

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2017.05.031

加热机制对粒径呈幂律分布的颗粒气体中 能量均分失效行为的影响

李睿¹, 戴伟¹, 张端明²

(1. 湖北第二师范学院物理与机电工程学院, 武汉 430205; 2. 华中科技大学物理学院, 武汉 430072)

摘要: 在粒径呈连续分布的颗粒气体系统内, 不同组分的颗粒之间的颗粒温度不相等, 即能量均分失效. 我们采用分子动力学模拟研究边界加热机制对粒径呈幂律分布的颗粒气体中能量均分失效行为的影响. 研究发现不仅仅是位于边界热源附近的颗粒, 远离边界位于系统内部的、不同组分的颗粒从边界热源获取的能量差越大, 系统的能量均分失效就越严重. 边界加热机制决定了混合颗粒系统内部的能量均分失效程度的强弱.

关键词: 粒径幂律分布; 能量均分失效; 加热机制

中图分类号: O552.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2017)05-1073-04

The effect of heating mechanism on nonequipartition behavior in granular gases with a power-law size distribution

LI Rui¹, DAI Wei¹, ZHANG Duan-Ming²

(1. Department of Physics, Hubei University of Education, Wuhan 430205, China;

2. Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: Two-dimensional molecular dynamics simulations are employed to gain insight on the effect of the different heating mechanism in determining the extent of nonequipartition of kinetic energy in granular gases with a power-law particle size distribution. It is found that the bulk value of the temperature ratio depends on the choice of different boundary heating.

Keywords: Power-law size; Nonequipartition; Heating mechanism

1 引言

颗粒物质比如碎石、沙子等广泛存在于自然界, 并在工业中有着重要的应用^[1]. 当颗粒系统的密度比较稀疏, 粒子间的相互作用类似分子气体的运动规律, 可以把这种颗粒系统看作“颗粒气体”^[2]. 颗粒气体中的粒子通过非弹性碰撞发生相互作用耗散能量, 系统要达到暂时稳定态就必须从外界获得能量. 在现实情况中, 能量是通过振动^[3,4]、剪切^[5]、施加电场力^[6]、磁场力^[7]等方式从

外加热源提供给颗粒系统的. 对两组分的混合颗粒系统的理论、模拟和实验研究揭示了颗粒系统的奇特现象之一是: 不同组分的粒子的颗粒温度是不相等的, 即在颗粒系统中能量均分失效^[3,4,8-14]. 即使是在一个示踪粒子浸入在另一个单一组分的颗粒气体系统(示踪粒子与单一组分的颗粒系统的粒子在直径和质量上都是不同的)的这种极端的情况下, 能量均分也是失效的^[15]. 颗粒系统的这种特性完全违背了平衡态热力学第零定律(处于热平衡的两物体其温度相等). 因此颗粒系统的温度完全

收稿日期: 2016-03-23

基金项目: 国家自然科学基金(11404104); 湖北省自然科学基金(2014CFC1127)

作者简介: 李睿(1978-), 女, 博士, 副教授, 从事颗粒物质动力学特性的研究. E-mail: lirui@hue.edu.cn

失去了在平衡态热力学中温度作为热平衡量度的含义,颗粒系统的颗粒温度只表示系统的平均动能,即 $T = \langle mv^2 \rangle / 2$. 在两组分振动流化态混合颗粒系统的实验^[3,8]中观测到不同组分之间的颗粒温度之比 $\gamma (\gamma \neq 1)$ 的大小(即能量均分失效的程度)由粒子的质量比决定,与粒子的非弹性无关. 实验^[3]发现:在模拟区域的边界处,两个组分的颗粒的温度比近似等于它们的质量比,而在模拟区域的内部(远离边界的区域)温度比趋于一个稳定的常数值(不等于质量比),这个常数值的大小只与颗粒的质量比有关,与颗粒的弹性恢复系数以及系统的粒子数密度无关. 然而在颗粒物质的实验中一个被经常忽视的问题是,不同组分的颗粒从外加热源所吸收的能量是不一样的. 例如在振动流化态实验^[3,8]中,振动边界被看作是无限大的,粒子从振动边界获得的是速度而不是能量,因此不同质量的颗粒从振动边界获得的能量是不同. 这个现象引出了这样一个问题:除了在模拟区域的边界,在模拟区域内部,边界热源对系统颗粒的加热机制的改变是否会改变颗粒温度比的值,从而改变系统能量均分失效程度的强弱呢?

