Marko Kuzmanović

Simulacija radijalne segregacije upotrebom celularnih automata

Proučavana je radijalna segregacija dvokomponentne smeše granularnih materijala prilikom rotiranja upotrebom celularnih automata. Ispitan je uticaj masa granula, kao i uticaj trenja između granula na radijalnu segregaciju. Pokazano je da i mala razlika u osobinama granula dovodi do segregacije u radijalnom pravcu, kao i da povećanje te razlike dovodi do gotovo potpunog razdvajanja smeše na komponente

Uvod

Granularni materijal predstavlja skup čvrstih, makroskopskih čestica, čija je osnovna karakteristika gubitak energije pri svakoj međusobnoj interakciji (Duran 1999).

Pri određenim uslovima (izloženosti vibracijama, rotiranju, itd), smeše dve ili više vrsta granularnih materijala podložne su manifestaciji raznovrsnih kontraintuitivnih fenomena. Jedan od njih jeste segregacija, odnosno razdvajanje smeše granula na komponente (Hill *et al*. 1997).

U industirji granularni materijali se često obrađuju u rotirajućim cilindričnim sistemima poput mešalica, sušionica, mašina za poliranje i mnogih drugih. Pod takvim uslovima dolazi do segregacije u dva različita pravca: normalnom na osu rotacije (radijalnom) i paralelnom sa osom rotacije sistema (aksijalnom). Radijalna segregacija je fenomen grupisanja manjih granula u jezgro blizu ose rotacije sistema i većih uz zid cilindra. U opštem slučaju, razlika između granula koja dovodi do radijalne segregacije ne mora biti u njihovoj veličini, nego i u drugim osobinama poput mase, trenja i drugih kohezionih efekata.

Tokom rotacije granule se penju sve dok ne dostignu maksimalan ugao statičke ravnoteže (ugao obrušavanja), nakon čega dolazi do lavine. Po obrušavanju, površina smeše se nalazi pod nešto manjim uglom, tj. uglom dinamičke ravnoteže. Za različite tipove granula vrednosti ovih

Marko Kuzmanović (1992), Beograd, Majke Jevrosime 11b, učenik 3. razreda Matematičke gimnazije u Beogradu

MENTOR:
dr Slobodan Vrhovac, Institut za fiziku, Beograd

uglova se razlikuju. Ispostavlja se da je to zbog različitog trenja između granula kao i da to ima značajnu ulogu pri formiranju aksijalne segregacije (Rapaport 2007).

Iako ne postoji sveoubuhvatni model, najprihvaćeniji mehanizam koji opisuje radijalnu segregaciju zasnovan je na „zaustavljanju" i „prodiranju" manjih granula u jezgro, odnosno: kako sistem rotira, na površininskim slojevima dolazi do lavina koje prenose smešu granula. Manje granule poseduju manji impuls, zbog manje mase, te je stoga verovatnije da prevale manji put usled sudara sa drugim granulama. Zbog toga se češće zadržavaju bliže osi sistema, dok velike granule dolaze do njegovih ivica (Nguyen *et al*. 2011). U ovom radu uvedena je pretpostavka da i drugi mehanizmi koji više podstiču, odnosno sprečavaju, obrušavanje jedne vrste granula nego druge takođe mogu dovesti do segregacije, kao i da je kretanje granula na površini dovodi do njenog nastanka.

Radijalna segregacija je eksperimentalno potvrđena u cilindrima, kao i u kvazi dvodimenzionalnim sistemima (McCarthy *et al*. 1996). Istraživanja su vršena putem površinskih opservacija, kao i upotrebom magnetne rezonance za neinvazivno određivanje stanja smeše. Problem je takođe ispitivan korišćenjem numeričkih simulacija, najčešće molekularno dinamičkim metodom (Rapaport 2007).

Cilj ovog rada je ispitivanje efekata različitih masa granula i trenja između njih na nastajanje i vid radijalne segregacije u polupopunjenom 2d sistemu. Takođe je bitno istaći korišćenje metoda celularnih automata za simuliranje ovakvih sistema, kao i njihovu veliku efikasnost. Model je zasnovan na postojećem (Yanagita 1998), uz korišćenje drugačije geometrije.

