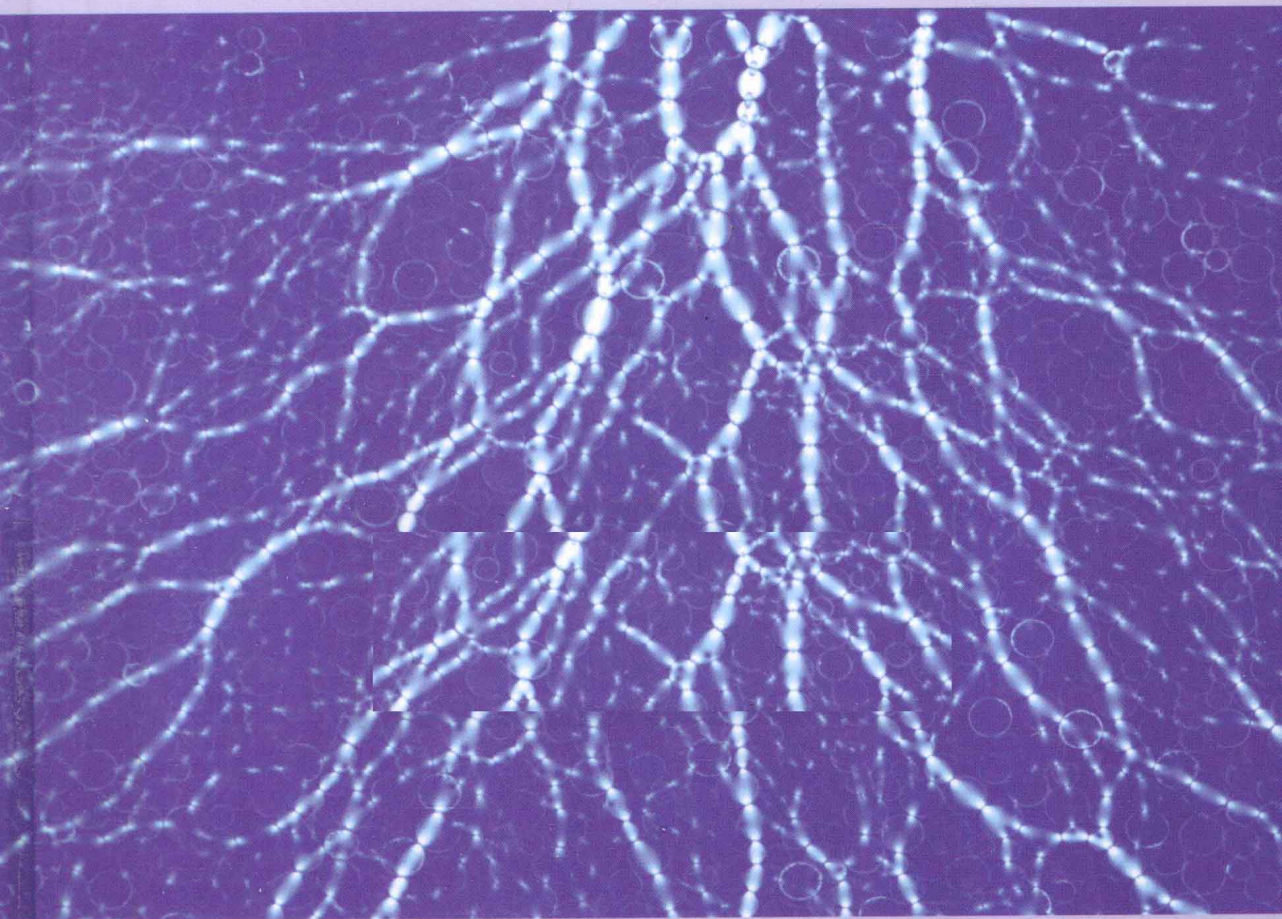


颗粒物质物理与力学

孙其诚 厚美瑛 金峰等 著



科学出版社

内 容 简 介

颗粒物质由大量离散的固体颗粒组成,近百年以来,在工业和工程领域得到深入研究,提出了大量唯象模型和理论.但是,颗粒固体的强非线性特性和应力应变局部化,跨越固体和流体的类固-液转变行为,颗粒流体的流变性质,颗粒气体的类气-液相变等复杂性质的物理机制还远未得到合理解释.颗粒物质是以接触力为主要作用的多体系统,针对其多尺度结构特征,分析各自尺度的物理机制,建立尺度间的关联,是深入研究颗粒体系复杂物理与力学性质的必然之路.以此为出发点,本书汇总了不同尺度上颗粒物质物理与力学研究的优秀成果.

本书可供物理、力学、水利和地质灾害等领域的科研人员,以及高等院校相关专业的研究生和高年级本科生参考.

