

## **ЕНТРОПІЙНА ГРАТКОВА МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСУ ВЕРТИКАЛЬНОГО ПРОФІЛЮ ГУСТИНИ У ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ У ГРАВІТАЦІЙНОМУ ПОЛІ**

*Модель конфігураційної ентропії граткового газу використовується для опису рівноважного вертикального профілю поля густини у гранульованих матеріалах у присутності гравітації. Розраховано параметр, подібний до параметра Ліндемана, поведінка якого, як функція компактизації, якісно відповідає даним експериментальних спостережень і співпадає з ними кількісно при наближенні до максимально досяжних значень компактизації.*

**Ключові слова:** *гранульовані матеріали, конфігураційна ентропія, гратковий газ, параметр Ліндемана, профіль густини.*

**Вступ.** Гранульовані матеріали (г.м.) є конгломераціями великого числа дискретних частинок (гранул) з розмірами від декількох мікрометрів, які взаємодіють між собою головним чином внаслідок міжчастинкових контактів. В більшості випадків такі контактні взаємодії нелінійні. До природи г.м. відноситься також та обставина, що контактні взаємодії між гранулами дисипативні і, таким чином, навіть у стані спокою такі системи нерівноважні і фактично знаходяться у метастабільних станах. Основним масштабом енергії в г.м. виступає їх енергія в зовнішньому (гравітаційному) полі, яке, разом з граничними умовами, зрештою визначає також і форму г.м. При припиненні підведення енергії ззовні кінетична енергія гранул майже миттєво перетворюється на нуль і таким чином гранульовані матеріали є нетермодинамічними системами.

Будучи дисипативною дискретною мікро-механічною динамічною системою, при створенні спеціальних умов г.м. проявляють властивості, як типові для агрегатних станів конденсованої матерії : газів, рідин і твердих тіл, так і принципово відмінні від них. Така багатоскладна поведінка г.м. робить завдання опису їх властивостей з точки зору послідовної теорії дуже складною, і не дивлячись на окремі вдалі моделі, далекою від свого остаточного розв'язку задачею [1].

Як наслідок такого положення речей, до сьогодення дня промислове маніпулювання г.м. (його теоретичне обґрунтування) головним чином засноване на узагальненні емпіричних відомостей про їх поведінку в різних зовнішніх умовах.

Візьмемо, скажімо, відому наочну властивість г.м., їх компактизацію, яка полягає в зменшенні об'єму, який займає система після обробки полем зовнішніх механічних збурень. Очевидно, що вже розуміння фізичної природи однієї цієї властивості г.м. дозволило б як якісно істотно поліпшити ефективність їх промислового застосування, так і зробити вагомий крок в розвитку теорії. Нижче буде запропоновано просту наочну модель для опису рівноважного вертикального профілю поля густини гранульованого матеріалу, який перебуває у гравітаційному полі, яка дозволяє досить адекватно параметризувати картину ущільнення, зокрема у найближчому оточенні максимального ущільнення, яке спостерігається у таких системах.

### **1 Моделювання щільності гранульованих матеріалів**

Збурення гранульованих систем веде до ущільнення, тобто до зменшення об'єму, який займає система, а також до симетризації розподілу частинок у системі (дивись рис.1 та 2) [2].

