科学通报 2009 年 第 54 卷 第 11 期: 1504 ~ 1510
专题: 颗粒物质物理及其应用 论 文 www.scichina.com csb.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE IN CHINA PRESS

基于流体动力学理论的颗粒物质本构关系

蒋亦民①, 刘佑②

① 中南大学物理科学与技术学院, 粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083;
② Theoretische Physik, Universität Tübingen, 72076 Tübingen, Germany
E-mail: jiangyimin@yahoo.cn

2009-01-14 收稿, 2009-03-25 接受
国家自然科学基金资助项目(批准号: 10674181)

摘要 利用流体动力学(hydrodynamic)方法, 普通固体的弹性理论能自然地推广到颗粒物质, 从而得到一组可用来具体计算包括应力、变形、能量、能流、热产生等所有物理量在内的完备偏微分方程. 特别地, 它们能确定具有重要工程意义、至今尚未完全建立的颗粒物质本构关系. 本文具体推导了这个本构关系的一般热力学表达式. 结果显示, 即使在自由能模型和耗散系数都比较简单的情况下, 本构关系也是非常复杂的非线性关系, 有繁多的关于应力、速度、密度等变量的空间导数项. 因此, 直接从实验数据建立严格的, 特别是非均匀情况下的本构关系将是一件非常困难的事情.

关键词
本构关系
流体动力学方程
颗粒温度

质量和动量守恒方程, 又称连续方程和力平衡方程(本文中, 脚标“i, j, k”等表示空间坐标, 并采用重复脚标自动求和的约定):

$$\partial_t \rho + \nabla_k \rho v_k = 0, \tag{1}$$

$$\partial_t \rho v_i + \nabla_j \sigma_{ij} = 0, \tag{2}$$

是分析材料宏观力学时被广泛认可的 4 个基础方程. 但它们不能完全支配密度ρ、速度 v_i、应力σ_{ij} (即动量的流量)这10个未知场变量的时间演化和空间变化, 因此需要补充一批其他方程. 建立本构关系 C 是工程中处理这个问题时经常采用的理论方法. 本构关系一般有两种形式, 一种是联系ρ, v_i, σ_{ij}, 温度 T 以及它们的空间导数的函数关系:

$$C\left(T, \rho, \sigma_{ij}, v_i, \nabla_k \sigma_{ij}, \nabla_k \rho, \nabla_k v_i, \ldots\ldots\right) = 0. \tag{3}$$

另一种是应力变化率与这些变量及其空间导数的函数关系, 又称增量形式的本构关系:

$$C\left(T, \rho, \sigma_{ij}, v_i, \nabla_k \sigma_{ij}, \nabla_k \rho, \nabla_k v_i, \ldots\ldots\right) = \partial_t \sigma_{ij}. \tag{4}$$

对水或晶体那样的普通液体或弹性固体, 有完善和普遍接受的连续介质理论[1,2], 由此可得唯一的本构关系. 但对某些其他材料, 特别是近来很受关注的软物质材料[3], 这还是一个未得到根本解决的问题. 如本文将考虑的沙子这样的颗粒物质, 仅工程文献就提出过许多不同的本构关系模型, 但没有一个被认为能全面准确地描述沙土的力学性质[4]. 其中一些模型经过长时间发展, 形成了相当复杂的具体方程, 如德国土力学学者建立的亚塑(hypo-plasticity) 模型, 但在解释棘齿现象和向非均匀情况发展时, 仍面临着许多困难[5,6]. 有的本构关系只针对特定几何和静止情况有效, 如Janssen[7]提出的“粮仓中水平与垂直应力之比为常数”的著名猜测, 可以理解为圆桶中静止颗粒物质的本构关系. 在极限平衡模型(incipient failure model)中假设的应力满足库仑屈服条件, 是一个被广泛用于塑性区域的本构关系[8]. 近 20 年来, 一些物理工作者注意到了颗粒物质基础理论尚不完善的状况[9], 并围绕着这个问题开展了许多研究工作. 文献[10,11]中研究人员曾尝试将Janssen猜测的适用范围延伸至粮仓以外, 诸如地面上的沙堆、顶面施有点状加载的颗粒床(又称

引用格式: 蒋亦民, 刘佑. 基于流体动力学理论的颗粒物质本构关系. 科学通报, 2009, 54: 1504~1510
Jiang Y M, Liu M. A granular constitutive relation derived from hydrodynamics (in Chinese). Chinese Sci Bull (Chinese Ver), 2009, 54: 1504—1510, doi: 10.1360/ 972008-2552

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552

Boussinesq问题)等任何情况,但他们据此提出的颗粒物中静止应力传播满足双曲型偏微分方程的观点没有得到实验的支持 [12], 进而推出的FPA(fixed principle axes)本构关系 [13,14]也受到了来自工程师的批评 [15,16]. 综上所述不难看出, 人们对如何封闭方程(1)和(2), 建立既物理概念简单明确, 同时又广泛适用的颗粒物质本构关系这个基本问题还没有取得一致的看法.

