

鱼洗内颗粒流动的数值模拟¹⁾

李 恒 蔡庆东²⁾

(北京大学工学院力学与空天技术系, 湍流与复杂系统国家重点实验室, 北京 100871)

(北京大学应用物理与技术研究中心, 北京 100871)

摘要 实验表明, 鱼洗内的流动存在高度非线性的相互作用, 并最终导致表面连续性的破坏. 在数值模拟中, 这类问题是非常难处理的. 该文从离散的观点出发, 直接考虑容器内部粒子的运动. 即采用分子动力学方法, 模拟鱼洗内的流动. 该方法所考虑的实质是颗粒流动, 不要求介质是连续的, 从统计物理的观点看, 当所模拟的粒子数非常大时, 在统计上和连续介质相当. 该文首先发展了基于消息传递 (MPI) 的并行计算程序, 可以用来做人规模的颗粒流动模拟. 对鱼洗内的颗粒流动模拟结果表明, 在外界激励下, 鱼洗内的颗粒流动表现出的现象和液体流动类似, 边界的能量以波的形式向内部传播, 并很快耗散掉, 在边界激励点附近, 颗粒因为受到边界和内部粒子的挤压作用而跳起, 从直观现象上看, 和鱼洗的流动实验一致. 在能量的概率密度分布函数中, 可以观察到两个明显的指数区.

关键词 颗粒流动, 鱼洗, 分子动力学模拟, 并行计算

中图分类号: O347.7, O353.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2008)01-0001-08

引 言

“洗”是古人用金属制作的盥洗用具, 类似于现在的脸盆. 因其内部雕刻有龙或者鱼的图案, 所以称为“龙洗”或者“鱼洗”. 在洗内盛一定量的水后, 用双手摩擦其边缘的双耳, 可以发出响亮的嗡嗡声, 洗内水面出现细小的波纹, 并会有水从鱼嘴位置高高溅起. 此现象在古代只是作为一个游戏, 在今天, 却受到了力学界的广泛关注^[1,2]. 然而, 想用现代的流体力学知识来解释清楚这一现象, 并不是一件容易的事情.

王大钧等^[2,3]通过振动与波的理论分析和实验观测, 对鱼洗盆壁自激励振荡的不同振型进行了深入研究. 鱼洗喷水现象是由于盆里的水受固壁的激励而发生的, 其中涉及到固液耦合非线性问题, 以及液体表面连续性的破坏, 这给理论与数值模拟研究带来很大的困难. 至今还无人对鱼洗内液体的流动进行模拟. 本文将鱼洗中的水用离散的颗粒物质代替, 对鱼洗中的颗粒流动进行数值模拟. 当粒子数目相当大时, 颗粒流动会表现出与液体流动非常类似的现象.

当然, 颗粒流动和流体运动有很大的差异, 但

对于鱼洗内这种复杂的流动, 在直接采用通常的数值模拟方法有困难的情况下, 从颗粒流动的角度, 或者说是从分子动力学方法的角度来考虑, 回避了诸如动边界和自由面这种难点, 这也许是一种有效的策略. 况且, 颗粒物质在鱼洗内的流动本身也可以作为一个独立的物理问题而提出, 在实验上也非常容易实现, 这对于认识颗粒流动是非常有意义的.

颗粒物质在自然界和工农业生产中广泛存在. 对颗粒物质的研究, 成为近年来物理研究的热点问题之一^[4~6]. 颗粒物质是不同于固、液、气体的一种特殊物质. 但是运动的颗粒会表现出类似流体的现象. 颗粒间的相互作用有摩擦力和非弹性碰撞, 颗粒物质在宏观上表现出许多复杂而有趣的现象, 比如尺度分离、表面波、颗粒聚集以及非弹性塌陷等^[7~9]. 随着计算机性能的提高, 数值模拟在颗粒物质的研究中起到了越来越重要的作用.

本文尝试利用分子动力学方法来模拟鱼洗内的颗粒流动, 并和实验上鱼洗内的流动做对比. 考虑到颗粒流动中的粒子数目越多, 流动情况和流体越接近, 所以我们尽量模拟粒子数目巨大的颗粒系统, 然后再对计算结果做适当的统计平均. 对于这样一个复杂的三维问题, 其规模和计算量都很大, 已经

2006-10-25 收到第 1 稿, 2007-11-12 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (10128204).

2) E-mail: caiqd@pku.edu.cn

超过了普通串行计算的范围. 因此本文采用了基于消息传递模式 (MPI)^[10] 的并行编程技术, 计算工作是在北京大学科学与工程计算中心的 HP 并行机群上完成的.

1 数值模型

1.1 鱼洗模型

首先需要给鱼洗建立合适的物理模型. 由于洗壁的振动激起喷水, 将鱼洗简化为一有底的圆柱型容器, 如图 1 所示, 对于这种结构, 振动所引起圆柱面中传播的机械波呈现一些稳定的驻波状态^[11]. 对应于不同的驻波频率, 用周向波数 m 表示. 圆柱壳的水平剖面是一环形驻波, 图 2 是鱼洗圆柱面模型 $m=2$ 和 3 情况下的振动模态示意图, 图中的圆周长正好是波长的 2 倍和 3 倍, 这两种模态分别有 4 个和 6 个波节和波腹, 对应于两种稳定驻波, 通常又称为 4 峰振型和 6 峰振型^[1]. 这两种模态在鱼洗的振动问题中是最常见的. 这种计算模型忽略了颗粒对容器的反作用, 也没有考虑底面的振动, 特别是流体又用颗粒物质代替, 所以, 和通常的洗是有很大区别的.

