

颗粒介质的结构及热力学

孙其诚

Granular structure and the nonequilibrium thermodynamics

Sun Qi-Cheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 076101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.076101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.076101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I7>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

具有形状记忆效应的新型智能阻尼材料及其热弹性力学性能研究

Research on the shape memory effect and thermalelasticity of a novel intellectual damping material

物理学报.2012, 61(16): 168102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.168102>

基于分形多孔介质三维网络模型的非混溶两相流驱替数值模拟

Numerical simulations of immiscible two-phase flow displacement based on 3D network model for fractal porous media

物理学报.2011, 60(9): 098103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.098103>

# 颗粒介质的结构及热力学\*

孙其诚†

(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)

(2014年6月12日收到; 2014年11月6日收到修改稿)

颗粒介质具有远程无序和近程有序的结构, 是产生动力学不均匀性 (dynamical heterogeneity) 和复杂不可逆过程的根源. 本文分析了颗粒介质的结构特征、变形和能量耗散之间的内在关联, 讨论了颗粒介质的弹性, 提出了流变应变增量、耦合应变增量和弹性应变增量的应变增量分解方式. 沿用非平衡热力学框架, 引入表征运动无序的动理学颗粒温度  $T^k$  和表征弹性应力涨落的构型温度  $T^c$ , 作为非平衡态变量, 建立了双颗粒温度热力学 (two-granular-temperature thermodynamics, TGT 理论), 注重分析了不可逆过程中的热力学力和流, 并与著名的砂土内变量热力学进行了对比.

**关键词:** 颗粒介质, 介观结构, 动力学不均匀性, 非平衡热力学

**PACS:** 61.43.±j, 62.20.±x, 81.05.Rm, 05.70.±a

**DOI:** 10.7498/aps.64.076101

## 1 引言

颗粒 (particles, 或 grains) 在自然界普遍存在, 比如雾霾颗粒、泥沙颗粒和碎屑流中的块石等, 其大小从微米到米跨越了6个数量级. 大小在毫米以上的粗大颗粒和块石, 流体不足以带动颗粒, 颗粒堆积形成一类新型物质形态, 它具有长程无序、短程有序结构, 处于能量亚稳态, 呈现独特力学性质, 国际学术界称此类体系为颗粒介质 (granular materials, granular matter). 颗粒介质的力学行为与密度和加载方式等密切相关, 有时类似固体, 有时类似流体, 人们形象地称之为固态颗粒介质 (granular solids) 和流态颗粒介质 (granular fluids). 在运动过程中, 其力学状态在时间和空间上往往自然转变, 称为固态—流态转变, 这是颗粒介质力学研究领域最为深刻的科学问题.

颗粒介质具有长程无序结构, 还具有短程有序结构, 比如稀疏颗粒流中的团簇, 密集颗粒流中的微剪切带、漩涡、力链和剪切带等. 它们与普通

固体和流体的结构不同, 这是颗粒介质变形、能量耗散和固态—流态转变的结构起源. 1905年, 爱因斯坦认为颗粒无序运动与微观粒子热运动有相似性<sup>[1]</sup>; 直至1978年, Ogawa首次提出了颗粒温度 (granular temperature) 概念表征颗粒运动的无序程度,  $T_g \sim \langle v'v' \rangle$ , 其中  $v'$  是颗粒脉动速度,  $\langle \cdot \rangle$  表示系综平均<sup>[2]</sup>. 20多年以来, 以颗粒温度为核心概念, 人们建立了适用于稀疏颗粒流的颗粒动理学理论 (granular kinetics), 得到了稀疏颗粒流的黏滞系数和能量耗散等的解析表达<sup>[3–6]</sup>, 当前的难点之一是如何分析颗粒间非弹性碰撞和初始的空间分布不均匀引起的团簇演化等. 对于密集颗粒体系, 1989年Edwards提出颗粒体系体积系综以来, 人们陆续提出了描述应力、力链网络 (force network ensemble) 等的颗粒介质统计力学, 见文献<sup>[7–10]</sup>. 1984年, 王光谦在国内率先开展了颗粒动理学研究, 之后研发了颗粒光弹设备和测试技术, 系统开展了二维颗粒光弹实验 (photoelastic tests), 实现了基于应力条纹快速计算数千颗粒上所有接触点的法向力和切向力, 区分了强力链区和弱力链区. 联

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11034010, 11272048, 51239006)、欧盟 Marie Curie 国际合作项目 (批准号: IRSES-294976) 和清华大学自主科研计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [qcsun@tsinghua.edu.cn](mailto:qcsun@tsinghua.edu.cn)

合光弹-超声技术 (acoustic probing), Sun 等<sup>[11-13]</sup>发现了力链构型对应的应力脉动, 与颗粒运动速率脉动规律不同, 这两类脉动从不同层面反映了内部结构的特征, 孙其诚和王光谦把颗粒介质模型化为强力链区和弱力链区, 提出了构型温度  $T^c$  (configurational temperature) 的新概念, 并把传统的颗粒温度称为动力学温度  $T^k$  (kinetic temperature), 初步分析了  $T^k$  和  $T^c$  的演化规律. 目前, 课题组正在采用 Speckle visibility spectroscopy (SVS) 技术测量颗粒温度.

颗粒体系处于能量亚稳态, 结构发生弛豫, 系统发生变形, 能量发生耗散, 宏观力学性质也随之改变, 这暗示着颗粒介质的变形、力学性质、能量耗散和热力学特性之间有内在的关联性. 在工程实践中, 人们主要关心颗粒体系的应力-应变(率)的关系, 往往先验性地选择表达式, 并反演得到参数数值, 这种做法解决了许多工程问题, 但是具有很大随意性, 对内在机理的探索帮助不大. 热力学是认识物质世界的主要范式之一, 注重能量耗散过程分析, 用有限数量的态变量 (state variable), 通过逻辑演绎简洁地描述系统的性质<sup>[14-17]</sup>. 作为一种宏观体系, 颗粒介质必然遵循热力学定律, 人们试图建立的颗粒介质力学统一理论也应该建立在热力学框架之中; 当然, 这也是对热力学理论的挑战, 难点在于如何选择态变量以及如何建立其演化方程. 与颗粒体系相关的有, Houlsby 等建立的准静态加载条件下的砂土内变量热力学, 称为超塑模型 (hyper-plasticity model)<sup>[18,19]</sup>. 这是在 Rice 的金属塑性内变量热力学基础上发展而来, 特别对应变分解做了深化.

采用先进测试和分析手段探测和表征颗粒介质结构特征和内部物理过程, 为量化热力学态变量及其演化方程提供依据, 开展结构分析、热力学的联合研究, 才能深入认识颗粒介质的力学特性, 把颗粒介质的力学研究从唯象的、先验的研究中解脱出来. 本文分别对颗粒介质的结构、能量耗散进行了分析, 由此发展了非平衡热力学理论, 初步实现了颗粒介质从固态、慢速流态到快速流态的统一描述.

