

**СТЕРЕОЛОГІЧНИЙ АНАЛІЗ ЛОКАЛЬНОЇ СТРУКТУРИ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ (МЕТОД ВОРОНОГО)**

*Для опису локальної структури складних багаточастинкових систем-гранульованих матеріалів, запропоновано підхід, який базується на використанні методів діаграм Вороного. У випадку двовимірної системи дисків в рамках розглянутих підходів встановлено зв'язки між розподілами параметрів моделюючих функцій та структурними характеристиками у конфігураційному просторі. Запропонована аналітична форма розподілу площ фігур Вороного та детально проаналізована поведінка її моментів, яка формується внаслідок структурних перетворень.*

**Ключові слова:** *гранульовані матеріали, локальна структура, метод Вороного.*

**Вступ.** Гранульовані матеріали (г.м.) є конгломератами великої кількості дискретних твердих частинок, які можуть бути дисперговані у вакуумі чи у повітрі, або ж поєднані у конденсовану речовину. Зазвичай проміж окремими гранулами діють лише некогезійні сили відштовхувального характеру, а отже, г.м. набувають форми, яка зумовлена граничними умовами (наприклад, геометрією об'єму, що її вміщує), та дією гравітаційного поля. Незважаючи на зовнішню простоту, г.м. за певних умов можуть поводитися як подібно, так і цілком відмінно від звичайних агрегатних станів конденсованої речовини, тобто газів, рідин чи твердих тіл. Різноманітність типів г.м., які представлені в природі та використовуються у промисловості (а це пісок, гравій, ґрунти, будівельні, харчові, фармакологічні та фармацевтичні матеріали у гранульованій формі та багато ін.), зумовлює важливість розуміння природи їх фізичних властивостей. Як не дивно (враховуючи, що історія фізичних досліджень г.м. є досить тривалою і починається з робіт Фарадея та Багнольда), але дотепер не існує єдиної точки зору щодо можливості опису гранульованих матеріалів за допомогою методів статистичної фізики. Справа в тім, що незважаючи на екстраординарну поведінку г.м., яка зовні часто виглядає як прояв дії саме колективних ефектів у конденсованому середовищі, вони є суто механічними системами. Поведінка кожної окремої гранули скоріше має сприйматися як наслідок руху пробної частинки у оточенні тотожних сусідів. Наявність непружних зіткнень, а також відкритий характер (відносно зовнішніх збурень різної природи: періодичних чи імпульсних) зумовлює складний, суттєво нелінійний характер динаміки гранульованих систем [1-5].

Матеріали, дослідженню яких присвячена робота, є об'єктами так званої м'якої матерії. Прикладом можуть бути гранульовані матеріали, які складають об'єкт новітнього глобального екологічного матеріалознавства, що ґрунтується на екологічно «чистих» матеріалах, які не потребують коштовних технологій отримання, і, водночас, демонструють унікальні властивості. Дослідження у цьому напрямку потребують адекватного супроводу з точки зору послідовної теорії.

Незважаючи на значну кількість робіт, присвячених вивченню структури та матеріальних співвідношень гранульованих матеріалів, адекватний опис вже локальної структури та її спостережуваних модифікацій залишається актуальною задачею. Важливим фактором, який ускладнює аналіз, є суттєва структурна неоднорідність, наявність патернів та дефектів що робить задачу експериментального дослідження досить трудомісткою. Так скажімо, дифракційні та спектральні методи експерименту постачають лише осереднену інформацію про локальні структурні характеристики. Останнім часом набувають розвитку прецизійні методи ядерного

магнітного резонансу та рентгенівської томографії, які обіцяють гарні перспективи у цьому напрямку досліджень.

**Методи дослідження.** Зупинимося на головних принципах, які покладені в основу метода Вороного, який широко використовується у стереологічному аналізі [6].

Покладемо, що  $S$  - це множина з  $n > 3$  точок - центрів  $p, q, r, \dots$  на площині. Тоді, для точок  $p = (p_1, p_2)$  та  $x = (x_1, x_2)$  евклідовська відстань задається виразом

$$d(p, x) = \sqrt{(p_1 - x_1)^2 + (p_2 - x_2)^2}. \quad (1)$$

Через  $\overline{pq}$  позначимо відрізок, який поєднує  $p$  та  $q$ . Замкнуту множину  $A$  позначатимемо  $\overline{A}$ .