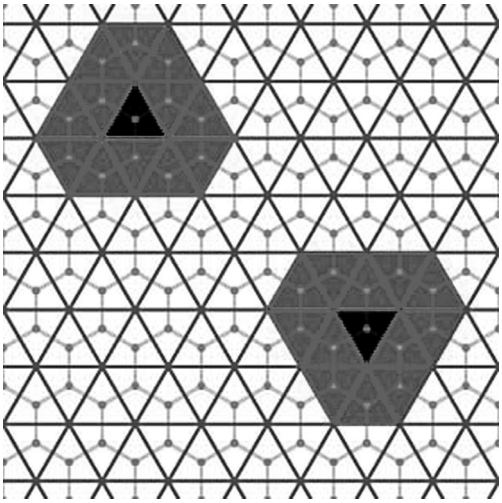
Model

Pri simuliranju granularnih materijala korišćenjem molekularno dinamičke metode potrebno je puno vremena i računarskih resursa zbog velikog broja čestica, složene međučestične interakcije i velikih vremenskih skala na kojima se fenomeni odvijaju. Zbog ovih problema izabran je drugačiji pristup.

Celularni automati su modeli sa diskretizovanim prostorom, vremenom i stanjima. Sastoje se od konačnodimenzionalne, pravilne i periodične rešetke i ćelija ograničenih ivicama rešetke. Svaka ćelija opisana je samo svojim stanjem i položajem u prostoru. Na osnovu trenutnog stanja ćelije i njenih suseda, pomoću unapred zadatih pravila, dobija se novo stanje ćelije. Ponavljanjem ovog postupka za svaku ćeliju, može se izračunati ponašanje sistema kroz vreme.

U ovom modelu iskorišćena je trougaona rešetka, dobijena popločavanjem ravni jednakostraničnim trouglovima. Svaka ćelija je predstavljena

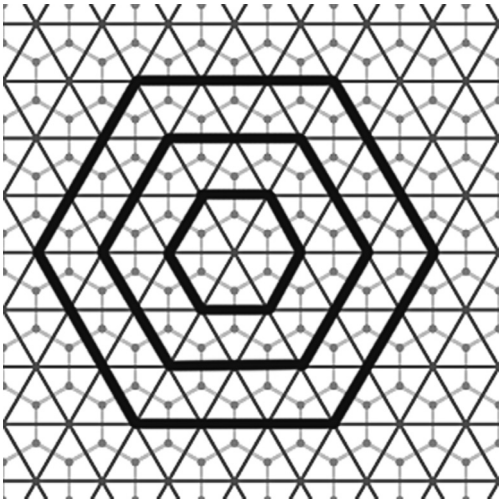
unutrašnjošću jednog od tih trouglova, a njeni susedi su sve ćelije koje sa tim trouglom dele teme ili stranicu. Funkcija $D((x,y),(p,q))$ ima vrednost 1 ako su ćelije sa koordinatama (x,y) i (p,q) susedi, dok u suprotnom ima vrednost 0. Na slici 1 prikazana je trougaona rešetka sa označenim ćelijama, u obe moguće orijentacije, i njihovim susedima.



Slika 1.
Trougaona rešetka, crvenom bojom obeležene su izabrane ćelije, dok su plavom bojom obeleženi njihovi susedi

Figure 1.
The triangular lattice, the selected cells are coloured black, while their neighbouring cells are coloured gray

Da bi se na ovakvoj rešetci dobila centralna simetrija, koja postoji u sistemima koji su modelovani, ćelije su raspoređene u slojeve. Jednom sloju pripadaju sve ćelije koje su na jednakom rastojanju od centra. Pritom je rastojanje ćelije do centra definisano kao minimalan broj susednih ćelija koje datu ćeliju povezuju sa centrom. Na slici 2 prikazan je princip grupisanja ćelija u slojeve.



Slika 2.
Način grupisanja ćelija po slojevina

Figure 2.
The pattern of grouping cells into layers

Sa slike se jasno vidi da ovako definisani slojevi obrazuju šestougaonike u orijentaciji gde imaju horizontalne stranice. Pretpostavka da su sve ćelije istog sloja jednako udaljene od centra znači da, u ovako definisanoj geometriji, svaki šestougao u horizontalnoj orijentaciji zapravo predstavlja kružnicu u euklidskoj geometriji. Ta činjenica nema suštinske veze sa funkcionisanjem modela, ona samo dozvoljava da se napravi geometrijska transformacija pomoću koje će se rezultati prezentovati na intuitivno jasan način.

Veličina modelovanog sistema definiše se brojem slojeva koje on poseduje. Redni brojevi slojeva počinju od 1, pa n-ti sloj sadrži $6(2n-1)$ ćelija. U skladu sa time ukupan broj ćelija u prvih n slojeva je $6n^2$. Svaka ćelija može imati jedno od stanja iz skupa $\{1, 2, 3\}$, što redom odgovara praznoj ćeliji, ćeliji popunjenoj granulom prve, odnosno druge vrste. $S(x, y)$ označava stanje ćelije sa koordinatama (x, y).