在我们的计算中, 认为鱼洗的振动是给定的, 并且认为在垂直方向是均匀的. 在图 1 所示的坐标系中, 边界上每一点都只沿径向运动, 位置和速度满足

$$r(\alpha) = \Delta r \cos(m\alpha) \sin(\omega t) \quad (1)$$

$$\dot{r}(\alpha) = \omega \Delta r \cos(m\alpha) \cos(\omega t) \quad (2)$$

其中的 Δr 和 ω 为给定的振幅和振动频率, m 是周向波数. $m=2$ 和 $m=3$ 的振动模态如图 2 所示. 作为初步的探索, 底面的运动暂时不考虑, 认为底面是静止的.

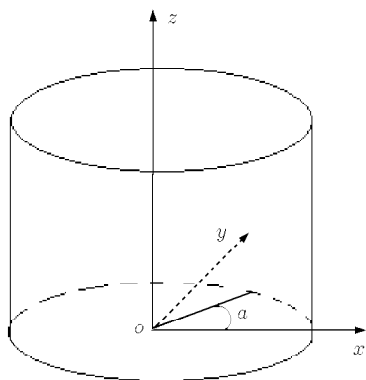


图 1 鱼洗物理模型

Fig.1 The physical model of fish basin

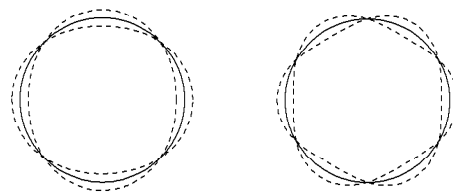


图 2 鱼洗的两种振型^[9]

Fig.2 Two vibration models of the fish basin^[9]

在本文的计算中, 容器也是用粒子来近似表示的, 只是粒子的运动是给定的, 容器的内部则充满着可以自由运动的粒子, 粒子的运动包括平动和旋转两部分. 每个粒子都受到重力和其它粒子所施加力的作用, 其运动满足 Newton 第二定律. 采用这种方法, 最大的好处是可以非常方便地计算含有自由面的问题, 并且允许运动介质出现不连续的情况, 这正是在鱼洗内的流动实验中所观察到的现象, 用通常的计算方法是难以处理的.

1.2 计算模型

对于颗粒物质系统的分子动力学模拟, 已经有多种计算方法可以选择. 主要分为硬球模型 (即事件驱动模型) 和软球模型 (即时间驱动模型) 两种方法. 由于大多数颗粒物质的运动, 特别是在重力场中的运动, 都是多体的、长时间的粒子接触. 用软球模型是最为合适的, 这种模型把颗粒简化为大小不等的圆球, 圆球之间的相互作用力根据其重叠情况, 利用等效的弹性模型以及适当的受力模型来确定. 受力模型问题本身是颗粒材料模拟中一个重要的基础问题, 但一般认为, 对于一个粒子数巨大的颗粒系统, 微观受力模型对宏观的统计结构影响不大.

每个粒子的运动都遵循 Newton 第二定律. 对于 N 个粒子的系统, 运动方程为

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij} + m_i \mathbf{g}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3)$$

$$J_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4)$$

其中 m_i 是第 i 个粒子的质量, $\mathbf{F}_{ij}$ 表示第 j 个粒子对第 i 个粒子的作用力, $\mathbf{g}$ 是重力加速度矢量, J_i 是第 i 个粒子的转动惯量矩阵, $\boldsymbol{\omega}_i$ 是第 i 个粒子的角速度矢量, $\mathbf{r}_{ij}$ 表示粒子 j 相对于粒子 i 的矢量. 所有粒子的运动方程, 构成了一组二阶常微分方程组. 可以看出, 求解方程组的关键是粒子之间的作用力 $\mathbf{F}_{ij}$ 的计算, 一旦此相互作用力给出, 那么系统就是完全确定的.

