回转筒颗粒表面流的分子动力学模拟和连续理论

李水清 姚 强 陈 冰 张 宣 Ding Y. D.^②

(清华大学热能工程系, 北京 100084; 利兹大学化学工程系, 利兹 LS2 9JT, 英国. E-mail: lishuiqing@mail.tsinghua.edu.cn)

摘要 在考虑颗粒非弹性接触、滑动摩擦和滚动摩擦基础上发展了分子动力学模拟的算法, 实现了中高速($Fr = 0.1 \sim 0.2$)回转筒内颗粒流的离散模拟. 回转筒内颗粒流由表面活性层和下部柱塞流区组成, 颗粒在活性层的停留时间约为柱塞流区的 $1/3 \sim 1/2$, 对称线上活性层和柱塞流区的厚度比为 $0.57 \sim 0.61$, 因而推断颗粒流动处于 Rolling-Cascading 过渡模式. 对称线上 MD 模拟的速度分布与正电子放射性测量实验结果十分吻合. 在模拟和实验结果基础上发展了连续理论: 柱塞流区内颗粒运动并非完全随着筒壁刚体转动, 而是存在着塑性蠕变, 这种速度变化过程符合指数函数规律; 而活性层内颗粒流动则符合简单的 Couette 切变流动分布. 最后探讨了颗粒温度和颗粒相对浓度分布的内在机理.

关键词 颗粒流 回转筒 分子动力学模拟 连续理论

颗粒体(granular material)是一些离散的固相颗粒形成的聚集体, 在没有外界扰动下是静止的, 当受到外界剪切、振动、转动或流体扰动的作用下, 颗粒体逐渐呈现出类似液体行为, 甚至在料层表面形成连续的颗粒流动^[1,2]. 这种颗粒流与传统气体或液体为代表的分子流最大区别在于: () 分子运动的状态取决于热力学温度, 而宏观的颗粒在重力作用下几乎没有热能效应, 其状态决定于外加力的作用或能量, 为统一表示不同形式力的作用, 可引入颗粒温度(即颗粒脉动速度均方差)的概念来表征颗粒的状态; () 与分子之间的弹性碰撞不同, 颗粒之间非弹性接触使得颗粒体是一个强耗散性系统, 为维持颗粒温度不变, 必须有外加能量不断地输入到系统, 回转筒和振动床就是两种最具代表性的实例; () 对于分子流, 任何一个微元控制容积体内都有足够数量的分子来满足连续介质假设, 而且其压力和温度参数的平均值足够精确, 然而对于颗粒流, 其微元控制容积体的尺度可能和颗粒尺度在一个数量级上, 因而直接采用连续介质理论开展研究的难度较大^[3].

20 世纪 90 年代以来颗粒流研究已逐渐成为国际上工程和物理科学研究的热点之一, 相关研究主要集中在 3 个方面: () 没有外力、只有重力作用的体系, 如倾斜平面、竖直槽道和自然堆积斜面上的颗粒流动, 相应的连续性动力学理论(kinetic theory)和离散分子动力学模拟(molecular dynamics, MD)的研究都得以迅速发展^[4,5]; () 边界周期性运动和重力共同作用的振动料床, 过去 10 年加州理工学院 Hunt 研究小组^[6]也使得其理论体系相对成熟, () 壁面转动

和重力共同作用的回转料床, 如工程中普遍存在的混合器、造粒机和回转窑等^[7], 尽管其应用背景尤为重要而日益受到重视, 但其相应基础研究仍在发展和完善之中^[8,9].

分子动力学模拟(MD)是非连续体所适用的数值方法, MD以颗粒体的接触力学理论为基础, 结合牛顿第二定律及显性时间积分法来描述每一个颗粒在单个时间步长的运动行为^[10,11]. 本文从分子动力学模拟思路出发, 在软球模型基础上首次补充了转动惯量方程的滚动摩擦一阶修正项, 从而实现回转筒内颗粒表面流的模拟, 模拟的速度场与文献中实验结果相吻合, 最后发展了描述颗粒速度分布的连续理论并和MD结果进行了比较.

