

КІНЕТИЧНА МОДЕЛЬ УЩІЛЬНЕННЯ У ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ

Застосування методів статистичної фізики до вивчення відкритих систем (зокрема гранульованих матеріалів) поблизу квазі-стаціонарних станів, припускає можливість протікання процесів ущільнення у системі твердих сфер, яка характеризується рівнянням стану Карнахана-Старлінга, за сценарієм Ландау-Гінзбурга. Для одновимірної системи визначено точний розв'язок рівняння Ландау-Гінзбурга. Досліджено вплив початкових умов на характер переходів між квазі-стаціонарними станами. Теоретичні розрахунки порівнюються з експериментальними даними.

Ключові слова: динамічні дисипативні системи, гранульовані матеріали, динамічні фазові перетворення, ущільнення.

Вступ

Серед найбільш специфічних властивостей гранульованих матеріалів (г.м.) ефекти ущільнення при зовнішніх струсах займають особливе місце [1-9]. У [7-8] була детально проаналізована модель середнього поля у застосуванні до опису кінетики вільного об'єму, а у [9] аналітично описано дисперсійний характер кінетики ущільнення г.м. під впливом зовнішніх збурень. З огляду експериментальних даних [9-11] та окремих теоретичних гіпотез [10, 11] відомо, що кінетика ущільнення г.м. поблизу квазістаціонарних станів [12] має ознаки фазових перетворень. Тому логічно використати наочний апарат статистичної фізики, а саме підхід Ландау-Гінзбурга [13, 14], для опису кінетики ущільнення г.м.

1 Вільна енергія для монодисперсної системи за рівнянням стану Карнахана-Старлінга

Як відомо [15], рівняння стану Карнахана-Старлінга для твердих сфер має такий вигляд

$$PV = NkT \cdot \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1 - \eta)^3}, \quad (1)$$

де $\eta = \frac{1}{6} \pi \sigma^3 \frac{N}{V}$ – параметр компактизації.

Скориставшись співвідношенням $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ можна знайти вільну енергію F

у такому вигляді

$$F = NkT \int_{\eta_1}^{\eta} \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1 - \eta)^3 \eta} d\eta = NkT \left(\frac{3 - 2\eta}{(1 - \eta)^2} - \frac{3 - 2\eta_1}{(1 - \eta_1)^2} + \ln \frac{\eta}{\eta_1} \right). \quad (2)$$

Параметр впорядкування ϕ можна визначити таким чином

$$\phi = \frac{\eta - \eta_1}{\eta_{\infty} - \eta_1}. \quad (3)$$

Вільна енергія, як функція параметра $\phi = 1 - \varphi$, матиме такий вигляд

$$F(\phi) = NkT \left(\frac{3 - 2(\eta_{\infty} - \Delta\eta\phi)}{((1 - \eta_{\infty}) + \Delta\eta\phi)^2} - \frac{3 - 2(\eta_{\infty} - \Delta\eta\phi_1)}{((1 - \eta_{\infty}) + \Delta\eta\phi_1)^2} + \ln \frac{\eta_{\infty} - \Delta\eta\phi}{\eta_{\infty} - \Delta\eta\phi_1} \right), \quad (4)$$

де для зручності було використано таке скорочення: $\Delta\eta = (\eta_{\infty} - \eta_1)$.

Розкладемо функцію $F(\phi)$ у ряд Маклорена:

$$F(\phi) = NkT \sum_{k=1}^{\infty} \phi^k (-\Delta\eta)^k \left[\frac{(3+k) - 2\eta_{\infty}}{(1-\eta_{\infty})^{k+2}} + \frac{(-1)^{k+1}}{k\eta_{\infty}^k} \right]. \quad (5)$$

Обмежуючи ряд внесками 4-го порядку, отримуємо

$$\frac{F}{NkT} \approx A_0 + A\phi + B\phi^2 + C\phi^3 + D\phi^4, \quad (6)$$

де коефіцієнти A, B, C, D визначаються співвідношеннями:

$$A_0 = 0, \quad A = (-\Delta\eta) \left(\frac{4-2\eta_{\infty}}{(1-\eta_{\infty})^3} + \frac{1}{\eta_{\infty}} \right), \quad B = (-\Delta\eta)^2 \left(\frac{5-2\eta_{\infty}}{(1-\eta_{\infty})^4} - \frac{1}{2\eta_{\infty}^2} \right),$$

$$C = (-\Delta\eta)^3 \left(\frac{6-2\eta_{\infty}}{(1-\eta_{\infty})^5} + \frac{1}{3\eta_{\infty}^3} \right), \quad D = (-\Delta\eta)^4 \left(\frac{7-2\eta_{\infty}}{(1-\eta_{\infty})^6} - \frac{1}{4\eta_{\infty}^4} \right). \quad (7)$$

2 Побудова кінетичного рівняння за сценарієм Ландау-Гінзбурга та його розв'язок у лінійному наближенні

Поблизу точки фазового переходу коефіцієнти біля непарних ступенів розкладення термодинамічного потенціалу, згідно з теорією фазових перетворень Ландау-Гінзбурга, перетворюються на нуль. При цьому кінетика параметра впорядкування може бути описана таким чином:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad (8)$$

де Γ - кінетичний коефіцієнт.

