

开口角度对二维颗粒流稀疏流-密集流转变的影响*

黄德财[†] 胡凤兰 邓开明 吴海平

(南京理工大学应用物理系, 南京 210094)

(2009 年 12 月 6 日收到; 2010 年 2 月 2 日收到修改稿)

用计算机模拟的方法研究了开口角度对二维颗粒流稀疏流-密集流转变的影响. 在固定入口流量和固定颗粒数两种条件下, 均发现当开口角度大于零时, 开口角度的增大可以提高颗粒流由稀疏流向密集流转变的最大出口流量. 在稀疏流状态下, 出口流量与开口角度无关; 而在密集流状态下, 出口流量随开口角度的增大而增大. 进一步的计算还发现增加开口角度可以提高颗粒流出开口的流动速度, 且最大出口流量与颗粒的流动速度呈线性关系.

关键词: 颗粒物质, 颗粒流, 分子动力学模拟

PACC: 8220M, 4610, 4760

1. 引 言

颗粒物质的流动在自然界和生产中广泛存在, 如沙石、矿石的流动、粮食的运输以及工业原料的处理过程等等. 颗粒物质的宏观尺寸、离散态、耗散性等特性使得其在流动过程中, 经常表现出复杂的非线性动力学性质, 如稀疏流、密集流、混合与分离等独特的现象^[1-5]. 对于颗粒物质的这些流动性质, 同样被发现存在于其他体系中, 如河道中的船只和公路上的交通流等等, 所以对颗粒物质流动性质的研究有着重要的理论和应用价值^[6-9].

对于颗粒物质流动性质的研究, 一类很好的研究对象就是通道内的颗粒流. 而对于通道内的颗粒流来说, 其流动状态通常被简单地分成三种: 稀疏流(快速流)、密集流(慢速流)和堵塞. 稀疏流的典型特征为颗粒密度较低、流动速度较大; 密集流的典型特征为颗粒密度较高、流动速度较低; 而堵塞就是指流动完全停止的状态. 目前, 针对单一流动状态的颗粒流, 已经取得了一些很好的进展, 相继提出了一些可描述的本构方程^[10-13]. 然而, 在一定条件下, 颗粒流不仅仅可以存在单一的流动状态, 而且相互之间还可以发生转变. 如密集流-堵塞转变、稀疏流-密集流转变^[14-17]. 对于通道内的颗粒

流来说, 主要是靠外界作用的驱动而流动起来, 而决定颗粒流流动状态的主要因素是来自于颗粒-颗粒之间和颗粒-通道壁之间的碰撞和摩擦的相互作用, 而这些作用通常都表现出非线性特征. 正是限于对颗粒流在不同流动状态之间转变的性质的认识, 至今还没有建立起统一的、合适的本构方程.

近年来, 对于通道内颗粒流由稀疏流向密集流状态转变的研究逐渐增多, 发现影响稀疏流-密集流状态转变的参数很多, 如通道的宽度、颗粒的速度和外电场等等^[18-21]. 最近, Hou 等人的实验结果表明^[22], 在固定入口流量的条件下, 通过调节开口尺寸可以实现颗粒流由稀疏流向密集流状态的转变. 在实验中发现, 在通道出口附近会形成三个区域: 中间自由流动区和开口两侧的楔形堆积区. 并且, 随着入口流量的增加, 开口两侧的楔形堆积区逐渐升高. 开口流量的贡献则可看作为来自于中间自由流动区的颗粒流与两侧楔形堆积区表面流动层的颗粒流. Huang 等人的实验和计算机模拟研究发现通道内颗粒流的流动状态与开口附近颗粒的流动速度和密度直接相关^[18, 23], 稀疏流-密集流的转变首先是在开口附近发生, 然后向通道入口方向传播. 进一步的研究还发现, 到达开口的颗粒的流动速度越大, 稀疏流-密集流转变越困难, 最大稀疏流流量越大.

* 国家自然科学基金青年科学基金(批准号:10904070), 国家自然科学基金(批准号:10847146)和南京理工大学青年学者基金(批准号:200705)资助的课题.