从物理角度看任何材料都遵守热力学关系, 它们与守恒方程一起构成的封闭方程组是全面描述材料宏观性质的理论基础. 这个建立运动和静止材料力学方程的思路最早曾被用来创立普通液体(如空气或水)的流体动力学, 后来被广泛应用于包括固体和电磁场等没有传统流动行为的物质, 但在物理文献中仍保留着"流体动力学"这个传统称呼 [17]. 目前对许多材料已经建立有相应的流体动力学方程, 如超流 [1]、晶体 [2,17]、液晶 [17,18]、磁流体 [19]、高聚物 [20]、超导 [21]、磁性液体(ferrofluid)[22]、等离子体 [23]等. 流体动力学不像本构理论那样寻求将材料的特性直接构筑到方程(3)和(4)左边的函数C中, 而是通过热力学函数(如自由能)和迁移系数来体现它们. 它对所有宏观物理量都给出了明确的表达式或计算方法, 并可直接用于工程分析. 作为一种处理宏观问题的普遍方法, 它当然也可以应用到颗粒材料上. 我们最近在这方面的一些研究显示, 这样得到的方程的确能够概括颗粒材料的不少特性, 包括库仑屈服和剪胀 [24]、实验测量的非线性弹性响应系数 [25]、粮仓的静力学特性和点状荷载下半无穷颗粒体的应力问题(Boussinesq问题)[26]、应力-应变响应性质的包络线(response envelope)和塑性流动法则(flow rule)[27]等. 在这些结果的支持下, 本文将进一步建立它们与本构理论之间的一般关系. 为简单起见, 我们将忽略重力. 另外值得指出的是, 文中出现的质量密度ρ、动量密度 $g_i=\rho v_i$、应力σ_{ij}等都应理解为在远大于邻近颗粒间距尺寸 ℓ 范围中作粗粒化(coarse-graining)平均意义下的宏观量. 最近, 研究人员通过模拟计算验证了这个粗粒化平均概念对应力的有效性 [28]. 作为宏观理论, 流体动力学方程显然不能描述~ℓ尺度上的那些现象, 如力链及颗粒在细管道中或小孔洞处的阻塞等. 通常, 它们需要用可直接计算每个颗粒运动行为的计算机模拟方法来描述 [29~31].

1 颗粒物质的流体动力学

普通固体的流体动力学即是熟悉的弹性理论. 如果在其中引进Haff在文献[32]中建议的颗粒温度概念和它带来的各种耗散效应, 我们能把理论自然地延伸到颗粒材料, 得到相应的流体动力学方程. 本节将从固体出发系统地介绍这个推广. 有关颗粒流体动力学的更多内容可进一步参见文献 [27,33]. 值得强调的是, 除方程(1)和(2)外, 下面的熵增加和能量守恒

$$\partial_t s+\nabla_k\left(sv_k-f_k\right)=R/T\geq 0, \tag{5}$$

$$\partial_t w+\nabla_k Q_k=0 \tag{6}$$

也是流体动力学中的普适方程. 这里 s 和 w 是熵和能量密度, R 和 Q_k 是热产生率和能量流密度, f_k 是与热传导等有关的熵耗散流密度. 我们将在本节中给出它们的表达式. 目前工程上一些广泛使用的颗粒本构模型常常没有给出这些表达式, 因此原则上还不能计算有关能量和能流等方面的内容.

1.1 普通固体的弹性理论

由于空间平移对称性破缺, 固体的状态变量与液体相比增加了弹性应变(对称)张量u_{ij}[17]. 因此, 固体的平衡态热力学关系为 [1]

$$\mathrm{d}w=T\mathrm{d}s+\mu\mathrm{d}\rho+v_i\mathrm{d}g_i-\pi_{ij}\mathrm{d}u_{ij}, \tag{7}$$

其中μ和π_{ij} 分别是化学势和弹性应力. 这里的质量密度ρ, 动量密度 $g_i=\rho v_i$, 熵密度 s 的时间演化分别满足方程(1), (2)和(5), 而 u_{ij} 的方程为

$$\left(\partial_t+v_k\nabla_k\right)u_{ij}=v_{ij}-u_{ik}\nabla_j v_k-u_{jk}\nabla_i v_k -\left(\nabla_j y_i+\nabla_i y_j\right)/2, \tag{8}$$

其中记号 $v_{ij}\equiv\left(\nabla_i v_j+\nabla_j v_i\right)/2$ 是速度的空间导数, 即材料的总应变率. 方程(8)的第一行即是常见的几何方程. 第二行是描述固体中缺陷扩散运动的耗散项 [17,20]. 它会破坏方程的时间可逆性, 导致塑性变形. 对没有耗散的理想固体, y_i=0, 这时由连续方程(1)和几何关系(8)式可以证明ρ将是u_{ij}的函数, 不是独立变量. 但对可发生塑性变形的非理想固体, 必须将ρ当作独立变量处理.

