

DISTRIBUCIÓN DE VOLÚMENES LOCALES EN MEDIOS GRANULARES

Kevin Hernández y Leonardo Reyes

Departamento de Física, Universidad Simón Bolívar

RESUMEN

Estudiamos la distribución de longitudes locales de Voronoï para el modelo de estacionamiento (PLM) y la comparamos con la distribución de volúmenes locales en los medios granulares en equilibrio mecánico encontrada por Aste et al. (Aste, y otros, 2007). El PLM es un modelo estocástico de adsorción y desorción de partículas sobre un substrato. Mostramos que para fracciones de empaquetamiento altas el PLM reproduce el tipo de distribución de Aste et al.

ABSTRACT

We study the local Voronoï lengths distribution for the parking lot model (PLM) and compare it with the local volume distribution of granular media in equilibrium found by Aste et al. (Aste, y otros, 2007). The PLM is a stocastic model of adsorption and desorption of particles on a surface. We show that for high packing fractions the PLM reproduces the kind of distribution of Aste et al.

I. INTRODUCCIÓN

Los medios granulares son sistemas disipativos de muchas partículas en los que la energía necesaria para cambiar su estado es mucho mayor que la energía térmica. Este tipo de medio es utilizado en industrias como la alimentaria, farmacéutica, geológica y metalúrgica (Botterill, 1975), por lo que entenderlos a nivel fundamental es de gran importancia e impacto económico.

Edwards y Oakeshott propusieron una mecánica estadística para medios granulares en equilibrio mecánico (Edwards, et al., 1989). Esta propuesta hace una analogía entre los sistemas térmicos y los medios granulares: el papel que juega la energía E tradicionalmente en la mecánica estadística es jugado en estos medios granulares por el volumen del bulto V_b y la entropía del sistema se define de forma análoga a los sistemas térmicos $S = \lambda \ln \Omega$, donde λ es una constante equivalente a la constante de Boltzmann k_B y Ω es el número de estados accesibles al sistema (volumen de bulto V_b

en equilibrio mecánico). Con estas dos variables de estado, definen la compactividad χ del sistema como el equivalente de la temperatura en los sistemas térmicos: $1/\chi = \partial S / \partial V_b$.

Si V_b es una variable de estado equivalente a la energía, entonces es importante conocer la distribución de volúmenes locales. Desde el punto de vista experimental esto requirió primero establecer métodos que permitieran preparar los sistemas con un volumen dado o, lo que es lo mismo, con una fracción de empaquetamiento ϕ dada (fracción del volumen del bulto ocupado por los granos). La fracción de empaquetamiento en estados desordenados (no cristalizados) varían entre dos límites: empaquetamiento desordenado denso (*random close packing*, ϕ_{RCP}), la mayor fracción de empaquetamiento posible en estados desordenados, cuando los granos están muy apiñados, pero sin cristalizar; y empaquetamiento desordenado suelto (*random loose packing*, ϕ_{RLP}), la menor fracción de empaquetamiento posible en estados desordenados, cuando los granos están bastante sueltos.

Nowak y colaboradores (Nowak, et al., 1998) lograron preparar sistemas de forma reproducible en un rango pequeño de fracciones de empaquetamiento cercano a ϕ_{RCP} ($\phi > 0,625$) utilizando agitaciones sinusoidales de aceleración máxima normalizada Γ ; este parámetro de control fija la fracción de empaquetamiento del sistema. En este trabajo introducen el modelo de estacionamiento (*parking lot model*) en el contexto de medios granulares al comparar algunos resultados de experimentos en medios granulares con resultados de simulaciones basadas en este modelo, mostrando que presentan similitudes cualitativas.

Schröter y colaboradores (Schröter, et al., 2005) realizaron un importante avance en cuanto a la preparación del sistema logrando obtener de forma reproducible estados iniciales con fracciones de empaquetamiento dentro de un rango mayor que con los métodos anteriormente reportados ($0,56 < \phi < 0,61$) para sistemas sumergidos en agua. El método de preparación requiere fluidizar el sistema con un flujo de agua Q . Los autores reportan que la fracción de empaquetamiento resultante depende sólo de Q .