[†] E-mail: hdc@mail.njust.edu.cn

以上的研究表明,通道开口附近的颗粒流性质与整个通道内的颗粒流状态有着直接的联系. 本文正是通过计算机模拟来研究开口角度对颗粒流稀疏流—密集流转变的影响. 在固定入口流量的条件下,通过研究在不同开口角度下出口流量随入口流量的变化,以观察开口角度对颗粒流稀疏流—密集流转变的影响. 在固定颗粒数的条件下,观察在不同开口角度下通道的出口流量与通道内颗粒数变化关系. 另外,还计算了颗粒流出开口时的流动速度与开口角度以及最大出口流量之间的关系.

2. 模拟体系和基本方法

2.1. 模拟体系

本文的模拟体系为二维矩形通道内的颗粒流,如图1所示,通道高为 $H = 400.0 \text{ mm}$, 宽为 $W = 60.0 \text{ mm}$. 在距离通道底部高度为 $h_1 = 50.0 \text{ mm}$ 处放置两挡板以形成开口,开口尺寸固定为 $D = 14.0 \text{ mm}$,开口角度记为 θ . 在距离通道顶部高度为 $h_3 = 50.0 \text{ mm}$ 的区域为颗粒产生区域. 高度为 $h_2 = 300.0 \text{ mm}$ 的区域为颗粒流动区域. 颗粒直径为 $d_0 = 2.0 \text{ mm}$. 颗粒在 h_3 区域内随机产生以形成均匀的入口流量,经由 h_2 区域到达开口并流出.

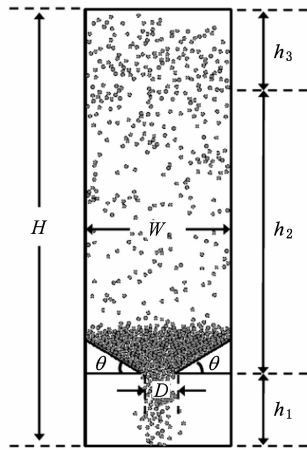


图1 模拟体系示意图

2.2. 基本方法

本文采用的模拟方法为分子动力学方法,在模拟过程中需计算颗粒与颗粒、颗粒与通道壁之间的相互作用. 对于本文模拟的颗粒流来说,涉及颗粒流由稀疏流向密集流状态转变以及密集流状态. 在

这些流动状态中,颗粒与颗粒、颗粒与通道壁之间的相互作用多表现为多体作用,所以我们采用了软球碰撞模型. 对于颗粒之间的法向碰撞,我们采用了 Kuwabara -Kono 模型来描述^[24,25],

$$F_{ij}^n = -k_n \xi_{ij}^{3/2} - \eta_n \xi_{ij}^{1/2} V_{ij}^n \quad (1)$$

对于描述颗粒之间的切向力,选取的是粘性摩擦和动摩擦力之间的较小值,

$$F_{ij}^\tau = \min(\eta_\tau V_{ij}^\tau, \mu F_{ij}^n), \quad (2)$$

在(1)和(2)式中, $\xi_{ij} = \max(0, d_0 - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ 为颗粒 i 和颗粒 j 的重叠部分, d_0 表示颗粒的直径, $V_{ij} = V_{ij}^n \mathbf{e}_n + V_{ij}^\tau \mathbf{e}_\tau$ 是颗粒 i 和颗粒 j 在接触点的相对速度,上标(下标)中的 n 和 τ 分别表示相应矢量在接触点的法向和切向方向的分量. 弹性系数为 $k_n = 5.0 \times 10^9 \text{ N/m}^2$,法向和切向方向的衰减系数分别为 $\eta_n = 300.0 \text{ Ns/m}^{1/2}$ 和 $\eta_\tau = 0.3 \text{ Ns/m}$, $\mu = 0.5$ 为动摩擦系数. 颗粒和通道壁之间的碰撞采取了与颗粒之间碰撞相同的参数. 为产生较大的入口流量,颗粒进入通道的初始速度设定为 $v_0 = 1.0 \text{ m/s}$. 颗粒在通道内的流动过程中,均处于均匀的重力场中,重力加速度为 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$.