固体的应力张量是 [1]

$$\sigma_{ij}=\rho v_i v_j+\left(\frac{\rho\partial}{\partial\rho}-1\right)\Phi\delta_{ij}+\pi_{ij}-2u_{ik}\pi_{kj}-\sigma_{ij}^{(1)}, \tag{9}$$

其中 $\Phi=\Phi\left(T,\rho,u_{ij}\right)=w-sT$ 是固体(静止时)的自由能, $\sigma_{ij}^{(1)}$ 是黏性耗散过程引起的应力. 尽管有多种贡献, 通常固体的σ_{ij}主要由弹性部分π_{ij}给出, 相比之下

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552

其他的项可忽略不计. 方程(5), (8)和(9)中的传热 f_k, 缺陷扩散 y_i, 黏性 $\sigma_{ij}^{(1)}$ 等耗散流的驱动力分别是 $\nabla_k T$, v_{ij}, $\nabla_k \pi_{ik}$, 并伴随有相应的热产生. 按照热力学, 总发热率 R 是这些耗散流与驱动力的乘积:

$$R = f_k \nabla_k T + \sigma_{ij}^{(1)} v_{ij} + y_i \nabla_k \pi_{ik}. \tag{10}$$

最后, 能流矢量 Q_k 为

$$Q_k = \sigma_{kl} v_l + \left(w - \rho v^2\right) v_k - T f_k - \pi_{kl} y_l. \tag{11}$$

通过直接计算可以验证, 能量守恒(6)式总是满足的. 注意如果去掉(7)~(11)式中与弹性有关的项, 它们即化为普通流体的 Navier-Stokes 方程.

1.2 Haff 的颗粒温度及其流体动力学效应

颗粒间的赫兹接触力、颗粒的涨落运动及其非弹性碰撞是这类材料的基本介观特点. 它们将带来一系列、普通固体没有的力学效应. 因此建立颗粒物质的流体动力学问题, 主要是如何在方程(7)~(11)中计入这些效应. 首先, 接触力将反映在自由能函数 Φ 中的弹性势能项上, 它不会改变这些方程的形式. 涨落运动指的是颗粒相对宏观速度场 v_i(可以看作颗粒的平均速度)的偏离, 它没有包含在 v_i 中, 需要额外引入一宏观变量来描述. 由于碰撞的非弹性, 涨落运动具有弛豫性, 因此这是一个弛豫型的变量. 从某种意义上讲, 颗粒的涨落运动与气体分子的有类似之处, 可尝试用类似气体的熵和温度变量来描述. 这个颗粒层次上的熵和温度常被称作颗粒熵和颗粒温度, 在本文中将记为 s_2 和 T_2. 这个做法可以追溯到Haff建立的颗粒气体流体动力学理论 [32], 在该工作中, 他假设了分子气体流体动力学中的热扩散、黏性和伴随的熵产生等基本过程在这个颗粒层次上都有相应的类比. 将它们分别记为 $f_k^{(2)}$, $\sigma_{ij}^{(2)}$ 和 R_2, 可以对 s_2 写出与分子气体类似的时间演化方程:

$$\partial_t s_2 + \nabla_k \left(s_2 v_k - f_k^{(2)}\right) = R_2 / T_2, \tag{12}$$

$$R_2 = f_k^{(2)} \nabla_k T_2 + \sigma_{ij}^{(2)} v_{ij} - I T_2. \tag{13}$$

只是这里 R_2 的方程(13)中多出了最后一项 $-IT_2 \le 0$. 该项描述 s_2 的弛豫行为, 即 s_2 会通过非弹性碰撞衰减自己, 变成 s. (13)式中的 IT_2 即是这个衰减率, 或 s_2 向 s 转变的速率. 这是颗粒熵与分子熵唯一不同的地方. 从宏观角度看, Haff引入的这些关于颗粒温度的内容是这类材料的基本特征, 具有广泛的适用性. 由于颗粒间碰撞的非弹性, 目前人们对颗粒涨落运动的统计规律是否遵守Maxwell分布仍有不同看法 [34]. 但一般地讲, 统计规律对流体动力学方程(12)和(13)在形式上的影响是很有限的, 另外目前还未见有关这个影响的确切报道, 因此本文将假设它们总是成立的.

在 Haff 工作的基础上, 可以进一步考虑颗粒温度对弹性方程(7)~(11)的影响. 首先, 颗粒涨落运动带有相应的动能, 会对能量有一定的贡献. 与分子气体的 $T\mathrm{d}s$ 类比, 不难看出颗粒物质的热力学关系应比(7)式多出一项 $T_2 \mathrm{d}s_2$, 即

$$\mathrm{d}w = T\mathrm{d}s + \mu \mathrm{d}\rho + v_i \mathrm{d}g_i - \pi_{ij} \mathrm{d}u_{ij} + T_2 \mathrm{d}s_2. \tag{14}$$