Posteriormente Aste y colaboradores (Aste, et al., 2007) recopilaron la información de 12 experimentos realizados con el método de Schröter sobre esferas de vidrio y 6 experimentos de

esferas de acrílico en aire realizados con distintos métodos de preparación descritos en (Aste, et al., 2005). Las posiciones de los granos fueron obtenidas mediante tomografía computarizada de rayos X. Con estos resultados obtuvieron que la distribución de volúmenes de Voronoï y de Delaunay locales de los medios granulares parece ser invariante (no depende del fluido intersticial ni de los tipos de granos) y se ajusta bien a una distribución gamma, $f(V,k)$, con factor de forma $k=12$ para volúmenes de Voronoï y $k=1$ para volúmenes de Delaunay.

En (Aste, et al., 2007) y con mayor detalle en (Aste, et al., 2008) proponen un modelo en el que suponen que existe una partición del espacio en celdas elementales disjuntas que llenan el espacio y que existe un volumen mínimo v_{\min} para estas celdas. Adicionalmente, suponen que otra partición del espacio consiste en celdas también disjuntas que contienen k celdas elementales cada una, por lo que además sus volúmenes tienen una cota inferior $V_{\min} = kv_{\min}$. Con esto, demuestran que para una partición dada la distribución de volúmenes locales es una distribución gamma con factor de forma k y factor de escala χ . Es importante notar que $\bar{V} = 1/\phi$ por lo que las curvas varían con ϕ . Esta distribución tiene la propiedad de que todas las curvas colapsan al graficarse respecto a la variable $(V - V_{\min})/(\bar{V} - V_{\min})$.

Estos resultados respaldan la propuesta de Edwards. Debido a la complejidad de estos medios, estudiar sistemas más simples que reproduzcan esta distribución puede ayudar a entender los medios granulares. Es por esto que nosotros estudiamos la distribución de volúmenes de Voronoï del modelo de estacionamiento.

II. MODELO DE ESTACIONAMIENTO (PLM)

Este modelo consiste en una línea de longitud L en la que se lanzan partículas de longitud 1 en posiciones elegidas al azar. Adicionalmente, las partículas sobre la línea pueden ser desorbidas. Un aspecto clave es que la desorción es irrestricta mientras que la adsorción está restringida por la exclusión de volumen.

La fracción de empaquetamiento de este sistema llega después de un tiempo a un estado estacionario alrededor del cual fluctúa. El valor de esta fracción de empaquetamiento depende sólo del cociente K

entre la tasa de adsorción y la de desorción (k_-), es decir, K es el parámetro de control del PLM equivalente al parámetro Γ en los experimentos de Nowak y colaboradores, y al parámetro Q de los experimentos de Schröter y colaboradores.

III. Resultados y Discusión

Nuestros resultados muestran que la distribución de longitudes x de Voronoï es también una distribución gamma con $k = 2$, para $K > K_C$ (ver Figura 1). Para valores menores a K_C el factor de forma comienza a disminuir y para valores suficientemente bajos de K las distribuciones de volúmenes locales de Voronoï dejan de tener la forma de distribuciones gamma.

Schröter y colaboradores (Schröter, et al., 2005) observaron que dos fenómenos distintos gobiernan a los sistemas granulares cerca de las fracciones de empaquetamiento límites. Cerca del límite inferior (ϕ_{RLP}) existen muchos estados con volumen V_b que no se encuentran en equilibrio mecánico, por lo que el mecanismo que rige en este límite es la necesidad de que el sistema se encuentre en equilibrio; mientras que al apiñar los granos y acercarse al ϕ_{RCP} , este equilibrio es prácticamente una garantía, lo que limita ahora el número de estados accesibles es la exclusión de volumen de los granos. El PLM sólo tiene condición para la exclusión de volumen, por lo que sólo puede reproducir en este límite el comportamiento de los medios granulares.

Utilizando entonces el parecido entre el PLM y los medios granulares para sistemas densos, utilizamos dos medidas de cercanía entre la distribución gamma con $k = 2$, $f(x,2)$, y las distribuciones locales para establecer un criterio a partir del cual se pueda considerar el modelo de estacionamiento en “equilibrio mecánico”. La primera de estas medidas es evaluar el colapso de las curvas de distribuciones de volúmenes locales al graficarlas con el parámetro $(x - x_{\min})/(\bar{x} - x_{\min})$, donde la bondad del colapso fue estimada con la diferencia cuadrática respecto a $f(x,2)$; la segunda es calcular explícitamente el valor de k utilizando el resultado (Aste, et al., 2008):

$$k = \frac{(\bar{V} - V_{\min})^2}{\sigma_V^2}$$

con ambas medidas obtuvimos $K_C \cong 60$. La fracción de empaquetamiento obtenida con $K = K_C$ coincide con la fracción de empaquetamiento para la que el sistema se tranca en ausencia de desorción ($k_- = 0$) (Tarjus, et al., 2004).