我们采用一种常用的线性弹簧 - 阻尼器模型来计算粒子间的作用力^[12,13]. 在三维情况下, 假设颗粒是一些软球体, 粒子间只有接触时才有相互作用力. 对于两个互相接触的粒子 i 和 j , 它们的直径分别为 d_i, d_j , 质量分别为 m_i, m_j , 位移矢量分别为 $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$, 速度分别为 $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j$, 角速度分别为 $\boldsymbol{\omega}_i, \boldsymbol{\omega}_j$, 相对位移为 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, 法向单位矢量 $\mathbf{n}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/|\mathbf{r}_{ij}|$, 相对速度 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, 两粒子的重叠尺度 δ_{ij} , 法向相对速度 $\mathbf{v}_{ij}^n$ 以及在接触点的切向相对速度 $\mathbf{v}_{ij}^t$ 可表示如下为 $\delta_{ij} = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - |\mathbf{r}_{ij}|$, $\mathbf{v}_{ij}^n = (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij})\mathbf{n}_{ij}$ 和 $\mathbf{v}_{ij}^t = \mathbf{v}_{ij} - \mathbf{v}_{ij}^n - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\omega}_i + \boldsymbol{\omega}_j) \times \mathbf{r}_{ij}$. 只有当 $\delta_{ij} \geq 0$ 时, 粒子 i 和 j 之间才存在相互作用力, 当粒子 i 和 j 相互接触时, 在接触点上的作用力可以分解为沿二者球心连线方向的法向力和与处于此连线的垂直平面内的切向力. 基于粒子 i 考虑, 作用在粒子 i 上的法向力为 $\mathbf{F}_{ij}^n = k_n \delta_{ij} \mathbf{n}_{ij} - m_e \gamma_n \mathbf{v}_{ij}^n$, 第 1 部分为弹性力, 第 2 部分是和法向相对速度成正比的法向耗散力, k_n 是法向弹簧的弹性系数, γ_n 是法向耗散系数; 切向力为 $\mathbf{F}_{ij}^t = \mathbf{F}_{\text{fric}} - m_e \gamma_t \mathbf{v}_{ij}^t$, 第 1 部分是摩擦力, 第 2 部分是和切向相对速度成正比的切向耗散力, 摩擦力包含静摩擦力和动摩擦力两种不同的情况. 静摩擦力是颗粒流动模拟的难点之一, 目前通常是通过引入切向虚拟弹簧来模拟静摩擦力, 当两个粒子开始接触时, 记录其相对滑动距离 $\mathbf{s}_{ij}^t = \int_{t_0}^{t_c} \mathbf{v}_{ij}^t(\tau) d\tau$, 此距离就是虚拟弹簧的伸长量, 当 $|k_t \mathbf{s}_{ij}^t| < |\mu_s \mathbf{F}_{ij}^n|$ 时, $\mathbf{F}_{\text{fric}} = -k_t \mathbf{s}_{ij}^t$, 即此时是静摩擦力; 当 $|k_t \mathbf{s}_{ij}^t| \geq |\mu_s \mathbf{F}_{ij}^n|$ 时, 取 $\mathbf{F}_{\text{fric}} = -\mu_d \mathbf{F}_{ij}^n \mathbf{s}_{ij}^t / |\mathbf{s}_{ij}^t|$, 此时为动摩擦力, k_t 是切向虚拟弹簧的弹性系数, 当它趋于无穷大时, 相当于不考虑静摩擦力. 对于适当的 k_t 值, 相对于用微小的移动代表了运动趋势, 虚假弹性力代表摩擦力, 摩擦力的方向总是和滑动矢量 $\mathbf{s}_{ij}$ 的方向相反. m_e 是粒子 i 与粒子 j 的有效质量, $m_e = m_i m_j / (m_i + m_j)$, μ_s, μ_d 分别是粒子间的静摩擦系数和动摩擦系数. 在这个作用力模型中, 包含大量的参数, 这些参数和实际情况并不是一一对应的, 只有给出合理的宏观统计特性就可以了. 例如, 碰撞中的恢复系数和摩擦系数, 应该给出宏观上正确的能量衰减指数.

1.3 并行程序设计

为了使得颗粒流动的统计性质和流体接近, 粒子数目必须足够大, 因此, 颗粒流问题的计算量也非常大. 由于计算机能力的限制, 通常的串行计算

很难满足求解问题的要求, 必须采用并行计算. 有一系列不同的算法可用于针对颗粒流动问题的并行计算^[14,15], 本文所采用的是基于 MPI^[10] 的并行编程技术, 将模拟区域划分为多个子区域, 分配给不同的进程, 各进程负责计算其所在区域的颗粒. 将整个物理空间划分为一些大小相等的小长方体网格单元, 网格单元的边长要大于或等于系统中最大颗粒的直径. 在计算的初始时刻我们把每个颗粒完全放置在不同的网格中, 网格结构形成了整个算法的基础, 按照网格单元来存储其中的粒子, 每一个网格单元中的粒子是按顺序存储的. 这样的存储方法对于进程间通讯非常重要, 网格中数据的有序性让我们通过传送一小块内存单元就可以很容易地传递整个网格单元的信息.

由于采用的是软粒子模型, 程序中很大一部分计算量消耗在检查颗粒之间是否发生了碰撞, 因此有必要采用一种有效的方法来检查粒子间是否接触^[16]. 根据牛顿第三定律, 每两个颗粒之间的相互作用力只需要计算一次, 这样就减少了一半的计算量. 我们按照某条作用路径^[17]来访问一个网格的相邻网格, 如图 3 所示. 在三维空间中每一个网格有 26 个相邻网格, 作用路径只需要访问其中一半的网格, 因为这个网格会被它另一半的相邻网格访问到. 如果两个粒子相互接触, 则根据前面给出的方法计算接触点受力, 再由方程 (3) 和 (4) 计算粒子的运动.

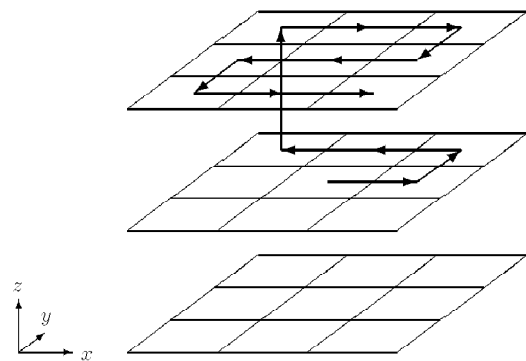


图 3 计算粒子间相互作用力时, 沿网格相邻网格搜索的示意图

Fig.3 The interaction path when computing forces among particles

2 计算结果及分析

2.1 初始状态

计算区域是一个规则的长方体区域, 划分为 $160 \times 160 \times 50$ 的盒子. 在 x 和 y 方向各分配 4 个进程, 一共分配了 16 个进程. 容器也是用固定在空间的