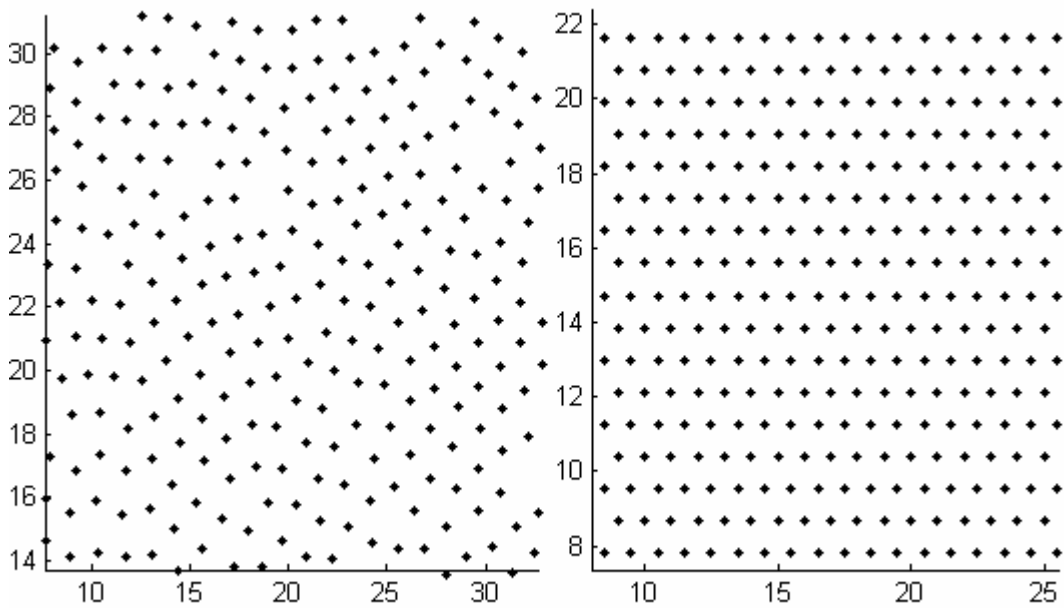


Рис.1 – Структури, які спостерігаються у гранульованих матеріалах під впливом зовнішніх збурень (точками показані центри дисків). Ліворуч – невпорядкована структура; праворуч – структура із характерними ознаками симетризації та ущільнення.

На рис.2 представлені відповідні побудови Вороного для структур приведених на рис.1. Метод Вороного дозволяє окрім оцінки ступеня ущільнення судити про симетризацію у розподілі частинок.

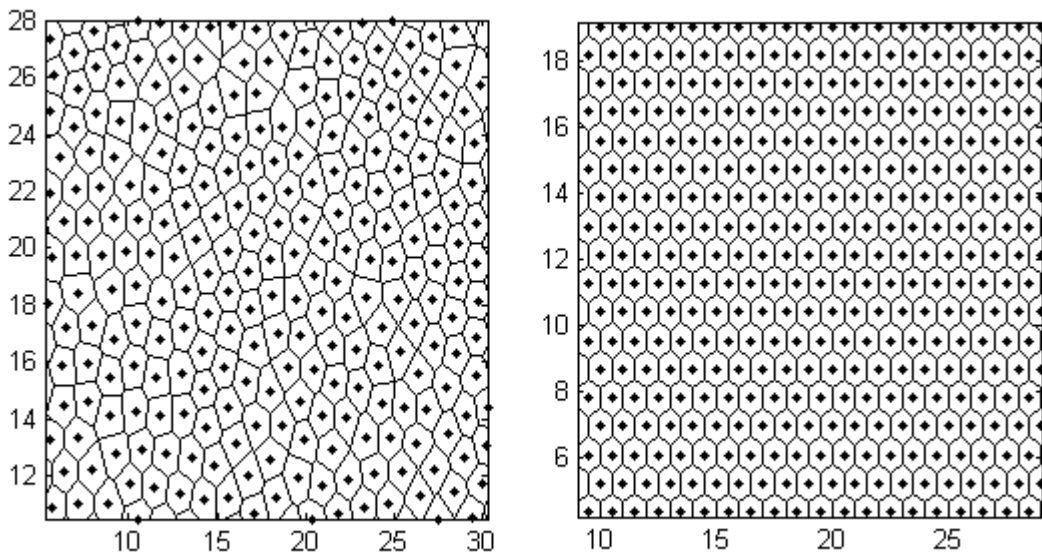


Рис.2 – Діаграми Вороного для структур які спостерігаються у гранульованих системах під впливом зовнішніх збурень. Ліворуч – початковий невпорядкований стан; праворуч – кінцевий симетризований стан в околі максимального впакування.

З огляду на це, постає питання теоретичного обґрунтування та параметризації цього явища. Скористаємося квазістатистичним підходом до опису густини гранульованих матеріалів в термінах відповідних теоретичних моделей.

На цьому шляху запишемо вираз для функціоналу вільної енергії системи у т.з. «інгерентних» станах [3] у вигляді

$$F(\rho) = E(\rho) - \beta^{-1} S(\rho), \quad (1)$$

де енергія системи в гравітаційному полі  $E(\rho)$  надається виразом

$$E(\rho) = mg \int_{(V)} z \rho(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (2)$$

тут  $z$  - вертикальна координата,  $\beta^{-1}$  - масштаб енергії,  $\rho$  - густина системи.

