

准静态颗粒介质的弹性势能弛豫分析

金鑫鑫 金峰 刘宁 孙其诚

Analysis of elastic energy relaxation process for granular materials at quasi-static state

Jin Xin-Xin Jin Feng Liu Ning Sun Qi-Cheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 096102 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.096102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.096102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I9>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

钝感高能炸药三氨基三硝基苯高温高压下热力学性质的分子动力学模拟研究

A molecular dynamics simulation of thermodynamic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene under high pressure and high temperature

物理学报.2016, 65(6): 066201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.066201>

颗粒介质弹性的弛豫

Relaxation of granular elasticity

物理学报.2015, 64(23): 236101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.236101>

La³⁺ 存在形式对白云鄂博稀选尾矿微晶玻璃性能的影响

Effect of existence form of La³⁺ on the properties of the Bayan Obo Mine tailing glass ceramics

物理学报.2015, 64(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.196201>

铁钛共掺强韧化蓝宝石晶体的研究

A method to strengthen and toughen Sapphire by codoping of Fe/Ti ions

物理学报.2013, 62(6): 066201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.066201>

<100> LiF 的低压冲击响应和 1550 nm 波长下的窗口速度修正

Elastic-plastic response of shocked <100> LiF and its window correction at 1550 nm wavelength

物理学报.2012, 61(15): 156202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.156202>

准静态颗粒介质的弹性势能弛豫分析*

金鑫鑫¹⁾ 金峰¹⁾ 刘宁²⁾ 孙其诚^{1)†}

1)(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)

2)(中华人民共和国水利部, 北京 100053)

(2016年1月14日收到; 2016年1月27日收到修改稿)

颗粒体系是典型的多体相互作用体系, 具有多重的能量亚稳态. 对于准静态颗粒体系, 引入构型颗粒温度 T_c 描述弹性势能涨落. 本文认为平衡的体系具有一定的构型颗粒温度 T_a , 其量值反映了其结构特征. 当外界扰动激发的构型颗粒温度超出 T_a 时, 产生不可逆过程. 通过对应力松弛过程的分析, 发现 $(T_c - T_a)$ 激发了弹性弛豫, 且 $(T_c - T_a)$ 越大则松弛过程中应力变化越大, 最终构型颗粒温度 $T_c \rightarrow T_a$ 时, 宏观应力松弛结束, 体系达到新的能量亚稳态.

关键词: 颗粒介质, 弹性, 弛豫, 非平衡态热力学

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

DOI: 10.7498/aps.65.096102

1 引言

颗粒体系是极为复杂的体系, 需要更多的变量来描述其宏观性质; 当平衡态被打破时, 产生多种不可逆过程, 包括输运过程和弛豫过程, 由于都是发生在相同的内部结构上, 因此这些不可逆过程具有内在的联系^[1]. 比如, 在颗粒的光弹实验中发现, 力链瞬间断裂并重新生成, 应力波动较大, 且局部颗粒的平动速度和旋转角度发生较大变化^[2]. 这就使得建立描述颗粒体系性质的模型或理论变得非常困难, 相关的工作也非常少. 基于经典的连续介质弹性, 弹塑性理论所建立的模型大多限制在宏观描述的范畴内, 且对于颗粒体系内部的演化过程很难准确地描述. 离散元的发展给深入了解和开展颗粒介质内部结构演化的研究提供了帮助, 通过对不同状态的颗粒介质进行内部状态变量的统计, 可以充分认识到体系的各向异性、剪胀性等性质, 和一些特征的局部结构形式, 如剪切带等^[3]. 同时将传统的弹塑性力学和离散元结合, 通过离散元的计算将一些能够表征结构演化的状态变量引

入到宏观模型的建立中, 将宏观和细观结合起来也逐渐成为研究的重点^[4]. 而基于热力学理论建立的本构关系, 如超塑性模型^[5]、临界状态理论模型等^[6], 在能量守恒方程基础上推导耗散关系也取得了一些进展. 然而模型的建立还是在传统的弹塑性理论框架下, 对于内部结构的反映还有局限. 而从介观尺度建立的颗粒流体动力学 (granular solid hydrodynamics, GSH) 方法以非平衡态热力学为基础, 将反映能量涨落的颗粒温度引入到模型中, 模型能够反映颗粒介质的非线性和多种输运过程, 已经应用到静态和准静态颗粒体系的分析计算^[7-9]. Sun 等^[10] 将颗粒温度细分为动能的涨落和弹性能的涨落两部分, 提出了动理学颗粒温度和构型颗粒温度的概念, 认为在密集颗粒体系中, 弹性能的涨落可以反映体系力链的演化, 初步将其应用到准静态的结构分析中. 这些工作还需更多和更深入的工作予以验证^[11,12], 其中之一就是要细致开展颗粒体系结构的探测和表征, 才有可能建立结构与宏观性质的联系. 比如, 颗粒之间存在相互挤压形成了强力链结构, 它决定了颗粒体系的弹性; 多个力链

