

О.І. Герасимов, д.ф.-м.н., О.А. Клименков, А.Я. Співак, М.М. Худинцев, к.ф.-м.н.
Одеський державний екологічний університет

КІНЕТИКА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ У ПОЛІ ВІБРОПРИСКОРЮВАНЬ

Запропоновані теоретичні моделі явищ компактизації та сегрегації, що відбуваються у гранульованих матеріалах. На цьому шляху використовують кінетичний підхід, який базується на рівняннях руху для відповідно визначеного параметра впорядкування. Отримані результати мають загальний характер і можуть бути застосовані також для дослідження кінетики фазових перетворювань, де існування метастабільних повільно релаксуючих станів відіграє суттєву роль.

Ключові слова: *гранульована матерія, компактизація, сегрегація, кінетика параметра впорядкування, фазовий перехід.*

Вступ

Гранульовані матеріали складаються з макроскопічної кількості твердих частинок-гранул, які можуть мати досить велику дисперсію власних розмірів. Такі системи як у стані спокою, так і за умов зовнішніх збурень виявляють поведінку, яка притаманна звичайним газам, рідинам та твердим тілам. Причому за своєю фізичною структурою вони суттєво відрізняються від останніх. Експерименти з гранульованими матеріалами показують значний перелік ефектів, які є специфічними і проявляються лише у випадку гранульованих матеріалів такі, наприклад, як сегрегація, формування дефектів (лакун), арок, насичення вертикального тиску, ланцюжкова кластеризація та непружній колапс, різноманітні види кооперативного руху у вигляді нелінійних поверхневих хвиль та багато інших [1].

На цей час у теоретичному вивченні гранульованого стану матерії домінують наступні головні напрями: кінетичний підхід, суцільно механічний підхід, динамічний підхід, які набули відомого розвитку [2-4].

Незважаючи на часткове порозуміння теоретичного опису окремих динамічних процесів та особливостей структури гранульованих матеріалів, розбудова теоретичної бази їх опису в інтервалі параметрів, що є типовими для так званих неоднорідних метастабільних станів, перебуває лише на початковому етапі і потребує розвитку альтернативних методів досліджень.

Наші дослідження були спрямовані на теоретичне вивчення поведінки гранульованих матеріалів, збурених зовнішнім впливом поблизу стаціонарних станів, умови існування яких знаходилися самоузгоджено. За цих умов ми очікуємо можливість адекватного застосування елементів статистичної фізики для опису фізичних властивостей дисипативних систем. За допомогою простих, наочних моделей були досліджені можливості існування асимптотичних стаціонарних станів гранульованих матеріалів у одновимірному просторі, запропоновані рівняння стану у диференціальній формі [5], відповідні фазові діаграми, досліджені релаксаційні процеси, які супроводжують явища сегрегації та компактизації.

1. Кінетична модель вільного об'єму

Розглянемо найпростішу кінетичну модель компактизації, яка базується на теорії вільного об'єму. Покладемо v - число гранул у одиниці об'єму (аналог густини), ω - об'єм кожної окремої гранули. Тоді об'ємна фракція (параметр компактизації) Ψ , яку займають гранули, надається у наступному вигляді

$$\Psi = v\omega. \quad (1)$$

Внаслідок компактизації гранульована система ущільнюється. При цьому повний об'єм системи зменшується, і відповідно зростають значення густини v та параметра компактизації Ψ . Можна очікувати, що система досягне максимально можливого ущільнення, відповідно густиною v_m і частиною зайнятого об'єму Ψ_m (параметром компактизації)

$$\Psi_m = v_m \omega. \quad (2)$$

У найпростішому випадку сферичних частинок, які розподілено у тривимірному просторі, максимально можливе значення параметра компактизації Ψ_m для твердих сфер точно розраховано і становить близько 0.74 [6].

Система з параметром компактизації Ψ_m характеризується найменшим значенням середнього вільного об'єму v , у розрахунку на одну гранулу

$$v = \frac{1}{v} - \frac{1}{v_m} = \frac{\omega}{\Psi} - \frac{\omega}{\Psi_m} = \omega \left(\frac{1}{\Psi} - \frac{1}{\Psi_m} \right) = \omega \frac{\Psi_m - \Psi}{\Psi \Psi_m}. \quad (3)$$

Постулюємо, що імовірність для окремої частинки проковзнути крізь отвір між сусідніми частинками задовольняє розподілу Пуассона $P(\Omega)$:

$$P(\Omega) = \frac{1}{v} \exp\left(-\frac{\Omega}{v}\right), \quad (4)$$

де $\Omega \geq \omega$ - розмір отвору між сусідніми частинками.

