

Hou Meiyng, Liu Rui, Meerson B. Gas-liquid like phase transition in granular gases under zero gravity. *Chin. J. Space Sci.*, 2008, **28**(1): 1~5

# 颗粒气体的类气液相变<sup>\*</sup>

厚美瑛 刘锐

(中国科学院物理研究所 北京凝聚态物理国家实验室 北京 100080)

B. Meerson

(Racah Institute of Physics, Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Israel)

**摘要** 颗粒体系是远离平衡态的复杂耗散体系，在外力驱动下，能表现出类似于固体、液体或气体的特性。在稀疏的颗粒气体中，由于耗散，体系中常常会形成颗粒在局部的凝聚。这种凝聚行为具有自发对称性破缺的特征，使得颗粒气体中自动形成高密度区域和低密度区域共存的非均匀状态，类似于气体中液滴的形成。本文利用零重力条件下的三维颗粒气体理论模型进行计算和分析，揭示了颗粒气体这一相变行为的不稳定性根源及类气液相变本质，给出了颗粒气体中这种相分离发生的临界条件，并通过分子动力学模拟进行检验，结果从定性上和定量上都能够很好地吻合，为进一步的空间实验提供了理论依据和相关实验参数。

**关键词** 颗粒气体；耗散；相分离；分子动力学模拟

中图法分类号 V 524

## Gas-liquid Like Phase Transition in Granular Gases Under Zero Gravity

HOU Meiyng LIU Rui

(Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

B. Meerson

(Racah Institute of Physics, Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Israel)

**Abstract** Granular systems are intrinsically far from equilibrium for their many-body and dissipative nature. Driven by external forces, they can behave like that of solids, liquids, or gases. In dilute granular gases, clusters usually form due to dissipation, which leads to inhomogeneous density distributions. Such a local condensation shows spontaneous symmetry-breaking instability and negative compressibility instability, just as droplets form in vapor. In this paper, a three-dimensional model for granular gases under zero gravity is investigated, and calculations predict such a gas-liquid like phase transition. Molecular dynamics simulations show good agreements with the theoretical results. The numerical results shall provide detailed experimental parameters for the further related space experiments.

**Key words** Granular gas, Dissipation, Phase separation, Molecular dynamics simulation

\* 国家自然科学基金项目 (A0402-10474124) 和中国科学院知识创新工程项目 (KACX2-SW-02-06) 共同资助  
2007-08-22 收到原稿, 2007-11-01 收到修定稿

## 1 引言

颗粒物质是由大量离散的尺寸大于微米的宏观固体颗粒组成的体系，这类体系在自然界中无处不在，与人们的日常生活紧密相关，对其静力学和动力学的研究具有深远的意义。颗粒之间的相互作用以摩擦与非弹性碰撞为主，这类耗散性质的作用使得颗粒体系总是处于非平衡态。维持这类耗散体系的运动状态需要依靠重力、振动、剪切或撞击等外力驱动，通过外部能量的注入来平衡体系内部因摩擦或非弹性碰撞所造成的能力损耗。在不同外力条件下，颗粒体系能表现出类似于固体、液体及气体的特性<sup>[1]~[3]</sup>。当颗粒体系受外力驱动而处于一种比较稀疏的分布时，颗粒能够快速运动，并且颗粒之间的相互作用以二体碰撞为主，具有类似于气体的性质，通常被称为颗粒气体<sup>[2],[4]</sup>。对于颗粒气体体系，涨落会破坏整个体系的均匀性，从而导致某个局部密度的偶然增加，同时也使得该处颗粒之间的碰撞概率增大，能量耗散更加严重，如果热扰动不能阻止这种趋势，就会形成局部的高密度聚集，使得颗粒气体中发生局部的凝聚现象<sup>[5]~[7]</sup>，类似于气体中形成的液滴。颗粒气体中的这种亚稳分解现象也可类似于图1所示的真实气液相变，颗粒气体经过此过程最终形成低密度区域（气相）和高密度（液相）共存的不均匀状态，实现颗粒气相和液相的两相分离。