* 国家自然科学基金 (批准号: 51239006, 11572178, 51408333) 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

包围的区域称为软区, 其中的颗粒相对疏松, 易于滑动和转动, 是颗粒体系能量耗散(主要是黏性耗散)的区域. 在外界作用下, 强力链和软区可能相互转化, 强力链和软区的空间分布也发生演化, 宏观上体现出不同的弹性和黏性性质.

与取决于原子价键强度的固体弹性相比, 颗粒介质弹性不仅取决于颗粒间的接触力, 还取决于颗粒的排布结构. 从能量角度, 颗粒体系具有多重亚稳态, 一种力链结构对应一个能谷, 亦即一个亚稳态; 当外部激励超过亚稳态之间的能量势垒时, 亚稳态之间发生转变, 亦即从一个力链形态到另外一个力链形态演化. 孙其诚初步提出了“构型颗粒温度 T_c ”的概念, 来表征能量的涨落, 对于 T_c 严格定义需要开展统计力学的研究. 本文基于构型颗粒温度分析了在准静态颗粒体系中应力松弛条件下的结构演化过程.

2 准静态颗粒体系的弹性势能亚稳态

从能量的角度来讲^[13,14], 体系演化过程会经过多个能量极小值点, 每个局部能量极值点对应一个处在亚稳态的结构. 在准静态加载条件下, 体系的动能可以忽略, 亦即体系的能量仅为弹性势能. 在体系演化过程中, 颗粒受到激发而产生位置重排, 形成新的颗粒接触关系和力链结构; 同时, 不稳定的力链结构也不断地向稳定的结构形式演化. 图1详细地说明了在准静态颗粒体系中的能量演化过程. 颗粒重排和结构调整是准静态颗粒体系中的主要演化过程, 其中颗粒重排过程中颗粒的相互摩擦、错动等耗散了大部分的能量, 表现为势能的大幅度改变. 而结构演化伴随着颗粒重排的进行, 在每一个颗粒重排的局部产生小的能量的调整, 达到更小的势能值, 而图中a处代表颗粒位置的突然改变导致结构能量的减小, 即为滞滑现象. 图中的阴影部分代表在宏观的颗粒重排结束后, 仅有结构调整时体系的能量变化过程, 即随着力链结构的调整, 体系由能量局部极小值点B向全局极小值点C演化, 而这个演化过程可以用来说明应力松弛现象. 在演化过程中, 体系从一个状态 s_1 到另一个状态 s_2 需要跨越能垒, b点处即代表不同的能态之间的转化要克服的能垒, 能垒高度由体系的摩擦性质、结构特征等决定.

对于密集颗粒体系而言, 在一定的应力状态

下, 由于颗粒之间的摩擦性质以及在几何尺度上的约束作用, 弹性弛豫不会使弹性能完全丧失, 弹性能涨落也可以稳定存在, 即C点处的构型颗粒温度并不为零, 构型颗粒温度本身并不是打破平衡态的原因. 当体系在外界激励下, 弹性能的涨落大于体系可以维持稳定的最大涨落时, 则不可逆的演化发生, 此时 $(T_c - T_a)$ 即为颗粒体系产生不可逆过程的耗散机理之一, 其中 T_a 即为在一定应力状态下稳定的构型颗粒温度.

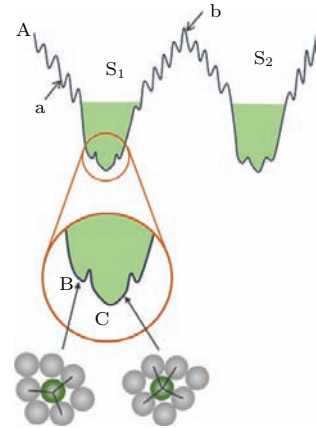


图1 (网刊彩色) 颗粒体系演化过程中的能量图
Fig. 1. (color online) Potential energy landscape during the evolution of granular materials.