## 2 颗粒体系的弹性

一般而言, 固体弹性取决于两个主要因素: 原子价键强度和可能的原子结构弛豫. 对于低温晶

体, 后者可忽略不计, 弹性模量主要取决于原子价键强度. 相比之下, 颗粒介质的弹性模量不仅取决于颗粒间接触力, 还取决于体系介尺度结构的分布. 当保持每个颗粒空间位置不变和外界应力不变时, 颗粒体系具有大量可能的强力链网络构型, 我们认为每种稳定的强力链网络对应构型势能面 (configurational potential energy landscape, PEL) 上的一个能量低谷, 亦即能谷 (energy basin), 虽然力链构型满足边界应力不变等条件, 但是不同力链构型对应的弹性势能是不同的. 力链构型和热力学参数之间的关系可用构型势能面清晰地表示, 如图 1 所示. 在 PEL 上,  $z$  轴代表体系弹性势能,  $x/y$  轴代表是构型坐标 (可以是弹性应变、弹性应力以及描述力链构型的参数等), 代表多维构型空间的一个点. 颗粒体系动力学过程对应的是体系在势能面上行走. 由于结构不均匀性, 势能面凹凸不平, 能谷是能量的局域极小点, 局部突起分开了相邻两个能谷, 其高度是动力学弛豫过程的能量势垒. 当构型发生演化, 体系状态在势能面上移动, 该过程遵从特定的系综统计平均; 在实空间中, 代表颗粒重排, 对应不可恢复应变. 外部激励程度的强弱决定了体系在势能面上行走的行为, 对于强激励, 比如高于所有能量势垒, 则系统发生流动, 且遍历整个势能面. 对于较低激励, 体系被限制在较高能量势垒中, 只能在相对较低的能谷间移动, 则体系表现出力学性质的不均匀性 (dynamical heterogeneity).

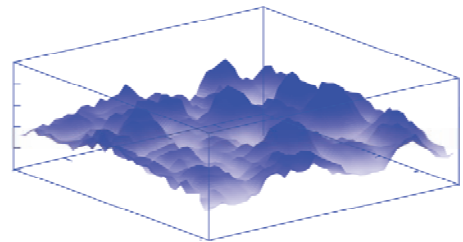


图 1 颗粒介质的弹性势能面示意图 (凹凸的势能面是内禀性质, 源自结构无序. 颜色越深表示弹性势能越大. 水平面两个坐标是构型坐标)

颗粒体系中的力链构型多种多样, 显然要逐一予以研究既不现实, 也不必要. 相应地, 我们假定存在为数不多的有限个变量, 它们在统计意义上足以描述颗粒体系的力链构型分布与其演变, 而这代表的充分性也仅限于对我们所关心的宏观力学性质的描述. 力链构型分布可用一组内变量表示  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ , 每一个内变量代表一个力链网络构型, 这些变量或整体地表示为  $\Psi$ .  $\Psi$  影响了颗粒介

质的模量、黏度等材料参数.  $\Psi$  可以是和历史无关的状态变量, 也可和历史 (亦即积分路径) 有关. 我们定义当结构  $\Psi$  不变时, 应力变化引起的那部分应变增量为可恢复 (或者弹性) 应变增量. 人们常采用弹性能密度模型  $e_e = f(\varepsilon_{ij}^e, \Psi)$  描述弹性应变  $\varepsilon_{ij}^e$  及其共轭的弹性应力  $\sigma_{ij}^e$  为

$$\sigma_{ij}^e(\Psi) = \frac{\partial e_e(\Psi)}{\partial \varepsilon_{ij}^e}. \quad (1)$$

其增量形式为  $d\sigma_{ij}^e = \frac{\partial^2 e_e}{\partial \varepsilon_{ij}^e \partial \varepsilon_{kl}^e} d\varepsilon_{kl}^e$ . 其中,  $\frac{\partial^2 e_e}{\partial \varepsilon_{ij}^e \partial \varepsilon_{kl}^e}$  是切线弹性刚度, 随结构  $\Psi$  的变化而变化. 需要说明的是, 弹性能  $e_e$  在每个状态是结构  $\Psi$  的函数, 亦即  $e_e$  反映了颗粒体系现时结构  $\Psi$  的可恢复响应. 弹性势能能谷的统计平均数值是描述颗粒体系弹性的一个重要物理量, 结合 Jamming 相图 [20], 超塑性模型的余能函数 [18] 以及 GSH 理论提出的弹性模型 [21], 我们提出了新的弹性能函数

$$e_e = \langle e_e(\Psi) \rangle = B_0(\phi - \phi_c)^a \Delta^b (\Delta^2 + u_s^2/\xi), \quad (2)$$

其中  $\Delta$ ,  $u_s$  是弹性应变  $\varepsilon_{ij}^e$  第一和第二不变量,  $\Delta = -\varepsilon_{kk}^e$ ,  $u_s^2 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}^{e,0} \varepsilon_{ij}^{e,0}$ .  $\varepsilon_{ij}^{e,0}$  是  $\varepsilon_{ij}^e$  的零迹张量.  $B_0$  是弹性模量系数,  $(\phi - \phi_c)$  反映了颗粒体积分数的影响,  $B_0$  是模量系数, 它是颗粒的材料参数 (如, 摩擦系数, 模量和级配等) 的函数. 设计一些简单加载 (如各向同性压缩和单轴压缩) 以及根据颗粒体系的声速测量结果, 可以反演得到上式中的弹性参数.

体系的特征弛豫时间尺度与观测时间尺度的比值, 决定了该体系更像固体, 或者更像流体. 如果观测时间比体系特征弛豫时间长的多, 则体系表现为流体, 反之则表现为固体 [22]. 比如, 即使对于许多固体 (如弹模极大  $\sim 70$  GPa 的花岗岩) 进行长时间观测时, 容易发现其像流体一样流动. 颗粒介质由于结构无序, 其模量相对较低, 比如超声测试结果发现, 其弹性模量一般比单颗粒的模量低  $10^3$  数量级. 石英的弹模是 90 GPa, 而石英颗粒组成的颗粒介质, 在 180 kPa 围压下的模量约为 70 MPa. 其特征弛豫时间与我们平时实验室观测时间大致在一个量级上, 那么在工程和实验中的常规加载条件下, 使得颗粒体系有时表现为固体, 有时表现为流体; 高能量的力链网络会向低能量的力链网络构型演化, 颗粒介质的弹性很自然地发生弛豫. 基于上述认识和对颗粒介质结构试验结果的观测, 需要对颗粒介质的结构进行深入认识, 结构的分布

及其对外界作用的响应决定了颗粒体系的力学和热力学性质, 并由此确定颗粒介质状态变量, 用于构建颗粒介质热力学理论.

### 3 应变分解

颗粒介质可从准静态变形到失稳流动, 经历了剪切带的发生与发展, 临界状态和流变等过程, 不可避免地涉及到颗粒介质大变形问题. 就内部而言, 颗粒位置发生程度不同的重排, 这一点与力链构型弛豫不同 (如上节所讨论的), 我们对这些过程引起的应变做了分析. 在本文中, 我们采用力学与工程中常用的笛卡尔坐标系和笛卡尔标记法 (Cartesian index notation), 并采用爱因斯坦求和约定 (Einstein summation convention). 有限应变理论主要研究任意大应变和旋转情况下的变形问题. 基于现时构型, Eulerian-Almansi 有限应变张量为  $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i - \partial_i u_k \partial_j u_k)$ . 其中, 颗粒介质位移矢量场为  $u_i$ , 速度  $v_i \equiv d_t u_i$ . 物质导数表示为  $d_t = \partial_t + v_i \partial_i$ , 应变的物质导数方程为

$$d_t \varepsilon_{ij} = v_{ij} - \varepsilon_{ik} \partial_j v_k - \varepsilon_{jk} \partial_i v_k, \quad (3)$$

其中, 速度梯度  $\partial_j v_i$  的对称部分  $v_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_j v_i + \partial_i v_j)$  即所谓的变形率张量, 与柯西应力是共轭的. 在小变形情况下,  $d_t \varepsilon_{ij} = v_{ij}$ ; 而在大变形情况下,  $v_{ij}$  是应变率  $d_t \varepsilon_{ij}$  的一部分. 速度梯度  $\partial_j v_i$  反对称部分  $\omega_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_j v_i - \partial_i v_j)$  代表纯转动.