1 分子动力学模拟方法

1.1 牛顿定律方程式

回转筒内任一颗粒的运动分为平动和转动, 采用牛顿第二定律分别表示为

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j (F_{ij}^n + F_{ij}^s + m_i g), \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\bar{\omega}_i}{dt} = \sum_j (r_i \times F_{ij}^s - M_{ij}), \quad (2)$$

式中 x_i , v_i , $\bar{\omega}_i$ 和 I_i 分别是颗粒的位移、平动速度、转动角速度和转动惯量. F_{ij}^n 和 F_{ij}^s 分别是颗粒 i 和 j 之间的法向和切向作用力(如图 1).

1.2 颗粒间接触力模型

如图 1, 颗粒间法向接触力(F_{ij}^n)包含弹性力及耗

图1 两个颗粒接触的示意图
(a) 参数变量; (b) 法向和切向接触力

散力两项. 与传统MD方法将分子视为弹性碰撞不同, 本文将颗粒间碰撞视为存在摩擦力的非弹性碰撞, 即软球模型. 根据Hook定律, F_{ij}^n 中弹性力与两个颗粒*i*和*j*之间重叠量(overlap)成线性关系^[12], 而耗散力可假定与颗粒相对速度成线性关系, 则 F_{ij}^n 可表示为

$$F_{ij}^n = \tilde{Y}_{\text{eff}}(r_i + r_j - |x_{ij}|)n_{ij} - \gamma_n m_{\text{eff}}(v_{ij} \cdot n_{ij})n_{ij}, \quad (3)$$

其中 $\tilde{Y}$ 是颗粒杨氏弹性模量, γ_n 是法向动耗散系数; r_{eff} 是颗粒有效半径, 且满足 $r_{\text{eff}} = r_i r_j / (r_i + r_j)$, m_{eff} 是有效质量且满足 $m_{\text{eff}} = m_i m_j / (m_i + m_j)$; $x_{ij} = x_i - x_j$ 是颗粒之间距离; n_{ij} 是由颗粒*j*指向颗粒*i*的单位矢量, 即 $n_{ij} = x_{ij} / |x_{ij}|$. 颗粒相对速度 v_{ij} 可表示为

$$v_{ij} = v_i - v_j - (r_i \omega_i + r_j \omega_j) \times n_{ij}. \quad (4)$$

颗粒切向接触力可假设只包含弹性力一项^[2,13,14], 但弹性力大小不会超过最大静摩擦力, 如果弹性力超过最大静摩擦力, 则发生滑动摩擦, 根据理解库仑屈服定律, 以摩擦力 $\mu_s |F_{ij}^n|$ 代替弹性力, 但方向仍维持原弹性力的方向, 如下式所示:

$$F_{ij}^s = -\text{sgn}(\delta_s) \min(k_s |\delta_s|, \mu_s |F_{ij}^n|), \quad (5)$$

其中 k_s 为切向力弹性常数, 和法向力弹性常数满足关系 $k_s = (0.67-1.0)k_n = (0.67-1.0)\tilde{Y}_{\text{eff}}$ ^[14]; μ_s 为滑动摩擦系数; δ_s 为颗粒*i*和*j*从初始接触时刻开始的切向位移, 表示为

$$\delta_s = -\int v_{ij}^s dt = -\int v_{ij} \cdot s_{ij} dt, \quad (6)$$

式中 s_{ij} 是颗粒*i*和*j*接触时的单位切向矢量.