Нехай для  $p, q \in S$  виконується співвідношення

$$B(p, q) = \{x | d(p, x) = d(q, x)\}, \quad (2)$$

де  $B(p, q)$  - бісектриса, що є перпендикулярною до відрізка  $\overline{pq}$  і проходить через його центр. Ця бісектриса розбиває площину на дві півплощини

$$D(p, q) = \{x | d(p, x) < d(q, x)\}, \quad (3)$$

які містять  $p$ ,  $D(q, p)$  та  $q$ .

Назвемо ділянку

$$VR(p, S) = \bigcap_{q \in S, q \neq p} D(p, q) \quad (4)$$

фігурою діаграми Вороного для множини  $S$ . Діаграма Вороного, в свою чергу, задається виразом

$$V(S) = \bigcup_{p, q \in S, p \neq q} \overline{VR(p, S)} \cap \overline{VR(q, S)}. \quad (5)$$

Кожна фігура  $VR(p, S)$  визначається як перетин  $n-1$  відкритих півплощин, в яких міститься  $p$ . Тому  $VR(p, S)$  відкритий та опуклий, а кожна фігура відокремлена від сусідньої.

Спільна межа двох фігур Вороного, які відносяться до  $V(S)$ , називається стороною фігури Вороного. Сторона фігури складається більше ніж з однієї точки. Кінцева точка сторони фігури Вороного називається вершиною. Вершина належить не менше ніж трьом фігурам Вороного (див. рис. 1).

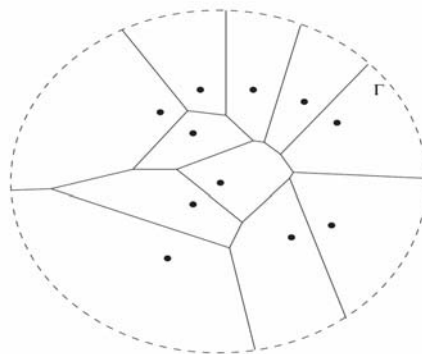


Рис. 1 - Діаграма Вороного для системи з 11 точок на площині.

Розглянемо тепер вищевисвітлений метод у застосуванні до опису структури двовимірних гранульованих систем.

**Результати дослідження та їх аналіз.** Побудови для випадку, коли центри фігур діаграм Вороного випадково розподілені у просторі називаються діаграмами Пуасона – Вороного.

У двовимірному випадку дослідження розподілу площ Пуасона – Вороного може стати джерелом корисної інформації про морфологічну структуру системи в координатному просторі. Знаючи функцію розподілу площ Пуасона – Вороного, ми можемо розрізняти структури змішаного(складеного) типу, оцінювати ступінь впорядкованості та можливість ущільнення системи. Власне кажучи, якщо досліджуються системи, які складаються із об'єктів правильної геометричної форми, за допомогою цього методу ми маємо особливо просту можливість безпосереднього моделювання розподілу вільного об'єму у системі.

Існує декілька формулювань аналітичної форми функції  $f(s)$ , яка описує розподіл площ фігур Пуасона – Вороного, та чисельних моделей, спрямованих на їх застосування [7,8]. Аналізуючи розподіл діаграм у випадку двовимірних систем ми встановили, що розподіл площин відповідних фігур Пуасона – Вороного досить задовільно узгоджується з функцією розподілу у наступному вигляді

$$f(s) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} s^{a-1} \exp(-bs), \quad (6)$$

де  $a, b$  - коефіцієнти,  $\Gamma$  - гамма функція. На Рис.2 представлені результати обробки даних спостережень для ідеального кристалічного впакування тотожних дисків на площині. Як бачимо, розподіли площ фігур Пуасона – Вороного нагадують дельта функції, які центровані на площі фігури відповідно для гексагонального та квадратного впакування. На рис.2 наведені також відповідні розподіли для випадку складеної системи, в якій співіснують два типи симетричних структур (зображений пунктиром), а також у випадку суміші, яка збурюється довільним чином (зображено суцільною кривою). В останньому випадку реалізується типовий бімодальний розподіл. Обробка даних спостережень була виконана за допомогою програмного пакета Matlab, який внаслідок відносно невеликої кількості частинок, що враховувались (яка не є макроскопічною), цілком задовільно виконує необхідну параметризацію(мається на увазі відповідна швидкість алгоритму).