3 构型颗粒温度的演化

在平衡态附近的微小涨落被认为处于非平衡态热力学的线性区, 涨落导致体系冲破能垒束缚, 产生不可逆的演化. Sun等^[10]将这种涨落定义为构型颗粒温度, 并类比GSH理论, 把构型颗粒熵(或组态熵)假设为构型颗粒温度的线性函数 $S_c = \rho b T_c$, 其中 ρ 为体系密度, b 为材料常数. 借鉴热力学熵的演化方程^[15], 我们可以类比得到构型颗粒熵的方程为

$$\partial_t s_c + \nabla_k (s_c v_k - f_k^c) = R_c / T_c, \quad (1)$$

其中 $s_c v_k - f_k^c$ 为构型颗粒熵流量. R_c / T_c 为构型熵增加率, 且

$$R_c = \frac{q_k^c}{T_c} \nabla_k T_c + \sigma_{ij}^c v_{ij} - I(T_c - T_a). \quad (2)$$

我们假设 Onsager 关系为

$$\begin{pmatrix} q_k^c / T_c \\ \sigma_{ij}^c \\ I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik}^c & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^c & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k T_c \\ v_{kl} \\ T_c - T_a \end{pmatrix}, \quad (3)$$

其中 σ_{ij}^c 为黏性应力, κ_{ik}^c 为构型颗粒温度的导热率. 在准静态三轴条件下我们可以得到

$$\rho b T_c \partial_t T_c = \eta_s v_s^2 + \frac{1}{3} \eta_v v_v^2 - r(T_c - T_a)^2, \quad (4)$$

其中 η_s, η_v 为体积和剪切黏性系数; v_s, v_v 为体积和剪切应变率. 我们假定在某一应力状态下, 体系能保持稳定的弹性能涨落与平均应力之间满足线性关系, 即 $T_a = k_0 P$, 其中 k_0 为常数, 与结构相关. 应力增加, 颗粒之间的约束更强, 因此稳定的弹性能涨落更大. $r(T_c - T_a)^2$ 反映构型颗粒熵始终向热力学熵转化. 在 $t = 0$ 时, $T_c = T_a$, 在演化过程中 $T_c > T_a$, 在 $t = \infty$ 时, $T_c = T_a$.

在加载过程中, 荷载导致体系的力链不断演化, T_c 不断增加, 在达到临界状态时, $v_v = 0, v_s \neq 0, T_c$ 随着剪应变率的施加而逐渐增大, 体系从无序到有序不断演化, 最终破坏^[1]. 在应力松弛条件下, $v_{ij} = 0$, 此时 $T_c \rho b \partial_t T_c = -r(T_c - T_a)^2$, 构型颗粒熵自身弛豫过程激发了体系结构的演化, 直至 $T_c = T_a$ 为止.

在准静态条件下, 动应力可以忽略, 因此总应力即等于弹性应力, 弹性应力由文献[12]中提出的弹性能公式得出, 即 $\sigma_{ij} = \partial w_e / \partial u_{ij}$. 在文献[16]中将总应变增量分解为弹性应变、塑性应变和耦合应变三部分

$$\delta \varepsilon = \delta \varepsilon^e + \delta \varepsilon^p + \delta \varepsilon^c, \quad (5)$$

其中 $\delta \varepsilon^e$ 为弹性应变增量, 描述颗粒骨架的性质, $\delta \varepsilon^p$ 为不可恢复的颗粒重排贡献的变形部分且 $\delta \varepsilon^p = \alpha \delta \varepsilon$; 耦合应变 $\delta \varepsilon^c$ 在结构的演化过程中发挥重要作用, 与能量的涨落息息相关. 而结构总是由不稳定态向最近的稳定状态演化, 且能量的涨落也在不断趋近稳定态, 而与稳定态的距离就决定了演化的路径和时间. 因此, 我们假设 $\delta \varepsilon^c = \lambda(T_c - T_a) \delta \varepsilon^e$, 进而松弛时间定义为 $\tau = 1/\lambda(T_c - T_a)$, 其中 λ 为材料参数, 是体系密度的函数.