对于固体, 如果变形非常小, 外力卸载后固体可以恢复到初始的未变形状态, 这种可恢复变形是弹性的. 对于大变形的固体, 当外力减小至零后, 体系仍有部分残余的、不可恢复的变形, 这在固体力学中称为塑性变形. 需要注意的是, 该分类仅适用于固体, 颗粒介质的变形机制要复杂的多. 第 1 节分析表明, 颗粒位置重排是不可恢复变形的主要原因, 另外力链构型弛豫对应力链形态的变化, 也会带来不可恢复变形, 对其细致研究需要更复杂的数学表达, 本文对应变增量做了尝试.

#### 3.1 应变增量的分解

由于结构无序, 颗粒介质处于能量的亚稳态. 在颗粒位置保持不变的情况下, 接触点的接触力发生变化, 力链构型随之改变, 导致颗粒体系切线刚度有降低的趋势. 比如, 单轴压缩颗粒介质在应变不变时发生的应力松弛 (stress relaxation). 对于颗

粒体系的弛豫现象, 人们从应变局部化和不连续性去理解, 并试图把它引入唯像本构关系中. 此类现象, 在颗粒介质和高聚物等软物质 (soft matter) 中普遍存在, 与固体中由于缺陷扩散引起的塑性变形不同. 显然, 此类应变增量取决于弹性应变 (或应力) 与内部结构  $\Psi$ , 是两者耦合确定的, 因此称为耦合应变增量, 用上标 c 标识,

$$\delta\varepsilon_{ij}^c = C_{ijkl}\sigma_{kl}^e, \quad (4)$$

$\sigma_{kl}^e$  满足齐次边界条件.  $C_{ijkl}$  表示力链构型弛豫系数, 与当前结构  $\Psi$ 、弹性应力、甚至体系速度等相关, 亦即  $C_{ijkl}(\Psi, \sigma_{kl}^e, v_i)$ , 单位为 1/Pa.

当弹性应力保持不变, 由于压缩或剪切作用, 颗粒之间相对运动对应的应变增量, 我们称为流变应变增量 (streaming strain), 记为  $\delta\varepsilon_{ij}^s$ , 该过程主要是引起了颗粒位置的重排. 由于颗粒重排和力链网络构型演化的内在耦合, 我们把流变应变增量与耦合应变增量合为不可逆应变增量,

$$\delta\varepsilon_{ij}^{ir} = \delta\varepsilon_{ij}^c + \delta\varepsilon_{ij}^s. \quad (5)$$

图 2 标示了分解后的各应变增量, 颗粒体系的应变增量写为

$$\delta\varepsilon_{ij} = \delta\varepsilon_{ij}^{ir} + \delta\varepsilon_{ij}^e = \delta\varepsilon_{ij}^c + \delta\varepsilon_{ij}^s + \delta\varepsilon_{ij}^e. \quad (6)$$

主要说明的是,  $\delta\varepsilon_{ij}^e$  可正可负,  $\delta\varepsilon_{ij}^c$  大于等于零. 在一些特殊的加载方式下, 有利于理解不同形式的应变增量, 1) 在稀疏流中没有力链, 因此  $\delta\varepsilon_{ij} = \delta\varepsilon_{ij}^{ir}$ ; 2) 单轴压缩条件下的应力松弛, 由于  $\delta\varepsilon_{ij} = 0$ , 因此  $\delta\varepsilon_{ij}^c = -\delta\varepsilon_{ij}^e$ .

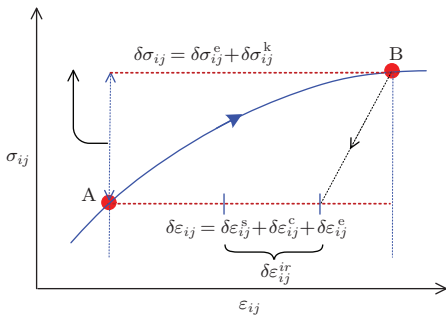


图 2 应变增量分解示意图

在本文中, 我们不妨简单地假设流变应变增量  $\delta\varepsilon_{ij}^s$  与体系的应变增量  $\delta\varepsilon_{kl}$  关联, 即

$$\delta\varepsilon_{ij}^s = \alpha_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl}. \quad (7)$$

把 (4) 式代入式 (6) 式, 得到弹性应变增量

$$\delta\varepsilon_{ij}^e = \delta\varepsilon_{ij} - \alpha_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl} - C_{ijkl}\sigma_{kl}^e. \quad (8)$$

对于小变形情况,  $d_t\varepsilon_{ij} = v_{ij}$ , 假设  $\alpha_{ijkl}$ ,  $\sigma_{kl}^e$  在局域是常数, 得到弹性应变率的物质导数方程

$$d_t\varepsilon_{ij}^e = v_{ij} - \alpha_{ijkl}v_{kl} - c_{ijkl}\sigma_{kl}^e, \quad (9)$$

其中,  $c_{ijkl} = \dot{C}_{ijkl}$ , 其单位是 1/(Pa·s).

## 4 状态变量

基于对系统内在机理的洞察, 热力学力图采用尽可能少的变量和尽可能简单的表达式来描述复杂现象. 经过人们的不懈努力, 热力学在大量物质体系, 涉及很宽的空间尺度和时间尺度的过程中得以成功应用. 因此, 对于蕴含复杂介观尺度的热力学系统, 非平衡热力学应该成为普适理论的基本框架. 非平衡热力学的研究包含 3 个核心内容, 1) 确定状态变量, 特别是如何引入非平衡态变量, 建立热力学基本方程, 2) 确定熵产生率, 3) 建立状态变量演化方程, 其中密度、速度、能量和熵等状态变量采用连续介质力学中的守恒方程予以描述, 非平衡态变量演化则需要构建相应方程. 颗粒介质作为一种宏观体系应该遵循热力学定律, 一个完善颗粒介质力学理论应该建立在非平衡热力学框架之中. 当前, 对于颗粒介质, 主要是以构建唯像本构关系为主, 而非平衡热力学研究颗粒介质的研究还亟待进一步发展.

### 4.1 状态变量选取的思考

确定独立热力学变量是热力学研究的第一步, 其数目取决于内在物理过程的多少, 在实践中人们选择那些实验上易于得到的物理量作为独立变量, 其他变量可以从独立态变量推导得到. 物理系统的对称性 (symmetry) 是确定态变量的基本依据. 最自然的是守恒量, Noether 定理表达了对称性和守恒定律相对应. 例如, 时间对称意味着能量守恒, 总能量  $E$  可作为态变量; 平移对称对应着动量守恒  $P_i$ , 动量选为态变量来描述发生流动的系统; 由于质量守恒, 密度  $\rho$  选为态变量; 对于晶态固体, 晶格微小位移导致平移对称破缺, 产生弹性应变  $\varepsilon_{ij}^e$  和弹性应力, Landau 和 Lifshitz 把弹性应变选为态变量, 建立了弹性固体的热力学基本方程 [23]; 由热力学第二定律, 熵  $S$  也被选为态变量.