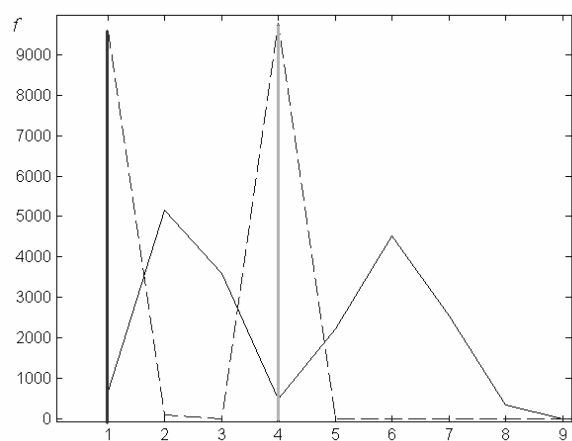


Рис. 2 - Функція розподілу площ фігур Пуасона – Вороного  $f$  для різних типів впорядкування у системі.

Розглянемо детальніше структуру двовимірної системи, яка формується під впливом зовнішніх збурень (постулюючи, що система прямує до впорядкованого стану) в термінах вище введеної функції розподілу площ фігур Пуасона – Вороного.

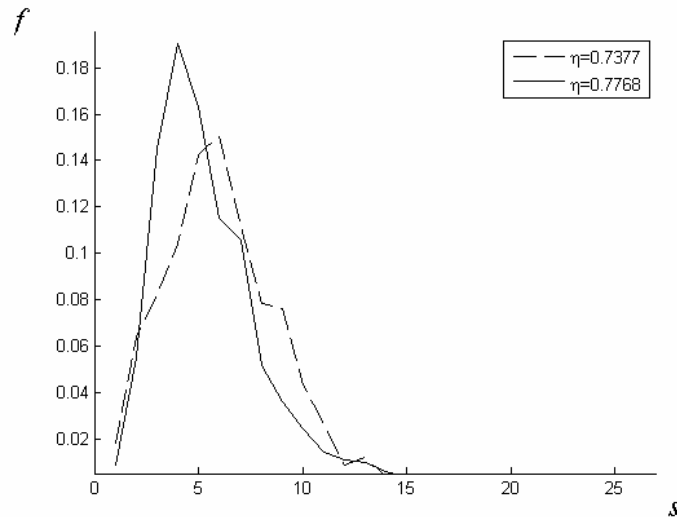


Рис. 3 - Функція розподілу площ фігур Пуасона – Вороного  $f$  для різних типів впорядкування у системі.

На рис.3 ми спостерігаємо наочну зміну амплітудного коефіцієнта розподілу та зменшення дисперсії моделюючої функції для систем із різним ступенем впорядкування.

Вищенаведені спостереження дають підстави для застосування методу фігур Пуасона – Вороного з метою детектування утворення дефектів структури (наприклад, дислокацій) у ГМ. На рис. 4 наведено зразок зміни характеру поведінки функції розподілу фігур Пуасона – Вороного для випадку, коли із системи було забрано одну частинку (і таким чином було утворено дефект типу вакансії). У відповідь спостерігаємо утворення додаткового піку в інтервалі площ, що не є характерними для ідеально-гексагонального впорядкування.