4 应力松弛计算

本工作分别针对不同表面性质、不同压力下的单轴松弛试验进行模拟. 在应力松弛过程中维持体系宏观应变不变, 因此几何方程可简化为

$$\partial_t \Delta = -\lambda_0 (T_c - T_a) \Delta,$$

$$\partial_t u_q = -\lambda (T_c - T_a) u_q, \quad (6)$$

其中 Δ, u_q 为弹性体积应变和剪应变. 由于密度不变, 因此 λ_0, λ 为常数. 对于颗粒温度演化方程, 在实际计算过程中简单假定 $\eta_s = \eta_v = T_c, r = r_0 T_c$. 由此在松弛条件下, 方程(4)可以简化为

$$\rho b \partial_t T_c = -r_0 (T_c - T_a)^2. \quad (7)$$

由(6)和(7)式可以看出, 在结构调整过程中, $T_c - T_a$ 是激发源, 导致弹性应变和应力的衰减, 同时 T_c 的自身弛豫过程导致能量涨落的降低和弹性弛豫演化速率的降低, 直到 $T_c = T_a$ 时, 应力松弛结束. 另外从能量耗散的角度, 松弛过程中体系的能量耗散率为

$$\dot{w} = \lambda (T_c - T_a) u_{ij} \sigma_{ij}^e = w^e / \tau, \quad (8)$$

其中 w^e 为一个与弹性的能量表征, 我们称为广义弹性能. 由此在松弛过程中, 能量耗散率即为广义弹性能在松弛时间下的速率, 说明应力松弛过程中一部分不稳定的弹性能转化为热, 即图1中所示的不同的波谷之间的能量差.

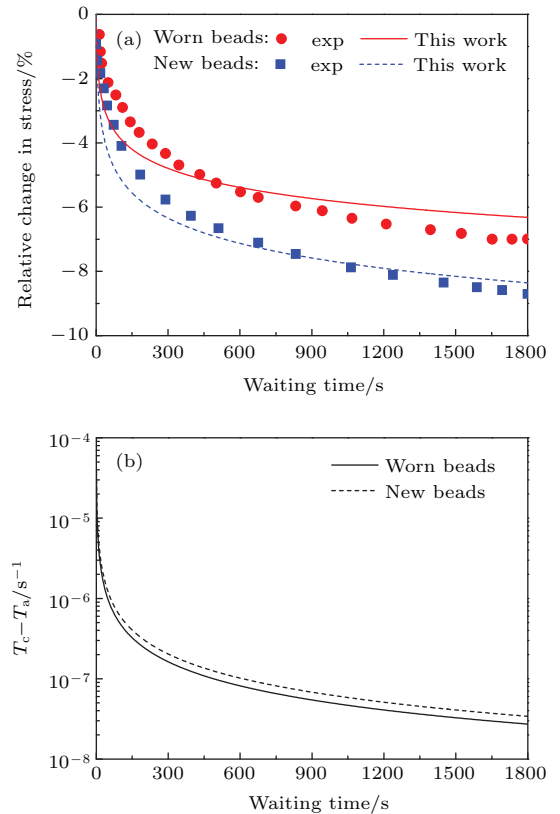


图2 (a) 新旧两种颗粒单轴压缩应力松弛; (b) 松弛试验中构型颗粒温度差的演化过程

Fig. 2. (a) Relative change in stress of relaxation tests for new and worn glass beads; (b) evolution of $T_c - T_a$ during stress relaxation.

图2为单轴条件下新旧两种玻璃珠的松弛试验模拟, 初始轴压为627 kPa, $\phi_c = 0.63$, 加载速率 $v = 8.3 \times 10^{-3}\%/s$ [17]. 弹性模型计算参数由声波试验获得, 其中 $a = 0.5$, $c = 0.4$, $B_0 = 9.3$ GPa, $\xi = 3.3$. 迁移系数 $\lambda/\lambda_0 = 3.8$, $b = 10^{-3}$, 对于新颗粒 $K_0 = 0.04$, $\lambda = 95 \times \left(\frac{1-\rho}{1-\rho_c}\right)^{0.8}$, $r_0 = 1.6$; 对于旧颗粒 $K_0 = 0.05$, $\lambda = 75 \times \left(\frac{1-\rho}{1-\rho_c}\right)^{0.8}$, $r_0 = 2$. 摩擦系数较大的颗粒约束作用更强, 在同样的压力条件下, 初始的 T_a 更大, 在加载过程中颗粒之间作用充分导致松弛开始时的 T_c 值较小, 所以 $T_c - T_a$ 较小, 由(7)式可知, 在演化过程中, 构型颗粒温度的自身弛豫量较小, 且摩擦系数较大的颗粒阻力更大, 因此最终的应力改变较小.