另外, 颗粒的运动显然会破坏它们之间的弹性接触, 使弹性应力 π_{ij} 或弹性应变 u_{ij} 发生松弛. 也就是说, 方程(8)中的耗散部分除扩散型的耗散流 y_i 外, 还应增加一项直接由弹性应力 π_{ij} 驱动的弛豫型耗散流 Y_{ij}:

$$\begin{aligned}\left(\partial_t + v_k \nabla_k\right) u_{ij} &= v_{ij} - u_{ik} \nabla_j v_k - u_{jk} \nabla_i v_k \\ &\quad - \left(\nabla_j y_i + \nabla_i y_j\right)/2 + Y_{ij}.\end{aligned} \tag{15}$$

这些耗散项都将导致材料的塑性变形. 颗粒黏性 $\sigma_{ij}^{(2)}$ 应该加到方程(9)中, 有

$$\sigma_{ij} = \rho v_i v_j + \left(\frac{\rho \partial}{\partial \rho} - 1\right) \Phi \delta_{ij} + \pi_{ij} - 2 u_{ik} \pi_{kj} - \sigma_{ij}^{(1)} - \sigma_{ij}^{(2)}. \tag{16}$$

注意这里的自由能是能量 w 对两个熵的勒让德变换:

$$\Phi = \Phi\left(T, \rho, u_{ij}, T_2\right) = w - sT - s_2 T_2.$$

热产生率 R 除(10)式的那些项外, 还应有来自颗粒温度和弹性应变弛豫这两个耗散机制的贡献, 即

$$R = f_k \nabla_k T + \sigma_{ij}^{(1)} v_{ij} + y_i \nabla_k \pi_{ik} + Y_{ij} \pi_{ij} + I T_2. \tag{17}$$

最后按照流体动力学, 扩散型的耗散流将引起相应的能流, 方程(11)中应加入一项 $-T_2 f_k^{(2)}$:

$$Q_k = \sigma_{kl} v_l + \left(w - \rho v^2\right) v_k - T f_k - \pi_{kl} y_l - T_2 f_k^{(2)}. \tag{18}$$

注意弛豫型耗散不影响能流.

方程(14)~(18)即是固体弹性方程对颗粒物质的推广, 显然属于双温度(或双熵)模型一类的理论. 方程将颗粒物质看成具有两个熵的系统, 它们都能引起迁移过程, 但颗粒熵 s_2 不能自己稳定, 它会不停地向熵 s 弛豫, 因此 $s_2 \ne 0$ 是非平衡状态. 注意热力学第二定律要求 $R \ge 0$, 也就是(13)和(17)式中的 $I \ge 0$. 这意味着理论不允许熵 s 向颗粒熵 s_2 转变, 或颗粒的涨落运动 s_2 只能用机械运动的方式(如 v_{ij})来激发, 不能用热运动激发. 这点在文献中常被表述为温度对颗粒体系不重要(如文献 [35]), 或颗粒物质是"非热性(athermal)"的. 双温度流体的处理方法在连续介质物

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552

理中并不陌生，如等离子体的流体模型就常有电子和离子两个温度．但注意颗粒物质的双温度不是因为它有多个组分，而是因为有近邻原子间距和近邻颗粒间距两个结构尺寸的缘故．

1.3 耗散系数和自由能：一个简单模型

从一定意义上讲，前面的流体动力学方程只是一组热力学关系，它们还需要用自由能函数 $\Phi\left(T,\rho,u_{ij},T_2\right)$ 和迁移系数来进一步具体化其中的耗散流和应力等．首先，可以将制造 s 和 s_2 的耗散流写成常见的 Onsager 形式:

$$\begin{pmatrix} f_i \\ \sigma_{ij}^{(1)} \\ y_i \\ Y_{ij} \\ I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^{(1)} & 0 & \alpha_{ijkl} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{ik} & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_{ijkl} & 0 & \lambda_{ijkl} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k T \\ v_{kl} \\ \nabla_l \pi_{lk} \\ \pi_{kl} \\ T_2 \end{pmatrix}, \quad (19a)$$

$$\begin{pmatrix} f_i^{(2)} \\ \sigma_{ij}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik}^{(2)} & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k T_2 \\ v_{kl} \end{pmatrix}, \quad (19b)$$

其中 $\kappa,\eta...$ 等是迁移系数．这里忽略了除 α 外的所有非对角系数，(19a)式中的负号来自 Onsager 倒易性．对各向同性情形，还可以进一步将耗散流表示成

$$f_i = \left(\kappa / T\right)\nabla_i T, \quad (20)$$

$$f_i^{(2)} = \left(\kappa_2 / T_2\right)\nabla_i T_2, \quad (21)$$

$$y_i = -\beta \nabla_k \pi_{ik}. \quad (22)$$

所有耗散对应力(16)式的贡献可写成

$$\sigma_{ij}^{(1)} + \sigma_{ij}^{(2)} = \frac{\alpha_v}{3}\pi_{kk}\delta_{ij} + \alpha_s \pi_{ij}^* + \eta v_{ij}^* + \zeta v_{kk}\delta_{ij}, \quad (23)$$