1.3 滚动摩擦阻力矩的修正项

颗粒之间滚压接触过程中还会产生不同形式的能量消耗, 称之为滚动摩擦, 黏弹性颗粒的滚动摩擦主要取决于颗粒堆积的变形损失, 而非颗粒表面效应^[15]. 因此, 我们假设滚动摩擦大小仅与颗粒堆积所呈现的黏性耗散有关(图 2(b)), 即颗粒表面效应导致的损失忽略不计. 根据图 2(a)所示, 滚动摩擦阻力矩可以表示为

$$M_{ij} = -\int_{S_a} (r - r_O) \times F_n ds, \quad (7)$$

式中 S_a 为接触平面上圆形轮廓线, 且 $r_O = (0, y_0, 0)$. Brilliantov和Pöschel积分上述方程有^[14]

$$M_{ij} = -\mu_r (r_i \omega_i) |F_{ij}^n|. \quad (8)$$

为正确求解方程(2), 假设滚动摩擦只从数值上减少转动力矩, 而不改变方向, 则其限制为

$$|M_i| = \left| \sum_j M_{ij} \right| \leq I_i \omega_i / \Delta t. \quad (9)$$

图2 黏弹性球状颗粒在硬面上的滚压摩擦示意图
(a) 滚动阻力矩; (b) 能量耗散

1.4 具体计算算法

颗粒间作用力计算的实现 联立方程(1), (2)与(3), (5), (9)可以求得任意时刻颗粒的位置乃至速度场. 如果所有颗粒对之间作用力都统计, 即采用全颗粒对计录法(all-pairs method)时, 颗粒数 N_m 的计算总步数是 $O(N_m^2)$. 为降到 $O(N_m)$ 量级, 本文采用邻居列表法(neighbor-list method). 该方法思想为: 任意时刻某一颗粒速度是有限的, 所以 Δt 内颗粒运动轨迹所覆盖范围是一个以其为球心的球体(假设颗粒速度方向任意). 换言之, 在下一个 Δt 时刻, 该颗粒只能与在这个球体范围内的颗粒发生碰撞. 首先将整个计算空间划分为二维空间许多相邻的小室, 每个颗粒散布在各个小室内. 这样计算颗粒间相互作用力时仅考虑该颗粒所处小室内其他颗粒以及相邻小室内的颗粒与该颗粒的作用力, 大大缩减计算量. 当颗粒跨越小室边界时, 则要更新该邻居列表 [10].

积分过程计算的实现 微分方程(1)和(2)的积分可通过预估-校正法(predictor-corrector method)实现. 对于预估阶段满足

$$v_i(t + \Delta t/2) = v_i(t) + (\Delta t/2) \cdot a_i(t), \quad (10)$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \Delta t \cdot v_i(t + \Delta t/2), \quad (11)$$

同时校正阶段则有

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t + \Delta t/2) + (\Delta t/2) \cdot a_i(t + \Delta t). \quad (12)$$

1.5 模型参数的选择

假设两个颗粒 i 和 j 发生碰撞简单系统, 则根据(1)式, 两个颗粒之间位移差表示为

$$d^2(x_i - x_j)/dt^2 = F_{ij}^n / m_{\text{eff}}. \quad (13)$$

$\delta = (r_i + r_j - (x_i - x_j))$ 是两个颗粒之间重叠量, 代入 Hook 定律则颗粒碰撞非线性方程为

$$\frac{d^2\delta}{dt^2} + \gamma_n \frac{d\delta}{dt} + \frac{\tilde{Y}r_{\text{eff}}}{m_{\text{eff}}} \delta = 0 \quad (\delta > 0). \quad (14)$$