У нашому випадку, як можна бачити з (7), всі коефіцієнти біля непарних ступенів розкладення (6) (перші з яких коефіцієнти A та C) завжди негативні. Таким чином вони не можуть задовольнити вищезазвані умови.

Підставимо у співвідношення (6) вираз $\phi = 1 - \varphi$ та знайдемо нові коефіцієнти

$$\left. \frac{F(\phi)}{NkT} \right|_{\phi=0} \approx A_0 + A(1-\varphi) + B(1-\varphi)^2 + C(1-\varphi)^3 + D(1-\varphi)^4 =$$

$$= \alpha_0 + \alpha\varphi + \beta\varphi^2 + \delta\varphi^3 + \gamma\varphi^4 \approx \left. \frac{F(\varphi)}{NkT} \right|_{\varphi=1}, \quad (9)$$

де $\alpha_0 = A_0 + A + B + C + D$, $\alpha = -A - 2B - 3C - 4D$, $\beta = B + 3C + 6D$, $\delta = -C - 4D$, $\gamma = D$ (табл.1).

З даних у таблиці 1 витікає, що коефіцієнти біля парних ступенів параметра порядку φ у (9) завжди позитивні ($\beta > 0$, $\gamma > 0$), а біля непарних ступенів (α та δ) змінюють знак (поблизу $\eta_1 = 0.62$ та 0.69 , відповідно). Таким чином, умова перетворення на нуль коефіцієнтів біля непарних ступенів розкладання термодинамічного потенціалу виконується, що дозволяє сформулювати кінетичне рівняння у вигляді (8).

Оскільки α та δ перетворюються на нуль не одночасно, як було зазначено вище, зробимо оцінку параметра ущільнення η_c , при якому доданки з непарними ступенями по φ компенсують один одного. Припустивши, що у такому випадку $\varphi = 1$, отримуємо алгебраїчне рівняння

$$(-A - 2B - 3C - 4D) + (-C - 4D) = 0,$$

Таблиця 1 – Залежність α , β , δ , γ від η_1 .

η_1	α	β	δ	γ
0,50	-133	242	-184	59
0,55	-43	89	-67	23
0,60	-6,03	25	-17	6,9
0,61	-2,52	18	-12	5,1
0,62	0,11	13	-8	3,7
0,63	2,03	10	-5,4	2,6
0,64	3,35	7	-3,34	1,79
0,65	4,19	4,94	-1,91	1,17
0,66	4,65	3,47	-0,98	0,73
0,67	4,79	2,43	-0,41	0,43
0,68	4,68	1,69	-0,10	0,23
0,69	4,37	1,17	0,029	0,11

звідки з урахуванням (7) маємо

$$\begin{aligned} & \left(\frac{4 - 2\eta_\infty}{(1 - \eta_\infty)^3} + \frac{1}{\eta_\infty} \right) - 2\Delta\eta \left(\frac{5 - 2\eta_\infty}{(1 - \eta_\infty)^4} - \frac{1}{2\eta_\infty^2} \right) + \\ & + 4(\Delta\eta)^2 \left(\frac{6 - 2\eta_\infty}{(1 - \eta_\infty)^5} + \frac{1}{3\eta_\infty^3} \right) - 8(\Delta\eta)^3 \left(\frac{7 - 2\eta_\infty}{(1 - \eta_\infty)^6} - \frac{1}{4\eta_\infty^4} \right) = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Прийнявши $\eta_\infty = 0.74$, отримуємо $\Delta\eta = 0.10$, звідки $\eta_c = 0.74 - 0.10 = 0.64$. Останнє значення, як відомо, відповідає максимально можливому значенню випадкового ущільнення сфер.

У лінійному наближенні кінетичне рівняння (8) з підстановкою вільної енергії (9) має такий вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= -\Gamma N k T \frac{\delta}{\delta \varphi} (\alpha_0 + \alpha \varphi + \beta \varphi^2) = \\ &= \Gamma' (\alpha + 2\beta \varphi) = \tilde{\alpha} - \tilde{\beta} \varphi, \end{aligned} \quad (11)$$

де $\Gamma' = -\Gamma N k T < 0$, $\tilde{\alpha} = \Gamma' \alpha > 0$, $\tilde{\beta} = 2|\Gamma'| \beta > 0$.

