

УДК 539

ПОБУДОВИ ВОРОНОГО ТА КЛАСИЧНА ТЕОРІЯ МОМЕНТІВ У ЗАСТОСУВАННІ ДО ПАРАМЕТРИЗАЦІЇ СТРУКТУРИ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

О.І. Герасимов, д.ф.-м.н., М.М. Худинцев, к.ф.-м.н.

Одеський державний екологічний університет,
вул. Львівська, 15, 65016, Одеса, Україна, gerasymovoleg@gmail.com

Теоретичний опис структури гранульованих матеріалів проводиться за допомогою методу Вороного. Структурні перетворення досліджуються шляхом детального аналізу відповідних розподілів фігур Вороного. Запропоновано аналітичний вираз для функції розподілу площ фігур Вороного в термінах класичної теорії моментів, який не потребує використання додаткових припущень щодо застосування методів статистичної механіки до опису фізичних властивостей гранульованих систем.

Ключові слова: гранульовані матеріали, фігури Вороного, класична теорія моментів, стиснені стани

1. ВСТУП

Гранульовані матеріали (ГМ) являють собою ансамбль великої кількості дискретних твердих частинок проміж якими діють виключно сили відштовхувального характеру. Вони широко представлені, як у природі так і у техніці. Навідміну від регулярних станів речовини, структуру ГМ у 2D можна спостерігати навіть неозброєним оком. Тому їх можна вважати ідеальною лабораторією для дослідження широкого спектру фізичних ефектів, які спостерігаються у ГМ. Різноманітність явищ, які протікають у ГМ, з урахуванням широкої розповсюженості останніх, дозволяє розглядати їх, як окремий стан конденсованої речовини [1-4].

Безпосередній опис структури – одне із ключових питань у фізиці і, зокрема, у вивченні ГМ. Інтерес до цього питання, головним чином викликаний завдяки багатому різноманіттю ефектів, які є наслідком саме особливостей структури ГМ. Експериментальні та теоретичні дослідження свідчать про наявність у локальній структурі ГМ впорядкування, яке спостерігається як у моно- так і у мульти-компонентних системах [5-6]. Відмітимо, що локальне впорядкування грає визначальну роль при побудові фізичних моделей таких процесів, як транспорт енергії та імпульсу, розсіювання випромінювання, та багатьох інших. Тому побудова адекватної до природи ГМ міри стану є визначальним кроком у їхньому описі. На цьому шляху було запропоновано багато підходів [2,4]. Зауважимо, що суттєвим ускладненням, яке діє у випадку гранульованих матеріалів є неможливість використання до їхнього опису методів статистичної механіки [3]. З огляду на це, домінуючу роль у описі структури та динаміки ГМ мають відігравати методи, які враховують їх атермічність. Мова йде про геометро-топологічні та ймовірнісні методи. Вони не потребують використання таких параметрів, як температура та міжчастинковий потенціал, і, з цієї точки зору, є найбільш адекватними у використанні до опису ГМ.

В нашій роботі, опис структурних перетворень в ГМ здійснюється за допомогою методу побудов Вороного. Для апроксимації розподілів відповідних діаграм експериментально спостережуваних станів використовується формула Неванлінни із класичної теорії моментів.

2. МЕТОД ДІАГРАМ ВОРОНОГО

Метод діаграм Вороного (ДВ) завдяки своїй, суто геометричній природі, дозволяє описувати структуру досить широкого класу систем. Для побудови ДВ для даного набору точок необхідно навколо кожної точки системи виділити простір, в якому знаходяться усі точки, які є найближчими до неї, з трансляцією цієї умови на решту точок системи. Таким чином кожна точка (ордината якої визначається положенням центру частинки-гранули) асоціюється із власним характерним об'ємом (або площею). Важливо зауважити, що характер взаємодії проміж частинками безпосередньо не впливає на процедуру розбиття.

Більше того, об'єми фігур є адитивними і повністю покривають об'єм системи. Це є важливою рисою саме для застосування підходу у випадку ГМ, а саме, при розв'язку задач про покриття (мінімізацію вільного об'єму) [7].