图书在版编目(CIP)数据

颗粒物质物理与力学/孙其诚等著. —北京:科学出版社, 2011

ISBN 978-7-03-031672-1

I. ① 颗… II. ① 孙… III. ① 颗粒物质-物理学 ② 颗粒物质-力学
IV. O552.5

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011) 第 115230 号

责任编辑:沈 建 / 责任校对:纪振红
责任印制:赵 博 / 封面设计:耕者设计工作室

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2011 年 6 月第 一 版 开本: B5 (720 × 1000)

2011 年 6 月第一次印刷 印张: 19 1/2

印数: 1—3 000 字数: 380 000

定价: 80.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

颗粒物质是由大量离散的固体颗粒组成的体系, 比如谷物、沙子、堆石体和堰塞体等. 依据运动状态, 颗粒物质可分为颗粒气体、颗粒液体和颗粒固体, 在一定条件下会相互转化, 许多自然现象 (雪崩、滑坡、碎屑流等) 和工业过程 (流态化、矿石储运等) 都与之有关.

从物质结构角度看, 普通流体和普通固体主要涉及微观分子电子运动和宏观运动两个空间层次, 可直接采用统计物理或动理学理论推导其热力学势和其他物理量的表达式, 而颗粒物质多出一个以颗粒大小为特征长度的细观层次, 该层次的运动特性极为复杂, 在宏观层次上的表现形式比较陌生, 对经典热力学和统计物理的直接应用提出了挑战.

细观层次的无序运动与微观分子的热运动不同, 即颗粒间的相互作用一般是非弹性的, 运动颗粒不处于局域平衡态时, 所携带的动能会向微观分子运动衰减或弛豫, 总是伴随熵产生. 这个熵产生为有限时间过程, 使得我们不能将细观层次上的无序运动直接归结到热力学熵中, 必须引入额外的类熵变量来反映其存在和演化, 这就需要在热力学框架下, 针对颗粒物质的“无序”和“非平衡”这两大特点进行扩展. 另外, 颗粒质量远大于分子质量, 其运动不能用分子的热能 $k_B T$, 而是需要通过机械方式激发; 颗粒之间的摩擦及非弹性碰撞使得颗粒物质是非保守体系. 基于上述原因, 颗粒层次的运动将没有各态历遍性质, 这不满足统计物理学的基本假设.

从力学角度看, 颗粒体系表现出远比普通液体和弹性类材料等传统体系更为丰富的力学行为, 例如, 颗粒固体强非线性和不可逆的力学变形响应, 跨越固体和流体的类固-液转变行为, 颗粒流体的流变性质, 颗粒气体的类气-液相变以及麦克斯韦妖等现象. 现有宏观理论无法很好地予以解释.

20 世纪 90 年代初期, 在诺贝尔物理学奖获得者 de Gennes 等物理学家的倡导下, 颗粒物质的物理机制和力学特性引起了人们的注意, 20 年来, 颗粒物质已经稳固地发展成为物理学和力学的前沿. 近 10 年来, 新的工程需求以及新的地质灾害类型的出现, 比如, 高堆石坝建设, 汶川地震诱发的滑坡-碎屑流等, 促使人们去了解这些没有得到深刻认识而又关系国计民生的颗粒体系. 所有这些, 都是颗粒物质物理与力学研究的巨大动力.

我国颗粒物质物理与力学的研究起步较晚, 但是 10 年来, 从颗粒物质多尺度结构入手, 深入研究了颗粒物质的若干关键科学问题, 涌现出了不少高水平的研究成果, 产生了一定的国际影响, 这些阶段性工作进一步凝练后, 形成了本书. 全书分

为 8 章, 按照从物理理论到力学基础的顺序安排章节, 各章都附有主要参考文献, 供深入研究参考.

- 第 1 章 颗粒固体的流体动力学 (蒋亦民, 刘佑)
- 第 2 章 颗粒物质统计力学 (张国华, 顾强, 孙其诚)
- 第 3 章 颗粒气体动力学 (刘锐, 厚美瑛)
- 第 4 章 颗粒的抗转动接触模型 (蒋明镜)
- 第 5 章 细观结构与宏观力学性质的关联 (秦建敏, 李霞, 张洪武)
- 第 6 章 岩土颗粒力学 (程晓辉)
- 第 7 章 颗粒物质类固-液转变过程的分析 (季顺迎, 严颖, 孙其诚)
- 第 8 章 点载荷响应及剪切带演变的模拟 (毕忠伟, 刘建国, 金峰, 孙其诚)

为了内容的连续和完整, 有利于已经掌握物理和力学基础知识的研究生和博士后研究人员阅读和理解, 而不需要其他更专门的知识, 本书的选材在一定程度上基于我们的经验判断, 未包含进来的研究工作并不意味着不重要. 中国科学院物理研究所组织了暑期讲习班和专题研讨会, 清华大学开设了研究生课程, 本书的部分内容曾被系统讲授过, 效果很好, 因此我们认为这本书可以作为颗粒物质物理与力学的基础教程.

本书的作者来自中国科学院物理研究所、清华大学、中南大学、大连理工大学、同济大学、北京科技大学、大连大学和大连交通大学等国内高校和科研院所, 以及德国 Tübingen University 和英国 Nottingham University. 国内单位的绝大多数作者都有多年的国外学习或工作经历, 具有开阔的学术视野, 能够准确把握学科发展的方向, 在编写过程中, 注重描述物理现象, 介绍最新的实验和理论, 总结尚未解决的若干问题, 并展望可能取得突破的方向, 希望能帮助科研人员较快了解国际前沿, 并为将来的研究工作提供可参考的方向.