本文采用分子动力学模拟来研究粒径呈幂律分布的颗粒气体中,边界加热机制对系统的能量均分失效程度的影响. 我们发现当采用三种不同的边界加热机制对系统颗粒加热时,不仅是位于边界热源附近的颗粒,远离边界、位于系统内部的不同组分的颗粒之间的颗粒温度比的值仍然是边界热源给系统颗粒提供的能量比的函数,不同组分的颗粒从外来热源获得的能量差越大,它们的颗粒温度比就越小(颗粒温度比为 1 表明能量均分),系统的能量均分失效的程度就越严重.

2 模型

我们采用事件驱动方法模拟 N 个质量密度相同、半径不同的光滑的非弹性颗粒在二维矩形格子(模拟区域示意图如图 1 所示)中的运动,模拟区域的尺寸为 $L \times L$,热浴墙位于模拟区域的左、右两边界处,上、下两边界采用周期性边界条件,系统不计重力影响. 当颗粒之间没有发生相互碰撞时,颗粒表现为随机行走,一旦发生碰撞(非弹性碰撞),系统耗散能量,同时系统的颗粒从边界处的外加热源获得能量. 我们采用硬质球模型来模拟颗粒间的非弹性碰撞,即碰撞是瞬时的,碰撞时动量守恒,同时只考虑两体碰撞. 当两个颗粒 i 和 j 碰撞时,它们的碰

前速度和碰前速度由下面的关系式来计算:

$$\begin{aligned} \vec{v}_{i,post} = & \\ \vec{v}_{i,pre} - (1+\eta) \frac{m_j}{m_i+m_j} [(\vec{v}_{i,pre} - \vec{v}_{j,pre}) \cdot \vec{n}] \vec{n}, & \end{aligned} \quad (1a)$$

$$\begin{aligned} \vec{v}_{j,post} = & \\ \vec{v}_{j,pre} + (1+\eta) \frac{m_i}{m_i+m_j} [(\vec{v}_{i,pre} - \vec{v}_{j,pre}) \cdot \vec{n}] \vec{n}, & \end{aligned} \quad (1b)$$

其中, η 是粒子的弹性恢复系数, \vec{v}_{pre} 是粒子的碰前速度, \vec{v}_{post} 是粒子的碰后速度, \vec{n} 是从粒子 i 的球心指向粒子 j 的球心的单位矢量.

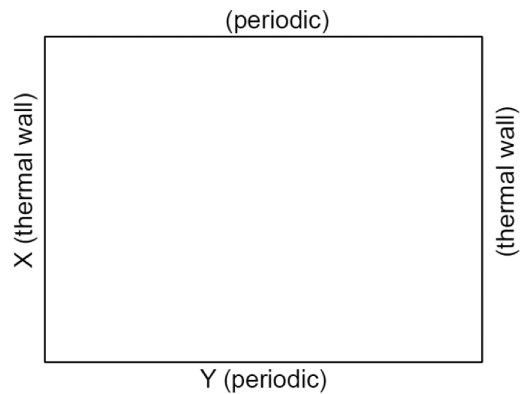


图 1 模拟区域示意图

Fig. 1 Snapshot of the simulation domain

自然界中存在的颗粒系统其粒径分布都是呈连续分布的,许多非均匀颗粒系统中颗粒的粒径分布满足幂律分布^[16],颗粒的半径满足关系式^[17]:

$$r = r_{\max} \left[\frac{N}{n_0} (1 - Y_{N_r}) \right]^{-\frac{1}{D}} \quad (2)$$

其中, Y_{N_r} 表示粒度小于 r 的颗粒数 N_r 与系统总颗粒数 N 之比, r_{\max} 为颗粒的最大特征粒径, n_0 表示粒径为 r_{\max} 的颗粒数. 由于 N_r 和 N 都很大,则 Y_{N_r} 也可表示粒度小于 r 的颗粒出现的概率, D 为描述系统中颗粒的粒径分布不均匀度的分形维数(fractal dimension of size distribution), $1 < D < 2$. 我们将系统的颗粒按照其半径大小分成组(按照半径从小到大的顺序排列),半径最小的颗粒放在第一组,半径最大的颗粒放在最后一组. 在我们的模拟中,规定系统包含 10 个不同组分的颗粒,系统的颗粒总数为 N .