Експериментальні дослідження ГМ дозволяють отримати інформацію про розподіл центрів частинок у певний момент часу і, таким чином, параметризувати структуру за допомогою методу Вороного. Дослідження структури за допомогою діаграм Вороного базується на аналітичному аналізі розподілів площ ДВ усіх частинок системи. Очевидно, такий підхід дозволяє отримати інформацію не лише про порядок (симетрію), чи безлад у системі, але й про розподіл вільного об'єму та його зміни, які відбуваються завдяки зовнішнім збуренням. Вільний об'єм виступає головним параметром який контролює поведінку ГМ. Деякі з станів, які спостерігалися у експерименті з ГМ [8] та відповідні діаграми Вороного наведені на рис.1 та рис.2.

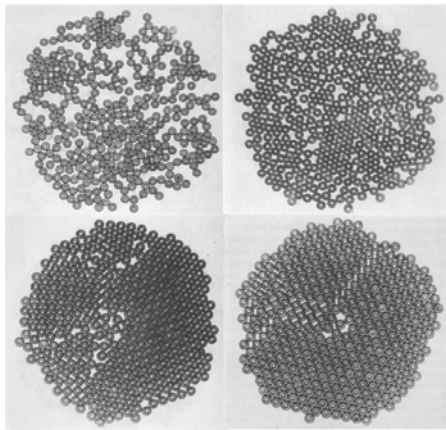


Рис.1 – Структури, які спостерігаються у гранульованих матеріалах під впливом зовнішніх збурень [8].

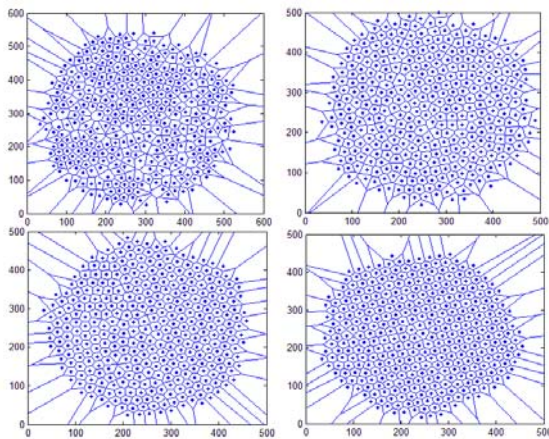


Рис.2 – Діаграми Вороного для структур які спостерігаються у гранульованих системах під впливом зовнішніх збурень.

Рис. 2 наочно демонструє одну із фундаментальних властивостей ГМ - здатність впорядковуватися під впливом зовнішніх збурень. Лише з діаграм Вороного вже видно, що під впливом збурень ГМ формують патерни із гексагональною симетрією. На Рис.3 наведено розподіли площ фігур Вороного для станів, які спостерігалися у експерименті. Проаналізуємо поведінку форми лінії розподілу величин площ фігур Вороного при зміні ступеня впорядкованості (симетризації) та зменшенні величини вільного об'єму у системі. Ці процеси супроводжуються збільшенням пакувальної фракції η . Досліджуючи зміни у формі лінії розподілу із збільшенням пакувальної фракції бачимо, що:

із збільшенням пакувальної фракції напівширина розподілу (другий момент) зменшується;
 середнє значення нормованої площі фігури Вороного (перший момент розподілу) зсувається вбік значення площі фігури Вороного, яке є характерним для систем із гексагональним впорядкуванням (нормування усіх площ, які отримано при аналізі експе-

риментальних даних, відбувалося на значення площі фігури Вороного s_0 для систем із гексагональною симетрією у розташуванні дисків);

із збільшенням впакувальної фракції амплітуда розподілу збільшується.

Загальноприйнятим підходом при дослідженні структури ГМ за допомогою фігур Вороного є використання аналітичного виразу для характеристичної функції розподілу у вигляді гама- розподілу [9]. Цей підхід дозволяє добре описати експериментальні дані в околі деяких виділених значень впакувальної фракції, але його використання потребує більш аргументованого обґрунтування, оскільки він базується на використанні принципів статистичної механіки [10,3], яка, строго кажучи, не може бути застосована до опису ГМ.

Застосуємо методи класичної теорії моментів для опису експериментальних даних щодо структури ГМ. По-перше, пронормуємо перші моменти експериментального розподілу на нульовий

$$m_j(s) = \frac{M_j(s)}{M_0(s)}, \quad (1)$$

де $M_j(s) = \int s^j I(s) ds$ - j -ий момент розподілу величини s (у нашому випадку це нормована площа фігур Вороного).