其中

$$\eta_{ijmn} = \eta_{ijmn}^{(1)} + \eta_{ijmn}^{(2)} = \eta\delta_{im}\delta_{jn} + \left(\zeta - \frac{\eta}{3}\right)\delta_{ij}\delta_{mn} \quad (24)$$

是系统的总黏性系数．上标“＊”表示与迹无关的张量部分，如 $\pi_{ij}^* \equiv \pi_{ij} - \pi_{kk}\delta_{ij}/3$．如果假设弹性的松弛可用驰豫时间模型描述，有

$$Y_{ij} = -\frac{\alpha_v}{3}v_{kk}\delta_{ij} - \alpha_s v_{ij}^* - \frac{u_{kk}\delta_{ij}}{\tau_v} - \frac{u_{ij}^*}{\tau_s}, \quad (25)$$

其中 $\tau_{v,s}$ 分别是体弹应变 $\Delta \equiv -u_{kk}$ 和剪弹应变 $u_{ij}^* \equiv u_{ij} + \Delta\delta_{ij}/3$ 的驰豫时间．这个迁移模型共有 κ，κ_2，β，α_v，α_s，η，ξ，τ_v^{-1}，τ_s^{-1} 等 9 个系数，表明颗粒物质是具有多种迁移机制的耗散体系．这一方面带来了复杂性，但另一方面也为研究迁移问题提供了一个以前未曾注意的新系统．

当弹性应变 Δ，$u_s \equiv \sqrt{u_{ij}^* u_{ij}^*}$ 和颗粒温度 T_2 不大时，可以将自由能 Φ 关于它们作展开．在最低级近似下，对如天然干沙，可取

$$\Phi = \frac{\rho}{m} f_1 + \frac{B}{5}\sqrt{\Delta}\left(2\Delta^2 + 3u_s^2\right) - \frac{b_0}{2}\rho\left(1 - \frac{\rho}{\rho_c}\right)^a T_2^2, \quad (26)$$

其中 $f_1=f_1(T)$ 和 m 是单个颗粒的自由能和质量．与普通固体相比，这里的 Φ 与 u_{ij} 的函数关系中多了一个反映颗粒间赫兹接触效应的因子 $\sqrt{\Delta}$ [24]．另外对高密度情况，颗粒的涨落运动将给出一比例于 $\left(1-\rho/\rho_c\right)^{-1}$ 的压力贡献(ρ_c 是最大无规堆积密度)[36]．为描述这个效应，我们在(26)式中引入了因子 $\left(1-\rho/\rho_c\right)^a$，其中的指数 $a \gtrsim 0$．参数 b_0 可作常数处理，B 反映弹性强度，可简单地看作只是密度 ρ 的函数(更仔细处理时，可进一步考虑 T_2 和 u_{ij} 对它的影响)．

由于只考虑了尽可能少的迁移系数和最低级的展开近似，(20)~(26)式是最简单的颗粒流体动力学模型．但它已经能描述本文引言中提到的一系列颗粒材料特性，说明其具备一定的实用价值．

2 增量形式本构关系的流体动力学推导

本构关系是不含弹应变的方程，因此从流体动力学过渡到本构模型的主要工作将是设法消去前者方程中的 u_{ij}．对系统不随时间变化的稳恒情况，如果忽略(15)式中的 y_i 和关于 u_{ij} 的高阶项，并考虑驰豫时间模型(25)式，有

$$u_{ij} \approx \tau_s\left(1-\alpha_s\right)v_{ij} + \frac{v_{kk}}{3}\left[\frac{\tau_v}{3}\left(1-\alpha_v\right) - \tau_s\left(1-\alpha_s\right)\right]\delta_{ij}. \quad (27)$$

用它消去应力方程(16)中的 u_{ij}，可以得到与非牛顿流体形式类似的本构关系．颗粒物质的稳恒流动可用非牛顿流体模型描述这个结果是与文献 [37]符合的．下面我们将给出一严格的、对非稳恒情况也适用的增量型本构关系．这些结果表明，颗粒物质的非牛顿流体模型和土木工程中广泛应用的增量模型的确都能统一地归纳到上节介绍的流体动力学理论中．

将应力方程(16)对时间求导数，并注意 $\partial_t\rho = -\nabla_k \rho v_k$ 和 $\partial_t g_i = \partial_t \rho v_i = -\nabla_k \sigma_{ik}$，可得

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552

$$\begin{aligned}\partial_t\sigma_{ij} &= v_i v_j \nabla_k \rho v_k - v_i \nabla_k \sigma_{jk} - v_j \nabla_k \sigma_{ik} \\ &+ \left(J_{ij}^{(1)} - K_{ij}^{(1)}\right)\partial_t T + \left(J_{ij}^{(2)} - K_{ij}^{(2)}\right)\partial_t T_2 \\ &- \left(J_{ij}^{(3)} - K_{ij}^{(3)} + \eta_{ijmn}\nabla_n \frac{v_m}{\rho}\right)\nabla_k \rho v_k \\ &+ \left(J_{ijlk}^{(4)} - K_{ijlk}^{(4)}\right)\partial_t u_{lk} \\ &- \eta_{ijmn}\left[\frac{v_n}{\rho}\nabla_m \nabla_k \rho v_k + \nabla_m\left(\frac{1}{\rho}\nabla_k \sigma_{kn}\right)\right],\end{aligned} \tag{28}$$