方程(13)和(14)为标准线性阻尼作用的一维简谐振动方程. 边界条件为 $t=0$, $\delta=0$, $d\delta/dt=v_0$. 假设即弱阻尼情况下, 设定 $\beta=\gamma_n/2$, $\bar{\omega}_0^2=\tilde{Y}r_{\text{eff}}/m_{\text{eff}}$ 和 $\bar{\omega}_n^2=\bar{\omega}_0^2-(\gamma_n/2)^2$, 方程分析解为

$$\delta(t) = \frac{v_0}{w_n} e^{-\beta t} \sin(w_n t) = \frac{v_0}{w_n} e^{-\gamma_n t/2} \sin(w_n t),$$

$$a(t) = \frac{d^2\delta(t)}{dt^2} = \frac{v_0}{w_n} e^{-\gamma_n t/2} [-\gamma_n/2 \sin(w_n t) + w_n \cos(w_n t)]. \quad (15)$$

此外, 表征非弹性碰撞程度的恢复系数定义为

$$e = \exp(-\gamma_n \pi / \bar{\omega}_n).$$

图 3 和 4 是两个球发生水平对心碰撞时两颗粒之间重叠量和加速度随碰撞时间的变化($d_p=3.0$ mm, $v_0=0.2$ m/s). 首先对于弹性系数 $k_n=\tilde{Y}r_{\text{eff}}$ 的选取, Weber [16] 对其做了简要的综述, 近 10 位学者选用 800 kg/s^2 这个值附近, 且认为该量纲内 k_n 值对计算结果影响不大, 因此本文选取杨氏弹性模量 $\tilde{Y}=5 \times 10^5 \text{ kg/(m}\cdot\text{s}^2)$, 相应弹性系数为 750 kg/s^2 . 这不仅与 Weber 推荐的范围吻合, 也与 Peters 在其综述中推荐 $\tilde{Y}=5 \times 10^5 \text{ kg/(m}\cdot\text{s}^2)$ 相符合 [13].

图 3 两球对心碰撞重叠量随碰撞时间的变化

图 4 两球对心碰撞法向加速度随碰撞时间的变化

相对于弹性系数 k_n , 对耗散系数的选取已有研究尚未形成共识. 本文基于 m_{eff} 导出了无量纲耗散系数 γ_n (如图 3), 发现当 γ_n 从 0 增加到 800 s^{-1} 时, 碰撞恢复系数从 1 减小到 0.824, 最大重叠量 δ_{max} 差别也仅有 10%. 但是当 γ_n 增加到 4000 s^{-1} 时, 恢复系数骤减到 0.363, 此时 δ 随时间变化曲线的形状和大小都与 $e > 0.824$ 的 4 个工况有根本不同. 同样地由图 4, γ_n

在 $0\sim800\text{ s}^{-1}$ ($e>0.824$) 的 4 个工况下颗粒法向加速度随时间变化曲线的形状和大小相当接近, 各工况差别小于 15%, 而 $\gamma_n=4000\text{ s}^{-1}$ 工况则差别十分大. 特别注意当 γ_n 较大(e 较小)时, 初始接触时作用力偏离零点与物理实际不符, 说明本文线性碰撞仅适用于恢复系数较大的物料. 而本文采用玻璃球碰撞后恢复特性较好, 因此选取 $\gamma_n=400\text{ s}^{-1}$, $e=0.908$ 是合理的 [17].

2 结果与讨论

正电子放射性测量技术(PEPT)是Birmingham大学开发的颗粒流场无扰测量手段, Parker 等人 [18]和Ding等人 [19]先后采用该技术首次实现了回转筒内颗粒流场的测量. 本文研究的模拟工况取自Parker等人的实验工况, 已有结论认为回转筒内颗粒轴向混合远小于径向混合, 为节省时间本文采用基于拟三维床思想的二维模拟 [20], 即筒体长度等于一个颗粒直径长, 颗粒转动惯量计算采用圆球而非圆盘的公式, 即 $2/5mr_p^2$, 详细参数列于表 1.