Кінетичний параметр компактизації у цьому випадку вміщує фактор

$$f = f(\Omega = \omega) = \exp\left(-\frac{\omega}{v}\right) = \exp\left(-\frac{\Psi \Psi_m}{\Psi_m - \Psi}\right). \quad (5)$$

Сформулюємо кінетичне рівняння процесу у наступному вигляді

$$\frac{d\Psi}{d\tau} = k \exp\left(-\frac{\Psi \Psi_m}{\Psi_m - \Psi}\right), \quad (6)$$

де k - кінетичний коефіцієнт.

Значимо, що час тут ми асоціюємо з кількістю струшуваль (циклів струсу), які діють на систему.

Інтегруючи (6), отримуємо функціонал

$$e^{\Psi_m k\tau} = \int_{\Psi_1}^{\Psi} d\Psi \exp\left(\frac{\Psi_m^2}{\Psi_m - \Psi}\right), \quad (7)$$

де Ψ_1 - початковий параметр компактизації системи у момент часу $\tau = 0$. Зрозуміло, що верхня межа інтегрування (Ψ) може набувати значення у наступному проміжку

$$\Psi_1 < \Psi < \Psi_m. \quad (8)$$

Виконуючі заміну

$$\frac{1}{\Psi_m - \Psi} = x, \quad (9)$$

після підстановок (9) в (7) та елементарних перетворень отримуємо

$$e^{\Psi_m k \tau} = - \frac{e^{\Psi_m^2 x}}{x} \Big|_{x_1}^x + \Psi_m^2 \left[E_1(-\Psi_m^2 x_1) - E_1(-\Psi_m^2 x) \right], \quad (10)$$

де $E_1(y)$ - інтегральна експонента.

У першому наближенні приблизний розв'язок (7) можна надати у наступному вигляді [7]:

$$\Psi \approx \Psi_m \left(1 - \frac{\Psi_m \Gamma}{1 + \Gamma \ln \left(1 + \frac{\tau}{\tau_0} \right)} \right), \quad (11)$$

де τ_0 і Γ , відповідно, характерний час процесу і константа, які визначаються наступним чином

$$\tau_0 = \frac{1}{k} \left(\frac{\Psi_m - \Psi_1}{\Psi_m} \right)^2 \exp \left(\frac{\Psi_m \Psi_1}{\Psi_m - \Psi_1} \right), \quad \Gamma = \frac{\Psi_m - \Psi_1}{\Psi_m^2}. \quad (12)$$

Як зазначено у [8,9] фізичний експеримент та чисельне моделювання з гранульованої компактизації свідчать як раз про виключно логарифмічний характер протікання таких процесів.

Підкреслимо, що розроблена кінетична модель підтверджує результати безпосередніх фізичних та чисельних експериментів. Зазначимо, що формально, застосована модель не враховує процеси дисипації у гранульованих відкритих системах. Зрозуміло, що застосування формалізму моделі до дисипативної системи можливо лише поблизу стаціонарних станів останньої. Таким чином урахування дисипативних процесів здійснюється так би мовити ефективно у рамках постулювання існування самого стаціонарного стану у нерівноважній системі.

Збудована модель дозволяє поширити наші уявлення про структуру та динаміку перетворень у гранульованих матеріалах шляхом побудови відповідної фазової діаграми. Така діаграма, яка базується на елементарних уявленнях про компактизацію гранульованих матеріалів, зокрема на рис. 1.

Компактизація здійснюється вздовж довільного контуру діаграми, який відповідає співіснуванню у будь-який момент часу фази gravel (крупніші частинки та дисперговані проміж ними дрібні частинки) та pudding (дрібнодисперсна суміш з вкрапленнями великих частинок). Розшарування здійснюється вздовж умовної фазової траєкторії OA, яка розділяє вищенаведені стани. Описана якісна фазова діаграма є за визначенням суттєво асиметричною. Взагалі кажучи, застосування кінетичної теорії вільного об'єму до багатокомпонентної суміші без будь-яких суттєвих змін може бути здійсненим за тотожністю, що і у винятку однокомпонентної системи. Останнє є наслідком того факту, що однокомпонентна модель вільного об'єму ефективно є двокомпонентною [6].

