现象。原则上溶解过程可以通过在分质量守恒方程 (4) 的右边引入一些“源”或“漏”来计入, 但本文将忽略这个复杂性。利用方程 (2) 和 (4), 可得浓度的运动方程:

$$d_t c^{(w,a,s)} - \frac{1}{\rho} \nabla_k J_k^{(w,a,s)} = 0, \quad (7)$$

其中 $d_t = \partial_t + v_k \nabla_k$ 是物质导数, 符号 $J_k^{(w,a,s)} = \rho \cdot c^{(w,a,s)} \cdot \bar{\omega}_k^{(w,a,s)}$ 是每个组元的扩散流量, 而 $\bar{\omega}_k^{(w,a,s)} = v_k - v_k^{(w,a,s)}$ 是组元的相对速度。另外可以验证:

$$J_k^{(w)} + J_k^{(a)} + J_k^{(s)} = 0, \quad (8)$$

即所有组元的扩散流之和为零。

因为守恒, 分量密度 $\rho^{(w,a,s)}$ 是严格意义上的热力学变量, 所考虑的混合物的热力学全微分为

$$dW = T ds + \mu_0 d\rho + v_k dG_k + \chi^{(w)} dc^{(w)}$$

$$+ \chi^{(a)} dc^{(a)} - \pi_{ij} du_{ij} + T_g ds_g, \quad (9)$$

这里仿照文献 [5] 的做法, 取总密度 ρ 和水、气浓度 $c^{(w,a)}$ 作为热力学变量 (由于归一性, 只有两个浓度是独立的). 除增加了这两个浓度 (化学势 $\chi^{(w,a)}$ 是它们的热力学共轭) 的微分项外, (9) 式的其他部分与我们以前考虑的纯颗粒物质的情况完全一样: 右边最后两项是来自骨架的弹性和颗粒温度的贡献, W 是能量密度, T, s 是温度和熵密度, μ_0 是化学势. 另外, 利用动量密度的表达式

$$G_k = \rho v_k, \quad (10)$$

还可以将上面的热力学关系写成

$$df = -s dT + \mu d\rho + \chi^{(w)} dc^{(w)} + \chi^{(a)} dc^{(a)} - \pi_{ij} du_{ij} - s_g dT_g, \quad (11)$$

其中 $f = W - \rho v^2/2 - sT - s_g T_g$ 是自由能密度, 化学势 $\mu = \mu_0 + v^2/2$. 本文假设水、气、颗粒三相的温度总是平衡的, 没有温差, 这时用自由能建模比较方便.

值得强调指出的是, 由于混合物各相之间的力相互作用频繁, 我们不能将每个相的动量密度 $G_k^{(w,a,s)} = \rho^{(w,a,s)} \cdot v_k^{(w,a,s)}$ 看作守恒量, 哪怕是近似的. 因此在热力学关系 (9) 和 (11) 式里没有分动量密度 $G_k^{(w,a,s)}$ 的贡献. 另外上面的关于混合物分质量的方程 (1)—(8) 与一些文献报道的“孔隙介质理论”^[11] 是一致的, 但热力学 (9) 式与文献 [11] 很不一样. 这个分歧使得本文的理论结构与“孔隙介质理论”的截然不同 (文献 [11] 采用的是 Houlsby 等提出的热力学形式, 有关这个问题的更多讨论参见文献 [12]).

能量守恒、动量守恒、和熵增加方程分别为

$$\partial_t W + \nabla_k Q_k = \rho g_k v_k, \quad (12)$$

$$\partial_t G_i + \nabla_k \Sigma_{ik} = \rho g_i, \quad (13)$$

$$\partial_t s + \nabla_k (s v_k - h_k) = R/T > 0, \quad (14)$$

其中 g_i 是重力加速度矢量, h_i 是 (例如与导热有关的) 熵扩散流. 注意 W 是包含热能和机械能在内的热力学能量, 因此有守恒方程 (12) 成立. 不失一般地, 可以将总应力 (即动量的流量) 写成 $\Sigma_{ik} = \rho v_i v_k + \sigma_{ik}$ 和

$$\sigma_{ik} = P \delta_{ik} + \pi_{ik} - \sigma_{ik}^D, \quad (15)$$

$$P = \mu \rho - f, \quad (16)$$

其中 σ_{ik}^D 待定. 作为与熵类比的颗粒层次变量, 颗粒熵的运动方程与 (14) 式类似:

$$\partial_t s_g + \nabla_k (s_g v_k - \iota_k) = \frac{R_g}{T_g} - I, \quad (17)$$