2.1 MD 模拟结果分析

图 5 所示是 42 r/min 转速时不同时间下MD模拟的颗粒流动情况. 根据单颗粒示踪可把颗粒流动模式分为两个区域: 上部表面区内, 颗粒沿倾斜表面做滚落运动, 速度略快, 停留时间约 $0.3\sim0.4\text{ s}$, 因而称之为活性层(active layer); 下部区域中, 颗粒随着筒壁转动做回转运动, 停留时间大约 0.8 s , 该区被其他学者称之为柱塞流区(plug-flow region) [7,19,21,22]. 一般地, 随着Froude数($Fr=\omega^2R/g$)提高, 回转筒内颗粒流将经历滑移(slipping), 塌落(slumping), 滚动(rolling), 泻落(cascading), 抛落(catarecting)和离心运动等模式, 其中Rolling和Cascading模式的特征都是由活性层和柱塞流区组成, 细微不同在于Cascading模式下料床表面的线性度没有Rolling模式好 [23]. 图 5 工况中 Fr 数是 0.098 , 据文献 [22,23]中 Fr 准则判据, 可视为Rolling-Cascading过渡区, MD模拟结果表明在部分时刻料床从线形变为明显的拱形, 符合过渡模式的特征, 也与Orpe和Kharkar [24]的实验结果相符

表 1 模拟参数工况汇总表

筒体半径 R	筒体长度 L	颗粒填充率	颗粒表面到圆心距离 h_0	颗粒直径 d_p	颗粒密度 ρ
50 mm	3 mm	36%	11 mm	3 mm	2600 kg/m ³
杨氏弹性模量 $\tilde{Y}$	法向弹性系数 k_n	切向弹性系数 k_s	颗粒间滑动摩擦系数 μ_p	壁面滑动摩擦系数 μ_w	壁面滚动摩擦系数 μ_{rp}
$5\times10^5\text{ kg/(m}\cdot\text{s}^2)$	750 kg/s^2	$1.0 k_n$	0.4	0.4	0.3

图 5 回转筒内颗粒流场的 MD 模拟结果($n=42\text{ r/min}$, $d_p=3\text{ mm}$, $D=100\text{ mm}$)

合. Yang等人^[25]针对该工况模拟研究却得出该区仍处于纯Rolling模式的结论,但纯Rolling模式 Fr 数上限是 0.02,远小于 0.098. 而且, Boateng^[22]得出 $5 \times 10^{-4} < Fr < 1.2 \times 10^{-3}$ 的Rolling模式下,活性层厚度仅是柱塞流区 20%,因而活性层停留时间相对于柱塞流区停留时间可以忽略, Li等人^[7]在这个 Fr 范围内也证实了该结论. 这与本文研究所得的两个区停留时间仅相差 2~3 倍不同,因此可间接地得出图 5 中颗粒流模式应是Rolling-Cascading过渡区.

2.2 MD 模拟值和实验值的比较

MD 微观模型适用性的验证依赖于从模拟结果中抽取出具有代表性的宏观特征. Ding等人^[19]、Kharkar等人^[21]和Boateng^[22]发展了回转筒内颗粒流的连续理论(continuum model),指出中线速度分布假设是质量和动量守恒方程求解的前提. 图 6 所示是筒内颗粒流区划分和对称线速度分布,而对称线速度分布即可视为验证各理论的宏观特征.

图 7 和 8 示出两种转速下对称线上颗粒周向速度的 PEPT 实验值和 MD 模拟均值的比较. 柱塞流区二者吻合较好,在上部活性层二者也基本吻合,但在接近料床表面处二者存在一定差别. 42 r/min 工况表面处 MD 模拟值比实验值大 27.4%, 65 r/min 时则大 27.5%. 究其原因在于实验结果来自 Parker 等人^[18]的

图 6 回转筒流区划分和速度分布

三维测量,而模拟结果是单层颗粒的拟三维模拟,下部区域由于颗粒主要发生的是随着筒体的转动,颗粒间紧密接触使得轴向扩散几乎不会发生,因此该区吻合较好;但在表面颗粒之间接触较少,会发生自由滚落运动,多层三维床颗粒碰到其他粒子的概率高于单层二维床,从而会降低滚落速度,因此 MD 模拟值要略大于实验值. Maneval 等人^[26]采用磁共振成像技术测量发现二维床和三维床对称线上速度分布几乎一致,仅在料床表面存在着 30%~40% 的差别,这也部分说明了图 7 和 8 中 MD 模拟的合理性.