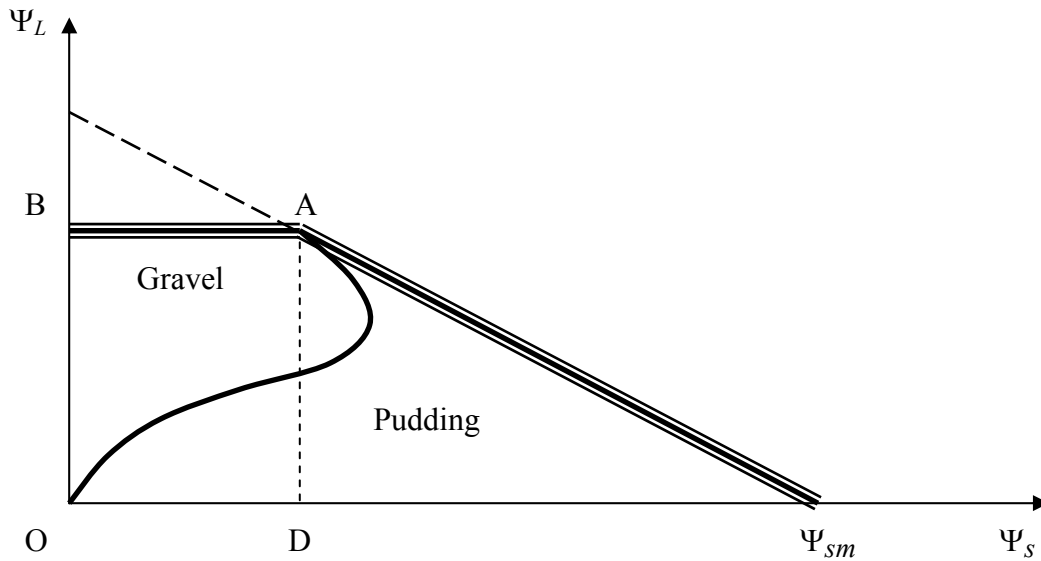


Рисунок 1 - Фазова діаграма суміші гранул.

2. Дослідження кінетики переходів між стаціонарними станами на прикладі сегрегації у гранульованій системі

Базуючись на даних експериментів, у яких спостерігалось явище сегрегації у сухих гранульованих системах, що складаються з суміші гранул, у 2-вимірному або 3-вимірному контейнерах, запропонована теоретична модель цього явища яка базується на кінетичних рівняннях для відповідного параметра впорядкування $\tilde{\varphi}(\vec{r}, t)$:

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tau} = \Delta' \tilde{\varphi} + \tilde{\varphi} - \tilde{\varphi}^3 \quad (13)$$

у випадку неконсервативного поля параметра впорядкування,

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tau'} = -\Delta' \left\{ \Delta' \tilde{\varphi} + \tilde{\varphi} - \tilde{\varphi}^3 \right\} \quad (14)$$

у випадку консервативного поля впорядкування.

За допомогою методів, розвинутих у теорії Ландау-Гінзбурга (для неконсервативного поля параметра впорядкування) або Кана-Хільярда (для консервативного поля впорядкування), знайдено аналітичні розв'язки моделей. Отримані теоретичні результати у порівнянні з даними експериментів, а також чисельного моделювання показують добре якісне співпадання. Знайдені ізоморфізми між деякими явищами у гранульованих системах і кінетикою фазових переходів у статистичних системах ведуть до встановлення зв'язку між стохастичною динамікою дисипативних систем і статистичною фізикою, розділу, який ще лишається далеким від остаточного розв'язку. Важливо підкреслити, що нові результати, отримані у розроблених моделях, піддаються безпосередній експериментальній перевірці. Проведений аналіз свідчить, що сегрегація у гранульованих системах є критичним кінетичним явищем, в деякому сенсі - ізоморфним обмеженому дифузіїю скупченню.

Отримані результати, що мають достатньо загальний характер, можуть бути застосовані практично без будь-яких змін до дослідження особливостей кінетики фазових переходів першого та другого роду поблизу критичних станів, де існування метастабільних повільно релаксуючих режимів відіграє важливу роль.

Порівнюючи результати, отримані у запропонованій моделі явища сегрегації у гранульованій системі, використанням кінетичного рівняння для відповідного параметра порядку, з вивченням відомої проблеми існування рівноваги поршня (пістона) у нерівноважних статистичних станах, можна зробити попередній висновок, що явище сегрегації може бути зображено як формування метастабільної системи у вигляді повільно релаксуючих (так би мовити заморожених) кластерів.