位于模拟区域的边界处给系统加热的两个热浴墙视为固定不动,颗粒与热浴墙碰撞后将获得一个速度,此速度的法向分量和切向分量均满足高斯分布,且高斯分布的宽度由式子 $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = 2E_a/m_a$

来确定,其中 $\alpha(\alpha=1, 2, \dots, 10)$ 是颗粒的组分编号, E_α 是第 α 个组分的颗粒从外源获得的能量.通过改变 E_α 值可以使系统中不同组分的颗粒从外源获得不同的能量,从而来研究当外加加热源对颗粒加热的机制发生改变时,如何影响颗粒系统的能量均分失效行为.在所有的模拟中,规定颗粒系统总的面积分数(所有颗粒的总面积比上模拟区域的面积) $\phi_{total}=0.02$, $D=1.5$, $\eta=0.9$.系统达到暂态后,开始采集数据.

3 结果与讨论

图2给出了颗粒温度比 $\gamma=T_1/T_\alpha$ (第1组分的颗粒温度与第 α 组分的颗粒温度之比)在沿着模拟区域的 y 方向上的变化规律,其中 y 轴坐标进行了无量纲化.外加加热源对系统的颗粒采用了三种不同的机制来加热:① $E_\alpha/E_1=1(\alpha=2, 3, \dots, 10)$,即所有组分的颗粒从外源获得的能量均相等;② $E_\alpha/E_1=m_\alpha/m_1(\alpha=2, 3, \dots, 10)$,即不同组分的颗粒从外源获得的能量比等于它们的质量比;③ $E_\alpha/E_1=(m_\alpha/m_1)^2(\alpha=2, 3, \dots, 10)$,即不同组分的颗粒从外源获得的能量比等于它们的质量比的平方,意味着更多的能量供给了质量更大的颗粒.需要说明的是,除了第1组分与第2组分的颗粒温度比 T_1/T_2 以及第1组分与第10组分的颗粒温度比 T_1/T_{10} 外,其它不同组分之间的颗粒温度比与 T_1/T_2 、 T_1/T_{10} 有相同的演化趋势.因此为了简要的给出模拟结果,在图2中我们只画出了 $\gamma=T_1/T_2$ 和 $\gamma=T_1/T_{10}$ 的曲线.从图2可以看出,在边界处($y/L=0$ 及 $y/L=1$ 附近的区域),无论受哪种加热机制作用,不同组分间的颗粒温度比 γ 的值均由加热机制决定.离开边界,系统内部($y/L=0.5$ 附近的区域)的颗粒间的颗粒温度比 γ 逐渐趋于一个稳定的常数值:当 $E_2/E_1=1$ 时,系统内部的颗粒温度比 $\gamma=T_1/T_2\approx 0.93$;当 $E_2/E_1=m_2/m_1$ 时, $\gamma=T_1/T_2\approx 0.86$;当 $E_2/E_1=(m_2/m_1)^2$ 时, $\gamma=T_1/T_2\approx 0.82$;当 $E_{10}/E_1=1$ 时,系统内部的颗粒温度比 $\gamma=T_1/T_{10}\approx 0.91$;当 $E_{10}/E_1=m_{10}/m_1$ 时, $\gamma=T_1/T_{10}\approx 0.78$;当 $E_{10}/E_1=(m_{10}/m_1)^2$ 时, $\gamma=T_1/T_{10}\approx 0.69$.由此可见,虽然系统内部的颗粒远离边界,但其温度比 γ 依旧是 E_α/E_1 的函数.并且,不同组分的颗粒从外来热源获得的能量差越大,它们的颗粒温度比 γ 就越小($\gamma=1$ 为能量均分),说明系统的能量均分失效的程度就越严重.从而可知,颗粒温度比并不只是颗粒自身的固有特性,还与外加热源密切相关.