其中含总黏性系数 η_{ijmn} 的项是来自 $\eta_{ijmn}\partial_t v_{mn}$ 的贡献，符号 $J^{(1-4)}$是一些由自由能的二阶导数构成的热力学参数. $K^{(1-4)}$是与迁移系数和变形率 v_{ij} 有关的动力学参数. 它们的具体表达式见附录(网络版).

为消去(28)式中的时间导数，需要推导温度的时间演化方程. 利用热力学关系 $s = -\partial\Phi/\partial T$ 和 $s_2 = -\partial\Phi/\partial T_2$，有

$$\begin{aligned}\partial_t s &= -\frac{\partial^2\Phi}{\partial T^2}\partial_t T - \frac{\partial^2\Phi}{\partial T\partial T_2}\partial_t T_2 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial T\partial\rho}\nabla_k \rho v_k \\ &+ \frac{\partial \pi_{lk}}{\partial T}\partial_t u_{lk},\end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}\partial_t s_2 &= -\frac{\partial^2\Phi}{\partial T\partial T_2}\partial_t T - \frac{\partial^2\Phi}{\partial T_2^2}\partial_t T_2 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial T_2\partial\rho}\nabla_k \rho v_k \\ &+ \frac{\partial \pi_{lk}}{\partial T_2}\partial_t u_{lk},\end{aligned} \tag{30}$$

将这两个方程对 $\partial_t T$ 和 $\partial_t T_2$ 求解，得

$$\partial_t T = J^{(5)}\nabla_k \rho v_k + J_{lk}^{(6)}\partial_t u_{lk} + J^{(9)}\partial_t s_2 - J^{(10)}\partial_t s, \tag{31}$$

$$\partial_t T_2 = J^{(7)}\nabla_k \rho v_k + J_{lk}^{(8)}\partial_t u_{lk} + J^{(9)}\partial_t s - J^{(11)}\partial_t s_2, \tag{32}$$

其中热力学参数 $J^{(5-11)}$ 的定义由附录给出. 将它们代入(28)式，再利用方程(5)，(12)和(15)消去 $\partial_t s$，$\partial_t s_2$，$\partial_t u_{ij}$，得

$$\begin{aligned}\partial_t\sigma_{ij} &= -v_i\nabla_k\sigma_{jk} - v_j\nabla_k\sigma_{ik} + \Lambda_{ij}^{(1)}\frac{R}{T} + \Lambda_{ij}^{(2)}\frac{R_2}{T_2} \\ &- \Lambda_{ij}^{(1)}\nabla_k\left(s v_k - f_k\right) - \Lambda_{ij}^{(2)}\nabla_k\left(s_2 v_k - f_k^{(2)}\right) \\ &+ \Lambda_{ijlk}^{(3)}\left[v_{lk} - v_n\nabla_n u_{lk} - 2u_{kn}\nabla_l v_n - \nabla_k y_l + Y_{lk}\right] \\ &+ \left[\Lambda_{ij}^{(4)} - \eta_{ijmn}\nabla_n\frac{v_m}{\rho}\right]\nabla_k\rho v_k \\ &- \eta_{ijmn}\left[\frac{v_n}{\rho}\nabla_m\nabla_k\rho v_k + \nabla_m\left(\frac{1}{\rho}\nabla_k\sigma_{kn}\right)\right].\end{aligned} \tag{33}$$

这里的系数 $\Lambda^{(1\text{-}4)}$ 分别由附录中的方程(49)~(52)给出. 如果再利用方程(16)消去 u_{ij}，并代入 $s = -\partial\Phi/\partial T$，$s_2 = -\partial\Phi/\partial T_2$，以及 R，R_2 的方程(17)，(13)和耗散流的表达式，我们可以把(33)式的右边表示成密度、速度、应力、温度以及它们的空间导数的函数. 因此(33)式即是所求的增量型本构关系.

对上节介绍的耗散流和自由能(20)~(26)式，有 $J_{\cdots\cdots}^{(1,6,8,9)}$ 和 $K_{\cdots\cdots}^{(1)}$ 等于零，由此得 $\Lambda_{ij}^{(1)} = 0$ 和 $\Lambda_{ijlk}^{(3)} = J_{ijlk}^{(4)} - K_{ijlk}^{(4)}$. 尽管这是一个最简单的模型，它给出的本构关系(33)式却非常复杂，这里不必继续写出它的具体方程(但可方便地用计算机处理). 如果密度、应力、变形等都是均匀的，并忽略关于应力和速度的高阶项，$\partial_t\sigma_{ij}$ 可简化为

$$\partial_t\sigma_{ij} \approx \left(J_{ijlk}^{(4)} - K_{ijlk}^{(4)}\right)\left(v_{lk} + Y_{lk}\right). \tag{34}$$

这里我们还假设了颗粒的热容量为常数，即f_1~T. 这时有 $J^{(11)} = 0$和 $\Lambda_{ij}^{(2)} = 0$. 在文献 [27]中我们曾验证了(34)式与亚塑模型有类似的行为.