只是多出一项反映颗粒熵向热熵衰减的 $I \geq 0$. 流体动力学的能量流量 Q_i 除了来自质量流动 $W v_i$ 和应力做功 $v_k \Sigma_{ik}$ 的贡献外, 还有各种扩散现象的贡献. 这里我们有两个熵扩散流 h_k, ι_k , 和两个质量扩散流 $J_k^{(w)}, J_k^{(a)}$ (注意因为 (8) 式, 只有两个独立的质量扩散流). 有

$$Q_i = W v_i + v_k \Sigma_{ik} - T h_k - T_g \iota_k - \frac{\chi^{(w)}}{\rho} \cdot J_k^{(w)} - \frac{\chi^{(a)}}{\rho} \cdot J_k^{(a)}, \quad (18)$$

最后, 弹应变 u_{ik} 的运动方程可在通常的弹性理论的几何方程基础上, 增加一项待定的反映塑性的项 X_{ik} , 即

$$d_t u_{ik} = V_{ik} + X_{ik}, \quad (19)$$

其中记号 $V_{ik} = (\nabla_i v_k + \nabla_k v_i)/2$ 是速度的梯度.

上述方程中的一些未知项, 集中记为

$$\Lambda = (h_k, \iota_k, X_{ik}, \sigma_{ik}^D, I, J_k^{(w,a)}), \quad (20)$$

都是一些与耗散密切相关的流通量 (简称耗散流), 可用标准的 Onsager 非平衡热力学方法做进一步的处理, 具体如下. 首先我们注意到方程 (1)—(19) 意味着有下面的恒等式成立 (可以直接计算证明):

$$R + R_g = h_k \nabla_k T + \iota_k \nabla_k T_g + X_{ik} \pi_{ik} + \sigma_{ik}^D V_{ik} + I T_g + J_k^{(w)} \nabla_k \frac{\chi^{(w)}}{\rho} + J_k^{(a)} \nabla_k \frac{\chi^{(a)}}{\rho}, \quad (21)$$

然后通过分析热力学关系 (9) 式的平衡条件, 可知上面恒等式 (21) 式右边两项乘积的第二项, 集中记为

$$\Phi = \left(\nabla_k T, \nabla_k T_g, \pi_{ik}, V_{ik}, T_g, \nabla_k \frac{\chi^{(w)}}{\rho}, \nabla_k \frac{\chi^{(a)}}{\rho} \right), \quad (22)$$

就是驱动耗散流 (20) 式的热力学力. 在最低阶近似下, 可以将熵和颗粒熵的增加率 R, R_g 取为这些热力学力的二次型函数, 即

$$R = \Phi_\alpha \cdot O_{\alpha\beta} \cdot \Phi_\beta, \quad (23)$$

$$R_g = \Phi_\alpha \cdot \Omega_{\alpha\beta} \cdot \Phi_\beta, \quad (24)$$

其中的展开系数 $O_{\alpha\beta}, \Omega_{\alpha\beta}$ 即是迁移系数. 注意到恒等式 (21) 式可写成

$$R + R_g = \Phi_\alpha \cdot \Lambda_\alpha, \quad (25)$$

将它与 (23) 和 (24) 式比较, 可得

$$\Lambda_\alpha = (O_{\alpha\beta} + \Omega_{\alpha\beta})\Phi_\beta, \quad (26)$$

也就是说在 Onsager 的关于热力学的展开近似下, 耗散流可由迁移系数确定.

以上的方程 (1)—(26) 是水 - 气 - 颗粒三相材料的一般流体动力学理论构架. 它们基本上与我们这十多年来建立的不含孔隙水气的 GSH 类似, 在文献 [6] 中可找到更详细的解释说明. 不难看出, 热力学全微分形式 (9) 或 (11) 式, 也就是独立热力学状态变量集的判定是这里惟一关键的一步, 它将影响着整个理论的基本结构. 这里我们完全采纳了经典物理处理混合物的基本思想 [5], 即对含水气的情形, 状态变量集仅需增加两个浓度变量.

2.2 自由能模型

基于上小节讨论的一般方程, 有连续介质力学的任务就是确定合适的热力学势和迁移系数模型. 从已知的各子相材料模型出发来推测建立混合物的材料模型, 是一个首先值得尝试的办法.