图 7 和 8 中 MD 的成功模拟与滚动摩擦阻力矩修

图 7 对称线速度分布实验值、MD 模拟值和简化分析值的比较(42 r/min)

图8 对称线速度分布实验值、MD模拟值和简化分析值的比较(65 r/min)

正至为关键,若无该项修正,颗粒转动角速度随时间逐渐累积,运行时间超过一定值之后稳态颗粒流将无法继续维持.过去10年关于回转筒颗粒流MD模拟不少^[13,25,27],但能对中线速度进行验证的却不多,除本文滚动摩擦采用 $\bar{\omega}_i$ 一阶修正外,Yang等人^[25]零阶修正亦可参考,但真正物理机制仍有待研究.

2.3 对称线上速度分布的连续理论分析

图7和8表明,MD数值实验可以提供准确的颗粒流场信息,回转筒反应器的设计还将依赖于从这些信息中归纳的宏观连续理论.如图5和6所示,对于下部柱塞流区内流动分布,Ding等人^[19]、Kharkar等人^[21]和Maneval等人^[26]在发展连续理论时都采用 $V_2(r) = rw$ 的假设,尽管这些学者都意识到柱塞流区内不同径向位置颗粒周向速度存在着塑性蠕变所造成的相对滑移,即 rw 这种刚性分布曲线并不能准确描述实际速度分布,但他们并未总结出更合理的表达式.我们经过长期MD模拟结果和实验观察,认为柱塞流区内颗粒周向速度的径向变化符合指数衰减规律:

$$V_2(r) = c_0 rw [1 - \exp(-m_0 \frac{r-r_0}{R-r_0})] \quad r_0 < r < R, \quad (16)$$

其中 c_0 表示筒壁和第一层颗粒速度间滑移比, m_0 表

征塑性蠕变而造成的颗粒层刚性转动衰减度.而对于活性层的颗粒流动符合快速切变流动,可采用简单的Couette流动分布描述:

$$V_1(r) = -2\bar{u}_0 \left(1 - \frac{r-h_0}{r_0-h_0} \right) \quad h_0 < r < r_0, \quad (17)$$

c_0 和 m_0 值可由MD模拟或实验结果根据(16)式拟合得到,则 $V_2(r)$ 速度分布已知后,(17)式中活性层平均速度 $\bar{u}_0$ 可由对称线上质量守恒式(18)计算, $\bar{u}_0$ 求解后则 $V_1(r)$ 也可得:

$$\int_{h_0}^{r_0} V_1(r) dr = \bar{u}_0 (r_0 - h_0) = - \int_{r_0}^R V_2(r) dr. \quad (18)$$

由图7和8,两种转速下(17)和(18)式理论分析都可准确地反映对称线上速度分布.42 r/min时筒壁处速度滑移比 c_0 约为0.8,而65 r/min时为0.6,Maneval等人^[26]和Ding等人^[19]的结果显示,在 Fr 较小的Rolling模式下 c_0 接近1.0,因此可以得出中高转速下回转筒壁和颗粒层将发生明显的速度滑移.如图7下部柱塞区颗粒速度并非符合 rw 或 c_0rw ,即保持其刚性,而是一个典型的蠕变流动,其中42 r/min工况下 $m_0 = 2.48$,而65 r/min时 $m_0 = 2.57$,拟合相关性超过95%.(16)~(18)式计算的速度分布完全符合MD模拟值和PEPT实验值,这是已有理论分析未能实现的.随着今后数值或实物实验进一步开展,(16)~(18)式有

望对已发表连续理论进行修订 [19,21,22].