在本文中,我们采用了两种方法对颗粒流进行了模拟:固定入口流量法和固定颗粒数法. 对于固定入口流量法来说,其模拟过程和实验过程相同^[22,23],即在入口流量固定的情况下,颗粒从通道上方进入,形成颗粒流. 在该流动条件下,当入口流量较小时,颗粒流的出口流量与入口流量相等,颗粒流处于稳定的流动状态,因而可以实现对颗粒流进行长时间的模拟计算以得到相关的物理量. 但是,当入口流量较大时,颗粒流就会发生稀疏流—密集流的转变. 一旦该转变发生,由于出口流量小于入口流量,颗粒会很快堆积满整个通道,这使得计算机模拟无法进行下去. 为解决这一问题,我们在模拟中采取了第二种方法,即固定颗粒数法. 固定颗粒数方法的初始阶段和固定入口流量方法相同,区别在于当通道内颗粒数达到某一值时,颗粒流的流动改变为当颗粒从通道流出的同时在入口处流入相同数量的颗粒,这样整个通道内的颗粒数维持恒定.

对于出口流量的计算,则是通过记录从出口处流出的颗粒个数 $N(t)$,利用公式 $Q = \Delta N(t) / \Delta t$ 计算以得到出口流量. 对于固定入口流量条件下的颗粒流,若在模拟时间内颗粒流一直处于稀疏流状态,则以出口流量的平均值作为最终出口流量值.

若在模拟时间内,颗粒流发生了稀疏流-密集流转变,则当颗粒在通道内堆积达到 5000 个时,然后采用固定颗粒数方法继续模拟,以在该流动条件下的出口流量的平均值作为最终出口流量值。

3. 模拟结果

图 2 给出的是入口流量固定为 $Q_0 = 1500 \text{ s}^{-1}$, 开口角度分别为 $\theta = 0^\circ$ 和 30° 时,出口流量和通道内颗粒数随时间的变化关系. 在初始阶段,通道内没有颗粒,出口流量从零开始增大,通道内的颗粒数

逐渐增多. 颗粒流在经历短暂的不稳定流动状态后,在不同开口角度下呈现出不同的流动特征. 当开口角度为 $\theta = 0^\circ$,稀疏流-密集流转变发生,出口流量小于入口流量,通道内颗粒数持续增多,颗粒流最终进入稳定密集流状态. 当开口角度为 $\theta = 30^\circ$ 时,在模拟时间内,未发生稀疏流-密集流转变,颗粒流一直处于稀疏流状态,出口流量等于入口流量,通道内的颗粒数稳定在 $N = 398$ 个附近. 由此可见,在固定入口流量的条件下,通过改变开口角度可以控制通道内的颗粒流的流动状态和出口流量。

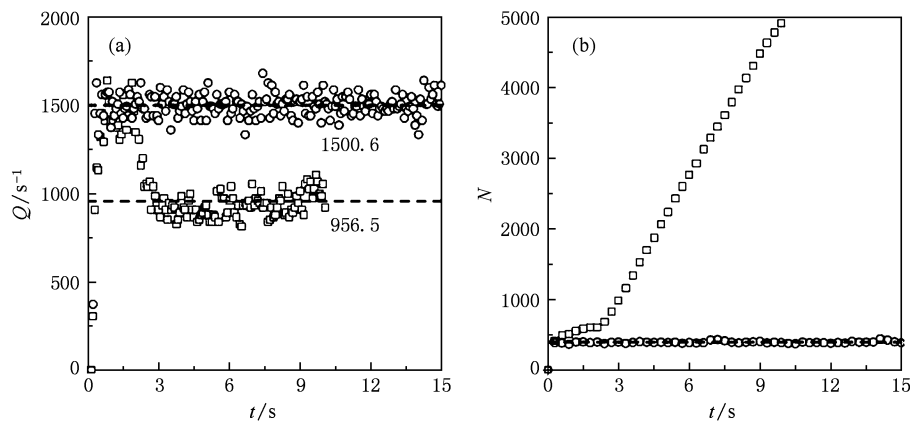


图 2 入口流量固定为 $Q_0 = 1500 \text{ s}^{-1}$ 时, (a) 出口流量和 (b) 通道内的颗粒数随时间的变化关系. 图中符号 \square 、 \circ 分别对应的开口角度为 $\theta = 0^\circ$, 30° . (a) 中虚线分别为对应角度下稳定流动状态下的平均出口流量, (b) 中虚线为稳定流动状态下的通道内的平均颗粒数