Порівнюючи теорію з безпосереднім фізичним експериментом, ми спостерігаємо контрастну якісну подоби, яка добре апроксимується формулою

$$\tilde{\varphi}(t) = \tilde{\varphi}(\infty) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right) \right), \quad (15)$$

де $\tilde{\varphi}(t)$ та $\tilde{\varphi}(\infty)$ параметри порядку системи у момент часу t та ∞ відповідно; τ_c - характерний час сегрегації.

Таким чином, ідея використання механізму релаксаційного переходу для відповідного поля параметра порядку у межах спостережуваної поведінки типу точки притягання сегрегуючої системи, виглядає вельми корисною. Нагадаємо, що наші результати отримані у межах припущення, що просторові варіації мають бути малі у порівнянні із середньою довжиною вільного пробігу, а також із розмірами частинок. При цьому, одним з джерел можливого повільного руху є гранульований потік, наприклад, від периферії контейнера до його осі симетрії. Ці процеси можуть бути описані, якщо покласти, що відокремлена частина системи знаходиться у локальній термодинамічній рівновазі, а далі використовуючи закони збереження, записати відповідне рівняння руху.

Наступним менш зрозумілим (і до того ж експериментально недостатньо вивченим) є склоподібна поведінка, яка характеризується частковим заморожуванням ступенів свободи. Саме його існування сповільнює релаксацію до станів повної рівноваги (цю поведінку було передбачено і описано як існування повільно релаксуючого гетерогенного стану у запропонованій моделі для випадку консервативного поля впорядкування). Взагалі, можна очікувати значної склоподібності у поведінці гранульованих систем у полі віброприскорювань. Детальний порівняльний аналіз експериментально спостережуваних (і теоретично отриманих) модельних даних вказує на існування згасаючих коливань, які накладені на однорідну релаксацію параметра впорядкування. Наші результати таким чином, демонструють, що у той час, як запропонована модель якісно поводить себе у відповідності зі спостережуваними сценаріями, явище сегрегації у термінах поля параметра порядку, ще вміщує несподіванки, які вимагають подальшого детального вивчення як експериментального, так і за допомогою теоретичних методів і альтернативних моделей [10]

Список літератури

1. *Duran J. Sands, Powders and Grains.*-NY.: Springer-Verlag, 2000.-200p.
2. *Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P.* The physics of granular materials. // *Rev.Mod.Phys.*-1996.-68.- P.1259-1272.
3. *Kadanoff L.* Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows.. // *Rev.Mod.Phys.*-1999.-71.-P.435-447.
4. *De Gennes P.G.* Granular matter: a tentative view. // *Rev.Mod.Phys.*-1999.-71,S.- P.374-385.

5. *Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M.* Differential equation of state of a model system with a singular measure: application to granular materials in steady states. // *Physica A.*-2002.-Vol.312.-P.172-180.
6. *Гирифельдер Д.О.* (и др.) Молекулярная теория жидкостей и газов. М.: Мир, 1973.-350с.
7. *Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya.* The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations. // *Ukr.Journ.Phys.*-2005.-Vol.50, № 6.-P.624-632.
8. *Knight J.B., Fandrich C.G., Lau C.N., Jaeger H.M., Nagel S.R.* Density relaxation in vibrated granular materials. // *Phys.Rev.E.*-1995.-Vol.51.-P.3957-3965.
9. *Vilarruel F.* (and all) Compaction relaxation and ordering in granular materials. // *Phys.Rev.E.*-2000.-Vol.61.-P.-6914-6932.
10. *Gerasimov O.I., Schram P., Kitahara K.* Kinetics of granular segregation. // *Ukr.Journ.Phys.*-2003.-Vol.48, № 8.-P.885-896.

Кинетика гранулированных материалов в поле виброускорений.

Герасимов О.И., Клименков О.А., Спивак А.Я., Худинцев Н.Н.

Предложены теоретические модели явлений компактизации и сегрегации в гранулированных материалах. Построены уравнения движения для адекватно введенного параметра порядка. Полученные результаты использованы для построения фазовых диаграмм и качественно согласуются с экспериментальными данными. Подчеркивается общий характер полученных соотношений позволяющий использовать их для решения задач теории фазовых переходов в статистически заданных системах.
Ключевые слова: *гранулированные материалы, компактизация, сегрегация, кинетика параметра порядка, фазовый переход.*

The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations. Gerasymov O., Khudyntsev N., Klymenkov O., Spivak A.

Theoretical modeling of granular compaction and segregation processes have been done. The relevant order parameter field relaxation is performed by means of solution of the appropriate equation of motion. The important character of obtained results for the general theory of phase transitions is emphasized.

Keywords: *granular materials, compaction, segregation, kinetics of order parameter, phase transition.*