对于通常的流体体系（气液或液液体系），通过亚稳分解发生相分离时，如果受到重力作用，两相分离的过程就会受到重力导致的沉积过程的干扰，这一点妨碍了对相分离的清晰理解和对其机制的检验，因此对相分离过程的研究通常需要无重力或微重力环境。对于宏观颗粒组成的颗粒气体体系，重力的影响更为显著，要研究这一相似的相变行为，弄清楚其发生的物理机制，更需要无重力或微重力环境。本文在已有研究的基础上<sup>[8],[9]</sup>，利用零重力条件下三维颗粒气体的理论模型进行计算，从理论上预期了颗粒气体中相分离现象发生的可能，揭示了这种相分离行为与真实气液相变行为的相似性质，并从数值上明确给出了相分离发生的条件，讨论了颗粒气体在相变的临界点附近的性质。这些数据及理论分析结果为进一步微重力条件下的实验研究提供了实验参数的选择标准，对实验的进行和实验结果的观测具有重要指导意义。

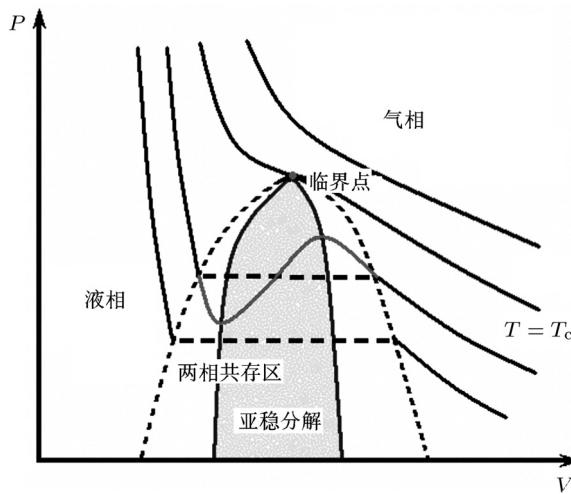


图1 真实气液相变示意图  
Fig.1 Sketch of the phase diagram for gas-liquid phase transition

## 2 基本模型

考虑零重力环境下， $N$ 个直径为 $d$ ，质量 $m=1$ 的硬球颗粒在尺寸为 $L_x \times L_y \times L_z$ （体积为 $V_0$ ）的封闭矩形容器中自由运动。位于 $x=0$ 处的容器壁通过振动方式向系统输入能量，假设该壁仅仅只是提供颗粒动能，其运动方式对颗粒体系不产生任何影响，理论上可以处理成热墙，即按照一定分布随机给与之接触的颗粒以反弹速度，其余器壁为完全弹性的固壁。颗粒在容器中运动并发生碰撞，颗粒之间的接触相互作用仅考虑法向的非弹性碰撞，法向恢复系数为 $e$ ，忽略摩擦和切向的能量损失。对于该体系，当颗粒的粒子数密度不是特别大，并且 $1-e \ll 1$ 时，根据动量守恒、能量守恒及一些本构关系，体系的稳定态可由如下三个方程来完全描述<sup>[10]~[12]</sup>：

$$p = \text{const}, \quad \nabla[\kappa \nabla T(r)] = I, \quad p = nT(1+4G). \quad (1)$$

其中， $p$  为颗粒气体压强； $T$  为颗粒气体温度； $n$  为颗粒气体中颗粒的粒子数密度； $r$  为空间坐标； $\kappa$  为热输运系数

$$\kappa = \frac{4dnT^{1/2}G}{\sqrt{\pi}} \left[ 1 + \frac{9\pi}{32} \left( 1 + \frac{5}{12G} \right)^2 \right];$$

能量耗散项

$$I = \frac{12(1-r^2)nT^{3/2}G}{\sqrt{\pi}d}, \quad G(\nu) = \frac{\nu(1-\nu/2)}{(1-\nu)^3},$$

式中  $\nu = \pi d^3 n / 6$  为颗粒的体积分数. 方程无量纲化后, 能量耗散项具有常系数,

$$\eta = \frac{\pi}{3} (1 - r^2) \left( \frac{L_x}{d} \right)^2,$$

其与颗粒非弹性碰撞的恢复系数相关, 是一个表征体系耗散性能的控制参量.

在热墙附近, 颗粒气体具有恒定的颗粒温度  $T_0$ ; 在除热墙外的五面固壁上, 可以应用无流边界条件, 同时, 体系总的颗粒数目应该守恒. 根据这些边界条件可以对方程 (1) 进行数值求解. 由于  $y$  和  $z$  两个方向在边界条件上具有对称性, 因而当体系在这两个方向上均匀分布时, 方程 (1) 具有最简单的稳定解. 定义体系无量纲化的平均颗粒数密度