本书的研究工作得到了国家重点基础研究发展计划 (973) 项目、“十二五”国家科技支撑计划、国家自然科学基金、中国科学院知识创新工程重要方向项目、清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室等的资助, 在此一并致谢.

作者

2010 年 10 月于清华园

目 录

前言

第 1 章 颗粒固体的流体动力学	1
1.1 守恒方程和熵增加方程	2
1.2 牛顿流体的热力学关系和材料模型	6
1.2.1 流体的平衡态热力学	7
1.2.2 平衡条件与熵制造: Onsager 非平衡态热力学	9
1.2.3 熵流、应力和能量流的流体动力学推导	12
1.2.4 自由能和迁移系数模型: 材料的流体动力学建模和计算	13
1.3 弹性固体的热力学关系和材料模型	15
1.3.1 应变的几何方程: 弹性和塑性应变	16
1.3.2 热力学恒等式	18
1.3.3 固体的 Onsager 关系: 暂态弹性材料的弛豫型耗散	19
1.3.4 守恒流、熵流和塑性流的流体动力学推导	21
1.3.5 应变和应力不变量: 主轴坐标系	21
1.3.6 内秉各向同性材料的弹性势能和迁移系数	23
1.4 颗粒物质热力学	26
1.4.1 颗粒熵和颗粒温度的“热力学”及其弛豫	27
1.4.2 颗粒物质广义热力学	29
1.5 颗粒物质的自由能和迁移系数模型	33
1.5.1 能量或热力学势函数	33
1.5.2 迁移系数模型	38
1.5.3 完整的 GSH 方程组	39
1.6 热力学稳定性与弹性消失: 颗粒固体的应力屈服面	41
1.7 GSH 的基本特性及其与实验数据的对比	44
1.7.1 库仑角	44
1.7.2 三轴测试的库仑屈服角	46
1.7.3 固结曲线	47
1.7.4 状态边界面	48
1.7.5 静态颗粒固体的非线性弹性特性	49

1.7.6	弹性应力-应变响应系数: 与 Kowano-Jardine 实验的对比	54
1.7.7	粮仓的静应力分布: Janssen 模型和 Jaky 公式	58
1.7.8	楔形颗粒堆的静应力分布: 密度非均匀对堆底压力影响	63
1.7.9	局域加载力在颗粒物质中的力分布: Boussinesq 问题	67
1.7.10	含塑性的应力-应变响应包络环和塑性流动法则: 亚塑本构公式	70
1.7.11	三轴动力学的 GSH 方程组: 棘齿效应	75
1.7.12	三轴动力学: 等体积轴向循环变形下的应力松弛	77
1.7.13	三轴动力学: 定压和循环剪切力作用下的 8-字形响应曲线	77
1.8	讨论	78
	参考文献	79
第 2 章	颗粒物质统计力学	83
2.1	体积系综	83
2.1.1	体积系综的基本思想	83
2.1.2	一维颗粒体系的体积 $V(X)$	86
2.1.3	三维颗粒体系的体积 $V(X)$	87
2.1.4	颗粒的混合与分离特性	88
2.1.5	Z - ϕ 相图	89
2.2	力系综	92
2.2.1	P 系综	93
2.2.2	边界力矩系综	94
2.2.3	应力系综	94
2.3	能量系综	96
2.4	Jamming 相图	98
2.4.1	无摩擦软球形颗粒 Jammed 体系的性质	99
2.4.2	无摩擦球形颗粒 Jammed 系统的平均场理论	103
2.5	接触力测量技术及分布规律	104
2.5.1	测量技术	105
2.5.2	力分布规律	106
2.5.3	力分布规律的统计解释	108
2.6	研究展望	111
	参考文献	112
第 3 章	颗粒气体动力学	114
3.1	与经典分子气体的比较	114
3.2	研究方法	115

3.2.1	重力和微重力实验	115
3.2.2	硬球分子动力学模拟	116
3.2.3	流体动力学理论	118
3.3	基本统计特性	121
3.3.1	均匀自由冷却体系	122
3.3.2	受外力驱动的颗粒气体	123
3.4	类气液相变	124
3.4.1	颗粒团簇	124
3.4.2	基本模型	125
3.4.3	横向均匀态及负压缩性质	126
3.4.4	亚稳分界线和两相共存线	127
3.4.5	边缘稳定性分析和临界尺寸	128
3.4.6	讨论	129
3.5	双仓体系非线性动力学现象	131
3.5.1	单分散体系麦克斯韦妖现象	131
3.5.2	双分散体系麦克斯韦妖现象	132
3.5.3	双分散体系振荡现象	134
3.5.4	双分散体系的分岔行为	137
3.6	小结	139
	参考文献	140
第 4 章	颗粒的抗转动接触模型	145
4.1	发生接触的颗粒运动	145
4.1.1	颗粒间的相对转动	147
4.1.2	颗粒的转动率	148
4.1.3	颗粒的能量耗散	149
4.2	抗转动的颗粒接触模型	149
4.3	考虑转动阻力的颗粒运动	154
4.3.1	单一接触面的情况	155
4.3.2	多接触面的情况	157
4.4	刚性边界的双轴试验	157
4.4.1	整体力学特性	157
4.4.2	局部力学特性	160
4.5	小结	166
	附录 A 抗转动接触模型比较	168
	附录 B 接触位移的分解	170