2.4 颗粒温度和颗粒相对浓度分布特性

MD 模拟可提供以往实物实验所无法提供的信息,如颗粒温度的分布.颗粒温度反映的是颗粒速度脉动的强弱,具体表示为 $\bar{\theta} = [\sum_n (v_i - \bar{v})^2 / 3] / n$. 图 9 即为颗粒温度分布图,上部活性层内颗粒温度要远高于下部柱塞流区,此外颗粒温度分布沿着对称线并不对称,也就是沿倾斜床面滚落到最底部处的颗粒碰撞尤为剧烈,因此其颗粒温度更大,该规律已有文献报道,而且与我们后续实验的发现十分吻合,将另文讨论.图 10 是二维床颗粒相对浓度的分布(最大浓度值设为 1),我们可以推断出颗粒在下部区域运动更像一个随筒体转动的流束,尽管不同径向位置流束角速度有衰减,但各个流束可假设为柱塞流.下部区域中颗粒浓度接近 1.0 的区域反映的是二维床中颗粒球填充的部分,而颗粒浓度比较低以至低于 0.1 的区域应该指的是颗粒填充后空隙.这种颗粒流动轨迹仅能在二维床 MD 模拟中可以看到,三维床中轴向平均的统计将会掩盖这一重要现象.

图 9 回转筒内颗粒温度的等势图(42 r/min)

3 结论

颗粒模拟和传统分子模拟的不同在于颗粒之间存在着非弹性接触,及符合库仑屈服定律的滑动摩擦和滚动摩擦,本文综合这些因素拓展了分子动力学算法,成功实现了中高速($Fr = 0.1 \sim 0.2$)回转筒内颗粒流的模拟.结果表明,筒内颗粒流由表面自由滚落的活性层和下部柱塞流区组成,颗粒在活性层的停留时间约为柱塞流区的 $1/3 \sim 1/2$,对称线上活性层和柱塞流区的厚度比为 $0.57 \sim 0.61$,因而推断筒内颗粒

图 10 回转筒内颗粒相对浓度的等势图(42 r/min)

流动并非处于传统 Rolling 模式,而应处于 Rolling-Cascading 过渡区.对称线上 MD 模拟的速度分布和文献中正电子放射性测量实验结果相当吻合.模拟和实验结果都揭示了柱塞流区内颗粒运动并非完全随筒壁做刚体转动,而是不同径向位置颗粒层之间存在着塑性蠕变,这种速度渐变过程符合指数函数规律;而活性层内颗粒流动则视为简单的 Couette 切变流分布.该模式下颗粒温度分布沿着对称线并不对称,亦即颗粒沿倾斜床面滚落到最底部处的颗粒碰撞尤为剧烈.

致谢 感谢在 Leeds 大学访问时与 Xu B H 博士之间有益的讨论,感谢课题研究过程中南威尔士大学 Feng Y Q 博士所给予支持和帮助.本工作受国家自然科学基金(批准号:50306012)和国家重点基础研究发展计划(编号:2002CB211600)资助.

参 考 文 献

- 1 Jaeger H M, Nagel S R, Behringer R P. Physics of the granular state. Science, 1992, 255: 1523—1531 [DOI]
- 2 Duran J, Reisinger A, Sands, et al. An Introduction to the Physics of Granular Materials. New York: Springer-Verlag, 2000
- 3 Hostler S R. Wave propagation in granular materials. Dissertation for the Doctoral Degree. California Institute of Technology at Blvd Pasadena, 2005, 1—15
- 4 Zhou Y C, Xu B H, Yu A B. Numerical investigation of the angle of repose of monosized spheres. Phys Rev E, 2001, 64: 021301 [DOI]
- 5 Johnson P C, Nott P, Jackson R. Frictional-collisional equations of motion for particulate flows and their application to chutes. J Fluid Mech, 1990, 210: 501—535 [DOI]
- 6 Hunt M L, Weathers R C, Lee A T, et al. Effects of horizontal vi-