图 3 给出了在固定入口流量的条件下,入口流量由小连续增大,出口流量随入口流量的变化关系. 首先,开口角度固定为 $\theta = 0^\circ$,出口流量如图 3 中符号 \square 、 \blacksquare 所示. 如图 3 中点线所示,出口流量存在一最大出口流量 $Q_{\max}^{(Q_0)}$, 它决定了稳定颗粒流状态是稀疏流还是密集流状态. 当入口流量小于 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 时,出口流量等于入口流量,颗粒不会在通道内堆积,颗粒流一直处于稀疏流状态(图 3 中符号 \square 所示). 而当入口流量大于 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 时,稀疏流-密集流转变发生,出口流量小于入口流量,颗粒在通道内堆积,颗粒流最终进入稳定密集流状态(图 3 中符号 \blacksquare 所示),图中出口流量为当通道内颗粒数达到 5000 个时,然后在固定颗粒数的条件下继续模拟得到的出口流量的平均值。

其次,我们将开口角度分别固定为 $\theta = 30^\circ$, 50° 和 60° ,连续增大入口流量,观察出口流量的变化,如图 3 中 \circ (\bullet), \triangle (\blacktriangle) 和 ∇ (\blacktriangledown) 所示. 由图可

见,在不同开口角度下,均存在最大出口流量 $Q_{\max}^{(Q_0)}$. 当入口流量小于 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 时,颗粒流一直处于稀疏流状态;而当入口流量大于 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 时,稀疏流-密集流转变发生,颗粒流最终处于密集流状态. 另外,如图 3 中实线所示,当入口流量较小时,不同开口角度下得到的出口流量很好的落在 $Q = Q_0$ 上,说明颗粒流处于稀疏流状态时,出口流量等于入口流量,与开口角度无关. 但是,对于最大出口流量和密集流流量来说,明显可见,开口角度不同,最大出口流量和密集流流量不同。

为进一步观察开口角度对最大出口流量的影响,在固定入口流量的条件下,我们对一组具有不同开口角度的通道内的颗粒流进行了模拟,如图 4 中符号 \triangle 所示为最大出口流量随开口角度的变化关系. 由图可见,当开口角度 $\theta = 0^\circ$ 时,最大出口流量为 $Q_0 = 1400 \text{ s}^{-1}$,而当开口角度 $\theta = 10^\circ$, 20° 时,最大出口流量均为 $Q_0 = 1300 \text{ s}^{-1}$. 当进一步增大开口

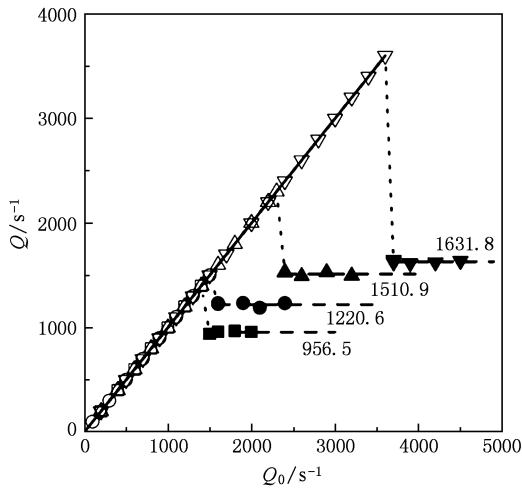


图3 稳定流动状态下出口流量随入口流量的变化关系. 其中, 符号□(■), ○(●), △(▲)和▼(▽)分别对应开口角度为 $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 50^\circ$ 和 60° 时的出口流量, 空心符号对应为稀疏流流量, 实心符号对应为密集流流量. 图中实线为 $Q = Q_0$, 虚线为 $Q = Q_d$, 点线分别对应为不同开口角度下发生稀疏流—密集流转变时的出口流量

角度时, 最大出口流量呈单调增长趋势.