粒子来代替, 这些粒子的运动是给定的. 初始时刻, 在每个盒子里给一个粒子, 处于容器外部的粒子是无效的, 最终有效的粒子数为 297889, 其中容器壁面的粒子数为 56339, 容器中的粒子数为 241550. 粒子的半径是呈正态分布的, 方差是平均值的 10%, 质量根据半径在认为密度相同的情况下自动计算得到. 在这个颗粒系统中, 特征长度取为粒子的平均半径 σ , 特征质量取为粒子的平均质量 m , 系统的特征时间 τ 取为粒子自由下落 σ 的特定倍数所需要的时间, 即 $\tau = (c\sigma/g)^{1/2}$, 选择合适的 c 值, 使得 $\tau = 1$. 在本文的计算中, 盒子的边长为 3σ , 计算的时间步长 $\Delta t = 10^{-4}\tau$. 法向和切向弹簧的弹性系数分别为 $k_{n,pp} = 2.5 \times 10^5 m\tau^{-2}$ 和 $k_{t,pp} = 0.57 \times 10^5 m\tau^{-2}$, 法向和切向的碰撞阻尼系数分别为 $\gamma_{n,pp} = 100.0\tau^{-1}$ 和 $\gamma_{t,pp} = 32.0\tau^{-1}$. 粒子间的静摩擦系数和动摩擦系数分别是 $\mu_{s,pp} = 0.84$, $\mu_{d,pp} = 0.4$. 对于粒子与壁面的碰撞, 法向和切向虚假弹簧的弹性系数分别为 $k_{n,pw} = 10^6 m\tau^{-2}$ 和 $k_{t,pw} = 2.28 \times 10^5 m\tau^{-2}$, 法向和切向的碰撞阻尼系数分别为 $\gamma_{n,pw} = 400.0\tau^{-1}$ 和 $\gamma_{t,pw} = 128.0\tau^{-1}$, 粒子与壁面间的静摩擦系数和动摩擦系数分别是 $\mu_{s,pw} = 0.95$ 和 $\mu_{d,pw} = 0.5$. 这些参数的选择参考了颗粒材料的实际值以及文献中的取值, 还不是从流体的宏观性质得到的, 因此, 这个系统的耗散将是非常大的. 在微观上的参数要比宏观参数多, 但微观的阻尼系数可以和宏观上的恢复系数对应起来^[18]. 初始时刻, 所有粒子从其初始位置自由释放, 粒子在重力作用下自由下落, 自然地互相碰撞, 同时也和壁面碰撞. 由于碰撞过程是非弹性的, 颗粒系统最后趋于静止. 图 4 是颗粒系

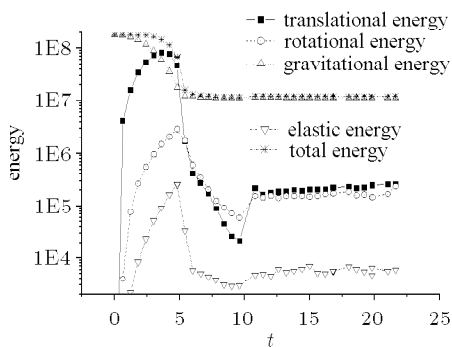


图 4 粒子系统总的平动动能、转动动能、弹性势能、重力势能以及总能量随时间变化的对数坐标图

Fig.4 Logarithmic plot of the translational energy, rotational energy, elastic energy, gravitational energy and the total energy of the granular system as functions of time

统的总平动动能、转动动能、弹性势能、重力势能以及总机械能随时间变化曲线图. 从图中可以看出, 颗粒系统的平动动能、转动动能、弹性势能都从 0 开始增加到某最大值, 然后逐渐衰减. 系统的重力势能和总能量逐渐减小, 经过 $t = 6\tau$ 以后, 颗粒系统的重力势能和高度趋于恒定, 而动能和弹性势能衰减到很小的量级. 这时候总能量和重力势能趋于相等, 颗粒系统处于准平衡状态. 在经过一段时间的衰减过程以后, 我们从 $t = 10\tau$ 开始对容器壁施加振动激励, 令容器壁做周向波数 $m = 2$ 的强迫振动, 最大振幅为 $\Delta r = 0.9\sigma$, 振动频率 $\omega = 400\tau^{-1}$.

2.2 激励振动下颗粒的运动

从 $t = 10\tau$ 开始, 即颗粒系统基本处于准平衡状态以后, 给予圆柱壳振动激励. 我们记录下各个时刻颗粒系统的位置, 并描绘整个系统的轮廓图, 考察自由面的情况. 经过很短的时间就会发现, 在靠近容器壁的 4 处位置有颗粒不断被向上抛起, 且能达到较高的高度. 图 5 所示的是 $t = 10.25\tau$ 时鱼洗中颗粒物质自由表面的轮廓图, 壁面受到的是 4 峰模态振动激励. 对比实际的鱼洗实验, 可以看出用颗粒材料模拟的结果与实际发生现象在表面上非常相似, 尽管二者的机制有很大的不同. 图 6 是不同时刻鱼洗中颗粒物质自由表面的轮廓图, 显然, 随着时间的推移, 颗粒表面的 4 个峰从靠近圆柱壳的 4 个位置开始, 分别向圆柱中心位置传播, 同时, 因为颗粒系统的高度耗散性而衰减.