В якості виразу для  $S(\rho)$  скористаємося відомим співвідношенням для ентропії ґраткового газу [4]

$$S(\rho) = - \int_{(V)} d\vec{r} \left\{ \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \ln \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right\}, \quad (3)$$

де  $\rho_0$  - максимальна густина системи.

Розрахунок варіаційної похідної  $\frac{\delta F(\rho)}{\delta \rho}$  породжує рівноважний профіль густини у формі розподілу, подібного до функції Фермі

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + ce^{\Gamma z}}, \Gamma = mg\rho_0\beta. \quad (4)$$

Саме формулу типу (4) було ефективно використано у [5] для параметризації експериментальних вимірів вертикального профілю густини у гранульованих матеріалах.

Зазначимо, що зазвичай, для кількісного визначення руйнації кристалічного впорядкування у твердих тілах (плавлення) використовується т.з. параметр Ліндемана [6]. Останній розраховується як середньоквадратичне відхилення окремої частинки від положення рівноваги

$$\gamma_m = \sqrt{\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle} / L, \quad (5)$$

де  $r$  - радіус-вектор частинки,  $L$  - відстань проміж частинками-сусідами у симетризованому стані (ґраткова стала),  $\langle r \rangle$  - середнє положення частинки у симетризованому стані. Критерієм плавлення (кристалізації) виступає нерівність емпіричного походження  $\gamma_m > \gamma_{kp}$ . Де  $\gamma_{kp}$  - критичне значення параметра Ліндемана, яке визначається експериментально. Використовуючи (4), введемо параметр, аналогічний (5), за таким правилом

$$\gamma = \frac{\rho_0 c}{\Gamma^2} \left\{ \rho \frac{\ln^2 \frac{1}{c} \left( \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right)}{c \rho_0} - \frac{1}{c} \ln^2 \frac{1}{c} \cdot \left( \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) - \right. \\ \left. - 2 \left[ \ln c \ln \frac{\rho_0}{\rho} + Li_2 \left( \frac{\rho_0}{\rho} \right) \right] - \rho_0 c \left[ \rho \frac{\ln c}{\rho_0} - \ln \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{\rho_0 - 1}{\rho} \ln \left( \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) \right]^2 \right\}, \quad (6)$$

де  $Li_2$  - є спеціальна функція ділогарифм [7].

На рис.3 зображена розрахована за формулою (6) поведінка залежності  $\gamma$  від параметра впакування  $\eta = \frac{1}{4} \pi \sigma^2 \rho$  (де  $\sigma$  - діаметр частинки).

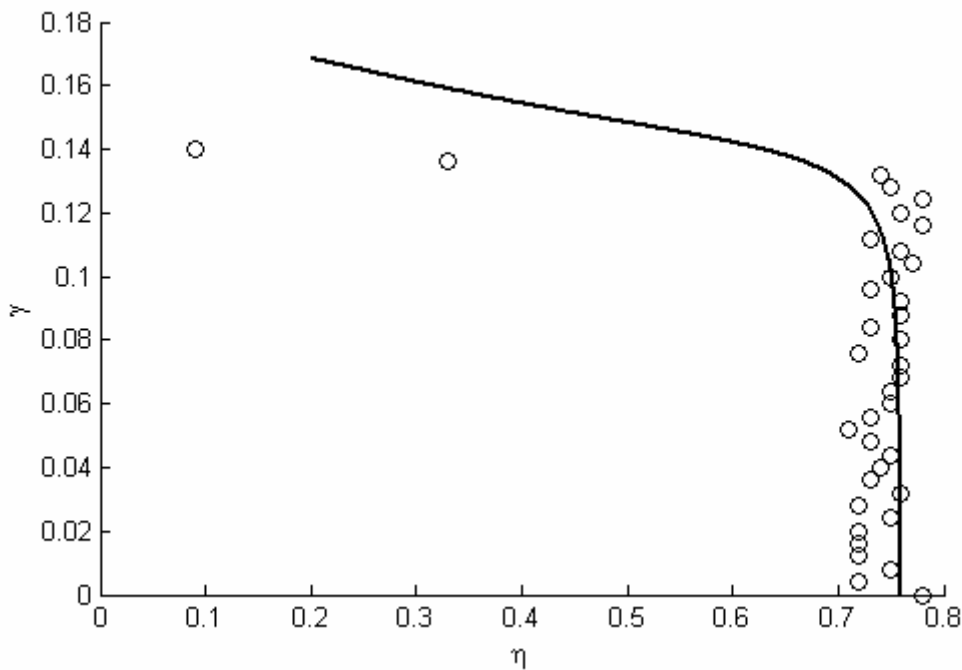


Рис.3 - Залежність параметра  $\gamma$  розрахована за формулою (6). Точками зображуються дані експериментальних вимірів, отримані у [5].