Розв'язок рівняння (11) може бути знайдений точно та матиме такий вигляд

$$\varphi(t) = \frac{\tilde{\alpha}}{\tilde{\beta}} \left(1 - e^{-\tilde{\beta} t} \right), \quad (12)$$

або

$$\varphi(t) = \frac{|\alpha|}{2\beta} \left(1 - e^{-t/t_0} \right), \quad (13)$$

де t_0 - характерний час релаксації, який має такий вигляд (див. Рис. 1)

$$t_0 = \frac{1}{2\beta \Gamma N k T}. \quad (14)$$

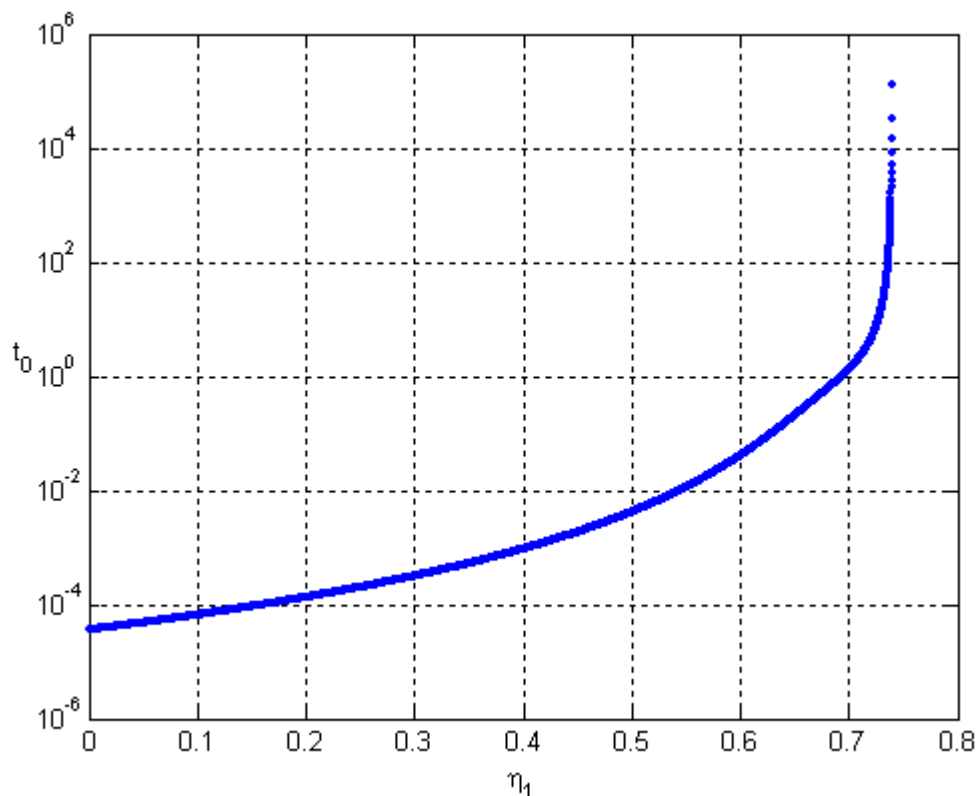


Рис.1 - Залежність характерного часу релаксації t_0 (14), як функції від початкової компактизації η_1 .

Висновки.

Отриманий у (13) розв'язок дозволяє дослідити кінетику параметра впорядкування $\varphi(t)$ (див. Рис.2) та параметра компактизації $\eta(t)$ (див. Рис.3). Як можна бачити, вже у лінійному наближенні знайдено типовий для гранульованих матеріалів тип релаксації параметра впорядкування для процесів ущільнення.

З аналізу Рис.1 витікає зростання характерного часу релаксації параметра впорядкування із збільшенням початкового ущільнення системи. Що не протирічить здоровому глузду. З Рис.2 можна бачити, що параметр впорядкування асимптотично прямує не до 1, а до певного значення, яке визначається початковим значенням компактизації η_1 . А саме, із збільшенням η_1 , це значення зменшується. Для відповідної кінетики $\varphi(t)$, яку зображено на Рис.2, поведінка параметра компактизації $\eta(t)$ з Рис.3 вказує на прямування системи до певного значення компактизації. Отриманий у (13) розв'язок залишається справедливим за такої умови, що накладається на початковий стан системи: $\eta_1 < 0.62$, тобто коли $\alpha < 0$.