当体系进入非平衡态时, 需要引进非平衡态变量, 标准之一就是能够刻画系统偏离平衡态的程度, 其选择往往缺乏严谨性和不可预知性, 比

如引入非零通量作为态变量, 来刻画物质、能量或熵在系统与周围环境间的传递, 显然这些非零通量在平衡态消失. 线性非平衡热力学 (linear irreversible thermodynamics, LIT), 由 Onsager, Prigogine 等发展起来, 简洁和优美地统一描述了过去 3 个世纪以来的主要宏观输运现象. LIT 采用的局域平衡假设根植于微观过程可逆性. 基于 Chapman-Enskog 的工作, Prigogine 证明当分布函数限制到一阶时, 局域平衡假设是合理的. LIT 采用平衡态变量, 其架构与平衡态热力学的相同. 当态变量变化率非常高时, 体系没有足够的时间达到热力学平衡, 比如在微流体的传热过程中经常遇到的, 其温度梯度可达  $10^6$  K/m. 扩展的非平衡热力学 (extended irreversible thermodynamics, EIT)<sup>[16]</sup> 力图描述这些高频扰动下的过程, 很自然的引入了快变量 (fast variable), 亦即把耗散通量作为新的态变量 (例如, 热通量等), 此时熵产生率既依赖于守恒量, 又依赖于这些通量. 在另外一些情况下, 人们倾向于忽略快变量而采用注重内部结构演化的内变量, 内变量热力学 (internal variable thermodynamics, IVT) 则把内结构的特征作为态变量<sup>[24]</sup>, 适用于粘土的剑桥模型则把塑性体应变作为内结构变量. 近期, Grmela 和 Ottinger 采用慢变量 (slow variables), 基于 Hamiltonian 结构, 发展了 GENERIC 热力学框架 (General Equation for the Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling)<sup>[17]</sup>.

介观尺度 (比如本文提出的力链结构) 是颗粒介质区别于普通物质的结构特征, 是产生复杂力学性质的结构起源. 介观结构的量化及其动力学描述还很难, 理论上的基本困难之一就是表征介观结构的物理量没有那么强的尺度分离 (scale separation), 包括时间尺度和空间尺度. 纵观现有的 EIT, IVT, Generic 等热力学理论, 引入非平衡态变量目的之一是刻画体系偏离平衡态的程度, 所选用的态变量不可避免的存在尺度不分离或者弱分离的情况, 比如 EIT 处理的是时间尺度分离不好的微流动过程, IVT 处理的是空间尺度分离不好的金属塑性和砂土. 介观结构一端链接微观, 另一端链接宏观, 现有的统计学主要是基于混沌假设, 最多到尺度间弱相互作用的平均场理论, 而对于介观结构间的强关联的体系, 原则上不适用. 在这种情况下, 采用快变量或者结构变量作为非平衡态变量, 就缺乏理论的支持. 多年以来, 非平衡热力学本身也力图对

这些问题予以澄清, 比如非平衡态温度和熵等基本物理量的内涵, 甚至非平衡态的热力学第二定律的具体表达等.

## 4.2 颗粒温度

颗粒介质中, 微观过程要比介观的力链结构演化过程快, 可以合理地假设微观过程处于局域平衡; 我们还假设介观过程稍微偏离平衡态, 亦即近平衡. 因此, 我们认为颗粒介质是准平衡的 (quasi-equilibrium), 并不是真的处于热力学平衡态, 我们采用结构变量作为非平衡态变量. 人们发现颗粒运动以及结构演化具有一定程度的无序性, 亦即当体系边界以恒定速度运动或处于恒定力作用时, 颗粒运动速度和应力均存在稳定的涨落. 这两种涨落从不同层面反映了颗粒介质结构特征, 其演化特性必然反映相应动力学过程的某些特征. 基于第 2 节揭示的结构特征, 选择合理的态变量. 孙其诚和王光谦把颗粒介质模型化为强力链区和弱力链区的设想, 进一步把力链结构无序引起的应力涨落用构型温度  $T^c$  来表征, 并建立了其弛豫方程; 而颗粒的无序运动, 沿用传统的颗粒动力学温度  $T^k$  表征, 两个颗粒温度都属于慢变量. 温度是热力学和统计物理的核心概念, 其定义多种多样, 定义之一就是刻画微观粒子运动引起的能量涨落. 在非平衡热力学中, 多温度现象并不陌生. 在许多情况下, 热力学系统由多种不同种类粒子或若干个亚系统构成, 如果它们之间的能量转换足够缓慢, 人们就可以针对这些不同类型的粒子或亚系统建立各自的温度, 一个典型例子是热等离子体的电子温度和离子温度. 另外, 在非平衡热力学系统中, 能量均分定理一般不再成立, 体系的不同自由度应该对应各自的温度, 使得人们定义的某一温度在描述其他自由度时不再适用, 或者在体系的某一阶段适用, 而在其他阶段消失.

这些物理事实启发我们结合颗粒体系的内部结构和动力学规律提出多颗粒温度概念. Ogawa 提出的颗粒温度<sup>[2]</sup>, 仅适用于描述稀疏颗粒介质, 自然界中常见的是密集颗粒介质, 颗粒间持续接触而形成力链网络, 构型演化引起的应力脉动规律与颗粒速度脉动规律显然不同, 仅描述脉动速度脉动的传统颗粒温度不能对应应力脉动进行刻画. 1989 年 Edwards 提出了颗粒体系体积系综理论<sup>[7]</sup>, 建立了研究密集颗粒介质构型、应力等性质的颗粒介质统计力学基本思想方法, 之后应力系综<sup>[8]</sup>、力链网络

系综<sup>[9]</sup>等多种理论, 探讨构型与应力等之间的关系. 人们也逐渐开展一些实验测量颗粒体系构型温度. 在本文中, 我们重新推导了与脉动速度相关的动理学温度, 提出了刻画脉动应力脉动的构型温度概念, 也尝试给出了构型温度的数学表达式, 当然还有很多工作需要细化和深化.

1) 动理学温度  $T^k$ :  $T^k \equiv \frac{1}{D} \langle \tilde{v}'_i \tilde{v}'_i \rangle$ ,  $D$  是颗粒体系的空间维度, 注意, 这里采用求和约定.  $\tilde{v}'_i$  是颗粒的瞬时脉动速度. 颗粒体系脉动动能表示为  $\rho T^k$ .

2) 构型温度  $T^c$  与弹性能涨落对应, 相应的弹性应变和应力是二阶张量. 那么, 其  $T^c$  定义并不唯一. 为简单起见, 定义  $T^c \equiv \langle \tilde{I}' \tilde{I}' \rangle$  其中,  $\tilde{I}' = \frac{1}{D} \tilde{\sigma}_{ii}^e$  是颗粒上的弹性应力第一不变量,  $\tilde{I}'$  其脉动部分. 颗粒体系弹性能的脉动可以写为  $T^c$  的函数.

我们把颗粒熵  $s^k$  和  $s^c$  作为颗粒介质的非平衡态独立变量, 那么状态变量集

$$\mathcal{V} : e, s, \rho, p_i, \varepsilon_{ij}^e, s^k, s^c. \quad (10)$$

在应力张量的标识中, 拉为正. 热力学基本方程写为

$$de = T ds + \mu d\rho + v_i dp_i + \sigma_{ij}^e d\varepsilon_{ij}^e + T^k ds^k + T^c ds^c, \quad (11)$$

式中右边各项表示了导致颗粒介质能量变化的各种原因: 第一项表示传热等耗散过程, 第二项表示密度变化引起的化学势变化. 第三项表示动量变化引起的能量变化, 第四项表示了颗粒弹性变形引起的能量变化, 第五、六项表示了颗粒体系涨落的动能和势能. 颗粒介质热力学压强  $P$  的关系式为

$$P = Ts - e + p_i v_i + \mu\rho + \sigma_{ij}^e \varepsilon_{ij}^e + T^k s^k + T^c s^c. \quad (12)$$

由于能量是广延量的一次齐次函数, 进而得到上式.