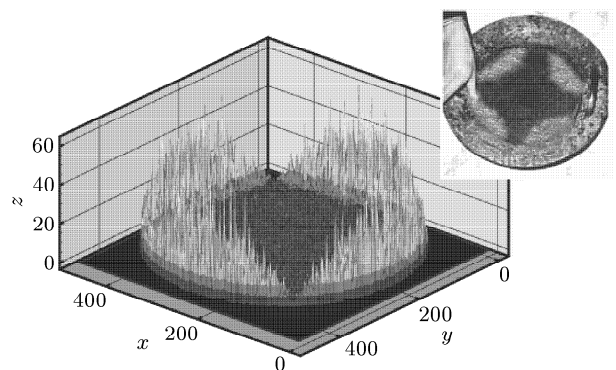


图 5 数值模拟的鱼洗“喷水”现象, 这是 $t = 10.25\tau$ 时系统中颗粒的三维轮廓图, 内部小图是实验照片, 二者定性一致

Fig.5 The spouting phenomenon obtained in our simulation, the three-dimensional contour map of the granular system at $t = 10.25\tau$. The inset picture, which is an experiment photo, showed the similar phenomenon

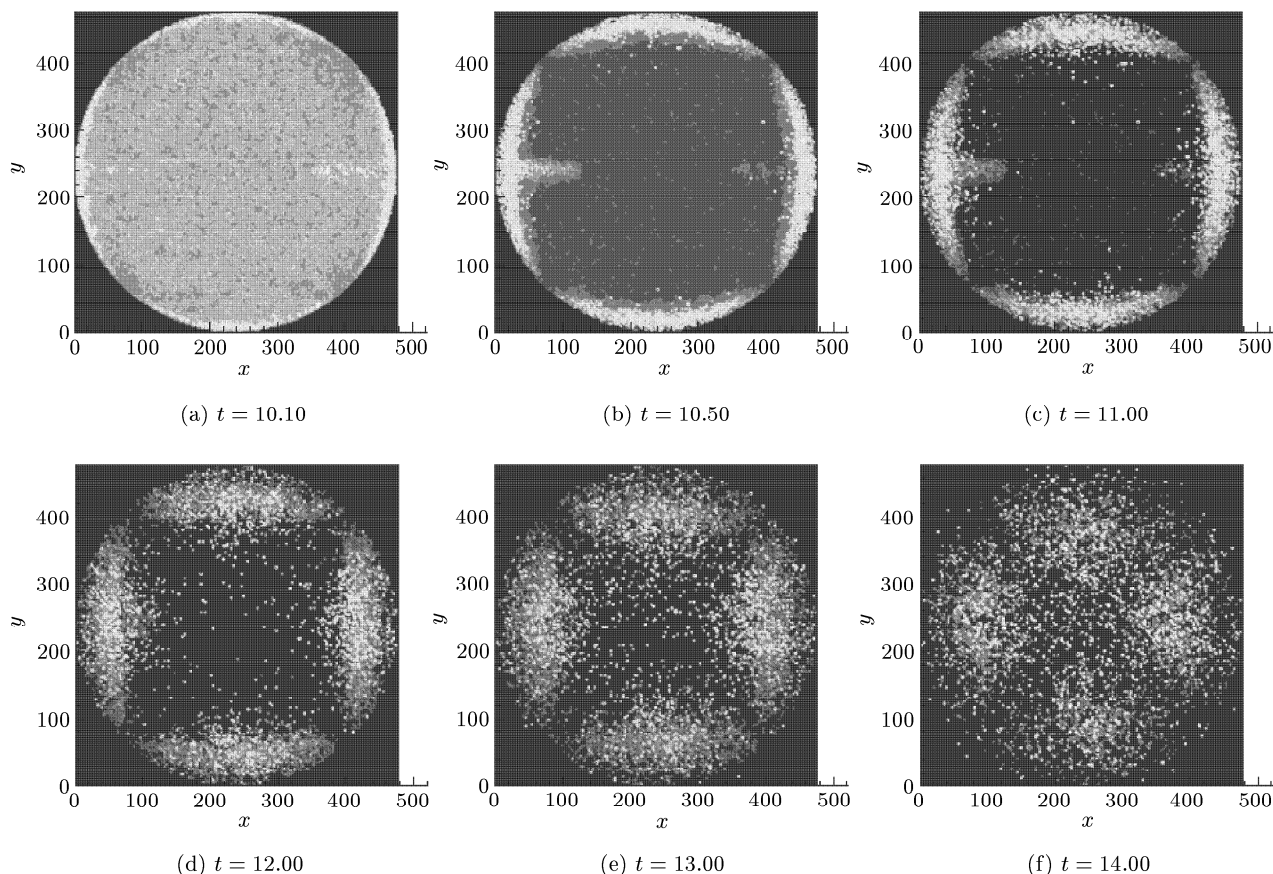


图 6 不同时刻的二维等高图

Fig.6 The contour map of the granular system at different times

我们沿着容器的两个对称的边界激励点选取一个竖直截面, 图 7 显示的是 $t = 10.50\tau$ 时此截面上颗粒的速度矢量分布. 可以看出容器中颗粒运动的趋势, 两个对称边界处的颗粒基本上都是沿着容器

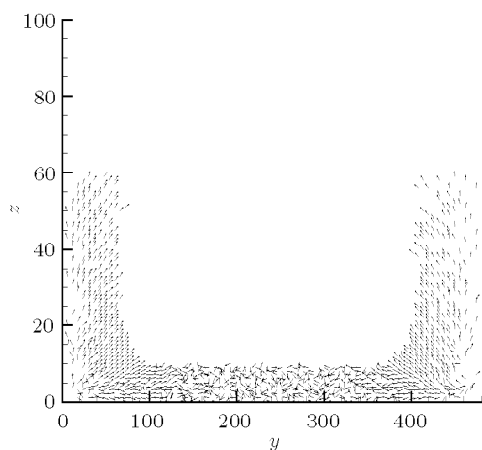


图 7 竖直截面上颗粒的速度矢量图

Fig.7 The velocity vectors in a vertical section through two excited points

中心运动, 由于受到中间颗粒的耗散作用, 在距离边界不远处, 速度方向就已经变得凌乱. 并且可以明显看到边界附近的颗粒向上跳起.