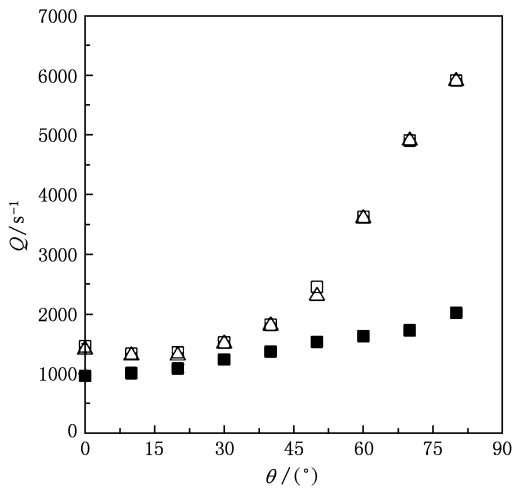


图4 出口流量随开口角度的变化关系. 符号△为固定入口流量方法得到的最大出口流量. 符号■和□分别为由固定颗粒数方法得到的密集流流量和最大出口流量

对于通道内的颗粒流稀疏流-密集流转变而言, 其过程是一个由于颗粒流的涨落导致地具有一定转变概率的定态过程^[23]. 在固定入口流量条件下, 当入口流量接近最大出口流量时, 亚稳定稀疏流的存活时间迅速减小, 这给获得稳定流动状态下的出口流量带来了一定的难度. 所以, 我们同时采用了固定颗粒数方法对不同开口角度下的颗粒流进行

了模拟, 通过连续增加通道内颗粒数来控制颗粒流的出口流量, 所得结果如图5中空符号所示, 其中实心符号为由固定入口流量方法得到的结果. 首先, 在颗粒数较小的范围内, 明显可见, 两种方法得到的模拟结果很好的重合在一起, 这表明由固定颗粒数方法得到的整个范围内颗粒数和流量之间的关系确实反映了颗粒流内在的物理本质. 其次, 由固定颗粒数方法所得的结果可以看出, 出口流量存在两个重要的特征值, 一个是当通道内颗粒数等于一中等值 $N = N_m$ 时, 出口流量存在一个最大值 $Q_{max}^{(N)}$; 另一个是当通道内的颗粒数大于 N_m 后, 出口流量逐渐趋于稳定密集流流量值 Q_d .

在固定颗粒数条件下, 我们对一组具有不同开口角度的通道内的颗粒流进行了模拟, 得到了对应不同开口角度下的密集流流量 Q_d 和最大出口流量 $Q_{max}^{(N)}$, 结果如图4中符号■、□所示. 对于密集流流量来说, 出口流量随开口角度增大而增大. 对于最大出口流量 $Q_{max}^{(N)}$ 来说, 同样发现开口角度为 0° 时比开口角度为 $10^\circ, 20^\circ$ 时的最大出口流量大. 而当开口角度大于零时(即除 0° 外), 开口角度越大, 最大出口流量越大. 另外, 对比两种方法获得的最大出口流量值, $Q_{max}^{(N)}$ 比 $Q_{max}^{(Q_0)}$ 大, 说明由固定颗粒数方法得到的最大出口流量才是对应体系实际的最大出口流量.

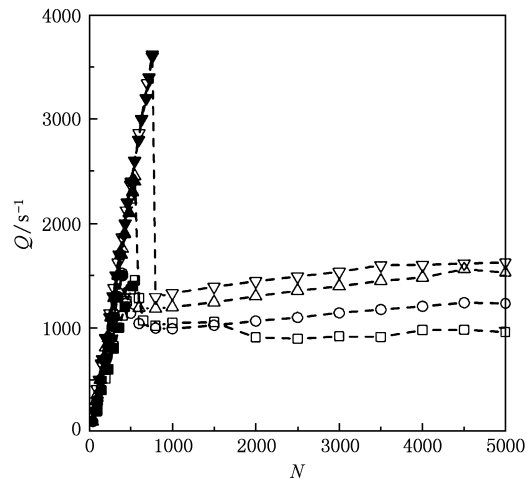


图5 出口流量随通道内颗粒数的变化关系. 其中, ■(□), ●(○), ▲(△)和▼(▽)对应的开口角度分别为 $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 50^\circ$ 和 60° , 实心和空心符号分别为由固定入口流量和固定颗粒数方法得到的计算结果