结合第2节谈到的颗粒弹性, 我们尝试理解颗粒温度  $T^k$ ,  $T^c$  的含义. 在稀疏流中, 没有力链, 仅涉及  $T^k$ ; 如果颗粒运动速度相等, 则  $T^k = 0$ . 在静止的密集颗粒体系中, 仅涉及  $T^c$ ; 假设力链在颗粒体系中规则排布、应力分布均衡, 则此时  $T^c = 0$ . 显然, 力链构型在空间分布越无序、运动越无序, 则  $T^k$ ,  $T^c$  都较大.

### 4.3 状态变量演化方程

对于颗粒介质, 采用现时构形为参考坐标来描述体系的应力和应变. 热力学量 (如熵  $s$ 、能量  $w$  等)

都是对于变形后的单位体积来说的, 用相应的小写字母来表示. 在确定了流体动力学量和结构变量等态变量之后, 需要建立其演化方程. 流体动力学量 (hydrodynamics entities) 的演化方程就是守恒方程. 基于非相对论连续介质力学的公理, 采用高斯定理和莱布尼兹法则可以推导得到守恒方程

$$\int_{R(t)} \partial_i (T_{jk\dots}) dV = \int_{S(x,t)} n_i T_{jk\dots} dS \quad (13)$$

以及

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{R(t)} T_{jk\dots}(x_i, t) dV \\ &= \int_{R(t)} \frac{\partial T_{jk\dots}(x_i, t)}{\partial t} dV \\ &+ \int_{S(x_i, t)} n_l w_l T_{jk\dots} dS, \end{aligned} \quad (14)$$

其中  $R(t)$  是任意移动域,  $dV$  是其体积微元,  $S(x, t)$  是移动域  $V$  的边界面.  $n_i$  是边界面  $S$  的外法线矢量,  $T_{jk\dots}$  是任意张量阶数的函数.  $w_l$  是边界面上任一点的速度矢量,  $n_l$  是垂直于运动表面的单位矢量. 单位体积的质量和线动量守恒方程写为

$$\partial_t \rho + \partial_j (\rho v_j) = 0, \quad (15)$$

$$\partial_t (\rho v_i) + \partial_j (\rho v_i v_j - \sigma_{ij}) = \rho g_i, \quad (16)$$

其中  $\sigma_{ij}$  是作用在边界面上的应力. 热量通量表示为  $q_i^e$ , 能量密度  $e$  守恒方程 (亦即热力学第一定律) 表示为

$$\partial_t e + \partial_j (e v_j - \sigma_{ji} v_i + q_j^e) = \rho g_j v_j. \quad (17)$$

对于不同类型的物质, 能量密度  $e$  不同, 对于流体  $e = -P + Ts + \mu\rho + v_i p_i$ , 对于弹性固体  $e = Ts + \mu\rho + \sigma_{ij}^e \varepsilon_{ij}^e$ . 对于我们研究的颗粒介质, 由 (12) 式得到能量密度

$$e = Ts + P + p_i v_i + \mu\rho + \sigma_{ij}^e \varepsilon_{ij}^e + T^k s^k + T^c s^c. \quad (18)$$

定义熵密度通量  $J_i$  沿着外法线方向, 熵增加方程为

$$\partial_t s + \partial_j (s v_j - J_j) = R, \quad (19)$$

其中  $J_k$  是熵密度通量,  $R$  是熵产生率. 类似地, 得到颗粒熵增加方程

$$\partial_t s^k + \partial_j (s^k v_j - J_j^k) = R^k \quad (20)$$

以及

$$\partial_t s^c + \partial_j (s^c v_{kj} - J_j^c) = R^c, \quad (21)$$

其中,  $J_j^k$  是动理学熵流,  $J_j^c$  是构型熵流.  $R^c$  是动理学颗粒熵产生率,  $R^k$  是构型颗粒熵产生率, 两者可负或等于零;  $T^k R^k$  称为脉动动能耗散率,  $T^c R^c$  称为脉动势能耗散率.

### 5 能量耗散

对能量转化(特别能量耗散)的深入理解, 对于准确描述颗粒介质动力学过程极为重要. GSH 理论曾提出了两类能量转化过程<sup>[21]</sup>. 在 TGT 理论中, 我们做了深化和发展, 涉及到 3 个空间尺度结构. 颗粒介质的能量转换过程如图 3 所示. 首先, 外界做功部分的转化为颗粒介质宏观测量到的机械能, 部分的转化为介观尺度的涨落能量,  $T^k$  和  $T^c$ . (a) 在运动过程中, 部分宏观机械能直接耗散为热能, (b) 还有部分宏观机械能转化为介观尺度的机械能, 使得  $T^k$  和  $T^c$  增加; (c) 在构型演化中, 部分脉动弹性能转化为脉动动能, 使得  $T^k$  增加和  $T^c$  降低; (d) 部分脉动动能进一步在微观尺度上消耗, 使得  $T^k$  降低 ( $T^k$  的衰减速率大致正比于  $t^{-2}$ ,  $t$  是时间),  $T$  增加.

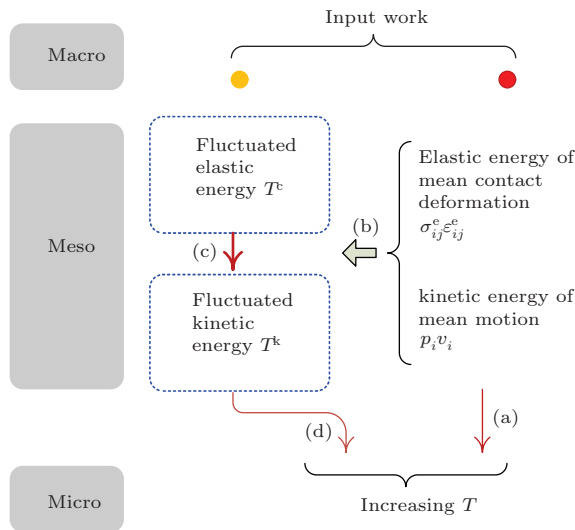


图 3 由于介观结构的存在, 颗粒介质中的能量转换过程较为复杂.

#### 5.1 热力学力与热力学流

当状态变量(如温度和速度)空间分布不均匀时, 体系内部产生相应的流, 体系处于非平衡态. 比如, 温度和速度的梯度则称为热力学力, 相应的热量流和动量密度流(亦即黏性应力)称为热力学流. 在此过程中, 部分能量向热能转化, 体系熵增加, 这是热力学第二定律. 材料的内部过程决定了

热力学力与流的类型, 非平衡热力学的重要研究内容就是确定热力学力  $X_\alpha$  与流  $J_\alpha$ . 在复杂过程中, 两者往往是非线性的, 但是热力学力与流的乘积得到熵产生率(亦即单位体积体系、单位时间内的熵产生)是当前非平衡热力学普遍采用的  $R = J_\alpha X_\alpha$ . 能量耗散率是指单位体积体系、单位时间内的能量耗散, 等于熵产生率乘以热力学温度  $TR$ .