Таким чином, запропонований модельний підхід дозволив встановити типовий для гранульованих систем характер релаксації параметра компактизації $\eta(t)$, який полягає у швидкому зростанні ущільнення системи на малих масштабах часу, та повільному – на великих. Окрім того, цей підхід дає можливість пов'язати мікроскопічні параметри системи (наприклад, розмір частинок σ) з її кінетичними характеристиками (характерний час релаксації t_0 , кінетичний коефіцієнт Γ).

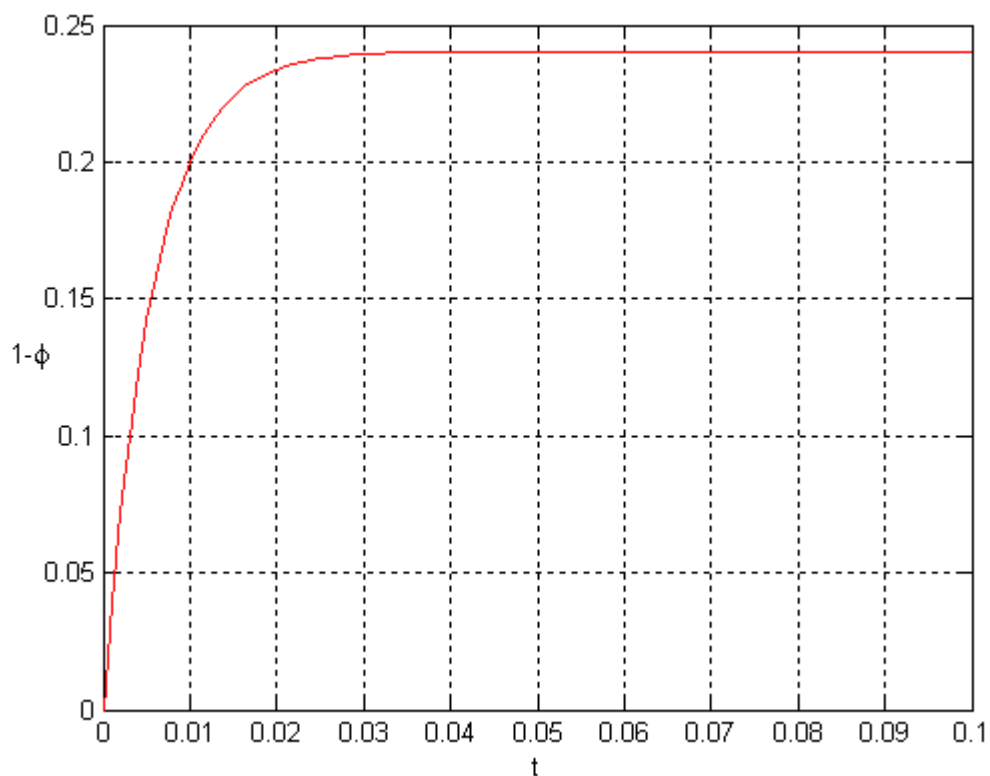


Рис. 2 - Кінетика параметра впорядкування $\varphi(t)$.