在颗粒流稀疏流-密集流转变的过程中, 颗粒的流动速度是其中一个非常重要的参数. 图6给出了

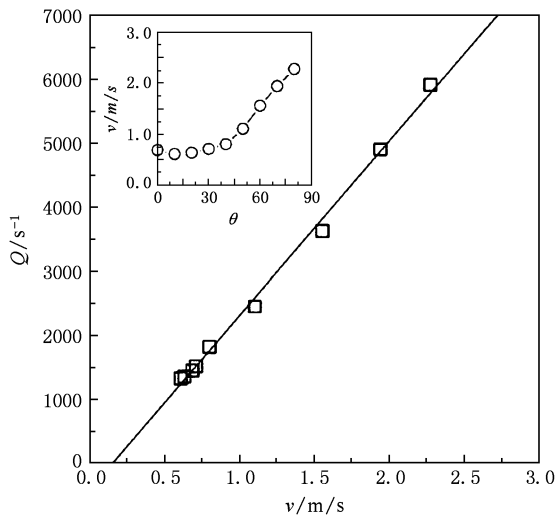


图6 不同开口角度下的最大出口流量随颗粒流出开口时的流动速度的变化关系. 图中实线的拟合公式为 $y = -420.9 + 2728.9x$. 内插图为颗粒流为最大出口流量时, 颗粒流出开口的流动速度随开口角度的变化关系

在固定颗粒数条件下, 不同开口角度下的最大出口流量随颗粒流出开口时的流动速度的变化关系, 内插图给出的是颗粒流出开口时的流动速度随开口角度的变化关系. 由内插图可见, 开口角度为 0° 时比开口角度为 10° , 20° 时的颗粒流动速度大. 而当开口角度大于零时 (即除 0° 外), 颗粒流出开口时的流动速度随开口角度的增加而增大. 由图6可见, 最

大出口流量与颗粒流出开口的流动速度之间呈简单的线性关系, 这说明到达开口附近的颗粒的流动速度越大, 允许通过开口的最大出口流量越大, 即最大稀疏流流量越大, 这与我们先前的研究结果完全一致^[17].

4. 结 论

本文通过计算机模拟研究了开口角度对通道内的颗粒流稀疏流-密集流转变的影响. 在固定入口流量的条件下, 发现颗粒流存在由稀疏流向密集流转变的最大出口流量 $Q_{\max}^{(Q_0)}$. 当入口流量小于 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 时, 颗粒流将处于稀疏流状态, 出口流量与开口角度无关; 而当入口流量大于 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 时, 颗粒流发生稀疏流-密集流转变, 出口流量小于入口流量, 最终稳定流动状态为稳定密集流. 当开口角度大于零时, 增加开口角度可以提高最大出口流量. 在固定颗粒数的条件下, 通过改变通道内的颗粒数来改变出口流量, 发现颗粒流同样存在有最大出口流量 $Q_{\max}^{(N)}$, $Q_{\max}^{(N)}$ 与 $Q_{\max}^{(Q_0)}$ 随开口角度的变化趋势相同, 但 $Q_{\max}^{(N)}$ 偏大. 同时发现当颗粒数增大时, 出口流量逐渐趋于稳定密集流流量值, 且密集流流量随开口角度的增加而增大. 通过分析, 发现开口角度的增大有利于提高颗粒流出开口时的流动速度, 且最大出口流量与颗粒的流动速度之间存在线性关系.