З наведених на рис.3 даних випливає, що отримана експериментально залежність параметра  $\gamma$  від густини, по-перше, якісно відповідає передбаченням запропонованої аналітичної моделі. По-друге, свідчить про те, що профіль ущільнення г.м. у гравітаційному полі не відповідає розподілу Больцмана. Варіація граничного значення густини  $\rho_0$  в межах фізичного змісту моделі (зокрема у напрямку реально досяжних значень параметра впакування), веде до кращого співпадання даних експерименту і отриманих на основі теоретичної моделі. Реально досяжні значення параметра впакування в вертикальній системі твердих сфер становлять 0.78. Наближуючи початкові умови до цієї границі, ми звужуємо інтервал впакування, в

якому розвиваються сценарії структуроутворень. Фактично це обмежує кінетичні степені вільності руху частинок-гранул, збільшуючи роль відносних конфігурацій та ентропійних ефектів, які їм відповідають. Порівняльний аналіз теоретичних та експериментальних даних свідчить про те, що вони майже повністю співпадають у найближчому околі максимального впакування у системі (див. рис.3).

**Висновки.** Для опису поведінки вертикального профілю густини гранульованих матеріалів у гравітаційному полі запропоновано наочну комбіновану модель ентропії ґраткового газу. Побудована фазова діаграма в термінах параметра, типу параметра Ліндемана в теорії плавлення кристалів та компактизації у системі. Отримані дані свідчать про відповідність базових принципів ентропійної моделі природі структурних перетворень у гранульованих системах, особливо, для щільно впакованих систем. Відзначимо також, що застосована ентропійна модель тривіально відтворює невольцманівський характер профілю густини г.м. у гравітаційному полі.

### Список літератури

1. *Gerasymov O.I.* Structure and Dynamics of Granular Materials Perturbed by External Fields. //Ukr. Journ. Phys.-2010.-Vol.55, N 5.-P.586-592.
2. *Vandewalle N., Lumay G., Gerasymov O., Ludewig F.* The influence of grain shape, friction and cohesion on granular compaction dynamics. //Eur.Phys.Journ.E.-2007.-**22**.- P.241-248.
3. *Герасимов О.І.* Структура та динаміка гранульованих матеріалів. //Доповіді НАН України.-2010.-№11.-С.59-65.
4. *А. Исихара.* Статистическая физика.-М.:МИР,1973.-443с.
5. *Holly Kokstein, Paul V. Quinn Sr.* Fermi statistics applied to a weakly excited column of granular particles in a vibrating bed.//Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.-2007.-Vol.374, N 1.-P.66-76.
6. *Куммель Ч.* Введение в физику твёрдого тела М.:Наука, 1978.-600с.
7. *Abramovitz M., Stegun I.A.* Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables.-Washington:US GPO, 10th, 1972.-1046p.

**Энтропийная решёточная модель для описания вертикального профиля плотности в гранулированных материалах в гравитационном поле. Герасимов О.И., Сомов М.М.**

*Модель конфигурационной энтропии решёточного газа используется для описания равновесного вертикального профиля поля плотности в гранулированных материалах в гравитационном поле. Рассчитанный на основе модели параметр, аналогичный параметру Линдемана, как функция компактизации, качественно описывает данные экспериментальных наблюдений и совпадают с ними количественно при приближении к максимально достижимой упаковке.*

**Ключевые слова:** *гранулированные материалы, конфигурационная энтропия, решёточный газ, параметр Линдемана, профиль плотности.*

**Entropic lattice gas model for description of equilibrium vertical density profile in granular materials subjected to gravity field. Gerasymov O.I., Somov M.M.**

*Entropy of lattice gas model used for description of equilibrium vertical density profile in granular materials subjected to gravity field. We perform the parameter (like Lindeman parameter in the theory of melting of the quantum crystals) which describe the structural deformations in considered systems. We observe good qualitative agreement between the data of theory and experimental observations, which became quantitative in the closest neighborhoods of the point of maximum compactisation.*

**Keywords:** *granular materials, configurational entropy, lattice gas, Lindeman criteria, density profile.*