为了考察颗粒材料内部的能量传递规律, 我们统计粒子在激振开始后内部颗粒所获得的能量, 此能量包含动能、弹性势能还有重力势能, 我们考察能量是如何传递到内部的. 主要考察弹性势能的传递, 不难理解, 这里的弹性势能和流体中的压力相当. 为了显示方便, 我们把垂直方向的能量累加起来, 即仅考察能量在水平方向传播, 且是一种平均行为. 图 8 是壁面激励开始之后几个不同时刻的弹性势等值图, 可以看出, 颗粒物质中的弹性势能以波的形式由壁面向中心传播, 弹性波面在壁面的 4 个对称位置交替出现. 这段时间内还没有观察到明显的颗粒跳起现象. 由于颗粒系统中的能量耗散快, 外加上在垂直方向取了平均, 在很短的时间内, 这些波便变得十分模糊. 最后表现为壁面附近的颗粒在竖直方向高高跳起, 这时候恰好开始形成了如图 5 所示的类似鱼洗中水沿壁面跳起的现象.

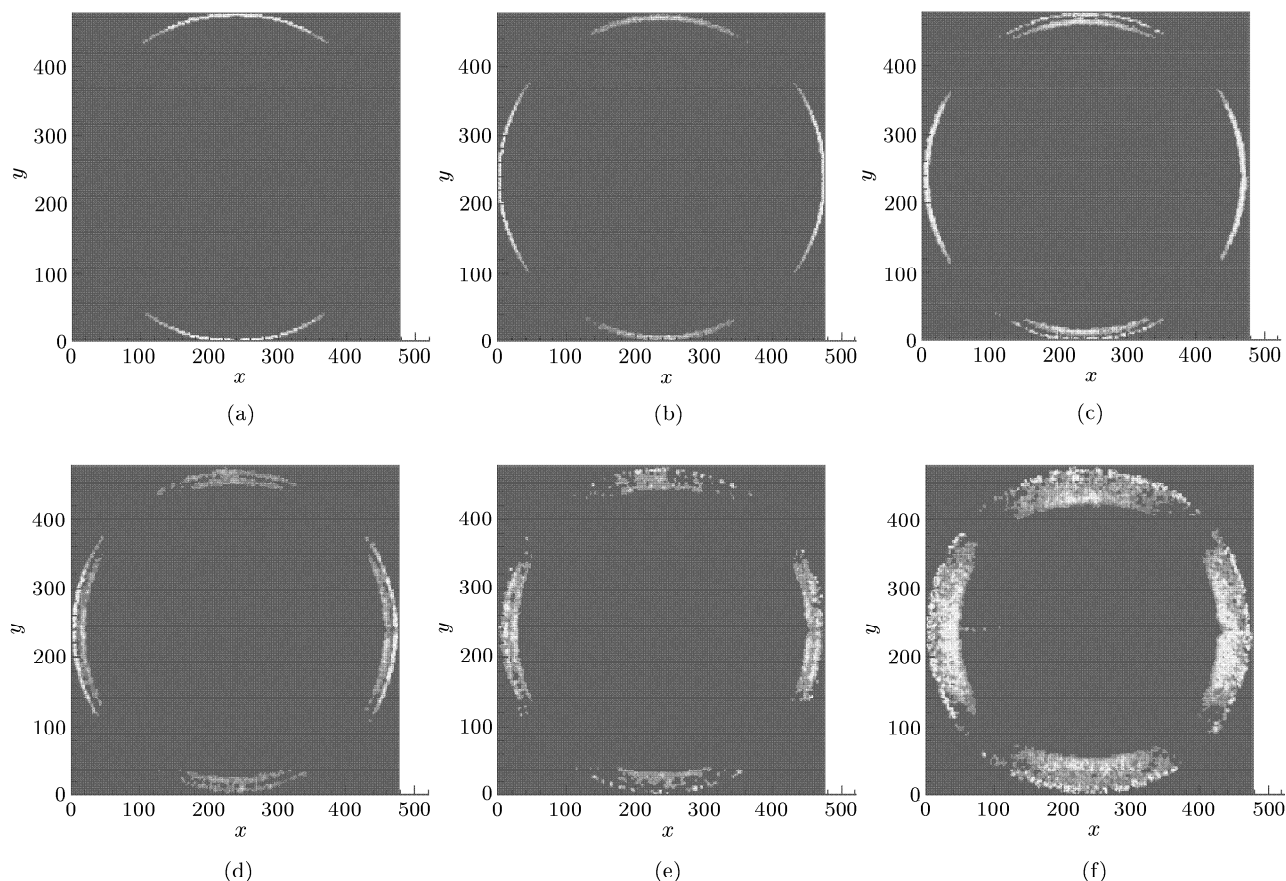
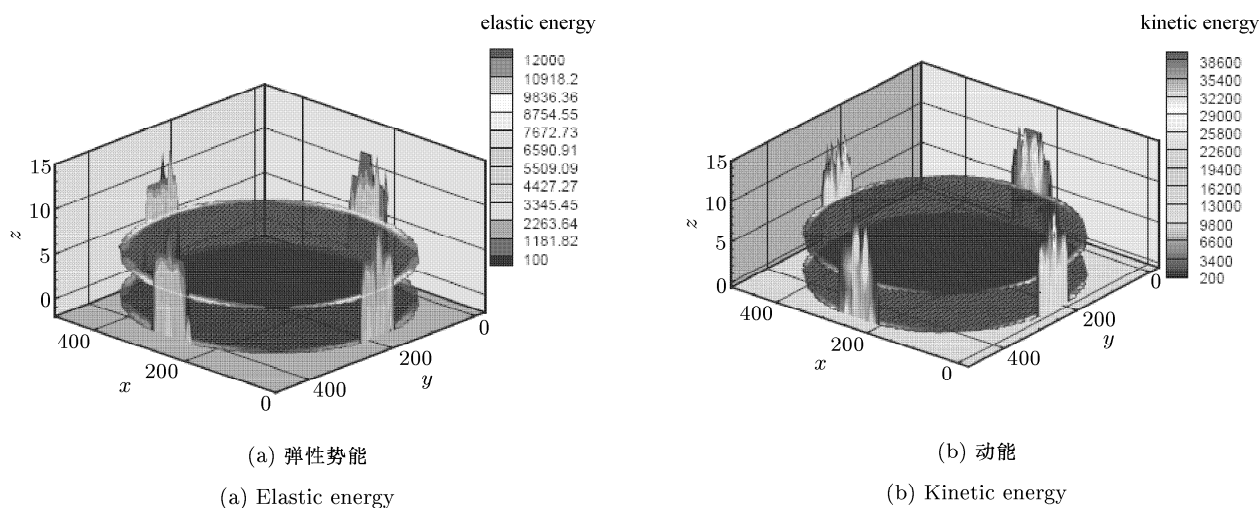