3 总结和讨论

颗粒物质与通常固体的一个重要区别是它具有离散性. 当处于运动状况时，离散性使得这类物质中不可避免地出现不能归结到流体动力学速度 v_i 中的涨落运动，也就是颗粒温度 T_2. 即使很小的 T_2 都会显著地破坏颗粒之间的弹性接触，导致材料的弹性松弛，另外还会严重地影响材料的迁移系数并带来新的迁移过程. 这使得颗粒物质表现出远比普通固体强和丰富的耗散现象，在外力作用下出现大的多的塑性形变. 幸运的是，从本文可以看到，这些复杂的耗散机制都能方便地加到普通固体的弹性方程中去，建立包括它们在内的流体动力学方程结构不是一件困难的事. 今后这个理论发展的重点将主要是自由能函数和迁移系数的研究，如迁移系数随密度或颗粒温度的变化关系. 在这方面我们目前已经有了一个能初步应用于实际计算的简单模型，它可在实验数据的指导下作进一步的完善. 完备的流体动力学方程能解决包括本构关系在内的所有宏观问题. 鉴于本构方法在工程领域的重要性和基础地位，本文具体推导了这个(增量型)本构关系的一般方程，作为沟通物理模型和工程模型之间的桥梁.

由于所涉及的变量原则上都可测量，本构关系的最大好处是与实验有着直接的联系，能够凝结大量的工程数据和经验. 但从处理问题的方法和思路来看，流体动力学理论也有不少可取之处. 首先，材料的平衡态性质，以及各种扩散、弛豫、黏滞等耗散

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552

过程在理论中都明确作了区分和定义. 从(33)式可以看出, 这些机制以非常复杂的方式混杂在本构关系中, 无法加以区分. 由于不可能判断它们各自在材料中的贡献程度, 本构理论中一般没有平衡性质和这些迁移过程的概念. 第二, 本文的颗粒流体动力学方程可直接用来分析计算空间非均匀情况时的力学问题. 因为过于复杂, 在本构关系中计入变量的空间导数是一项很困难的工作, 目前还只有一些试探性的文献报道 [6]. 第三, 它们能够分析计算材料中的能量和能量的流量. 第四, 与Navier-Stokes方程类似, 它们对材料的任何变形运动, 无论是有旋的还是无旋的都适用. 本构关系在处理有旋变形时对应力变化率的具体形式还存有分歧, 有人倾向采用Jaumann的形式(如文献 [5]), 有人倾向用Dienes的(如文献 [38]). 流体动力学理论可避免这个不确定性. 最后, 相对复杂的(33)式而言, 采用流体动力学方程作数值计算可能比用本构关系更为合适. 特别是在速度 $v_i \to 0$ 或弹性应变 $u_{ij} \to 0$ 的极限下, 这些方程能分别趋向于含库仑屈服在内的颗粒固体非线性静力学, 或Haff的颗粒气体流动力学. 因此, 这将是一个可用来分析计算包括颗粒固态、液态和气态, 以及它们之间转变的统一理论.