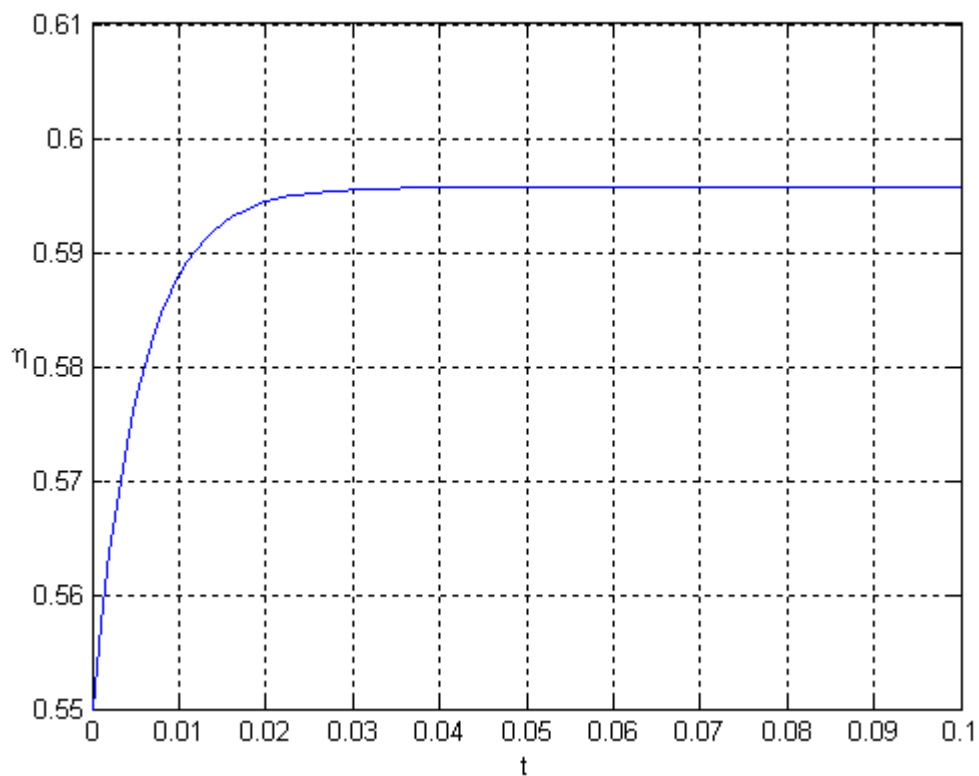


Рис. 3 - Кінетика параметра компактизації $\eta(t)$.

Список літератури

1. Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P. The physics of granular materials. //Rev.Mod.Phys.-1996.-Vol.68.- P.1259-1272.
2. Duran J. Sands, powders and grains.-New York: Springer-Verlag, 2000.-200 p.
3. Kadanoff L. Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows. //Rev.Mod.Phys.-1999.-Vol.71.-P.435-447.
4. De Gennes P.G. Granular matter: a tentative view. //Rev.Mod.Phys.-1999.-Vol.71,S.- P.374-385.
5. Gerasimov O.I., Schram P.P.-J.M., Kitahara K. The kinetics of granular segregation. //Ukr.Journ.Phys.-2003.-Vol.48, №8.-P. 885-896.
6. Vandewalle N., Lumay G., Gerasymov O., and Ludewig F. The influence of grain shape, friction and cohesion on granular compaction dynamics. //Eur. Phys. J. E - 2007.- Vol.22, 241-248.
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. Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я., Худинцев М.М. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. //Вісник ОДЕКУ.-2006.-№3.- С.247-252.
9. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична дисперсійна модель середнього поля для ущільнення гранульованих матеріалів. //Вісник ОДЕКУ.-2010.-№9.-С.190-197.
10. Gerasymov O.I. Structure and dynamics of granular materials perturbed by external fields. //Ukr.Journ.Phys.-2010.-Vol.55, №5.-P.560-567.
11. Герасимов О.І. Структура та динаміка гранульованих матеріалів. //Доповіді НАН України.-2010. (прийнято до друку)
12. Герасимов О.І., Ванделлале Н., Співак А.Я., Худинцев М.М., Люме Г., Дорболло С., Клименков О.А. Стационарні стани у 1D системі непружних частинок //Укр.фіз.журн. -2008.- Т.53, № 11. – С.1129-1137.
13. Patashinski A.Z., Pokrovsky V.L. Fluctuational theory of phase transitions.-Moscow: Nauka, 1982.
14. Lifshitz E.M., Pitaevskii L.P. Fizicheskaya Kinetika (Physical Kinetics).-Moscow: Nauka, 1979; Translated into English (Oxford: Pergamon Press), 1981.
15. Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем.-Киев: Наук. Думка, 1980.-372с.; Крокстон К. Физика жидкого состояния. /Пер. с англ. под. ред. А.И. Осипова. -М.: Мир, 1978.-400с.

Кінетическая модель упаковки в гранулированных материалах.

Герасимов О.И., Спивак А.Я.

Методы статистической физики (в частности, теория Ландау-Гинзбурга) применяются для изучения открытых систем (в частности - гранулированных материалов) вблизи квази-стационарных состояний, что дает возможность описания процессов упаковки в системе твердых сфер, которая подчиняется уравнению состояния Карнахана-Старлинга. Для одномерной системы получено точное решение уравнения Л.-Г. Исследованы влияния начальных условий на характер переходов между квази-стационарными состояниями. Теоретические расчеты сравниваются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: динамические диссипативные системы, гранулированные материалы, динамические фазовые переходы, упаковка.

Kinetics model of compaction for granular materials. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya.

Methods of statistical physics (especially Landau-Ginsburg theory) has been applied for the description of densification of the systems which consist on the hard spheres governed by the Carnakhan-Starling equation of states. In case of one-dimensional systems a rigorous solution of L-G model have been obtained. We study the influence of the initial conditions on character of relaxation of the relevant order parameter in the vicinity of quasistationary states. Obtained results are compared with a relevant physical experiments.

Key words: dynamic dissipative systems, granular material, dynamic phase transition, compaction.