$$f = N / (n_c V_0).$$

式中,  $n_c = \sqrt{2}/d^3$  为密堆积的粒子数密度. 给定不同的  $\eta$  和  $f$ , 可以通过方程 (1) 求解体系的横向均匀稳定解及相应的约化颗粒气体压强,  $P = p/(n_c T_0)$ . 当  $\eta = 5000$  时, 改变不同的  $f$  值, 计算得到的  $P-f$  曲线如图 2 所示. 在气液相变的 van der Waals 理论中, 体系处于亚稳分解状态时, 对应的就是  $P-f$ (压强-体积分数) 曲线中负压缩部分, 即  $\partial P/\partial V > 0$  的部分 (如图 1 中阴影部分所示). 可以看到, 图 2 中颗粒气体的  $P-f$  曲线也有一段反常的下降区域 ( $f$  越大, 压强  $P$  越小), 类似于气液相变的所谓负压缩区域, 它对应的就是颗粒气体发生亚稳分解并产生相分离的区域, 因此颗粒气体的相分离可以归结为一种与气液相变相似的负压缩不稳定性. 鉴于这种相似性质, 可以采用如图 1 类似的方法来确定颗粒气体相图的两相共存边界及亚稳分解边界.

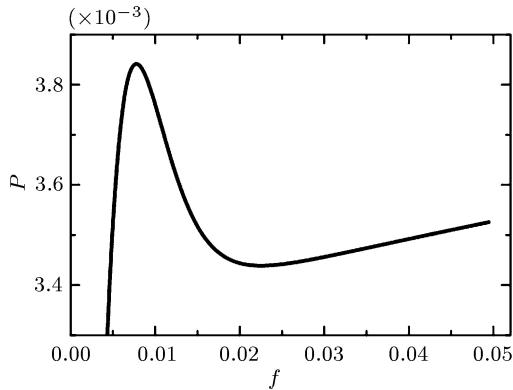


图 2  $\eta = 5000$  时体系的  $P(f)$  曲线

Fig.2  $P(f)$  curve at  $\eta = 5000$ , and the falling part shows the negative compressibility

由于负压缩区域在两个极值点之间, 对不同的  $\eta$ , 其边界均可由  $\frac{\partial P}{\partial f} = 0$  确定, 并构成所谓的亚稳分界线 (spinodal curve), 如图 3 中实线所示. 当控制参量  $\eta$  减小时, 负压缩区域会趋于消失, 消失点是极值点和拐点重合的地方, 这就是临界点, 可由  $\frac{\partial P}{\partial f} = 0, \frac{\partial^2 P}{\partial f^2} = 0$  (拐点) 确定, 可理论计算的结果给出  $\eta$  的临界值  $\eta_c \approx 199.3$ . 当  $\eta < \eta_c$  时,  $P(f)$  呈单调递增, 负压缩区域不复存在, 因而相分离现象的发生要求  $\eta > \eta_c$ . 类似于气液相变,  $\eta$  如同温度一样控制着体系的相变行为.

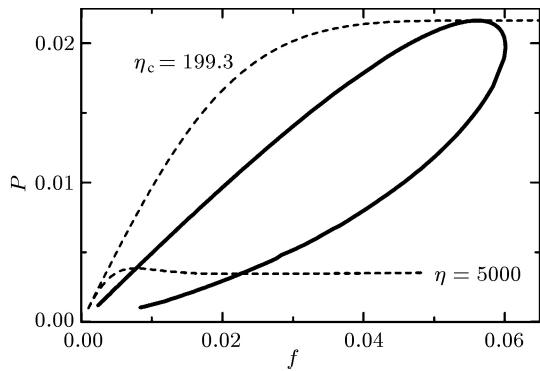


图 3  $\eta_c = 199.3$  和  $\eta = 5000$  时的  $P(f)$  曲线  
及亚稳分界线

Fig.3 Spinodal curve (solid) and  $P(f)$  curves (dashed)  
for  $\eta_c = 199.3$  and  $\eta = 5000$

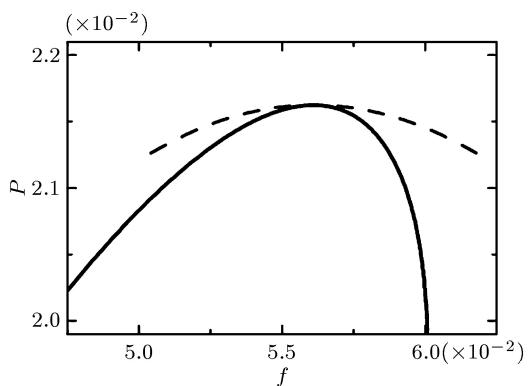


图 4 利用文献 [8], [9] 的近似方法得到的临界点附近的两相共存线

Fig.4 Coexistence curve (dashed) near  
the critical point

对于气液两相的共存问题, 考虑到真实体系不可能越压越大, Maxwell 给出一个等面积的构造法

(Maxwell's Construction) 来确定两相共存边界——两相共存线。同样，对于颗粒气体体系，并不能导出共存线的解析表达式，文献[6]和文献[7]提出，可以类似地根据 Maxwell 等面积构造来确定共存边界( $f_1, f_2$ )，即