参考文献

1 Landau L D, Lifshitz E M. Fluid Mechanics. 2nd ed. Oxford: Pergamon Press, 1987
2 Landau L D, Lifshitz E M. Theory of Elasticity. 3rd ed. Oxford: Pergamon Press, 1986
3 de Gennes P G. Soft matter. Rev Mod Phys, 1992, 64: 645—648[DOI]
4 黄文熙. 土的工程性质. 北京: 水利电力出版社, 1983
5 Kolymbas D. Introduction to Hypoplasticity. Rotterdam: Balkema, 2000
6 Wu W. On high-order hypoplastic models for granular materials. J Eng Math, 2006, 56: 23—34[DOI]
7 Janssen H A. Getreidedruck in silozellen. Z Ver Deutch Eng, 1895, 39: 1045—1049
8 沈珠江. 理论土力学. 北京: 中国水利水电出版社, 2000
9 de Gennes P G. Granular matter: A tentative view. Rev Mod Phys, 1999, 71: S374—S382[DOI]
10 Wittmer J P, Cates M E, Claudin P. Stress propagation and arching in static sandpiles. J Phys I France, 1997, 7: 39—80[DOI]
11 Bouchaud J P, Cates M E, Claudin P. Stress-distribution in granular media and nonlinear-wave equation. J Phys I France, 1995, 5: 639—656[DOI]
12 Redeyllet G, Clement E. Green's function probe of a static granular piling. Phys Rev Lett, 2001, 86: 3308—3311[DOI]
13 Wittmer J P, Claudin P, Cates M E, et al. An explanation for the central stress minimum in sand piles. Nature, 1996, 382: 336—338[DOI]
14 Watson A. Searching for the sand-pile pressure dip. Science, 1996, 273: 579—580[DOI]
15 Savage S B. Problems in the statics and dynamics of granular materials. In: Behringer R P, Jenkins J T, eds. Powders and Grains. Rotterdam: Balkema, 1997. 185—194
16 Cates M E, Wittmer J P, Bouchaud J P, et al. Jamming and static stress transmission in granular materials. Chaos, 1999, 9: 511—522[DOI]
17 Martin P C, Parodi O, Pershan P S. Unified hydrodynamic theory for crystals, liquid crystals, and normal fluids. Phys Rev A, 1972, 6: 2401—2420[DOI]
18 de Gennes P G, Prost J. Liquid Crystal. Oxford: Oxford University Press, 1993
19 Landau L D, Lifshitz E M. Electrodynamics of Continuous Media. 2nd ed. Oxford: Pergamon Press, 1984
20 Temmen H, Pleiner H, Liu M, et al. Convective nonlinearity in non-newtonian fluids. Phys Rev Lett, 2000, 84: 3228—3231[DOI]
21 Liu M. Rotating superconductors and the frame-independent London equation. Phys Rev Lett, 1998, 81: 3223—3226[DOI]
22 Liu M. Fluid dynamics of colloidal magnetic and electric liquid. Phys Rev Lett, 1995, 74: 4535—4538[DOI]
23 Jiang Y M, Liu M. Dynamics of dispersive and nonlinear media. Phys Rev Lett, 1996, 77: 1043—1046[DOI]
24 Jiang Y M, Liu M. Granular elasticity without the Coulomb condition. Phys Rev Lett, 2003, 91: 144301[DOI]
25 Jiang Y M, Liu M. Energetic instability Unjams sand and suspension. Phys Rev Lett, 2004, 93: 148001[DOI]
26 Braeuer K, Pfitzner M, Krimer D O, et al. Granular elasticity: Stress distributions in silos and under point loads. Phys Rev E, 2006, 74: 061311[DOI]
27 Jiang Y M, Liu M. From elasticity to hypoplasticity: Dynamics of granular solids. Phys Rev Lett, 2007, 99: 105501[DOI]
28 Goldenberg C, Atman A P F, Claudin P, et al. Scale separation in granular packings: Stress plateaus and fluctuations. Phys Rev Lett,

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552

2006, 96: 168001[DOI]
29 葛蔚, 李静海. 颗粒流体系统的宏观拟颗粒模拟. 科学通报, 2001, 46: 802—805
30 徐泳, 孙其诚, 张凌, 等. 颗粒离散元法研究进展. 力学进展, 2003, 33: 251—260
31 季顺迎, Shen H H. 颗粒介质在类固-液相变过程中的时空参数特性. 科学通报, 2006, 51: 255—262
32 Haff P K. Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon. J Fluid Mech, 1983, 134: 401—430[DOI]
33 Jiang Y M, Liu M. Granular solid hydrodynamics. Granular Matter, 2009, 11: 139—156[DOI]
34 Hou M Y, Liu R, Zhai G J, et al. Velocity distribution of vibration-driven granular gas in Knudsen regime in microgravity. Microgr Sci Tech, 2008, 20: 73—80
35 陆坤权, 刘寄星. 颗粒物质(上). 物理, 2004, 33: 629—635
36 Bocquet L, Losert W, Schalk D, et al. Granular shear flow dynamics and forces: Experiment and continuum theory. Phys Rev E, 2001, 65: 11307[DOI]
37 Jop P, Forterre Y, Pouliquen O. A constitutive law for dense granular flows. Nature, 2006, 441: 727—730[DOI]
38 郑泉水. 简单物质的本构方程从无旋形式到一般形式. 科学通报, 1990, 22: 1751—1754

A granular constitutive relation derived from hydrodynamics

JIANG YiMin[1] & LIU Mario[2]

[1] School of Physics Science and Technology, State Key Laboratory for Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China;
[2] Theoretische Physik, Universität Tübingen, Tübingen 72076, Germany

Employing the hydrodynamic approach, normal elasticity theory is generalized in a natural way to account for granular media. The result is a set of partial differential equations that can be used to calculate all relevant physical quantities, including stress, deformation, energy, energy flux and heat production. Especially, a constitutive relation appropriate for granular media and expressed in thermodynamic quantities——something of great engineering significance and not yet fully established——is deduced from the theory. This constitutive relation is complex and nonlinear, containing gradients of stress, velocity and density, even for the simplest possible input of a free energy expression and transport coefficients. This amply demonstrates the difficulties of arriving at an appropriate constitutive relation starting directly from experimental data.

constitutive relations, hydrodynamic theory, granular temperature

doi: 10.1360/972008-2552

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/972008-2552