对于复杂系统, 热力学力与流的概念可以应用到弛豫过程. 对于颗粒体系, 由于结构无序, 颗粒介质处于能量的亚稳态, 颗粒接触点的接触力和变形逐渐衰减, 整体体现为弛豫, 在上节中把此应变增量为耦合应变增量, 是不可恢复应变增量的一部分, 因此该弛豫过程也消耗能量, 因此把弹性应力  $\sigma_{kl}^e$  作为热力学力之一. 与此同时, 忽略热力学温度的影响, 则颗粒介质的热力学力初步确定为

$$\partial_i(1/T^k)^{-1}, v_{ij}, \sigma_{ij}^e. \quad (22)$$

表 1 颗粒介质的热力学力与流

|      |   |  |                          |
|------|---|--|--------------------------|
| 热力学力 | $\partial_i \left( \frac{1}{T^k} \right)$ | $v_{ij}$                                     | $\sigma_{ij}^e$          |
| 热力学流 | $q_i^k$                                   | $\left( \frac{1}{T^k} \right) \sigma_{ij}^k$ | $d_t \varepsilon_{ij}^e$ |
| 输运系数 | $\kappa$                                  | $\eta_{ijkl}$                                | $c_{ijkl}$               |

#### 5.2 热力学熵产生率

对照图 3 所示的能量转换示意图, 沿用热力学力与流的线性关系, 熵产生率表示为

$$R = T^{-1}(\Lambda^k T^k + \Lambda^c T^c), \quad (23)$$

以及颗粒体系的能量耗散率为

$$TR = \Lambda^k T^k + \Lambda^c T^c, \quad (24)$$

$\Lambda^k T^k$ ,  $\Lambda^c T^c$  分别表示颗粒脉动动能和脉动弹性能的耗散.

稀疏流的能量耗散率来自颗粒无序运动之间的非弹性碰撞, 依据颗粒动理学可得到能耗率

$$\Lambda^k T^k = \frac{24}{\sqrt{\pi}}(1-e)G \frac{\rho}{d_p} (T^k)^{3/2}, \quad (25)$$

其中,  $G = \phi g_0(\phi)$ ,  $g_0(\phi) = \frac{2-\phi}{2(1-\phi)^3}$ ,  $\phi$  是颗粒体积分. 对于密集体系, Jenkins 采用

$$\Lambda^k T^k = \frac{24}{\sqrt{\pi}}(1-e)G \frac{\rho}{L} (T^k)^{3/2},$$

这里的  $L \sim 10d_p$  大致表示颗粒关联长度<sup>[25]</sup>.

在弹性应力  $\sigma_{kl}^e$  作用下, 弹性发生弛豫, 尽管此时体系结构可能不发生变化. 弛豫引起的



耦合应变率在局部产生黏性应力,  $\eta^c d_t \varepsilon_{ij}^c$ , 其中  $d_t \varepsilon_{ij}^c = c_{ijkl} \sigma_{kl}^e$ ,  $c_{ijkl} = d_t C_{ijkl}$  是颗粒构型弛豫系数, 进而消耗能量,  $\Lambda^c T^c$ .

### 5.3 颗粒熵产生率

类似地, 宏观运动会向介观尺度无序运动转化, 引起颗粒熵  $s^k$  增加. 参照表 1,  $T^k$  涉及两个热力学力,  $\partial_i \left( \frac{1}{T^k} \right)$  和  $v_{ij}$ , 熵产生率表示为

$$R^k = q_i^k \partial_i \left( \frac{1}{T^k} \right) + (T^k)^{-1} \sigma_{ij}^k v_{ij} - \Lambda^k, \quad (26)$$

以及脉动动能耗散率为

$$T^k R^k = T^k q_i^k \partial_i \left( \frac{1}{T^k} \right) + \sigma_{ij}^k v_{ij} - \Lambda^k T^k, \quad (27)$$

其中,  $q_i^k$  是由于动理学温度差别引起的热流, 类比 Fourier 定律, 则有  $q_i^k = -\kappa^k (T^k)^2 \partial_i (T^k)^{-1}$ ,  $\kappa^k$  是颗粒温度  $T^k$  的热传导系数. 黏滞应力  $\sigma_{ij}^k = \eta_{ijkl} v_{kl}$ ,  $\eta_{ijkl}$  是黏滞系数, 是  $T^k, T^c$  的函数. 传统动理学中, 快速颗粒流的黏滞系数仅是  $T^k$  的函数,  $\eta_{ijkl} \propto T^k$ ,  $T^k \propto v_{ij}$ , 因此黏滞应力  $\sigma_{ij}^k \propto v_{ij}^2$ .

宏观运动会向介观尺度结构转化, 引起颗粒熵  $s^c$  增加. 参照表 1,  $T^c$  涉及热力学力  $\sigma_{ij}^e$ , 熵产生率表示为

$$R^c = (T^c)^{-1} (d_t \varepsilon_{ij}^c) \sigma_{ij}^e - \Lambda^c, \quad (28)$$

以及脉动弹性能耗散率为

$$T^c R^c = (d_t \varepsilon_{ij}^c) \sigma_{ij}^e - \Lambda^c T^c. \quad (29)$$

弹性能脉动按照弹性波速传递, 瞬间达到均衡, 可以忽略  $\partial_i (T^c)^{-1}$  的影响.

### 5.4 涨落的能量密度

单位体积颗粒体系的脉动动能密度为  $e'_k = \rho T^k$ , 采用第 4.3 节中的高斯定理和莱布尼兹法则可以推导得到  $\rho T^k$  的演化方程

$$\partial_t (\rho T^k) + \partial_j (\rho T^k v_j - q_j^k) = T^k R^k. \quad (30)$$

把 (27) 式代入上式, 得到

$$\begin{aligned} & \partial_t (\rho T^k) + \partial_j (\rho T^k v_j - q_j^k) \\ &= T^k q_i^k \partial_i \left( \frac{1}{T^k} \right) + \sigma_{ij}^k v_{ij} - \Lambda^k T^k, \end{aligned} \quad (31)$$

上式各项对脉动动能的贡献有明确的物理含义, 可大致类比 RANS 方程, 理解其含义.

颗粒体系的脉动势能密度  $e'_c = f(T^c)$  与构型温度相关, 类比 (31) 式, 得到  $e'_c$  演化方程

$$\partial_t e'_c + \partial_j (e'_c v_j) = T^c R^c. \quad (32)$$

把 (29) 式代入上式, 得到

$$\partial_t e'_c + \partial_j (e'_c v_j) = (d_t \varepsilon_{ij}^c) \sigma_{ij}^e - \Lambda^c T^c. \quad (33)$$

如何合理定义构型温度, 将是下一步努力开展的工作.

总之, 输运系数  $\eta_{ijkl}, \kappa^k, c_{ijkl}$  是状态变量  $\{s, \rho, p_i, \varepsilon_{ij}^e, s^k, s^c\}$  的函数, 目前只能经验性地确定, 我们的思路是结合动理学的工作, 进行简单试验 (如单轴压缩体系的应力松弛和蠕变等) 和声学试验予以测定, 同时配合大规模颗粒离散元计算 (discrete element method). 颗粒介质超弹性能函数可采用声学方法确定.