Далі, скористаємося відомим апроксимаційним співвідношенням (формулою) Неванліни у термінах моментів експериментальних розподілів [11]

$$I(s) = \frac{M_0 E_2^4 \delta}{\pi} \times \left\{ \left[E_2^2 s^2 + (E_2^2 + E_1^2) s E_1 - (E_2^2 + E_1^2)^2 + u(s + E_1) \right]^2 + q^2 (s + E_1)^2 \right\}^{-1} \quad (2)$$

Тут : $E_1 = m_1$ та $E_2 = \sqrt{m_2 - m_1^2}$ це перший та другий нормовані моменти експериментальних розподілів відповідно.

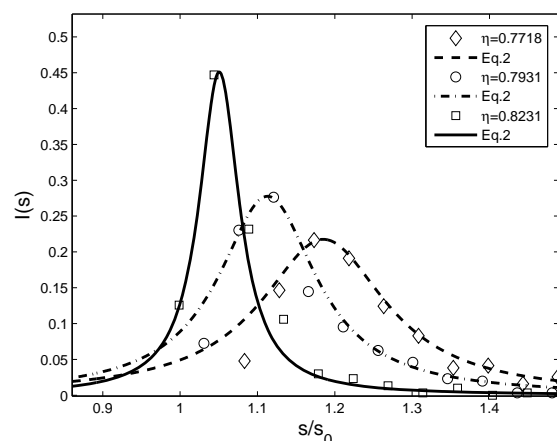


Рис.3 – Параметризація розподілів площ фігур Вороного для станів, які спостерігалися у експерименті . Суцільною зображені експериментальні дані з [8]; пунктиром – дані отримані за допомогою формули Неванліни (2).

Як бачимо, запропонований підхід дозволяє здійснити аналітичний опис відповідних розподілів.

3. СТРУКТУРНІ ІНВАРІАНТИ

Коректний і послідовний опис локальної структури та її змін також може бути здійснений за допомогою т.з. структурних інваріантів. Приймаючи до уваги чутливість структурних інваріантів у ГМ до масштабної ієрархії флуктуацій ми очікуємо, що для кожної величини l існує характерний масштаб зсуву ξ_l , який відповідає вибраному відхиленню від Ψ_l^k . Флуктуації структурних інваріантів супроводжуються зменшенням ξ_l із зростанням l до границі, коли ξ можна порівняти із відповідним ξ_l . У цих умовах відповідний інваріант Ψ_l^k флюктує настільки сильно, що система здатна переходити до інших станів із відмінною симетрією.

Якщо трьохвимірний домен відповідає гранецентрованої кубічній, гексагональній густій або ікосаедрічній симетрії, він має складатися з 1 центральної та 12 "зовнішніх" гранул, які розташовані на однакових відстанях від центральної. При чому, кожна з 12 частинок, які належать до обраної ділянки, може змінювати своє положення на поверхні сфери радіусом ξ розташованої навколо центральної гранули.

Дотримуючись підходу, описаному в [12], введемо два параметри порядку, а саме, просторовий - R_{lm}

$$R_{lm} = \frac{1}{N} \sum_a Y_{lm}(\Omega^{(a)}) \left| \bar{r}^{(a)} \right|^l, \quad (3)$$

і орієнтаційний - Q_{lm}

$$Q_{lm} = \frac{1}{N} \sum_a Y_{lm}(\Omega^{(a)}) . \quad (4)$$

Відповідні структурні інваріанти побудовані за допомогою (3), (4) можуть бути визначені наступним чином:

$$R_l^2 = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |R_{lm}|^2, \quad (5)$$

$$Q_l^2 = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |Q_{lm}|^2 \quad (6)$$

У відсутності флуктуацій у групі гранул ($R_l = Q_l$) структурні інваріанти характеризується величинами, наведеними у Таблиці 1.

Аналіз даних, представлених у Таблиці 1, показує, що, зокрема, інваріант Q_6 є дуже чутливим до будь-якого типу впорядкування, і таким чином є параметром, який характеризує різницю у локальній структурі доменів із різними типами симетрії.

4. ПАРАМЕТРИЗАЦІЯ ЛОКАЛЬНОЇ СТРУКТУРИ СТИСНЕНИХ СТАНІВ

Стисненим станом гранульованої системи (jamming state) називають такий стан, при переході до якого суттєво зменшується свобода руху окремих гранул у межах певної області (домену).