对砂土这样的孔隙填充型混合物, 可以考虑水-气-颗粒三相之间有明确的分界面, 同时每相都有其自身的细观密度, 分别记为 $\rho^{(w0,a0,s0)}$. 各相的体积填充情况可通过由下面公式定义的体积分数

$$\phi^{(w,a,s)} = \frac{\rho^{(w,a,s)}}{\rho^{(w0,a0,s0)}} \quad (27)$$

来描述. 因为没有任何真空区域, 体积分数满足归一条件:

$$\phi^{(w)} + \phi^{(a)} + \phi^{(s)} = 1. \quad (28)$$

除体积分数外, 工程领域还习惯用孔隙比 n 和饱和度 S_r 来量化水、气的体积填充情况. 其定义分别是

$$n = 1 - \phi^{(s)} \quad (29)$$

和

$$S_r = \frac{\phi^{(w)}}{n} = \frac{\phi^{(w)}}{1 - \phi^{(s)}}. \quad (30)$$

利用其可以将体积分数写成

$$\phi^{(s)} = 1 - n, \quad (31)$$

$$\phi^{(w)} = n \cdot S_r, \quad (32)$$

$$\phi^{(a)} = n \cdot (1 - S_r), \quad (33)$$

(自动满足归一条件 (28) 式). 注意不同于对任何混合物都适用的浓度概念, 体积分数、孔隙比、饱和度仅对体积填充类的混合物有意义. 它们的用途主要是为下面的材料建模提供方便.

在给定温度 T 下, 可以简单地假设三相有下面的细观自由能密度模型:

$$f^{(s)} = \rho^{(s0)} \cdot f^{(s0)}(T) + K_s \left[\rho^{(s00)} + \rho^{(s0)} \ln \left(\frac{\rho^{(s0)}}{e\rho^{(s00)}} \right) \right], \quad (34)$$

$$f^{(w)} = \rho^{(w0)} \cdot f^{(w0)}(T) + K_w \left[\rho^{(w00)} + \rho^{(w0)} \ln \left(\frac{\rho^{(w0)}}{e\rho^{(w00)}} \right) \right], \quad (35)$$

$$f^{(a)} = AT\rho^{(a0)} \ln \left(\frac{k_1\rho^{(a0)}}{T^k} \right), \quad (36)$$

其中材料常数 K_s 和 K_w 的值可从颗粒和水的压缩系数值得到, $\rho^{(s00)}$ 和 $\rho^{(w00)}$ 是它们在零压强极限时的密度; $f^{(s0)}$ 和 $f^{(w0)}$ 是与温度有关的零压强极限时的单位质量自由能; (36) 式是描述气相的理想气体自由能, A, k, k_1 是它的材料常数. 注意, 这里我们考虑的只是给定温度下, 水、气压变化导致粒子密度变化而引起的自由能变化, 并不涉及大量颗粒构成的弹性骨架的自由能. 骨架弹性是骨架密度 $\rho^{(s)} = (1 - c^{(w)} - c^{(a)})\rho$ 和弹应变 u_{ij} 的函数 (具体见后面的 (46) 式).

利用热力学公式 $(\rho^{(s,w,a)} \partial / \partial \rho^{(s,w,a)} - 1) f^{(s,w,a)}$ 可以计算 (34)—(36) 式给出的压强. 首先模型 (35) 式给出的孔隙水压是

$$\zeta = K_w (\rho^{(w0)} - \rho^{(w00)}), \quad (37)$$

它应该与模型 (34) 式给出的颗粒压力保持力平衡, 即

$$K_w (\rho^{(w0)} - \rho^{(w00)}) = K_s (\rho^{(s0)} - \rho^{(s00)}). \quad (38)$$

另外由于表面张力的缘故, 模型 (36) 式给出的气压与水压之间可以有一个压差 Υ , 即

$$K_w (\rho^{(w0)} - \rho^{(w00)}) = A\rho^{(a0)}T - \Upsilon, \quad (39)$$

反映表面张力的压差 Υ 在岩土工程里称作“吸力”(suction)^[9], 一般与水气填充的体积分数有关. 如果吸力 $\Upsilon(\phi^{(w)}, \phi^{(a)})$ 已知, 将其代入 (39) 式, 再与

方程 (38) 和下面的方程 (即归一条件 (28) 和 (27) 式)

$$\frac{c^{(w)}}{\rho^{(w_0)}} + \frac{c^{(a)}}{\rho^{(a_0)}} + \frac{1 - c^{(w)} - c^{(a)}}{\rho^{(s_0)}} = \frac{1}{\rho} \quad (40)$$

一道联立求解, 可得三相的细观密度随热力学状态变量 $\rho, c^{(w,a)}, T$ 变化的函数关系:

$$\rho^{(w_0, a_0, s_0)} = \rho^{(w_0, a_0, s_0)}(\rho, c^{(w)}, c^{(a)}, T). \quad (41)$$

将其代入 (37) 式, 可得用热力学状态变量表示的孔隙水压表达式:

$$\zeta = \zeta(\rho, c^{(w)}, c^{(a)}, T). \quad (42)$$

如果忽略吸力 Υ 的变化 (即假设它为常数), 方程组 (38)—(40) 的解可以利用三次方程的根公式解析地写出 (但很长). 对没有气相 ($c^{(a)} = 0$) 的水饱和和填充情形, 也有解析解. 但一般地, 细观密度 (41) 式只能用 (38)—(40) 式隐含地给出.