符号表	170
参考文献	171
第 5 章 细观结构与宏观力学性质的关联	172
5.1 引言	172
5.2 符号规则	175
5.3 细观结构的定量描述	175
5.3.1 颗粒的几何特性	176
5.3.2 对偶几何系统	177
5.4 应力张量的细观定义	180
5.5 应变张量的细观定义	183
5.6 细观组构对材料力学性能的影响	187
5.6.1 配位数	188
5.6.2 组构各向异性	189
5.6.3 颗粒空间排列	191
5.6.4 颗粒形状	193
5.6.5 加载引起的细观结构演化	195
5.7 小结	197
符号表	198
参考文献	199
第 6 章 岩土颗粒力学	201
6.1 经典土力学蕴含的颗粒力学问题	202
6.1.1 有效应力与颗粒间作用力	202
6.1.2 岩土弹塑性极限状态与临界状态土力学	208
6.1.3 离散元方法和 CT 技术	214
6.2 岩土颗粒力学的强度	216
6.2.1 接触力链的定性分析	216
6.2.2 宏观强度与颗粒间摩擦强度的相似关系	218
6.2.3 Rowe 应力剪胀关系的局限	221
6.2.4 影响宏观强度与颗粒间摩擦强度相似关系的因素	222
6.2.5 宏观强度的伪“尺寸效应”	224
6.2.6 宏观强度的尺寸效应	226
6.2.7 宏观强度的尺寸效应与应变率的关系	230
6.3 理想颗粒材料的物理实验与数值模拟	231
6.3.1 光弹颗粒等体积剪切试验	232
6.3.2 无侧限双轴压缩试验	233

6.3.3 片状颗粒材料的贯入实验	234
6.4 小结	236
符号表	236
参考文献	237
第 7 章 颗粒物质类固-液转变过程的分析	242
7.1 引言	242
7.2 离散元模拟	243
7.2.1 应力、接触时间数和惯性数	244
7.2.2 转变区的确定	245
7.3 时空参数特性	247
7.3.1 应力分布特性	247
7.3.2 接触时间数特性	248
7.3.3 颗粒群特性	249
7.3.4 惯性数特性	252
7.4 颗粒体系的能量	253
7.4.1 颗粒体系的能量平衡状态	253
7.4.2 能量的分布特性	255
7.5 类固-液转变的本构方程	257
7.5.1 类固态和类液态的本构方程	257
7.5.2 类固-液转变的本构方程	260
7.6 小结	264
符号表	265
参考文献	266
第 8 章 点载荷响应及剪切带演变的模拟	268
8.1 点载荷作用下的力传递特性分析	268
8.1.1 数值模拟设置	269
8.1.2 点载荷在体系中的传递	270
8.1.3 应力分布	271
8.2 单轴压缩下的力链结构	273
8.2.1 力链的接触力判据	273
8.2.2 力链的角度判据	275
8.2.3 侧向压力系数	277
8.3 双轴压缩下剪切带的形成与发展	279
8.3.1 宏观现象	280
8.3.2 应变局部化的细观分析	282

8.3.3 颗粒的旋转分析	285
8.3.4 力链结构的 3 种类型	286
8.3.5 能量的演化	288
8.4 小结	290
附录 A 光弹静力触探实验	291
A.1 光弹图像的平均灰度梯度法, $\langle G^2 \rangle$ 方法	291
A.2 实验设置	293
A.3 力的分布	294
A.4 力链网络形态的描述	295
附录 B 颗粒体系的能量	297
B.1 弹性能	297
B.2 动能	297
B.3 摩擦耗能	298
附录 C 高科学置信度大规模计算	298
附录 D 颗粒物质的细观力学	300
参考文献	301

第 1 章 颗粒固体的流体动力学

普通液体和固体的宏观动力学性质可以分别用 Navier-Stokes 方程和弹性方程描述^[1, 2], 本章将讨论对颗粒物质是否也能建立类似的描述其宏观动力学性质的偏微分方程组. 颗粒物质的力学现象公认非常复杂, 受力-变形行为具有非线性和不可逆的特点, 并随着密度和剪切力的变化表现出跨越流体和固体的力学行为^[3~9]. 长期以来工程领域和近二十多年来物理领域对这些现象作了许多测量工作, 积累了大量的实验数据和经验公式. 如何构建定量描述它们的动力学理论, 是一个有重要应用价值的基础研究课题.