Перехід системи у стиснений стан є зовні ізоморфним з переходом до нового агрегатного стану з відмінними макроскопічними властивостями.

Самому стисненому стану можуть відповідати різні за симетрією конфігурації впакувань. Стиснений стан системи в реальному просторі залежить від багатьох факторів: характеру взаємодії між гранулами, сили тяжіння, сил тертя у системі, тощо.

Класичні експерименти з моделювання упаковок у монодисперсних системах, як правило, проводяться шляхом внесення сферичних кульок у визначений модельний простір зразка, з наступною параметризацією виникаючих конфігурацій. Так, у випадку двовимірних моделей мова йде про фотографування, для тривимірних, використовують магнітно-резонансну томографію.

Для збільшення щільності упаковок, що досягаються у таких моделях застосовуються різні методи, серед яких найбільш розповсюдженим з віброзбудження.

Важливо відзначити, що у подібних експериментах значну роль відіграють такі фактори, як параметри вібрації, матеріальні співвідношення, жорсткість кульок, їх форма, властивості границь, що обмежують систему, геометрія, форма поверхні.

Всі вище перераховані фактори впливу відіграють суттєву роль у процесі формування стисненого стану. Сама ця залежність від умов проведення експерименту, і виступає недоліком такого підходу, а також призводить до необхідності у обережному переносі даних комп'ютерного моделювання на реальні процеси. Зауважимо, що як правило, комп'ютерні моделі мають справу з дуже ідеалізованими випадками.

Отримані дані підтверджують, що при деякій щільності система досягає стану при якому суттєво змінюються механічні властивості системи і зменшується ступінь рухомості в межах певного обмеженого домену.

Цей стан, який називається стисненим (jammed), характеризується максимальним для даних умов, координаційним числом для кожної гранули.

До недавнього часу для характеристики щільно впакованого стану використовувався термін випадкова щільна упаковка (RCP). Проблема термінології полягає у тому, що терміни випадкова і щільна, строго кажучи, не повністю сумісні, тобто чим більша щільність упаковки, тим менше у ній випадковості у розміщенні гранул.

Таблиця 1 - Структурні інваріанти

Тип ґратки	Q_1	Q_2	Q_3	Q_4	Q_5	Q_6	Q_7	Q_8	Q_9	Q_{10}
гранецентрована кубічна ґратка	0	0	0	0.1909	0	0.5745	0	0.4039	0	0.0129
гексагональна густа ґратка	0	0	0.0761	0.0972	0.2516	0.4848	0.3108	0.3170	0.1379	0.0102
Ікосаедрична ґратка	0	0	0	0	0	0.6633	0	0	0	0.3629

Для більш детального опису стисненого стану конкретної системи гранул раціонально ввести два параметри: координаційний та трансляційний.

Моделювання упаковок структур у 2D системі твердих дисків нами було проведено чисельно із використанням стандартного програмного забезпечення. Доводка програми проводилася у середовищі GNU/ Linux для процесору з архітектурою AMD64. (використовувались дистрибутиви Slackware64 13.37 і Slackware64 14.1) Для збирання використовувався компілятор GCC версії 4.5.2.

Перед зборкою було проведено відповідне налаштування коду, що помітно зменшило кількість вимірів у просторі в якому працював алгоритм програми (з 3 вимірного до 2 вимірного). Такий крок, між іншим, відповідав фізичному змісту задачі.

Вхідні дані задавались за через адаптований файл з вхідними даними.

Автоматизація роботи програми проводилася за допомогою скрипта написаного на мові командного інтерпретатора `bash`. Стисло скетч скрипту (інфраструктури) послідовно виглядав як: модифікація вхідних даних у файлі, коректний старт програми, переміщення напрацьованих файлів даних по відповідних каталогах (кількість частинок складала 1000).

Для отримання монодисперсної системи, в конфігураційному файлі фракція бі-дисперсності була налаштована на 0. Максимальна ступінь впакування змінювалась у межах 0,6 – 0,84 за лінійним законом, з кроком 0,01.

Подальша обробка результатів проводилася за допомогою бібліотеки `voro++`, що дозволило здійснити ефективну параметризацію відповідних багатокутників Вороного.