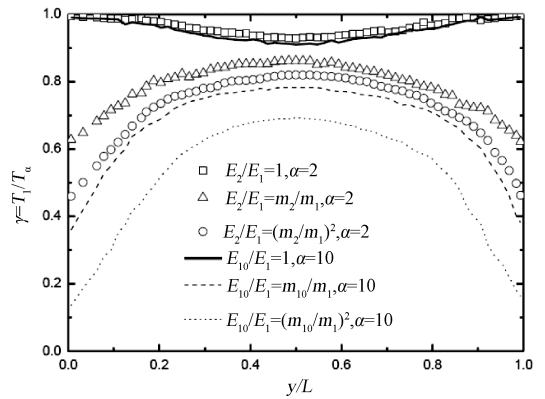


图2 沿着模拟区域 y 轴方向的颗粒温度比的曲线图
Fig. 2 Temperature ratio profile along the y direction

为了检验图2的结论没有受到有限尺寸效应的影响,我们采用 q_i 来记录颗粒 i 与边界处的热浴墙发生碰撞后,到下一次与边界的热浴墙碰撞之前与系统中其它颗粒发生碰撞的次数.颗粒 i 与其它粒子发生一次碰撞, q_i 的值就加1,当粒子 i 再次与边界相碰,则 q_i 的值归零,系统总的碰撞数 $q = \sum_{i=1}^N q_i$.用 d 来记录一个颗粒与任一热浴墙碰撞后到再一次与任一热浴墙碰撞前在 y 轴方向的位移.图3给出了 d/L 的概率密度函数 $P(d/L)$ 的图像, d 除以 L 进行了无量纲化.从图3可以看出,碰撞数 q 值较小时, $P(d/L)$ 曲线陡峭,曲线峰值位于 d/L 值很小的区域,表明此时颗粒主要分布在热浴墙附近区域;当碰撞数 q 值逐渐增大时, $P(d/L)$ 的曲线逐渐变宽并变得平坦,曲线的峰值逐渐向 d/L 值增大的方向移动,该峰值最终位于 $0.5d/L$ 处.这种变化趋势表明颗粒经历的碰撞越多,则越趋向集中在系统的中间区域,即经过多次碰撞,系统的颗粒主要集中于系统的中部.

图4给出了颗粒温度比 γ 随 q 的变化关系.从图4可以看出,从初始状态开始,经过大约15次碰撞(即 $q=15$)后,系统的颗粒温度比 γ 趋于一个稳定的渐进值.且在 q 值较大的区域, γ 的渐进值依旧是 E_α/E_1 的函数,即当 $E_2/E_1=1$ 时, $\gamma=T_1/T_2\approx 0.92$;当 $E_2/E_1=m_2/m_1$ 时, $\gamma=T_1/T_2\approx 0.86$;当 $E_2/E_1=(m_2/m_1)^2$ 时, $\gamma=T_1/T_2\approx 0.82$;当 $E_{10}/E_1=1$ 时,系统内部的颗粒温度比 $\gamma=T_1/T_{10}\approx 0.91$;当 $E_{10}/E_1=m_{10}/m_1$ 时, $\gamma=T_1/T_{10}\approx 0.79$;当 $E_{10}/E_1=(m_{10}/m_1)^2$ 时, $\gamma=T_1/T_{10}\approx 0.7$.再次说明加热机制对位于系统内部的颗粒之间的碰撞的影响是不可抹杀的,边界热源对不同组分的颗粒提供的能量的差越大,则颗粒系统的能量均分失效就越严重.

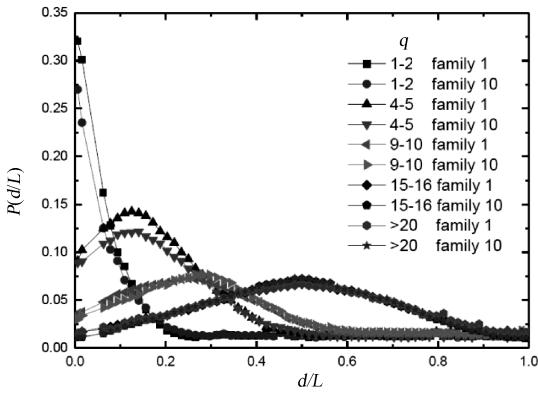


图 3 颗粒与任一热浴墙碰撞后到再一次与任一热浴墙碰撞前在 y 轴方向的位移 d/L 的分布函数图像
Fig. 3 The distribution of the distance from the last heating boundary d/L for different ranges of q .

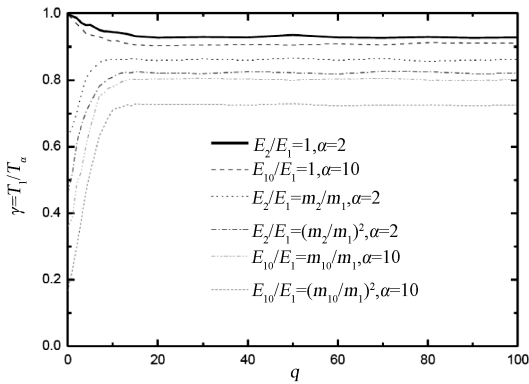


图 4 在三种加热机制下,颗粒温度比 γ 随 q 变化的关系图
Fig. 4 The temperature ratio γ as a function of collision number q .