几何方程、热力学关系和各种守恒定律是处理非均匀物体宏观力学性质的经典物理基础^[1, 2]. 它们用能量、动量、质量密度、熵、应变以及温度、应力、熵增加率、各种耗散流等物理变量和概念, 成功地建立了普通液体和固体的连续力学理论. 经典物理方法能否处理这类跨越流体和固体、具有强非线性和不可逆耗散的复杂材料, 不单是其应用范围的推广和延伸, 也是对其能力的严峻挑战. 本章将仅限于在这些原理和变量的方法构架范围里, 探讨颗粒物质宏观动力学理论的构建问题.

物理文献中常常将这类在经典物理基础上构建的连续介质理论统称为“流体动力学”(hydrodynamics)^[10]. 该称呼仅表示它们的方法思想来自牛顿流体力学, 不是指所描述的材料一定是液体或气体那样的流体. 原则上讲, 任何材料, 无论流体还是固体, 都有描述其低频长波动力学行为的流体动力学理论, 如液晶流体动力学^[11]、高聚物流体动力学^[12~14]、晶体流体动力学^[10]等. 按照这个习惯, 本章将介绍的理论可称作“颗粒固体流体动力学”(granular solid hydrodynamics, GSH), 表示其描述的是高密度的类固态颗粒物质的低频长波动力学行为. 为方便学习和理解, 本章将从最简单的牛顿流体出发, 介绍有关流体动力学的基本概念和方法, 再通过对固体和弹性的讨论, 逐步延伸到近年来建立的 GSH^[15~35]. 最后一节是 GSH 理论与一些实验结果的对比讨论. 由于颗粒物质实验数据特别复杂多样, 涉及工程和物理等多个学科领域, 它们与 GSH 理论之间关系的研究目前尚处于初步阶段. 有关这方面的系统研究和理论应用情况, 以及对 GSH 模型的改善等内容, 正在积极开展和考虑中. 本章出现的所有场变量都是实验室坐标系的时间和空间坐标 t, x, y, z 的函数 (即工程领域里的拉格朗日描写法), 拉丁字母脚标 i, j, k, l, m, n 表示三个空间坐标 x, y, z , 并采用重复脚标自动求和的 Einstein 约定. 另外它们都是远

大于邻近颗粒间距尺寸 ℓ 意义上的宏观变量. 流体动力学是宏观理论, 只描述空间变化 $\gg \ell$ 的大尺度动力学性质, 不能描述空间精度 $\sim \ell$ 的微观现象 (又称尺寸效应), 以及宏观变量的涨落性质.

1.1 守恒方程和熵增加方程

质量、动量和能量是任何材料都普遍具备的基本物理量. 一个运动物体在任何时刻 t 和其占据的任意空间区域 D 中都有确定的质量、动量和能量值. 如果 D 由 $D_1 \cup D_2 \cup \dots$ 等两个以上的子部分组成, 它们将等于各子部分的和, 也就是说具有简单叠加性. 守恒是质量、动量和能量的最重要性质, 意味着它们既不能产生自己, 也不能消灭自己. 因此任意 D 中的质量、动量和能量的变化只能来自它们在 D 的边界面 ∂D 上的流进和流出 (质量守恒意味着忽略质量-能量转换的相对论效应, 这显然对本章将考虑的颗粒物质成立).

质量、动量和能量的叠加性和守恒性能很方便地用下面微积分方程定量描述. 首先, 叠加性意味着可以定义单位体积的守恒量, 即质量密度 ρ 、动量密度 m_i 和能量密度 w 等场变量, 它们在 D 中的积分就是其在该区域中相应的值. 其次, 可以用流量描述守恒量在材料内的流动情况, 具体定义为单位时间流过单位面积的守恒量. 将它沿闭合边界 ∂D 积分, 就是单位时间流入 D 中的守恒量. 流体动力学中习惯将质量的流量, 简称质量流, 记为 ρv_k , 其中 v_k 是速度场, 可定义为质量流除以质量密度. 如果用 σ_{ik}^{tot} 和 Q_k 分别记动量第 i 个分量和能量的流量, 简称动量流和能流, 可以根据守恒性得到方程

$$\frac{d}{dt} \iiint_D \rho dV + \iint_{\partial D} \rho v_k da_k = 0 \quad (1-1)$$

$$\frac{d}{dt} \iiint_D m_i dV + \iint_{\partial D} \sigma_{ik}^{\text{tot}} da_k = g_i \iiint_D \rho dV \quad (1-2)$$

$$\frac{d}{dt} \iiint_D w dV + \iint_{\partial D} Q_k da_k = g_k \iiint_D v_k \rho dV \quad (1-3)$$

式中, g_i 是重力加速度矢量, 绝对值为 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$; $dV \equiv dx dy dz$ 是体积元; da_k 是按照 ∂D 外法线方向定义的面积元矢量. 单位时间引力场传给质量元 $dM = \rho dV$ 的动量和能量分别是 $g_i dM$ 和 $g_k v_k dM$, 积分后得引力场对动量和能量守恒方程的贡献, 即式 (1-2) 和 (1-3) 的右边项. 注意来自引力的贡献总是被单独给出, σ_{ik}^{tot} 和 Q_k 不包括它的动量流和能量流. 由于动量变化就是力, 导致其变化的动量流 σ_{ik}^{tot} 又常被称作应力张量. 的确, 在牛顿力学中动量变化率和力是同一概念的不同表述.