现在我们可以引入下面的水 - 气 - 颗粒体系的自由能模型

$$f = f_0 + w_{\text{ela}} + f_T, \quad (43)$$

其中 f_0 是以体积分量为权重的, 三相细观自由能 (34)—(36) 式之和为:

$$\begin{aligned} f_0 &= \phi^{(s)} f^{(s)} + \phi^{(w)} f^{(w)} + \phi^{(a)} f^{(a)} \\ &= \frac{\rho}{\rho^{(s_0)}} (1 - c^{(w)} - c^{(a)}) f^{(s)} + \frac{\rho}{\rho^{(w_0)}} c^{(w)} f^{(w)} \\ &\quad + \frac{\rho}{\rho^{(a_0)}} c^{(a)} f^{(a)}. \end{aligned} \quad (44)$$

注意需要利用 (41) 式, 将它表示成热力学状态变量 $\rho, c^{(w)}, c^{(a)}, T$ 的函数, 才可得到自由能的 f_0 部分. f_T 和 w_{ela} 分别是与颗粒温度有关的自由能贡献和骨架的弹性性能, 可以取我们以前的不含水气的 GSH 自由能模型 [6]:

$$f_T = -\frac{1}{2} \rho^{(s)} \left(1 - \frac{\rho^{(s)}}{\rho_{\text{cp}}} \right)^a T_g^2, \quad (45)$$

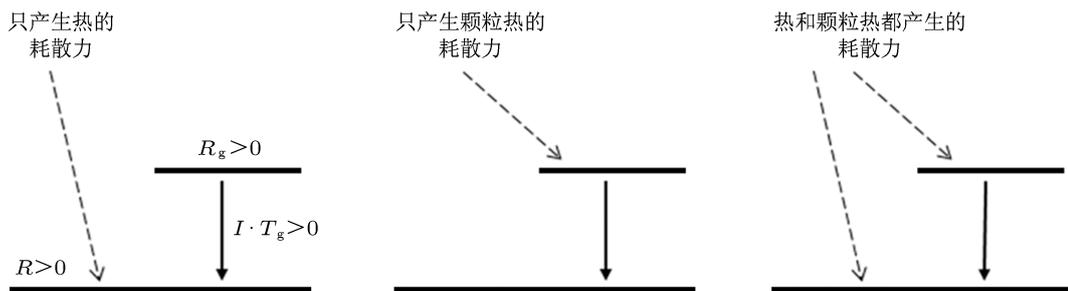


图1 双熵材料的三种迁移过程

$$\begin{aligned} w_{\text{ela}} &= B_0 \left(\frac{\rho^{(s)} - \rho_0}{\rho_{\text{cp}} - \rho^{(s)}} \right)^{a'} \sqrt{\Delta} \left(\frac{2}{5} \Delta^2 + \frac{u_s^2}{\xi} - \frac{\xi_1 u_l^3}{\xi \Delta} \right) \\ &\quad - \xi_2 \Delta, \end{aligned} \quad (46)$$

这里的骨架密度 $\rho^{(s)} = \rho(1 - c^{(w)} - c^{(a)})$. 符号 $\Delta = -u_{kk}$ 是弹应变的迹取负, u_s^2 和 u_l^3 分别是偏弹应变 $u_{ij}^* = u_{ij} + \Delta \delta_{ij}/3$ 的平方和立方的迹. 注意 (46) 式右边最后是反映颗粒间湿黏力的项.

如果忽略吸力 Υ 的变化 (即假设它为常数), 可以验证自由能 (43) 式中的 f_0 部分对压强的贡献恰好等于孔隙水压 (42) 式与吸力 Υ 的和, 即

$$\rho \frac{\partial f_0}{\partial \rho} - f_0 = \zeta + \Upsilon, \quad (47)$$

这意味着将应力 (15) 式扣除掉孔隙水压和吸力后, 得到

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} - \zeta \delta_{ik} - \Upsilon \delta_{ik} \\ = \pi_{ik} - \sigma_{ik}^D + \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - 1 \right) (f_T + w_{\text{ela}}) \delta_{ik}, \end{aligned} \quad (48)$$

上式右边最后项往往可以忽略. 在没有耗散的静态情形, $\sigma_{ik}^D = 0$. 这时总应力减去孔隙水压和吸力后, 基本上就是骨架的弹应力.