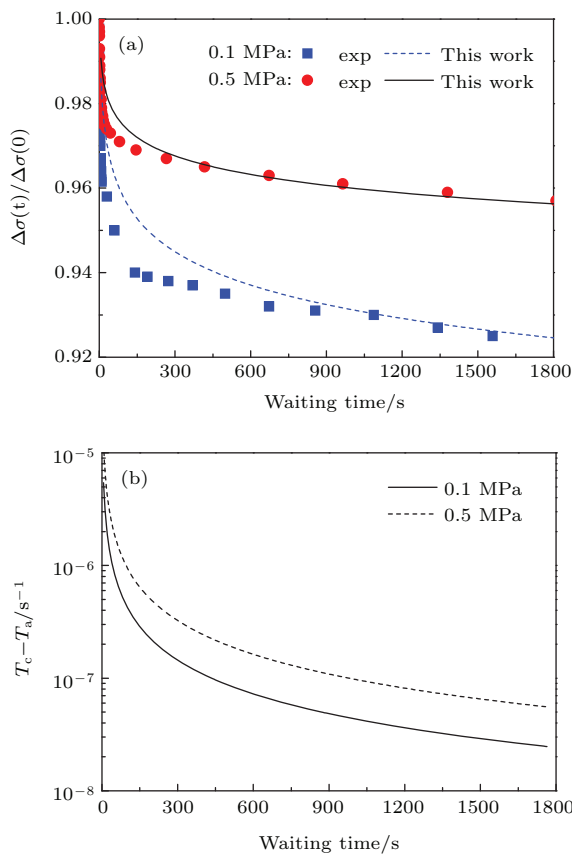


图3 (a) 不同轴压下的应力松弛; (b) 松弛试验中颗粒温度差的演化过程

Fig. 3. (a) Stress of relaxation at different confining pressure; (b) evolution of $T_c - T_a$ during stress relaxation.

对于同种材料不同轴压条件下的松弛模拟试验结果见图3, 轴压分别为0.1 MPa和0.5 MPa, 加载速率为 $v = 6.6 \times 10^{-3}\%/s$ [18], 弹性模型参数为 $a = 0.5$, $c = 0.4$, $B_0 = 9.0$ GPa, $\xi = 3.3$, 迁移系数

$\lambda/\lambda_0 = 3.8$, $b = 2.0 \times 10^{-3}$, $\lambda = 150 \times \left(\frac{1-\rho}{1-\rho_c}\right)^{0.8}$. 对于0.1 MPa轴压的试验, $K_0 = 0.01$, $r_0 = 2.0$; 对于0.5 MPa轴压的试验 $K_0 = 0.03$, $r_0 = 4.5$. 轴压大的颗粒体系内部结构更加紧密, 力链相互约束作用更强, K_0 更大; 在演化过程中所需要克服的阻力也较大, r 较大, 且 $T_c - T_a$ 更小, 那么最终轴压较大的颗粒体系的应力改变较小.

由上述两组计算可以看出, T_a 反映了颗粒体系的结构特征, 在演化过程中, 随着压力和结构的改变, T_a 值也在不断改变, 反映体系对应新的结构稳态, 在应力松弛过程中, 体系在不断趋向能量最低点. $T_c - T_a$ 差值越大, 体系演化越快, 结构调整也越剧烈.

5 结 论

构型颗粒温度反映颗粒体系内部的能量涨落, 超出稳定态的能量涨落部分是驱动准静态颗粒体系演化的热力学力, 差值越大代表离稳态的距离越远, 演化的速度越快, 且内部结构变化剧烈, 导致在应力松弛过程中, 应力改变量越大. 构型颗粒温度差激发的弹性弛豫, 使得体系在一定的能量范围内向全局最小值点演化. 但是也应该看到, T_a 作为体系的稳定能量涨落需要更加深入的研究, 以便明确其与内部结构和外界作用之间的关系.

参考文献

- [1] Coussot P 2014 *Rheophysics* (Switzerland: Springer) **231**
- [2] Wood D M, Leśniewska D 2011 *Granular Matter* **13** 395
- [3] Cundall P A, Strack O D L 1979 *Geotechnique* **29** 47
- [4] Li X S, Dafalias Y F 2015 *J. Mech. Phys. Solids* **78** 141
- [5] Collins I F, Houlsby G T 1997 *Proc. Royal Soc. A* **453** 1975
- [6] Li X S, Dafalias Y F 2012 *J. Eng. Mech. ASCE* **138** 263
- [7] Jiang Y M, Liu M 2014 *Europhys. J. E* **38** 1
- [8] Jiang Y M, Liu M 2008 *Phys. Rev. E* **77** 02130621
- [9] Jiang Y M, Liu M 2009 *Granular Matter* **11** 139
- [10] Sun Q, Song S, Jin F, Jiang Y 2012 *Theor. Appl. Mech. Lett.* **2** 021002
- [11] Sun Q C, Liu C Q, Zhou G D 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 236101 (in Chinese) [孙其诚, 刘传奇, 周公旦 2015 物理学报 **64** 236101]
- [12] Wang W H 2013 *Prog. Phys.* **33** 177 (in Chinese) [汪卫华 2013 物理学进展 **64** 076101]
- [13] Sun Q, Jin F, Wang G, Song S, Zhang G 2015 *Sci. Rep.* **5** 9652