- bration on hopper flows of granular materials. *Phys Fluids*, 1999, 11: 68—75[DOI]
- 7 Li S Q, Yan J H, Li R D, et al. Axial transport and residence time of MSW in rotary kilns: Part I. Experimental. *Powder Tech*, 2002, 126: 217—227[DOI]
- 8 Metcalfe G, Shinbrot T, McCarthy J J, et al. Avalanche mixing of granular solids. *Nature*, 1995, 374: 39—41[DOI]
- 9 Shinbrot T, Alexander A, Muzzio F J. Spontaneous chaotic granular mixing. *Nature*, 1997, 397: 675—678
- 10 Rapaport D C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. 2nd ed. London: Cambridge University Press, 2004
- 11 葛蔚, 麻景森, 张家元, 等. 复杂流动多尺度的粒子方法. *科学通报*, 2005, 50(9): 841—853
- 12 Dury C M, Ristow G H. Competition of mixing and segregation in rotating cylinders. *Phys Fluids*, 1999, 11: 1387—1394[DOI]
- 13 Dziugys A, Peters B. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers. *Granular Matter*, 2001, 3: 231—265[DOI]
- 14 Brilliantov N V, Pöschel T. Rolling friction of a viscous on a hard plane. *Europhys Lett*, 1998, 42: 511—516[DOI]
- 15 Goldenberg C, Goldhirsch I. Friction enhances elasticity in granular solids. *Nature*, 2005, 435: 188—191[DOI]
- 16 Weber M W. Simulation of cohesive particle flows in granular and gas-solid system. Dissertation for the Doctoral Degree. University of Colorado at Boulder, 2004, 73—108
- 17 Stevens A B, Hrenya C M. Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts. *Powder Tech*, 2005, 154: 99—109[DOI]
- 18 Parker D J, Dijkstra A E, Martin T W, et al. Positron emission particle tracking studies of spherical particle motion in rotating drums. *Chem Eng Sci*, 1997, 52: 2011—2022[DOI]
- 19 Ding Y L, Seville J P K, Forster R, et al. Solid motion in rolling mode rotating drums operated at low to medium rotational speeds. *Chem Eng Sci*, 2001, 56: 1769—1780[DOI]
- 20 Xu B H, Yu A B. Numerical simulation of gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chem Eng Sci*, 1997, 52: 2785—2809[DOI]
- 21 Khakhar D V, McCarthy J J, Shinbrot T, et al. Transverse flow and mixing of granular materials in a rotating cylinder. *Phys Fluids*, 1997, 9: 31—43[DOI]
- 22 Boateng A A. Boundary layer modeling of granular flow in the transverse plane of a partially filled rotating cylinder. *Int J Multiph Flow*, 1998, 24: 499—521[DOI]
- 23 Mellmann J. The transverse motion of solids in rotating cylinders—forms of motion and transition behavior. *Powder Tech*, 2001, 118: 251—270[DOI]
- 24 Orpe A, Kharkar D V. Scaling relations for granular flow in quasi-two-dimensional rotating cylinders. *Phys Rev E*, 2001, 64, 031302[DOI]
- 25 Yang R Y, Zou R P, Yu A B. Microdynamics analysis of particle flow in a horizontal rotating drum. *Powder Tech*, 2003, 130: 138—146[DOI]
- 26 Maneval J E, Hill K M, Smith B E, et al. Effects of end wall friction in rotating cylinder granular flow experiments. *Granul Matt*, 2005, 7: 199—202[DOI]
- 27 Wightman C, Moakher M, Muzzio F J, et al. Simulation of flow and mixing of particles in a rotating and rocking cylinder. *AIChE*, 1998, 44: 1266—1276[DOI]

(2006-01-22 收稿, 2006-08-22 接受)