2.3 迁移系数

引入记号 $\Lambda_\alpha^{(1)} = O_{\alpha\beta} \Phi_\beta$ 和 $\Lambda_\alpha^{(2)} = \Omega_{\alpha\beta} \Phi_\beta$, (26) 式可写成 $\Lambda_\alpha = \Lambda_\alpha^{(1)} + \Lambda_\alpha^{(2)}$, 它们分别表示与热产生 R , 和颗粒热产生 R_g 有关的耗散流. 由于颗粒类物质有两个熵 [7], 需要视情况判断一个耗散力驱动的迁移过程属于图 1 中的哪一种. 这里必须注意到因为考虑的颗粒粒子是不能被分子热运动激发的宏观大小, 温度梯度对 R_g 没有贡献. 另外为简单起见, 除非有明确的实验原因, 非对角迁移系数基本都可忽略.

可以在我们以前的纯颗粒物质 GSH 迁移系数模型基础上 [6], 补充与质量扩散有关的部分, 得到

$$\begin{pmatrix} h_i^{(1)} \\ l_i^{(1)} \\ X_{ij}^{(1)} \\ \sigma_{ij}^{(1D)} \\ I \\ J_i^{(1w)} \\ J_i^{(1a)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{ijmn} & \alpha_{ijmn} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha_{mni j} & \eta_{ijmn} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^{(1w)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^{(1a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_i T \\ \nabla_i T_g \\ \pi_{mn} \\ V_{mn} \\ T_g \\ \nabla_i \chi^{(w)} / \rho \\ \nabla_i \chi^{(a)} / \rho \end{pmatrix} \quad (49)$$

和

$$\begin{pmatrix} h_i^{(2)} \\ l_i^{(2)} \\ X_{ij}^{(2)} \\ \sigma_{ij}^{(2D)} \\ 0 \\ J_i^{(2w)} \\ J_i^{(2a)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \eta_{ijmn} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^{(2w)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^{(2a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_i T \\ \nabla_i T_g \\ \pi_{mn} \\ V_{mn} \\ T_g \\ \nabla_i \chi^{(w)} / \rho \\ \nabla_i \chi^{(a)} / \rho \end{pmatrix}, \quad (50)$$

这里关于扩散系数 β 的一些性质, 可用 Darcy 渗流实验来研究 (详见下节的讨论). 另外, (49) 式中的 α 是一个必须考虑的非对角迁移系数 (负号来自 Onsager 倒易原理, 详见文献 [5, 6]).

复杂材料的迁移系数性质很难从微观和细观相互作用出发进行推导分析 (例如动理学分析), 这时只能通过流体动力学计算与实验结合来了解它们. 对砂土而言这方面的研究还处于非常初步的起始阶段, 这里存在一些颗粒物质特有的、以前未曾遇见的迁移过程 (如非对角迁移系数 α), 深入研究能扩充有关非平衡物理方面的知识.

3 讨论

Biot 方程组是目前广泛应用的砂土连续介质理论, 具体含牛顿力平衡方程、连续方程、Darcy 渗流方程、Terzaghi 有效应力和本构等五个部分 [7]. 前两个部分就是上小节介绍的动量守恒和质量守恒, 因此只需讨论后面三部分内容. 本文主要限于讨论没有气相 (吸力也相应地没有了) 的饱和砂土情况. 由于非饱和砂土的工程理论目前还不十分确切, 这里不给出详细对比.

$O_{\alpha\beta}$ 和 $\Omega_{\alpha\beta}$ 的模型. 最简单的做法是取:

饱和砂土的 Darcy 渗流方程为 [7]

$$v_k^{(s)} - v_k^{(w)} = \frac{k_{\text{Darcy}}}{g\rho^{(w)}} \cdot \nabla_k \zeta, \quad (51)$$

k_{Darcy} 称作 Darcy 渗流系数, 它应该对应于描述质量扩散的 Onsager 公式. 由 (49) 和 (50) 式可得质量扩散 $J_k^{(1w)} + J_k^{(2w)}$ 为

$$J_k^{(w)} = \beta^{(w)} \cdot \nabla_k \frac{\chi^{(w)}}{\rho}, \quad (52)$$

其中 $\beta^{(w)} = \beta^{(1w)} + \beta^{(2w)}$. 这里的水浓度化学势主要来自自由能 f_0 , 利用模型 (44) 式可以验证, $\chi^{(w)} / \rho$ 只与孔隙水压有关. 利用这个性质我们可以将 (52) 式写成

$$J_k^{(w)} = \beta^{(w)} \frac{d(\chi^{(w)} / \rho)}{d\zeta} \cdot \nabla_k \zeta, \quad (53)$$