## 6 完整方程组

如图 4 所示, 联合热力学力与流表达式, 流体动力学守恒方程和非平衡状态变量演化方程, 我们就可以建立宏观物理量与流体动力学量和非平衡状态变量之间的联系, 特别是表征颗粒介质力学状态的应力、应变 (率) 和其他一些宏观量 (如通量) 等. 如果初始条件和边界条件给定, 就可以理论计算颗粒介质的宏观力学性质. 因此, 非线性的 TGT 理论框架在分析颗粒介质连贯力学性质的能力得以体现. 描述颗粒介质力学性质的完整方程组为

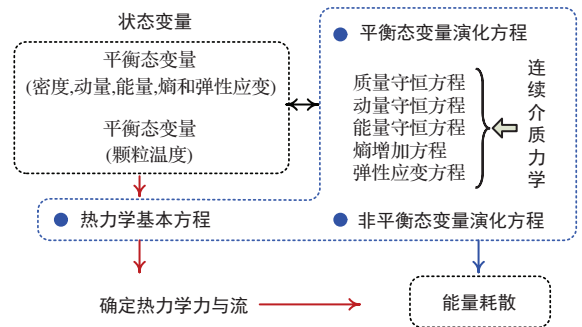


图 4 颗粒介质的双颗粒温度热力学框架

$$\sigma_{ij} = -P \delta_{ij} + \sigma_{ij}^e + \eta_{ijkl} v_{kl},$$

$$\sigma_{ij}^e = \frac{\partial e_e}{\partial \varepsilon_{ij}^e},$$

$$d_t \varepsilon_{ij}^e = v_{ij} - \alpha_{ijkl} v_{kl} - c_{ijkl} \sigma_{kl}^e,$$

$$\partial_t \rho + \partial_j \rho v_j = 0,$$

$$\begin{aligned}
 & \partial_t(\rho v_i) + \partial_j(\rho v_i v_j - \sigma_{ij}) = \rho g_j, \\
 & \partial_t(\rho T^k) + \partial_j(\rho T^k v_j - q_j^k) \\
 & = T^k q_i^k \partial_i \left( \frac{1}{T^k} \right) + \sigma_{ij}^k v_{ij} - \Lambda^k T^k, \\
 & \partial_t(\rho T^c) + \partial_j(\rho T^c v_j) \\
 & = (d_t \varepsilon_{ij}^c) \sigma_{ij}^e - \Lambda^c T^c. \tag{34}
 \end{aligned}$$

对于准静态、小应变的颗粒介质, 仅涉及  $T^c$ , 与速度梯度相关的项可以舍去, 难题是  $T^c$  和输运系数的确定, 其中输运系数可借鉴适用于非晶材料的扩展的 Arrhenius 方程<sup>[26]</sup>. 稀疏颗粒流仅涉及  $T^k$ , 设  $\eta_{ijkl}$  为各向同性张量, 有

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij} & = -P\delta_{ij} + \eta_{ijkl} v_{kl} \\
 & = -P\delta_{ij} + \left( \eta_V - \frac{2}{3}\eta_s^k \right) \delta_{ij} v_{kk} \\
 & \quad + 2\eta_s^k v_{ij}^0, \tag{35}
 \end{aligned}$$

其中,  $v_{ij}^0$  是零迹速度梯度张量,  $v_{ij}^0 = v_{ij} - \left( \frac{1}{3} v_{kk} \delta_{ij} \right)$ .  $\eta_s, \eta_V$  分别为剪切黏滞系数和体积黏滞系数, 是动力学温度  $T^k$  的函数.  $T^k$  演化见 (31) 式. 压强  $P = 4FG\rho T^k$ , 黏滞系数

$$\begin{aligned}
 \eta_V & = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \rho d_p G (T^k)^{1/2}, \\
 \eta_s & = \frac{8J}{5\sqrt{\pi}} \rho d_p G (T^k)^{1/2},
 \end{aligned}$$

能量耗散率

$$T^k \Lambda^k = \frac{24}{\sqrt{\pi}} (1 - e) \rho \frac{G}{d_p} (T^k)^{3/2}.$$

式中,

$$\begin{aligned}
 G & = \phi g_0(\phi), \quad g_0(\phi) = \frac{2 - \phi}{2(1 - \phi)^3}, \quad F = 1 + \frac{1}{4G}, \\
 J & = 1 + \frac{\pi}{12} \left( 1 + \frac{5}{8G} \right)^2, \quad M = 1 + \frac{9\pi}{32} \left( 1 + \frac{5}{12G} \right)^2.
 \end{aligned}$$

表2 TGT 与基于内变量热力学的超塑性模型 (hyper-plastic model) 的对比

|      | TGT   | Hyper-plasticity                    |
|------|---|-------------------------------------|
| 理论框架 | 非平衡热力学  | 弹塑性力学和热力学                           |
| 态变量  | $\{e, \rho, s, p_i, \varepsilon_{ij}^e, T^k, T^c\}$ | $\{e, s, \varepsilon_{ij}, \xi_i\}$ |
| 内部结构 | 基于 SFN/WFN 结构单元假设                                   | 注重颗粒重排                              |
| 应力   | 可弛豫的弹性应力与粘滞应力共同作用                                   | 弹、塑性应力                              |
| 关键问题 | 确定超弹性模型和热力学力与流                                      | 构建势函数                               |
| 适用范围 | 固态和流态均使用  | 固态, 率不相关                            |

把应力带入动量方程 (16), 得到颗粒流的标准雷诺平均 Navier-Stokes 方程 (RANS)

$$\begin{aligned}
 & \rho d_t v_i \\
 & = \partial_k (P \delta_{ij}) - \partial_k \left[ \left( \eta_v^k - \frac{2}{3} \eta_s^k \right) \delta_{ij} v_{kk} + 2\eta_s^k v_{ij}^0 \right] \\
 & \quad + \rho g_i. \tag{36}
 \end{aligned}$$

## 7 TGT 与砂土内变量热力学的比较

沿用内变量热力学思路, 牛津大学 Houlsby 建立了适用于准静态加载条件下 (亦即率无关) 的砂土内变量热力学<sup>[18,19]</sup>, 有必要将其与 TGT 理论做对比. 砂土内变量热力学的核心问题是确定增量形式的弹塑性应力-应变关系, 这沿用传统弹塑性力学的基础, 需要确定 4 个基本问题, 弹性模量, 屈服条件, 流动法则 (亦即屈服后塑性应变增量的方向), 硬化规律. 准静态加载的砂土, 内变量热力学选取的态变量为  $\mathcal{V}: e, s, \varepsilon_{ij}, \xi_i$ , 其中  $\varepsilon_{ij}$  是应变, 其共轭量为应力  $\sigma_{ij}$ . 热力学基本方程为

$$de = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + T ds - \sum f_i d\xi_i. \tag{37}$$

颗粒不可逆重排用内变量  $\xi_i$  表示, 其共轭量是  $f_i$ , 则  $\sum f_i d\xi_i$  表示能量耗散, 可表示成  $\varpi$ . 由于颗粒体系的热力学温度对体系的力学性质几乎没有影响, 可以设体系温度不变化, 由 Legendre 变换得到 Gibbs 自由能 ( $\psi = e - Ts$ )

$$d\psi^{IVT} = de - T ds - s dT = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \varpi. \tag{38}$$

依据文献 [19], 颗粒体系应变可以写为弹性应变和塑性应变之和,  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p$ , 那么

1) 对于弹性应变  $\varepsilon_{ij}^e$ , 提出弹性能的余能势函数  $\hat{\phi}(\sigma_{ij})$ , 它以应力为自变量, 则弹性应变为  $\varepsilon_{ij}^e = \partial \hat{\phi} / \partial \sigma_{ij}$ ;

2) 对于塑性应变  $\varepsilon_{ij}^p$ , 提出塑性势函数  $\hat{\Omega}$ , 则有  $\varepsilon_{ij}^p = \partial \hat{\Omega}(\chi, \sigma_{ij}, \mathcal{H}) / \partial \chi$ ;

3) 对于能量耗散  $\varpi$ , 提出耗散势函数,  $\hat{\omega}$ , 有  $\varpi = \varepsilon_{ij}^p (\partial \hat{\omega} / \partial \varepsilon_{ij}^p)$ .