图 8 颗粒物质中弹性波的传播示意图

Fig.8 The transmission of elastic wave in granular media

接下来我们考察激振开始以后整个三维颗粒系统中能量的分布. 对空间中各处的能量在时间上进行平均, 图 9 是在激振开始后一个周期内平均弹性

势能和动能的三维分布. 可以看出最大能量集中在各激励点附近, 其余位置相对较小. 图 10 是同一周期内粒子动能 E_k 、弹性势能 E_s 以及 $E_k + E_s$ 的概

(a) 弹性势能
(a) Elastic energy(b) 动能
(b) Kinetic energy图 9 激振开始后一个周期内平均弹性势能和动能的三维分布, 其中在 z 方向选取了两个截面Fig.9 The 3-d distribution of average elastic energy and kinetic energy during one period of time after excitation, where two sections are selected along z direction

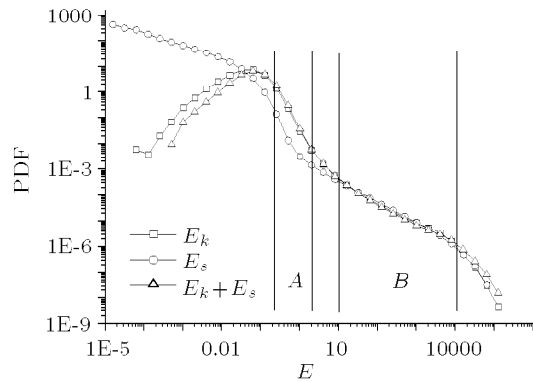


图 10 激振开始后一个周期内粒子的动能 E_k , 弹性势能 E_s 和总能量 $E_k + E_s$ 的概率密度分布

Fig.10 The probability density function of kinetic energy E_k , elastic potential energy E_s , and total energy $E_k + E_s$ during one period of time after excitation

率密度分布图. 可以看出, 弹性势能的大能量区集中在低能量部分, 说明势能的传播快, 在空间分布上比动能要均匀得多. 另外一个现象是, 动能存在两个线性区, 即图中的 A 区和 B 区, A 区大约占总能量的 40%, 跨越能量从 0.2 到 2 的一个数量级, B 区大约占总能量的 4%, 跨越从 10 到 10^4 三个数量级. 在 A 区, 可以得到 $E_k \sim E^{-2.691}$, $E_k + E_s \sim E^{-2.782}$, 在 B 区有 $E_k \sim E^{-0.771}$, $E_s \sim E^{-0.813}$, $E_k + E_s \sim E^{-0.776}$.

我们对不同的振幅 Δr 和振动频率 ω 进行了模拟, 发现当它们的值足够大以后均能激起相似的现象, 而且 Δr 和 ω 越大, 激发的速度更快. 对于图 2 所示的 6 峰模态也产生了明显的颗粒跳起和能量传播现象.

3 结论和说明

作为中华古代文物之一的鱼洗, 其有趣现象的背后蕴涵着复杂的力学知识. 本文利用数值模拟在颗粒物质研究中独特的优越性来模拟类似鱼洗内流体流动问题的三维颗粒系统. 尽管随着计算机性能的提高, 数值模拟在对颗粒物质的研究中起到了越来越重要的作用. 但仍然受计算机性能的限制, 大多数针对颗粒系统的数值模拟都是在二维情况下进行. 对于三维大规模问题的计算, 必须采用并行化. 本文首先利用分子动力学方法发展了并行计算程序, 用来对三维颗粒系统进行数值模拟. 结果表明, 鱼洗内的颗粒流动也会产生类似水流的现象, 计算结果与流体的实验具有一定的可比性. 统计得出了颗粒系统中能量的概率分布, 明显观察到能量分布中有两个明显的指数区. 同时还观察到颗粒物质中能量

以波的形式从边界向内部传播. 通过本文的例子, 在展示了颗粒流动类似液体流动的这一奇特现象同时, 也为鱼洗这种复杂流动的数值模拟探索出一个新的方法.