另外由于 $J_k^{(w)} = (\rho^{(w)} \rho^{(s)} / \rho) \cdot (v_k^{(s)} - v_k^{(w)})$, 对比 (51) 和 (53) 式可得 Darcy 渗流系数 k_{Darcy} 与迁移系数 $\beta^{(w)}$ 之间的关系为

$$k_{\text{Darcy}} = \frac{g\rho\beta^{(w)}}{\rho^{(s)}} \frac{d(\chi^{(w)} / \rho)}{d\zeta}, \quad (54)$$

(52)—(54) 式是用自由能模型 (44) 式和流体动力学对 Darcy 渗流的理解.

在没有耗散的静态情形, (48) 式表明 Terzaghi 有效应力 $\sigma'_{ik} = \sigma_{ik} - \zeta \delta_{ik}$ 就是骨架的弹性应力 π_{ik} . 这意味着由 π_{ik} 决定的骨架的静力稳定判据 (或屈服判据) 实际上取决于有效应力. 这完全与 Terzaghi 的有效应力原理一致.

对动态变形情况, 典型的工程本构理论 (例如弹塑 (elastoplastic) 或亚塑 (hypoplastic) 理论) 认为有效应力满足下面形式的运动方程 [7]:

$$\partial_t \sigma'_{ij} = C_{ij}(\rho^{(s)}, \dot{\epsilon}_{mn}, \sigma'_{mn}), \quad (55)$$

其中 $\dot{\epsilon}_{mn}$ 是骨架的应变率, C 往往是特别复杂的泛函, 具体公式在工程领域似乎也没有共识. 但本构关系 (55) 式反映的一个基本思想是: 骨架可看作一个独立的“有效应力 - 应变”力学系统, 与描述水运动的 Darcy 方程没有耦合. Terzaghi 把应力分解为描述骨架的有效应力和孔隙水压两部分的一个主要目的就是为了能够分别建立它们的运动方程. 对三三相的非饱和砂土, 工程界一直在尝试用类似的应力分解思路来建立理论, 但进展的似乎十分困难 [7].

将自由能模型 (43) 式代入 (15) 和 (16) 式, 并注意性质 (47) 式, 有流体动力学对扣除了孔隙水压的应力, 即有效应力, 等于 (48) 式的右边. 由于它是弹性应变、颗粒温度、密度和浓度的函数, 它的动力学是由这些变量的运动方程来决定的, 数学上并不总是能归结为一个像 (55) 式那样的运动方程. 这是经典物理与工程理论的一个基本分歧. 换句话讲, 就是本构的理论模式不属于经典物理的理论构架, 因此不应该作为砂土材料的连续力学理论基础. 当然这并不排除其作为描述某些实验现象的、非常重要的唯象经验定律. 虽然在一定近似下, 可以从流体动力学推导本构关系 [13], 但本构显然不等价于前者 (作为完整的物理理论, 流体动力学给出了所有的热力学量、能量及其流量等的计算公式, 而本构缺少其中的部分内容, 所以本构模式和经典物理是不可能等价的). 随着多相的卷入, 推导本构关系所需的近似代价将增大 (因为需要解耦各相), 精度上可能无法满足要求, 使得用本构模式构建理论时出现问题. 从这个角度来看, 尝试用经典物理解决目前在非饱和砂土上面面临的困境, 应该是一条有前景的研究思路.

目前经典物理的一般方程构架对水 - 气 - 颗粒三相混合物的有效性仍是一个被怀疑和争议的问题, 其原因也许与下面的一些现实存在的复杂性和观点看法有关.

1) 随着应力、应变率、密度和浓度的变化, 材料有类似固态、液态、气态的力学行为转变 (但不一定尖锐), 因此需要一个能描述跨越固液的连续介质方程. 熟知的范德瓦尔斯气体方程是一个跨越液 - 气态的理论范例, 但跨越固 - 液态, 由于涉及对称破缺量的“呈现”与“消亡”[8], 似乎还没有可供参考的先例. 分固 - 液 - 气态区域单独建立理论也有困难, 因为各态的 (宏观) 交界面的位置、是否存在、都可能不明确 [14]. 地质灾害和工程安全特别关心的事情又多在跨态区域, 这迫使我们去建立能“连贯跨态”的统一理论. 另外当颗粒组元密度从高向低变化时, 会出现颗粒之间的“咬合 - 脱离”、相互作用从“长时间摩擦接触”型向“碰撞”型的转变. 转变边界往往也是模糊和不确定的, 也不适合分开来各自处理.