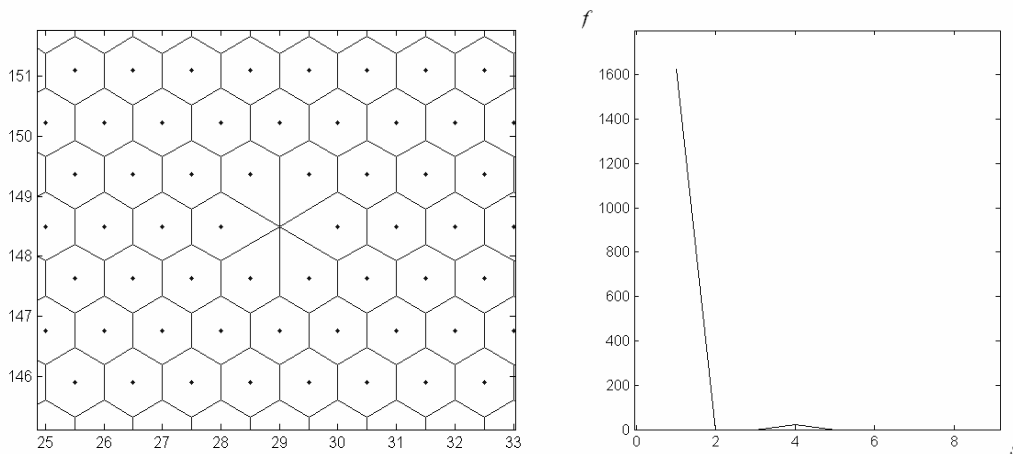


Рис. 4 - Розподіл Пуасона – Вороного для ідеально впорядкованої структури (ліворуч) та графік функції розподілу для випадку структури із одним дефектом, типу вакансія (праворуч).

Як випливає з наведених даних запропонований метод можна використовувати при дослідженні структурних перетворень у гранульованих матеріалах для кількісного аналізу та детектування дефектоутворення або довільних структуроутворень, які спостерігаються у експериментах з ГМ внаслідок зовнішніх збурень.

**Висновки.** В роботі показано, що метод Вороного дозволяє досить наочно здійснювати опис характерних змін у структурі ГМ, які відбуваються внаслідок, наприклад, зовнішніх збурень. Аналіз отриманих результатів свідчить про наявність характерної поведінки розподілів для визначених типів структур. А саме: для повністю впорядкованих структур має місце різкий максимум у розподілі площ фігур Пуасона – Вороного. Спостерігається зміна амплітудного коефіцієнта розподілу в залежності від ступеня (радіуса) впорядкування. При введенні дефектів у структуру (скажімо - вакансій) відбуваються характерні зміни у поведінці графіку функції розподілу площ фігур Пуасона – Вороного  $f$  у порівнянні із випадком ідеально впорядкованої структури. Якщо система прямує до впорядкованого стану, дисперсія відповідного розподілу зменшується, а також відбувається зсув у бік значень площ фігур Пуасона – Вороного, які відповідають ідеально впорядкованому стану (зокрема, було досліджено стан із гексагональною симетрією впорядкування).

### Список літератури

1. Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P. The physics of granular materials. //Rev.Mod.Phys.-1996.-Vol.68.- P.1259-1273.
2. Duran J. Sands, Powders and Grains.-New York: Springer Verlag, 2000.- 200p.
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.-71,S.- P.374-385.
5. Mehta A. Granular Physics .- Harvard, Massachusetts, 2009.-318p.
6. Н.Н. Медведев, Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем .-Новосибирск: СО РАН, 2000.-214с.
7. John C. Russ, Robert T. Dehoff, Practical stereology.- New York: Plenum Press, 1999.- 312p.
8. Z. M. Jakšić, S. B. Vrhovac, B. M. Panić and B. M. Jelenković. Upward penetration of grains through a granular medium //Eur.Phys.Journ.E-2006.-Vol.27.-P.345-356.

#### Стереологический анализ локальной структуры гранулированных материалов (Метод Вороного). Герасимов О.И., Сомов М.М.

Для описания локальной структуры сложных многочастичных дискретных систем – гранулированных материалов предложен подход, который основан на использовании методов диаграмм Вороного. В случае двухмерной системы дисков в рамках рассмотренного подхода установлены связи между распределениями параметров моделирующей функции и характеристиками структур, наблюдаемых в конфигурационном пространстве. Предложена аналитическая форма распределения площадей фигур Вороного и проанализированы характерные особенности поведения её моментов вследствие изменений в локальной структуре .

**Ключевые слова:** гранулированные материалы, локальная структура, метод Вороного .

#### Stereological analysis of local structure of granular materials (Voronoi method).

Gerasymov O.I., Somov M.M.

The method of Voronoi diagrams has been used for the local structure analysis of 2D system consist on hard disk. We propose the analytical model for the parameterization of the Voronoi squares distribution. Within the given approach the particular behavior of the parameters (moments) of the deterministic distribution influenced by the structure defects has been outlined.

**Keywords:** granular materials, local structure, Voronoi method.