参 考 文 献

- 1 赵凯华, 秦克诚编. 物理学照亮世界. 北京大学出版社, 2005, 246~273 (Zhao Kaihua, Qin Kecheng. Physics Enlightens the World. Peking University Press, 2005, 246~273 (in Chinese))
- 2 Wang Dajun, Bell Chime, Dragon Washbasin. Modern scientific information hidden in ancient chinese science and technology. *Technische Mechanik*, 2005, 25 (1): 9~16
- 3 贾启芬, 于雯, 刘习军等. 多自由度分段光滑非线性系统的近似解 — 中华文物龙洗的自激振动. 力学学报, 2004, 36(3): 373~378 (Jia Qifen, Yu Wen, Liu Xijun, et al. Approximate analytical solution of the piecewise-smooth nonlinear systems of multi-degrees-of-freedom — The self-excited vibration of the Chinese cultural relic dragon washbasin. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 36(3): 373~378 (in Chinese))
- 4 Jaeger HM, Nagel SR, Behringer RP. Granular solids, liquids, and gases. *Rev Mod Phys*, 1996, 68: 1259~1273
- 5 唐孝威, 张训生, 陆坤权主编. 交通流与颗粒流. 杭州: 浙江大学出版社, 2004, 174~191 (Tang Xiaowei, Zhang Xunsheng, Lu Kunquan, eds. Traffic Flow and Granular Flow. Hangzhou: Zhejiang University Press, 2004, 174~191 (in Chinese))
- 6 夏建新, 韩鹏. 水沙流中离散颗粒流动应力关系. 力学学报, 2004, 36(2): 213~217 (Xia Jianxin, Han Peng. Stresses of Cohesionless Solids Flow in Water-sediment Mixture. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 36(2): 213~217 (in Chinese))
- 7 Goldhirsch I, Zanetti G. Clustering instability in dissipative gases. *Phys Rev Lett*, 1993, 70: 1619
- 8 Behringer RP, Jenkins JT, editors. Powders and Grains 97. Balkema, Rotterdam, 1997
- 9 Kudrolli A, Wolpert M, Gollub JP. Cluster formation due to collisions in Granular Material. *Phys Rev Lett*, 1997, 78: 1383
- 10 都志辉. 高性能计算并行编程技术 — MPI 并行程序设计. 北京: 清华大学出版社, 2001 (Du Zhihui. High Performance Computing Parallel Programming Technique — MPI Parallel Program Design. Beijing: Tsinghua University Press, 2001 (in Chinese))
- 11 严燕来, 梁华翰, 浦琴娣等. 鱼洗振型浅析. 大学物理, 1996, 15(2): 41~44 (Yan Yanlai, Liang Huahan, Pu Qindi, et al. Investigation of Vibration Modes of a Fish-Basin. *College Physics*, 1996, 15(2): 41~44 (in Chinese))
- 12 Cundall PA, Strack ODL. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1979, 29(1): 47~65
- 13 Leonardo E. Silbert et al. Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology. *Physical Review E*, 2001, 64: 051302
- 14 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117: 1~19

- 15 Ferrez JA, Müller D, Liebling TM. Parallel implementation of a distinct element method for granular media simulation on the Cray T3D. *EPFL Supercomputing Review*, 1996, 8: 4~7
- 16 Ristow GH. Granular dynamics: a review about recent molecular dynamics simulations of granular materials. *Annual Reviews of Computational Physics*, 1994, 1: 275~308
- 17 Lomdahl PS, Tamayo P, Grønbech-Jensen N, et al. Proc. of Supercomputing 93. IEEE Computer Society, 1993: 520~527
- 18 Chen S, Deng Y, Nie X, et al. Clustering kinetics of granular media in three dimensions. *Physics Letters A*, 2000, 269: 218~223

NUMERICAL SIMULATION OF GRANULAR FLOW IN “CHINESE FISH BASIN”¹⁾

Li Heng Cai Qingdong²⁾

(State Key Laboratory of Turbulence and Complex System, Peking University, Beijing 100871, China)

(Center of Applied Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract As demonstrated in experiments, highly nonlinear reactions exist in “Chinese Fish Basin”, which finally lead to surface discontinuity. It is difficult to deal with such problems in numerical simulation. In this paper, Molecular Dynamics Method is employed to simulate three-dimensional granular flow in the Chinese Fish Basin. We consider particles in the container from the viewpoint of discretization, without the requirement of continuous media. When the number of particles in the simulation is large enough, the behaviors of granular flow are statistically equivalent to those of the continuous media. We first develop a parallel program based on message passing interface(MPI), which can be used to simulate large scale granular flow. Interesting phenomena in the “Chinese Fish Basin” are demonstrated with our simulation results. As a result of the excitation from outside, energy from the boundary spreads to the interior of the basin in the form of wave, and dissipates quickly. And particles spout upward near the excited points, which is in consistent to the water spouting in the real Fish Basin.

Key words granular flow, Chinese Fish Basin, molecular dynamics simulation, parallel computation

Received 25 October 2006, revised 12 November 2007.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10128204).

2) E-mail: caiqd@pku.edu.cn