- [14] Charbonneau P, Kurchan J, Parisi G, Urbani P, Zamponi F 2014 *Nat. Commun.* **5** 3725
- [15] Song S, Sun Q, Jin F, Zhang C 2014 *Acta Mech. Solida Sin.* **27** 15
- [16] Sun Q C 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 076101 (in Chinese)
- [孙其诚 2015 物理学报 **64** 076101]
- [17] Miksic A, Alava M J 2013 *Phys. Rev. E* **88** 032207
- [18] Brujic J, Song C, Wang P, Briscoe C, Marty G, Makse H A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 248001

Analysis of elastic energy relaxation process for granular materials at quasi-static state*

Jin Xin-Xin¹⁾ Jin Feng¹⁾ Liu Ning²⁾ Sun Qi-Cheng^{1)†}

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

2) (*Ministry of Water Conservancy, Beijing 100053, China*)

(Received 14 January 2016; revised manuscript received 27 January 2016)

Abstract

The granular system has complicated force chain network and multiple relaxation mechanisms. The different relaxation mechanisms have largely effects on others. The force chains divide the whole system into many soft zones which dominate the main dissipation process. The system evolves into lower potential energy state gradually and forms directional arrangement under an external load. During the evolution, the complex relaxation behaviors such as transport and migrant processes, make it difficult to distinguish different dissipated mechanisms. Each single physical mechanism stripping from multiple mechanisms should be studied in depth. While among all the mechanisms, the structure evolution plays a crucial role and needs to be paid more attention to.

From the view of potential energy, the detailed energy transformation is illustrated. The granular system is often at a metastable state. When the external disturbance is large enough, the system would step over the energy barrier to a new state. The height of energy barrier is related to the packing structure and grain property. In energy landscape, there exist many energy valleys which correspond to different metastable states. The grain rearrangement and structure reorganization are two main evolution processes at a quasi-static state. The former brings about major potential energy change because of friction and forms certain contact relations. While the latter evolves on the basis of the skeleton formed by grain rearrangement and reaches lower energy state. The conversion among different energy valleys can be used to explain stress relaxation process.

In a complex granular system, the choosing of appropriate internal state variables becomes important, which can reflect specific relaxation process and internal characteristics. The energy fluctuation in the system has a huge influence on dissipation process and macroscopic response and is an effective internal variable to have an insight into the structure evolution. Then granular temperature rooted from gas kinetics is introduced to model the macroscopic behaviors. For loose and rapid granular flow, the kinetic granular temperature itself is the root to affect the flow process. While in a dense granular system, the granular temperature at a quasi-static state is referred to as elastic energy fluctuation. The structure can be kept stable when granular temperature exists on account of the mutual confinement among particles. And the granular temperature at a stable state is just a representation of internal structure of granular assembly. When

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51239006, 11572178, 51408333), and Tsinghua University Initiative Scientific Research Program.

† Corresponding author. E-mail: qcsun@tsinghua.edu.cn

the granular temperature stimulated by the external disturbance exceeds the stable value, the irreversible process happens and the difference between the excited state and stationary state is the driving force for evolution.

The stress relaxations under different surface properties and confining pressures are simulated using non-equilibrium theory with new change for granular temperature. It can be found that the granular temperature difference triggers elastic relaxation and force chains reorganization. And the larger the temperature difference, the further away from the steady state the system is and the larger the stress change is. The more smooth the surface and the smaller the confining pressure, the lower resistance is generated, so that the initial granular temperature difference is larger and the stress change is larger during stress relaxation. The granular temperature decreases as time goes by because of its own relaxation. When the difference is equal to zero, the process of stress relaxation finishes and the system evolves into a global minimum of potential energy.

Keywords: granular materials, elasticity, relaxation, non-equilibrium thermodynamics

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

DOI: [10.7498/aps.65.096102](https://doi.org/10.7498/aps.65.096102)