除质量、动量、能量外,熵也是任何材料都有的基本物理量,主要描述其中原子、分子、电子等量子粒子无序热运动的强度.根据经典热力学原理,如果材料内部某个体积元 dV 处于热平衡状态,其中大量微观粒子的热运动在宏观层次上的力学和物理效果可用其熵值概括.熵有着与守恒量一样的可叠加性和不可消失性,但唯一不同的是它可以被产生,又叫熵制造,或热产生、生热、发热等.熵的制造行为是自然界里所有不可逆现象的起因,如日常生活中经常遇到的热损耗、衰老、材料的塑性变形等.尽管严格讲需要平衡态作为其前提条件,但实际发现熵的概念和行为特性在体积元 dV 偏离热平衡时也往往有效、或在很好的近似下有效.这意味着在相当广泛的情况下,我们都能引入材料的熵密度 s 和它的流量,它们满足类似质量守恒那样的方程 [式 (1-1)],但要将右边的零换成单位时间区域 D 中的熵制造:

$$\frac{d}{dt} \iiint_D s dV + \iint_{\partial D} (sv_k - f_k) da_k = \iiint_D \frac{R}{T} dV \quad (1-4)$$

这里遵从热力学中的习惯将熵制造写成了单位时间单位体积的发热,即热产生率 R 除以温度 T .熵的制造特性由不等式

$$R \geq 0 \quad (1-5)$$

表述,即热力学第二定律.需要注意的是,熵流与质量流 ρv_k 之间并不是简单的比例关系,因为即使对没有质量流动的 $v_k = 0$ 情况,熵亦可能通过其他方式流动,例如导致热传导现象的熵扩散过程.为反映这个性质,式 (1-4) 中的熵流写成了 $(sv_k - f_k)$,其中 sv_k 是与质流伴随的熵流部分, f_k 表示其他形式的熵流贡献.对熵扩散流,它与温度的乘积 Tf_k 即是热传导现象中热流量.下面将把式 (1-4) 和 (1-5) 称作熵增加方程,以区别于守恒方程.

如果微积分方程 (1-1)~(1-4) 中出现的所有被积函数,即密度和流量等场变量在材料内部都满足必要的连续性和可微分性,利用高等数学的高斯定理和斯托克斯定理,可将它们转换成下面的微分方程形式:

$$\partial_t \rho + \nabla_k \rho v_k = 0 \quad (1-6)$$

$$\partial_t m_i + \nabla_j \sigma_{ij}^{\text{tot}} = \rho g_i \quad (1-7)$$

$$\partial_t w + \nabla_k Q_k = \rho g_k v_k \quad (1-8)$$

$$\partial_t s + \nabla_k (sv_k - f_k) = R/T \quad (1-9)$$

式中, ∂_t 和 ∇_k 分别是关于时间和空间的偏微分.守恒方程 (1-6)~(1-8) 和熵增加方程 (1-9) 可看做场变量 ρ 、 m_i 、 w 、 s 的运动方程.注意在材料的边界或不同材料之间的交界面上,某些场变量会出现不连续性,因此在研究边界条件时一般需要用

微积分方程 (1-1)~(1-4). 下面将不考虑边界问题, 并总是认为微分方程 (1-6)~(1-9) 适用于整个材料内部.

上面出现的守恒量和熵, 它们的流量和熵增加率, 都是远大于邻近颗粒间距尺寸 ℓ 意义上的宏观变量. 由于守恒量和守恒流都具有简单叠加性质, 并且在空隙处为零, 即使在远小于 $\sim \ell$ 精度下, 也可以严格定义. 特别是, 这些微观守恒量和流与守恒方程 (1-6)~(1-8) 中的宏观守恒量和流之间有粗粒化 (coarse-graining) 平均关系. 因此守恒方程不仅是物理图像简单, 其中变量的微观意义也完全明确. 如果有它们的微观测量或离散元计算数据, 简单地作粗粒化平均就马上得到相应的宏观值. 注意并不是所有量都有这个粗粒化平均性质, 例如应变就没有 (参见文献 [18]).

根据角动量守恒和相对论原理的一般性要求^[1, 2], 可以证明动量流或应力 σ_{ij}^{tot} 必须是一个对称的 3×3 张量:

$$\sigma_{ij}^{\text{tot}} = \sigma_{ji}^{\text{tot}} \quad (1-10)$$

另外以速度 v_i 运动的质量元 ρdV 的动量是 $v_i \rho dV$, 由此得到动量密度

$$m_i = \rho v_i \quad (1-11)$$

也就是说, 运动材料的动量密度与它的质量流相等. 注意式 (1-11) 只对没有宏观电磁场情况有效, 这时动量 m_i 只有来自运动质量的贡献. 有电磁场时需要在式 (1-11) 的右边加上电磁场的动量密度 (玻印廷矢量除以光速平方). 下面将只限于考虑没有电磁场的情形.