$$\int_{f_1}^{f_2} [P(f) - P(f_1)] dV = 0,$$

其中，约化体积  $V \propto \frac{1}{f}$ 。Khain 等<sup>[8]</sup>提出在临界点附近用简单关系替代

$$P(f_1) = P(f_2), \quad (f_1 + f_2)/2 = f_c.$$

仅考虑临界点附近的情况，可以采用文献[8], [9]的方法得到两相共存的边界线，结果如图 4 中虚线所示，图 4 中的实线为临界点附近的亚稳分界线。

### 3 分子动力学模拟

根据上面理论计算和分析的结果，可以给出零重力条件下三维颗粒气体中相分离现象发生的条件，也就是说，表征耗散的控制参量  $\eta$  决定相分离现象是否能够发生，相分离区域的存在要求它必须大于某一临界值，即  $\eta > \eta_c$ 。对于  $\eta > \eta_c$ ，体系能在平均粒子数密度  $f$  处于某个范围 ( $f_1, f_2$ ) 内时发生相分离。另外，如果体系在  $y$  和  $z$  两个方向上的尺寸很小，颗粒的运动足以破坏该方向上的任何不均匀结构的形成，从而会抑制相分离的发生<sup>[13]</sup>，因此容器的横向尺寸不宜太小。

对于这些理论结果，在进行实验验证之前，可以用数值模拟实验来进行检验。我们采用事件驱动(event-driven)的硬球分子动力学模型来进行模拟，所有颗粒均作为硬球处理，如同理论模型一样，忽略颗粒的摩擦作用和旋转自由度，仅考虑法向的非弹性碰撞，以碰撞事件序列作为程序运行的驱动来进行模拟，模拟方法的技术细节可以参考文献[14]。对于热墙的模拟，如果简单地按高斯分布赋予热墙附近颗粒以法向和切向速度，在完全弹性极限下体系的温度(速度的方均值)将偏离热墙的给定温度，这与热平衡的基本观点不相符。为此，我们采用 Poeschel 等<sup>[15]</sup>的方法实现热墙的模拟，以避免这种理论意义上的矛盾。在模拟过程中，用颗粒体系的动能和质心位置来判断体系是否达到一个稳定状态，运行足够长时间，当二者均能长时间稳定在某个值或位置附近时即认为体系已经稳定。

具体考虑容器尺寸为  $L_x = 200d$ ,  $L_y = L_z = 400d$ , 给定颗粒的恢复系数  $e = 0.89945$ ，则表征体系的耗散性能参数  $\eta = 8 \times 10^3$ ，理论计算结果给出此时的亚稳边界  $f_1 = 0.00608$ ,  $f_2 = 0.01864$ 。选择不同的颗粒数目  $N$  进行分子动力学模拟，结果如图 5 所示。当  $f < f_1$ ,  $f > f_2$  时体系均处于一种横向均匀的稳定状态。在理论预期能够发生相分离的体积分数范围 ( $f_1, f_2$ ) 内，有高密度区域的形成，相分离现象确实被观察到。但是由于横向维度有两个，三维相分离即可展现出图 5(b) 中的二维形貌和图 5(c) 中的三维形貌。其中当体系的体积分数  $f$  较大时，即靠近  $f_2$  时，体系会出现二维形貌，这是由于颗粒数目较多时，体积排斥使得它们不能完全聚集在一个角落，阻碍了对称性在两个方向上同时破缺，因此形成条带状的相分离形貌。

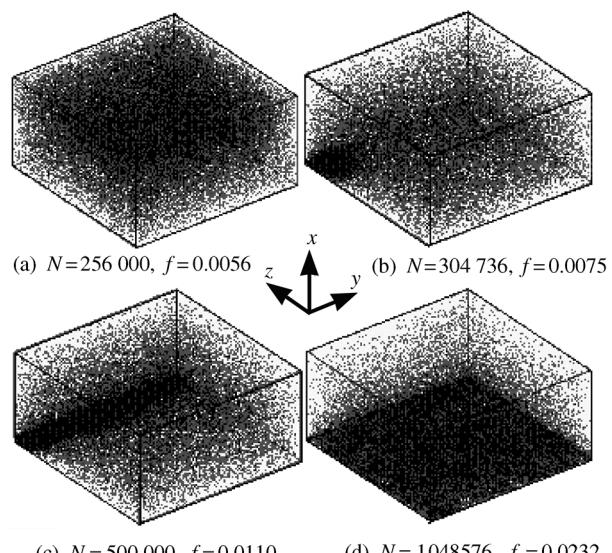


图 5 三维体系分子动力学模拟结果  
Fig.5 Results of molecular dynamics simulations  
for different packing fraction  $f$