符号的物理含义参见文献 [19]. 对于准静态加载和等温条件, TGT 热力学基本方程 (11) 式简化为

$$de = T ds + \sigma_{ij}^e d\varepsilon_{ij}^e + T^c ds^c, \quad (39)$$

由于是准静态加载, 因此  $\sigma_{ij} \simeq \sigma_{ij}^e$ , 并且  $T^c ds^c = (T^c R^c) \delta t = \left( (d_t \varepsilon_{ij}^c) \sigma_{ij}^e - \Lambda^c T^c \right) \delta t$  (见 (29) 式). Gibbs 自由能写为

$$\begin{aligned} d\psi^{\text{TGT}} &= \sigma_{ij}^e d\varepsilon_{ij}^e + T^c ds^c \\ &= \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + \delta \varepsilon_{ij}^c \sigma_{ij}^e - \Lambda^c T^c \delta t \\ &= \sigma_{ij} (d\varepsilon_{ij}^e + \delta \varepsilon_{ij}^c) - \Lambda^c T^c \delta t. \end{aligned} \quad (40)$$

应变分解式 (6) 中, 流变应力增量近似为零,  $\delta \varepsilon_{ij}^s \sim 0$ , 则有  $\delta \varepsilon_{ij} \simeq \delta \varepsilon_{ij}^c + \delta \varepsilon_{ij}^e$ , 代入上式, 得到

$$d\psi^{\text{TGT}} = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \Lambda^c T^c \delta t. \quad (41)$$

对比 (38), (41) 式可以看出, 基于内变量热力学的超塑性模型和我们的 TGT 理论在描述准静态加载颗粒介质的能量方面是一致的. 但是, 两者还是有较大差异, 1) 态变量不同: TGT 采用刻画弹性能涨落的构型温度  $T^c$ , 超塑性模型用刻画颗粒重排的  $\xi_i$ ; 2) 超塑性模型重点发展耗散函数, 颗粒体系过程越复杂, 则势函数将越复杂; 而 TGT 沿用传统 LIT 的路线, 注重逐一确定不可逆过程中的热力学力和流, 进而来确定能量耗散. TGT 可以推导出超塑性模型的 Gibbs 能量方程和能量耗散率  $\varpi = \Lambda^c T^c \delta t$ .

## 8 结 论

文献已经报道了颗粒介质的多种多样结构形态和动力学不均匀性, 它们是从不同测量反映了颗粒结构的某种信息, 对其全貌的认识还远远不够. 由于内部过程的耦合, 使得颗粒介质的变形分析比较困难, 本文尝试性地提出的三种应变增量, 既适用于准静态体系, 又适用于稀疏流动. 强能量耗散是颗粒体系的基本特征, 非平衡热力学是研究其不可逆过程的有力理论工具. 提出的构型温度新概念是对传统颗粒温度概念上的拓展, 采用以两个颗粒温度为非平衡态变量, 建立了双颗粒温度热力学理

论. 对比表明, 该理论简化到砂土内变量热力学的 Gibbs 自由能, 适用于更宽广的颗粒介质力学状态.

另外, 非平衡热力学作为一门学科还不成熟, 尽管 LIT, EIT, IVT 和 GENERIC 等热力学流派发展了多年, 一些共性问题它们是共同面对的, 其解决途径需要相应的非平衡统计力学, 由它来考量现有非平衡热力学的缺陷和解决方法. 对于颗粒体系而言, 统计力学还远远没有建立, 当前颗粒介质热力学还缺乏说服力, 可行的做法是借鉴成熟的实践经验, 确定其中的参数形式, 使得颗粒介质热力学逐渐完善.

## 参考文献

- [1] Einstein A 1956 *Investigations on the theory of the Brownian movement* (New York: Dover)
- [2] Ogawa S, Umemura A, Oshima N 1980 *ZAMP* **31** 483
- [3] Haff P K 1983 *J Fluid Mech.* **134** 401
- [4] Lun C K K, Savage S B, Jeffrey D J, Chepurnyi N 1984 *J. Fluid Mech.* **140** 223
- [5] Jenkins J T, Savage S B 1983 *Granular Mat.* **130** 187
- [6] Babic M, Shen H H 1989 *J. Eng. Mech.* **115** 1262
- [7] Edwards S F, Oakeshott R B S 1989 *Physica A* **157** 1080
- [8] Henkes S, O'Hern C S, Chakraborty B 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 038002
- [9] Tighe B P, Vlugt T J H 2011 *J. Stat. Mech.* P04002
- [10] Tighe B P, Snoeijer J H, Vlugt T J H, van Hecke M 2010 *Soft Mat.* **6** 2908
- [11] Bi Z, Sun Q, Jin F 2011 *Granular Mat.* **13** 503
- [12] Sun Q, Song S, Liu J, Fei M, Jin F 2013 *Theoret. Appl. Mech. Lett.* **3** 021008
- [13] Sun Q, Jin F, Zhou G D 2013 *Granular Mat.* **15** 119
- [14] Onsager L 1931 *Phys. Rev* **37** 405
- [15] Prigogine I 1961 *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes* (New York: Interscience)
- [16] Jou D, Casas-Vazquez J, Lebon G 2010 *Extended Irreversible Thermodynamics* (4th Ed.) (Berlin: Springer)
- [17] Ottinger H C 2005 *Beyond Equilibrium Thermodynamics* (New York: Wiley-Interscience)
- [18] Collins I F, Houlsby G T 1997 *Proceed. Royal Soc. A* **453** 1975
- [19] Houlsby G T, Puzrin A M 2007 *Principles of Hyperplasticity: An Approach to Plasticity Theory Based on Thermodynamic Principles* (Berlin: Springer)
- [20] Xu N 2011 *Front. Phys.* **6** 109
- [21] Jiang Y M, Liu M 2009 *Granular Mat.* **11** 139
- [22] Liu Z Y, Yang Y 2012 *Intermetallics* **26** 86
- [23] Landau L D, Lifshitz E M 1986 *Theory of Elasticity* (3rd Ed.) (Butterworth-Heinemann)
- [24] Rice J R 1971 *J. Math Phys. Solids* **19** 433
- [25] Jenkins J T 2006 *Phys. Fluids* **18** 103307
- [26] Wang W H 2012 *Prog. Mater. Sci.* **57** 487

# Granular structure and the nonequilibrium thermodynamics\*

Sun Qi-Cheng<sup>†</sup>

(State Key Laboratory of Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

( Received 12 June 2014; revised manuscript received 6 November 2014 )

## Abstract

Granular materials possess disorder structures which are the origin of dynamical heterogeneity. On the basis of non-equilibrium thermodynamics, the structure characteristics, complex deformations, and energy dissipations are analysed. Based on the photoelastic tests, the granular elasticity is discussed. The strain increments are classified into three categories. By means of the non-equilibrium thermodynamics, two granular temperatures,  $T^k, T^c$ , are introduced as the state variables, which denote the fluctuations of the kinetic energy and the elastic energy, respectively. Further, a two-granular-temperature thermodynamics (i.e. TGT theory) are developed for granular materials. The thermodynamic forces and fluxes are particularly analyzed. TGT theory is also compared with the previous internal variable thermodynamics for sands (IVT theory) developed a few decades ago. It is found that from TGT the Gibbs free energy in the IVT theory can be deduced, and the energy dissipation function can be apparently expressed from TGT theory.

**Keywords:** granular materials, mesoscale structure, dynamical heterogeneity, non-equilibrium thermodynamics

**PACS:** 61.43.±j, 62.20.±x, 81.05.Rm, 05.70.±a

**DOI:** [10.7498/aps.64.076101](https://doi.org/10.7498/aps.64.076101)

---

\* project supported by the National Natural Science Foundation of China(11034010, 11272048, 51239006), European Commission Marie Curie Actions(IRSES-294976) and Tsinghua University Initiative Scientific Research Program

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [qcsun@tsinghua.edu.cn](mailto:qcsun@tsinghua.edu.cn)