值得指出的是, 动量是只能通过流动来传播的守恒量, 应力是它的流量. 因此称动量的流动或“传播”没有概念问题. 但目前许多文献中习惯将应力的空间分布称为“应力传播”, 需特别注意不要因此将应力误解为守恒量.

不等式 (1-5) 和式 (1-6)~(1-11) 对任何材料, 无论液体、固体、颗粒物还是软物质都普遍适用. 它们在一些连续力学著作和文献中还常以其他形式出现, 但都可看做是式 (1-5)~(1-11) 的推论. 比如定义

$$\sigma_{ij} \equiv \sigma_{ij}^{\text{tot}} - \rho v_i v_j \quad (1-12)$$

可以将动量守恒方程 (1-7) 写成

$$\rho d_t v_i = \rho g_i - \nabla_j \sigma_{ij} \quad (1-13)$$

其中算子

$$d_t \equiv \partial_t + v_k \nabla_k \quad (1-14)$$

是物质导数. 因为 $\rho v_i v_j$ 是物质流动 (又称对流流动) 导致的应力贡献, σ_{ij} 则表示与质量流动无关的、局域静止坐标下的应力部分. 方程 (1-13) 还可解释为连续力

学中的牛顿第二定律, 或牛顿运动方程, 因为 ρ 是质量, $d_t v_i$ 表示加速度, 而右边可看做力. 注意 σ_{ij} 也是对称张量 [可由式 (1-10) 和 (1-12) 证明], 通常也称应力.

利用物质导数算子 (1-14) 可将质量守恒方程 (1-6) 写成

$$d_t \rho = -\rho v_{kk} \quad (1-15)$$

其中符号

$$v_{ij} = \frac{\nabla_i v_j + \nabla_j v_i}{2} \quad (1-16)$$

是由速度的空间导数构成的对称张量, 可称作变形率 (因为在小变形极限下, v_{ij} 就是变形的速率). 它的迹 v_{kk} 是速度矢量的散度.

除前面提到的单位体积的熵 s 外, 还可以定义单位质量的熵, 或熵容为

$$\vartheta \equiv s/\rho \quad (1-17)$$

它的运动方程可由熵增加方程 (1-9) 得到, 有

$$\rho T d_t \vartheta = R + T \nabla_k f_k \quad (1-18)$$

式 (1-18) 在一些文献和热力学书中常被写成

$$d_t \vartheta = \dot{\vartheta}^r + \dot{\vartheta}^i \quad (1-19)$$

式中

$$\dot{\vartheta}^r \equiv \rho^{-1} \nabla_k f_k \quad (1-20)$$

是由熵扩散流 f_k 导致的熵变, 又叫可逆熵变 (注意这里的“可逆”并不意味着扩散是可逆过程), 而符号

$$\dot{\vartheta}^i \equiv \frac{R}{\rho T} \geq 0 \quad (1-21)$$

是单位质量的熵产生率, 又叫不可逆熵变. 式 (1-21) 右边是不等式 (1-5) 的另一种写法.

如果定义 Q_k^D (上标 D 表示该量与耗散有关):

$$Q_k^D = w v_k + \sigma_{kl} v_l - Q_k \quad (1-22)$$

和不含对流流动动能 $\rho v^2/2$ 的单位质量能量为

$$e = \frac{w}{\rho} - \frac{v^2}{2} \quad (1-23)$$

可将能量守恒方程 (1-8) 写成

$$\rho d_t e = -\sigma_{kl} v_{lk} + \nabla_k Q_k^D \quad (1-24)$$

它常被解释为连续介质力学中的热力学第一定律,也就是通常气体热力学中的 $dU = TdS - PdV$ 的类比. 因为 $\rho d_t e$ 可看做能量变化, 对应于气体热力学中的内能变化 dU , 散度 $\nabla_k Q_k^D$ 可看做热交换、比如通过传热导致的系统能量改变, 对应气体热力学中的 TdS , 而 $-\sigma_{kl} v_l$ 可看做通过机械做功导致的系统能量变化部分, 对应气体热力学中的 $-PdV$. 后面将证实 Q_k^D 的确是诸如热传导等耗散过程伴随的能量流动. 方程 (1-24) 的推导过程如下. 将算子 (1-14) 作用于式 (1-23), 得

$$\begin{aligned} d_t e &= (\partial_t + v_k \nabla_k) \left(\frac{w}{\rho} - \frac{v^2}{2} \right) \\ &= \partial_t \frac{w}{\rho} - v_l \partial_t v_l + v_k \nabla_k \frac{w}{\rho} - v_l v_k \nabla_k v_l \\ &= \frac{1}{\rho} (\partial_t w + v_k \nabla_k w) - \frac{w}{\rho^2} d_t \rho - v_l d_t v_l \end{aligned} \quad (1-25)$$

再将它乘以密度 ρ , 并用式 (1-8)、(1-13) 和 (1-15) 消去其中的 $\partial_t w$ 、 $d_t v_l$ 和 $d_t \rho$, 得

$$\begin{aligned} \rho d_t e &= v_k \nabla_k w - \nabla_k Q_k + w v_{kk} + v_l \nabla_j \sigma_{lj} \\ &= \nabla_k (w v_k) - \nabla_k Q_k + \nabla_j (\sigma_{lj} v_l) - \sigma_{lj} \nabla_j v_l \end{aligned} \quad (1-26)$$

注意到应力 σ_{ij} 是对称张量, 不难看出它就是式 (1-24).