### 4 讨论

由上可见，颗粒气体的这种相分离行为与气液体系 van der Waals 理论描述的亚稳分解极其相似，它们都具有一种负压缩不稳定性特征，并具有相似的相图规律，可以用相似的数学形式描述，并能够从数值上预期这种不稳定性现象发生的条件和范围。通常体系中亚稳分解的具体过程比较复杂，这种相

似性让我们期望能观察到颗粒气体相分离时更复杂的过程, 如粗粒化, 即体系从出现多个分立的高密度区域状态, 通过此消彼长, 最终达到融合成一个高密度区域的状态。另外, 在相变的临界点附近, 颗粒气体体系应当与真实的气液体系一样具有临界涨落行为, 较大的密度涨落期望被观测到。如何在实验中观测这些相变行为将至关重要。

以上分析均建立在零重力条件的基础上, 实际上完全营造一个无重力环境的实验条件是非常困难的, 通常只能在微重力条件下进行实验。微重力对实验结果的影响将是下一步需要考虑的问题。

## 5 结论

颗粒物质的研究与工业技术和人类生活密切相关。在空间探测中对颗粒物质在不同重力环境的运动规律有足够认识也是必不可少的。理论预测了零重力条件下颗粒气体(以及广义的颗粒流动体系)表现出自发对称性破缺不稳定性及有凝聚图样产生的相分离现象。分子动力学的数值模拟对理论结果给出了很好的验证, 因此进一步的微重力条件下的实验验证显得尤其重要, 本文的数值结果则为此提供了详细的实验参数和理论依据。由于不稳定性敏感于引发它产生的物理机理, 相分离不稳定性研究提供了一种对颗粒动力学及普适化的全面和决定性的检验。同时颗粒体系中的相分离是广泛非平衡态相分离中的一个典型代表, 细致的实验研究将使我们对非平衡态物理的认知更进一步, 并有助于对非平衡态相分离过程的普适性规律的认识。

## 参考文献

- [1] Jaeger H M, Nagel S R, Behringer R P. Granular solids,

- liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys.*, 1996, **68**(4): 1259~1273
- [2] Campbell C S. Rapid granular flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1990, **22**:57~92
- [3] Kadanoff L P. Built upon sand: Theoretical ideas inspired by granular flows. *Rev. Mod. Phys.*, 1999, **71**(1):435~444
- [4] Goldhirsch I, Zanetti G. Clustering Instability in Dissipative Gases. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(11): 1619~1622
- [5] McNamara S, Young W R. Inelastic collapse in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 1994, **50**(1):R28~31
- [6] Argentina M, Clerc M G, Soto R. van der Waals-like transition in fluidized granular matter. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **89**(4):044301
- [7] Cartes C, Clerc M G, Soto R. van der Waals normal form for a one-dimensional hydrodynamic model. *Phys. Rev. E*, 2004, **70**(3):031302
- [8] Khain E, Meerson B. Symmetry-breaking instability in a prototypical driven granular gas. *Phys. Rev. E*, 2002, **66**(2):021306
- [9] Khain E, Meerson B, Sasorov P V. Phase diagram of van der Waalslike phase separation in a driven granular gas. *Phys. Rev. E*, 2004, **70**(5):051310
- [10] Brey J J, Dufty J W, Kim C S et al. Hydrodynamics for granular flow at low density. *Phys. Rev. E*, 1998, **58**(4):4638~4653
- [11] Jenkins J T, Richman M W. Grad's 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 1985, **87**:355~377
- [12] Carnahan N F, Starling K E. Equation of state for nonattracting rigid spheres. *J. Chem. Phys.*, 1969, **51**(2):635~636
- [13] Liu R, Li Y, Hou M, Meerson B. van der Waalslike phase-separation instability of a driven granular gas in three dimensions. *Phys. Rev. E*, 2007, **75**(4):061304
- [14] Rapaport D C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1997
- [15] Poeschel T, Schwager T. *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms*. Berlin: Springer, 2005