4 结 论

本文采用分子动力学模拟研究了在 $E_a/E_1 = 1$ 、 $E_a/E_1 = m_a/m_1$ 和 $E_a/E_1 = (m_a/m_1)^2$ 这三种边界加热机制作用下粒呈幂律分布的颗粒气体中的能量均分失效行为. 我们的研究表明位于系统内部的不同组分之间的颗粒温度比 γ 是加热机制 E_a/E_1 的函数, 不同组分的颗粒从外来热源获得的能量差越大, 系统的能量均分失效的程度就越严重, 颗粒温度比并不只是颗粒自身的固有特性, 还与外加热源密切相关. 颗粒系统的理论研究多采用均匀加热机制, 实验研究则多采用边界加热机制. 本文模拟结果说明了, 今后在将理论研究和实验研究的结果的作对比时, 应该充分考虑边界加热机制本身对研究结果的影响. 同时, 边界加热机制是否对混合颗粒系统的其它特性行为, 比如颗粒分离行为存在影响, 值得我们进一步探究.

参考文献:

- [1] Hinrichsen H, Wolf D E. The physics of granular media [M]. Berlin: Wiley, 2004.
- [2] Brilliantov N V, Pöschel T. Kinetic theory of granular gases [M]. Oxford: Oxford university press, 2004.
- [3] Feitosa K, Menon N. Breakdown of energy equipartition in a 2D binary vibrated granular gas [J]. Phys Rev Lett, 2002, 88: 198301.
- [4] Windows-Yule C R K, Rivas N, Parker D J. Thermal convection and temperature inhomogeneity in a vibrofluidized granular bed: the influence of sidewall dissipation [J]. Phys Rev Lett, 2013, 111: 038001.
- [5] Ren J, Dijkstra J A, Behringer R P. Reynolds pressure and relaxation in a sheared granular system [J]. Phys Rev Lett, 2013, 110: 018302.
- [6] Aranson I S, Olafsen J S. Velocity fluctuations in electrostatically driven granular media [J]. Phys Rev E, 2002, 66: 061302.
- [7] Falcon E, Bacri J C, Laroche C. Equation of state of a granular gas homogeneously driven by particle rotations [J]. Europhys Lett, 2013, 103: 64004.
- [8] Wildman R D, Parker D J. Coexistence of two granular temperatures in binary vibrofluidized beds [J]. Phys Rev Lett, 2002, 88: 064301.
- [9] Wang H Q, Jin G J, Ma Y Q. Simulation study on kinetic temperatures of vibrated binary granular mixtures [J]. Phys Rev E, 2003, 68: 031301.
- [10] Wang H Q, Menon N. Heating mechanism affects equipartition in a binary granular system [J]. Phys Rev Lett, 2008, 100: 158001.
- [11] Brey J J, Ruiz-Montero M J. Velocity fluctuations of a piston confining a vibrated granular gas [J]. J Stat Mech, 2008, 2008: L09002.
- [12] Brey J J, Ruiz-Montero M J. Cooling rates and energy partition in inhomogeneous fluidized granular mixtures [J]. Phys Rev E, 2011, 84: 031302.
- [13] Chen Y P, Evesque P, Hou M Y. Breakdown of energy equipartition in vibro-fluidized granular media in micro-gravity [J]. Chin Phys Lett, 2012, 29: 074501.
- [14] Li R, Xiao M, Li Z H, et al. Temperature properties in polydisperse granular mixtures [J]. Commun Theor Phys, 2013, 59: 229.
- [15] Brey J J, Ruiz-Montero M J, Moreno F. Energy partition and segregation for an intruder in a vibrated granular system under gravity [J]. Phys Rev Lett, 2005, 95: 098001.
- [16] Allen T. Particle Size Measurement [M]. New York: Chapman and Hall Ltd, 1981.
- [17] Li R, Zhang D M, Li Z H. Velocity distributions in inelastic granular gases with continuous size distributions [J]. Chin Phys Lett, 2011, 28: 090506.