Для використання бібліотеки з наявними даними була розроблена програма на мові C++, яка на основі попередньо отриманих даних, здійснювала зображення побудов Вороного.

Результати були представлені у вигляді побудов типу «паркету» Вороного. Вигляд конструкцій виявив характер переходу моделі до стисненого (*jamming*) стану, а також, підтвердив висновок, про те, що із

підвищенням щільності упаковки структура модельної системи асимптотично прямує до кристалоподібної границі.

Подібний сценарій відтворюється як за допомогою математичного моделювання, так і фізичних експериментах.

Побудова «паркету» Вороного добре відображає, структуру модельної системи. При підвищенні щільності розташування дисків, спостерігається симетризація системи, що відбивається і на побудованих для неї багатокутниках Вороного. Морфологія таких побудов дає уявлення про характер структур, що характеризують стани моделі, а також про види конфігурацій елементів системи.

При малих щільностях системи (коефіцієнт упаковки є меншим за 0,65) диски розташовані хаотично. На рис.4 зображена відповідні побудови «паркету» Вороного. Наочно спостерігається складна морфологія «паркету» багатокутників, їх несиметричність та нерегулярний характер відповідного розподілу.

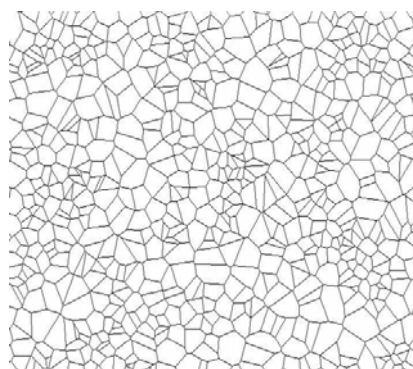


Рис.4 - Хаотичний паркет багатокутників Вороного при малих щільностях системи твердих дисків.

При збільшенні щільності спочатку виникають окремі кластери, в яких має місце формування координаційної структури дисків першої оболонки навкруги центральної частинки.

При подальшому збільшенні щільності спостерігається ріст кластерів, що мають

псевдокристалічну структуру, і переважно гексагональну симетрію. Також зустрічаються об'єми зайняті ділянками системи, що мають менший коефіцієнт упаковки, ніж всередині кластерів. Це можуть бути, як ділянки з хаотично розташованими елементами, так і сегменти з відмінними за симетрією типами розміщення дисків (див.рис.5).

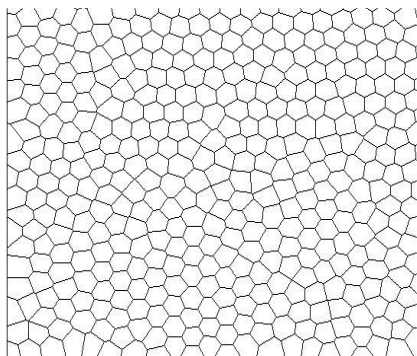


Рис.5 –Симетризовані кластери з діаграм Вороного у співвідношенні із ділянками з альтернативним за симетрією розміщенням елементів

При більших значеннях упакувань (при коефіцієнтах упаковки в межах 0,8 – 0,84) система представляє собою один, або декілька кластерів з повністю впорядкованою структурою. У загальному випадку структура може мати дефекти у вигляді сегментів з різними за симетрією типами локальної структури системи(див. рис.6)

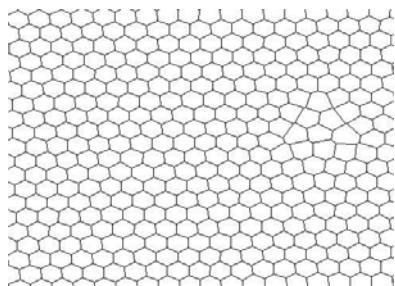


Рис.6 - Майже суцільний симетричний кластер(ближче до правого краю спостерігається ділянка з відмінною до основної матриці симетрією)

5. ВИСНОВКИ

У роботі для теоретичного опису структури гранульованих матеріалів використовується метод побудов Вороного. Для апроксимації функції розподілу площ фігур Вороного використовується формула Неванлінни із класичної теорії моментів. Запропонований підхід дозволяє описати експериментальні дані з використанням лише перших двох моментів розподілу (які можуть бути отримані безпосередньо з експериментальних даних), і у порівнянні з іншими підходами, не потребує використання додаткових припущень щодо адекватності застосування методів статистичної механіки до опису гранульованих матеріалів.