Referencias

T. Aste y T. D. Matteo. Emergence of Gamma distributions in granular materials and packing models. *Phys. Rev. E*, 77(2):021309, 2008.

T. Aste, T. D. Matteo, M. Saadatfar, T. J. Senden, M. Schröter, y H. L. Swinney. An invariant distribution in static granular media. *Europhys. Lett.*, 79(2):24003, 2007.

T. Aste, M. Saadatfar y T. J. Senden. Geometrical structure of disordered sphere packings. *Phys. Rev. E*, 71(6):061302, 2005.

J. S. M. Botterill. *Fluid-bed heat transfer*. Academic Press, 1975.

S. F. Edwards y R. B. S. Oakeshott. Theory of powders. *Physica A*, 157:1080, 1989.

E. R. Nowak, J. B. Knight, E. Ben-Naim, H. M. Jaeger, y S. R. Nagel. Density fluctuations in vibrated granular materials. *Phys. Rev. E*, 57(2):1971, 1998.

M. Schröter, D. I. Goldman y H. L. Swinney. Stationary state volume fluctuations in a granular medium. *Phys. Rev. E*, 71(3):030301, 2005.

G. Tarjus y P. Viot. Statistical mechanical description of the parking-lot model for vibrated granular materials. *Phys. Rev. E*, 69(1):011307, 2004.

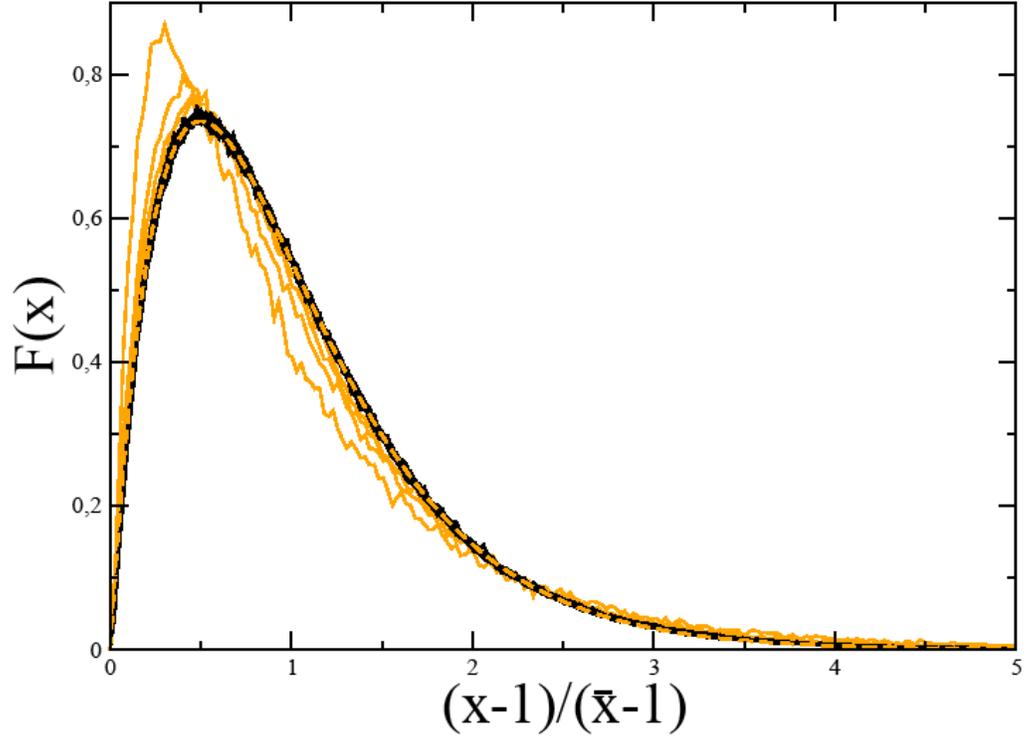


Figura 1: Distribución de longitudes $F(x)$ para K entre 2 y 1000. Las líneas sólidas claras son las distribuciones para K menores que 50, las líneas sólidas negras son las correspondientes a K a partir de 50 y la línea punteada clara es la distribución $f(x,2)$.