作为守恒方程和熵增加方程 (1-6)~(1-11) 的数学推论, 式 (1-13)、(1-15)、(1-18), 和 (1-24) 等对任何材料也都普遍适用. 本节的方程都是流体动力学中经常用到的基本公式.

1.2 牛顿流体的热力学关系和材料模型

1.1 节介绍的守恒和熵增加方程虽然对任何材料都普遍成立, 但显然不构成完备方程组. 为得到可用于分析计算材料宏观动力学行为的完备偏微分方程组, 还需要补充其他方程来闭合它们. 热力学关系, 又叫热力学恒等式, 是解决这个问题的重要部分. 它们也是不含任何材料参数的一般方程, 反映和体现任何物体都必须遵守的热力学原理. 但与守恒和熵增加方程不同的是, 表征材料热力学状态的变量数目与材料所属类型有关, 为清晰起见, 我们将分别介绍流体类、弹性类、颗粒类材料的热力学. 尽管不同类别材料的热力学关系有数目上的差别, 它们的论证和表述方式都非常类似, 具体包括可以用一个全微分形式概括的状态方程和 Maxwell 关系, 热力学平衡条件和稳定条件, 联系热产生、耗散流、耗散力的 Onsager 关系, 以及与应力和能量流有关的流体动力学恒等式等内容.

材料模型指形式和参数与具体材料有关的方程, 起着封闭上述一般方程, 体现材料个性的作用. 除某些简单材料, 比如稀薄气体, 可尝试用统计物理或动理学等

微观理论推导它们的形式和其中的参数值外, 复杂物质的材料方程大都通过测量, 或研究对比理论计算与实验数据的方法得到. 在流体动力学中, 材料关系具体指热力学特征势和迁移系数表达式, 而理论研究的任务就是建立和完善它们的模型公式, 因为守恒方程和热力学关系都是普适和严格的, 属于既不能改变, 也无需再研究的内容.

本节主要介绍牛顿流体的热力学和一些简单材料模型. 牛顿流体类材料指常见的液体和气体, 比如水和空气. 由于状态变量数目少, 热力学关系也相对简单, 历史上许多热力学原理的发现与流体有着密切关系. 初学者可以很方便地从流体入手了解流体动力学的基本方法和概念, 然后再逐渐延伸到弹性固体和颗粒物质等复杂情形.

1.2.1 流体的平衡态热力学

考虑 t 时刻的体积元 dV , 其中的流体处于热平衡. 根据热力学, 它的物理状态可以用该处的熵 s 、质量 ρ 和动量 m_i 表征. 这意味着其他所有宏观物理变量, 如能量 w 、温度 T 、化学势 μ_c 、速度 v_i 等, 都是它们的函数, $\{s, \rho, m_i\}$ 是一个完备的独立状态变量集合. 另外特别需要强调的是, 这些函数关系并不完全任意, 它们必须满足下面的全微分关系:

$$dw = Tds + \mu_c d\rho + v_i dm_i \quad (1-27)$$

上式又称热力学全微分. 它意味着如果知道了流体的能量随熵、质量和动量变化的函数表达式, 就可以通过微分计算得到温度、化学势和速度:

$$T = \left(\frac{\partial w}{\partial s} \right)_{\rho, m_i}, \mu_c = \left(\frac{\partial w}{\partial \rho} \right)_{s, m_i}, v_i = \left(\frac{\partial w}{\partial m_i} \right)_{s, \rho} \quad (1-28)$$

除此之外, 全微分关系 (1-27) 还意味着有下面的 Maxwell 关系:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, m_i} = \left(\frac{\partial \mu_c}{\partial s} \right)_{\rho, m_i}, \left(\frac{\partial T}{\partial m_i} \right)_{\rho, s} = \left(\frac{\partial v_i}{\partial s} \right)_{\rho, m_i} \quad (1-29)$$

$$\left(\frac{\partial \mu_c}{\partial m_i} \right)_{\rho, s} = \left(\frac{\partial v_i}{\partial \rho} \right)_{s, m_i}, \left(\frac{\partial v_i}{\partial m_j} \right)_{s, \rho} = \left(\frac{\partial v_j}{\partial m_i} \right)_{s, \rho} \quad (1-30)$$

式 (1-27)~(1-30) 都是热力学恒等式, 只要流体满足局域平衡, 它的所有宏观场变量都必须遵守它们.

全微分关系 (1-27) 概括材料的所有平衡态热力学性质, 能给出所有的热力学恒等式. 它与熵增加不等式 (1-5) 一道还将确定着材料的平衡条件和稳定条件. 这里仅推导一些简单的恒等式, 在后面小节中再陆续讨论平衡条件和稳定条件等复杂内容. 首先, 微分单位质量的熵 [式 (1-17)] 和能量 [式 (1-23)], 并代入式 (1-27), 得