REFERENCES

1. Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P. *Rev. Mod. Phys.*, 1996, no. 68, pp. 1259.
2. Duran J. *Sands, Powders and Grains*. New York: Springer, 2000.
3. Kadanoff L. *Rev.Mod.Phys.*, 1999, no. 71, pp. 435.
4. De Gennes P.G., *Rev. Mod. Phys.*, 1999, no. 71, pp. 374.
5. Bideau D., Gervois A., Oger L., Troadec J.P. *J.Physique*, 1986, no. 47, pp. 1697.
6. Lumay J., Vandewalle N. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, no. 95, pp. 028002.
7. Voronoi G., *Reine Angew J. Math.*, 1908, no. 134, pp. 198.
8. Quickenden T.I., Tan G.K. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1974, no. 48, pp. 382.
9. Aste T., Di Matteo T. *Phys. Rev.*, 2008, no. E77, pp. 021309.
10. Edwards S.F. *Physica*, 2005, no. A353, pp. 114.
11. Achiezer N.I., *Classical problem of moments*. Moscow: Nauka, 1961. 600 p.
12. Gerasymov O.I. *Ukr.Journ.Phys.*, 2010, vol.55, no. 5, pp. 560.

ПОСТРОЕНИЯ ВОРОНОГО И КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ МОМЕНТОВ В ПРИМЕНЕНИИ К ПАРАМЕТРИЗАЦИИ СТРУКТУРЫ ГРАНУЛИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

О.И. Герасимов, д.ф.-м.н.

Н.Н. Худинцев, к.ф.-м.н.

Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, gerasymovoleg@gmail.com

Теоретическое описание структуры гранулированных материалов проводится с помощью метода Вороного. Структурные преобразования исследуются путем детального анализа соответствующих

распределений фигур Вороного. Предложено аналитическое выражение для функции распределения площадей фигур Вороного в терминах классической теории моментов (формула Неванлинны), которое не требует использования дополнительных предположений относительно применимости методов статистической механики к описанию свойств гранулированных систем.

Ключевые слова: гранулированные материалы, фигуры Вороного, классическая теория моментов, сжатые состояния

VORONOI TESSELLATIONS: THE CLASSICAL THEORY OF MOMENTS FOR STRUCTURE DESCRIPTION OF GRANULAR MATERIALS

O.I. Gerasymov, Dr. Sci. (Phys.-Math)
N.N. Khudyntsev, Cand. Sci. (Phys.-Math)

*Odessa State Environmental University .
Lvivska str. 15, 65016, Odessa, Ukraine, gerasymovoleg@gmail.com*

The theoretical description of the local structure of granular materials has been performed by means of Voronoi method. The detailed investigation of structure transformations has been carried on with help of Voronoi tessellation supplemented by direct modeling of the relevant distribution function in terms of classical moments theory. Analytical expression for distribution function of Voronoi figures has been constructed with the help of Nevanlinna's formula from theory of orthogonal polynomials. Proposed approach permit to avoid the problem of weak argumentation of applicability the statistical mechanics methods for description of the structure and physical properties of granular materials. We show that generated ordering in local structure are escorted by appearing of particular symmetries in Voronoi diagrams. We perform a numerical simulations of structural configurations in 2D system of hard discs. Proposed algorithm allow us to prove theoretical predictions about existence of correlations between configurational ordering and symmetry breaking in Voronoi tessellations. We study these effects in the vicinity of jammed states. Obtained results shows that criticality in structuration (formation of jammed states) connected with particular behavior of the first two moments of Voronoi figures distribution function. We show nonhomogeneous character of jammed states in which kinematic freedom degrees become frozen. Namely, coexisting ordered domains which has a different symmetries in grain configurations are observed. Therefore given analysis fulfill the basis of research in the area of granular physics which are mostly based on the concepts of probabilistic stereology and do not use methods from statistical mechanics which in the case of granular materials are not enough argued.

Key words: granular materials, jammed states, Voronoi figures, classical theory of moments

*Дата першого подання: 09.06.2015
Дата надходження остаточної версії: 03.07.2015
Дата публікації статті: 24.09.2015*