2) 即使在类固态, 弹性与塑性共存是其变形力学的主要特征. 例如高密的颗粒固体能在定常应力下保持稳恒变形运动, 工程中称作“临界状态”(critical state), 即持续的塑性变形. 不同于 Navier-Stokes 方程或纯弹性理论, 塑性力学似乎是数学力学学科发展的理论, 其做法为大多物理研究者不熟悉, 一些基本思路与经典物理之间的关系并未详细研究澄清.

3) 实验数据与基本理论的关系往往是间接的, 同时也有数据不足的问题, 特别是缺少样品的初始和边界信息. 局域测力探头往往会干扰测点处的样品应力状态, 导致测量值失真. 这使得在建立砂土物理方程或论证其有效性时, 难免会出现一些基于洞察、直觉、猜测和试错等不太直观的因素. 另外初始和边界情况往往与样品的制备历史有关, 并且不易控制, 这也容易使人产生“经典物理失效”的误解.

4) 如果样品, 或探测探头尺寸偏小, 测量结果会受到细观涨落干扰, 或偏离连续介质宏观理论预测. 注意, 这类尺寸效应是任何材料测量都有的普遍现象, 它并不否认宏观物理的存在性 (例如液体中微粒的布朗运动属于尺寸效应, 但这不否认 Navier-Stokes 方程的合法性). 也许不少颗粒物质实验装置尺寸接近、甚至远低于宏 - 细观尺寸分离值 (对不同实验可能值不同), 很容易观测到显著的尺寸效应, 从而导致了一些人误认为这类材料不能用偏微分方程描述, 没有连续介质物理.

5) 非线性、多迁移系数和多相使得实验现象复杂化, 物性难于用一两个简单的几何实验表征测

定. 复杂性也会引起对建立统一理论的做法产生怀疑.

6) 由于粒子几何形状和耗散型细观相互作用(固-液接触、粒间固-固接触、摩擦力和表面张力等)带来的复杂性,基于细观推导的理论方法(如动理学)在处理较大颗粒密度情况时面临很大困难,目前还无法为相应的宏观理论论证,以及热力学势和迁移系数等材料建模问题提供定量帮助.

上述一些困难和误区并不妨碍我们直接发展建立颗粒类物质的流体动力学方程. 从以前建立的GSH和本文将其对孔隙含水、气情形的推广结果看,虽然在材料模型的修正和细化以及理论的实验验证上,还有大量的工作有待今后开展,但建立一个统一的砂土连续介质物理理论是可行的.

最后我们注意到如果颗粒粒径足够小,空气在狭小的孔隙里不易做扩散流动,相应的Darcy渗流系数很小. 这时系统中会出现气压不均匀现象,例如一些实验观测到的颗粒振动床底部的负气压区域^[15]. 用本文的流体动力学方程可对此做定量分析,这将有助于理解巴西果效应和反巴西果效应、三明治分离等复杂现象^[16,17].

4 结论

水-气-颗粒三相混合物是当前岩土工程和颗粒物理都关注的材料,但描述其宏观性质的工程理论与经典物理之间在基本构架上存在一些偏差. 这个基础问题的解决显然对两者都非常重要,本文对此做了详细讨论和揭示. 主要有以下结果: 1) 利用处理混合物的标准物理方法,建立了这类材料的一般流体动力学方程; 2) 提出了一个简单的自由能模型; 3) 澄清了工程理论中的Darcy方程和Terzaghi有效应力与前面的流体动力学和自由能没有冲突; 4) 强调指出工程与物理的分歧具体表现在“本构建模”还是“自由能和迁移系数建模”上.

虽然以“建立有效应力运动方程”为基本特征的本构理论方法在工程界被广泛接受,但对它的怀疑似乎一直存在. 最近国内有学者抱怨“本构模型多达数百个,但得到工程师认可的极少,或者说还没有”;(有关研究)“从满怀信心进入迷惑不解的状态”^[18]. 它在向非饱和和砂土推广时进展缓慢,至今还未能完成^[7]. 相信从经典物理角度对此进行研究考察将有助于问题的解决.