[1] Aranson I S, Tsimring L S 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 641
 [2] Lu K Q, Liu J X 2004 *Phys.* **33** 629 (in Chinese) [陆坤权、刘寄星 2004 物理 **33** 629]
 [3] Lu K Q, Liu J X 2004 *Phys.* **33** 713 (in Chinese) [陆坤权、刘寄星 2004 物理 **33** 713]
 [4] Boudet J F, Amarouchene Y, Kellay H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 254503
 [5] Meier S W, Barreiro D A M, Ottino J M, Lueptow R M 2008 *Nature Phys.* **4** 244
 [6] Tang X W, Zhang X S, Lu K Q, 2004 *Traffic Flow and Granular Flow* (Hangzhou: Zhejiang University Press) (in Chinese) [唐孝威、张训生、陆坤权 2004 交通流与颗粒流 (杭州: 浙江大学出版社)]
 [7] Helbing D 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 1067
 [8] Bursik M, Patra A, Pitman E B, Nichita C, Macias J L, Saucedo R, Girina O 2005 *Rep. Pro. Phys.* **68** 271
 [9] Li Q D, Dong L Y, Dai S Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7584 (in Chinese) [李庆定、董力耘、戴世强 2009 物理学报 **58** 7584]

[10] Kumaran V 2009 *Phys. Rev. E* **79** 11301
 [11] Tewari S, Tithi B, Ferguson A, Chakraborty B 2009 *Phys. Rev. E* **79** 11303
 [12] Khain E, Meerson B, Saaorov P 2008 *Phys. Rev. E* **78** 41303
 [13] Drozd J J, Denniston C 2008 *Phys. Rev. E* **78** 41304
 [14] Mankoc C, Garcimartin A, Zuriguel I, Maza D, Pugnaldi L A 2009 *Phys. Rev. E* **80** 11309
 [15] Janda A, Zuriguel I, Garcimartin A, Pugnaldi L A, Maza D 2008 *Europhys. Lett.* **84** 44002
 [16] Boudet J F, Amarouchene Y, Kellay H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 254503
 [17] 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** 6671]
 [18] Huang D C, Sun G, Hou M Y, Lu K Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4754 (in Chinese) [黄德财、孙刚、厚美瑛、陆坤权 2006 物理学报 **55** 4754]
 [19] Chen W, Hou M Y, Lu K Q, Jiang Z H, Lam L 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2213

- [20] Hu G Q, Zhang X S, Bao D S, Tang X W 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 4277 (in Chinese) [胡国琦、张训生、鲍德松、唐孝威 2004 物理学报 **53** 4277]
- [21] Bao D S, Lei Z M, Hu G Q, Zhang X S, Tang X W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5922 (in Chinese) [鲍德松、雷哲敏、胡国琦、张训生、唐孝威 2007 物理学报 **56** 5922]
- [22] Hou M, Chen W, Zhang T, Lu K 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 204301
- [23] Huang D C, Sung G, Lu K Q 2006 *Phys. Rev. E* **74** 61306
- [24] Kuwabara G, Kono K, 1987 *Jpn. J. Appl. Phys. Part. I* **26** 1230
- [25] Schafer J, Dippel S, Wolf D E 1996 *J. Phys.* **16** 5

Effect of opening angle on dilute-dense flow transition in two-dimensional granular flow^{*}

Huang De-Cai[†] Hu Feng-Lan Deng Kai-Ming Wu Hai-Ping

(*Department of Applied Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China*)

(Received 6 December 2009; revised manuscript received 2 February 2010)

Abstract

Computer simulations are performed to investigate the effect of opening angle on dilute-dense flow transition in a two-dimensional granular flow. Two methods, i. e. the fixed inflow rate and the fixed particle number, are adopted. Both results show that larger opening angle results in an increase of maximum outflow rate in dilute-dense flow transition when the opening angle is larger than zero. When granular flow keeps a dilute flow, the outflow rate is irrelative with the opening angle. When the flow becomes a dense flow, the dense flow rate increases with opening angle increasing. Further studies show that the granules flow out with a higher velocity when the opening angle increases. The linear relationship between maximum outflow rate and granule flow velocity is observed.

Keywords: granular matter, granular flow, molecular dynamics simulations

PACC: 8220M, 4610, 4760

^{*} Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10904070), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10847146) and the NJUST Young Scholar Foundation (Grant No. 200705).

[†] E-mail: hdc@mail.njust.edu.cn