- [1] Yan X, Shi Q, Hou M, Lu K 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 014302
- [2] Fiscina J E, G. Lumay G, Ludewig F, Vandewalle N 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 048001
- [3] Zheng X J, Bo T L 2009 *Chin. Sci. Bull.* **54** 1488 (in Chinese) [郑晓静, 薄天利 2009 科学通报 **54** 1488]
- [4] Royer J R, Corwin E I, Eng P J, Jaeger H M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 038003
- [5] Lifshitz E M, Landau L D 1987 *Fluid Mechanics* (New York: Pergamon Press)
- [6] Sun Q C, Hou M Y, Jin F 2011 *Physics and Mechanics of Granular Matter* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [孙其诚, 厚美瑛, 金峰 2011 颗粒物质物理与力学 (北京: 科学出版社)]
- [7] Shen Z J 2000 *Theoretical Soil Mechanics* (Beijing: China Water Power Press) (in Chinese) [沈珠江 2000 理论土力学 (北京: 中国水利水电出版社)]
- [8] Martin P C, Parodi O, Pershan P S 1972 *Phys. Rev. A* **6** 2401
- [9] Haff P K 1983 *J. Fluid Mech.* **134** 401
- [10] Luding S 2009 *Nonlinearity* **22** R101
- [11] Zhao C G, Zhang X D 2008 *Sci. China E* **38** 1453 (in Chinese) [赵成刚, 张雪东 2008 中国科学 E **38** 1453]
- [12] Jiang Y M, Liu M 2010 *Rock and Soil Mechanics* **31** 1729 (in Chinese) [蒋亦民, 刘佑 2010 岩土力学 **31** 1729]
- [13] Jiang Y M, Liu M 2010 *Chin. Sci. Bull.* **54** 1504 (in Chinese) [蒋亦民, 刘佑 2009 科学通报 **54** 1504]
- [14] Komatsu T S, Inagaki S, Nakagawa N, Nasuno S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1757
- [15] Yan X Q, Shi Q F, Hou M Y, Lu K Q 2003 *Physics* **32** 748 (in Chinese) [阎学群, 史庆藩, 厚美瑛, 陆坤权 2003 物理 **32** 748]
- [16] Peng Y J, Liu X S, Zhen Z, Jiang Z H 2011 *Physics* **40** 672 (in Chinese) [彭亚晶, 刘小嵩, 甄珍, 姜泽辉 2011 物理 **40** 672]
- [17] Jiang Z H, Lu K Q, Hou M Y, Chen W, Chen X J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2244 (in Chinese) [姜泽辉, 陆坤权, 厚美瑛, 陈唯, 陈相君 2003 物理学报 **52** 2244]
- [18] Gong X N 2011 *Rock and Soil Mechanics* **32** 321 (in Chinese) [龚晓南 2011 岩土力学 **32** 321]

Hydrodynamic theory of grains, water and air*

Jiang Yi-Min^{1)†} Liu Mario²⁾

1) (School of Physics and Electronics, Central South University, Changsha 410083, China)

2) (Theoretische Physik, Universität Tübingen, Tübingen 72076, Germany)

(Received 10 May 2013; revised manuscript received 10 July 2013)

Abstract

Starting from the thermodynamic framework of a mixture, granular solid hydrodynamics (GSH), which has been developed in recent years, is generalized to the cases in which water and/or gas are present in the interstitials of a granular solid. A preliminary model for the free energy of the mixture is proposed. The three-phase system of grains, water and air is a material relevant to soil mechanics and rock engineering, especially geological catastrophes, for which the macroscopic physics has not been clarified as yet. The engineering theory used currently for analyzing this mixture contains the Darcy's law of interstitial flow, the effective stress by Terzaghi, including its equation of motion (i.e., the constitutive relation). Comparing it with the theory of GSH, we clarify that Darcy's equation represents mass diffusion, and the effective stress can be explained by the specific model of free energy that is volumetric filling. The usual engineering approach and GSH, a theory based on physics, are consistent, but we do find some discrepancies, especially on how to parameterize the model: the engineering approach employs varying constitutive relation, but the physical approach considers the free energy and the transport coefficients. Clarifying this, we believe, is important for eventually obtaining a unified continuous mechanical theory of soils, especially nonsaturated ones, which is complete and satisfying from physics's point of view.

Keywords: granular matter, mixture, stress, hydrodynamics

PACS: 45.70.-n, 81.05.Rm, 83.10.Ff, 83.10.Gr

DOI: 10.7498/aps.62.204501

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274390).

† Corresponding author. E-mail: jiangyimin@aliyun.com