Za interakciju između čestica izabran je pojednostavljen model trenja. Ona postoji samo između čestica koje su u direktnom kontaktu (odnosno nalaze se u susednim ćelijama) i računata je na sledeći način:

Neka postoje dva tipa granula A (označene brojem 1) i B (označene brojem 2). Defininisane su vrednosti interakcija granula A-A, A-B i B-B tako da uvek važi poredak $f_{AA} \leq f_{AB} \leq f_{BB}$. Takođe, interakcija između prazne ćelije i bilo koje druge ćelije je uvek nulta. Uočimo preslikavanje $f : (0, 1, 2, 4) \rightarrow (0, f_{AA}, f_{AB}, f_{BB})$. Onda je interakcija dve ćelije sa koordinatama (x, y) i (p, q) jednaka $f(S(x, y)S(p, q))D((x, y), (p, q))$. Sumiranjem interakcije neke čestice po svim njenim susedima dobijamo ukupnu interakciju te čestice sa sredinom, odnosno matematički:

$$F(x, y) = \sum_p \sum_q f(S(x, y)S(p, q))D((x, y), (p, q)).$$

Osnovno kretanje, odnosno rotacija, granula vršeno je pomeranjem svakog sloja, odnosno njegovih granula, za jedno mesto u negativnom matematičkom smeru. Nakon toga razmatrana su dva procesa za sve površinske granule:

1) Obrušavanje granula. Neka je $h(x) = \max(\{y \mid S(x, y) \neq 0\})$ visina, a $\Delta h(x) = h(x) - h(x+1)$ gradijent, odnosno nagib površine, u tački sa koordinatom x. Ako je nagib površine u nekoj tački x veći od efektivnog trenja u toj tački $(h(x) > F(x, h(x)))$ granula se smatra nestabilnom i ona se obrušava.

2) Kretanje obrušene granule. Granula koja je zadovoljila uslov nestabilnosti će se obrušiti, odnosno početi da se kreće u odnosu na površinu. Ona se ne mora zaustaviti na prvom slobodnom mestu, nego može prevaliti neki put. U skladu sa pretpostavkom o impulsu koji ta granula nosi, pređeni put treba da bude veći kada je masa veća. Ve-

rovatnoća da granula koja se obrušila pređe k mesta je $p_k = m^{k-1}$, gde je m masa granule koja se obrušila: $m = m(S(x, h(x)))$.

U daljem tekstu će se pod obrušavanjem podrazumevati i samo obrušavanje i kretanje granula koje nakon njega usledi.

Nakon osnovnog kretanja, proces obrušavanja se ponavlja dokle god se ne postigne stanje u kom se nijedna granula neće obrušiti.

Simulacija je vršena iterativnim ponavljanjem rotiranja i obrušavanja, a vreme je mereno brojem iteracija proteklim od početnog trenutka.

U smeši je uvek sadržan jednak broj granula obe vrste, takav da zajedno popune polovinu ćelija. U početnom trenutku granule su smeštene u donju polovinu ćelija, popunjene nasumičnim rasporedom.

Ovakav model ima nekoliko mana. Neke od njih su posledice korišćenja celularnih automata. Upravo diskretizovanje prostora, koje omogućava lako i brzo izračunavanje, čini da brzinu kretanja samih čestica, a i rotacije, ne vredi posmatrati na klasičan način. Takođe, parametre koji figurišu u simulaciji teško je egzaktno povezati sa fizičkim veličinama koje sistem opisiju. Na primer, moguće je povezati promenu ponašanja sistema sa promenom trenja između čestica, ali ne i sa samim vrednostima koeficijenata trenja. Pored toga, ovako definisana geometrija sistema ima probleme sa reprodukovanjem malih nagibnih uglova i zakrivljenosti površine.

Molekularno dinamičkim simulacijama ovakvih mnogočestičnih sistema nije uvek moguće utvrditi i razumeti mehanizme odgovorne za neku pojavu. U tom slučaju bolje je problem razmatrati fenomenološki, odnosno na najjednostavniji, ali opet realan, način reprodukovati pojavu polazeći od osnovnih pretpostavki i ideja. Bez obzira na probleme koje sa sobom nosi, model koji je predstavljen u ovom radu uspeva da reprodukuje fenomen radijalne segregacije, dajući rezultate koji su u skladu sa eksperimentalnim.

Rezultati

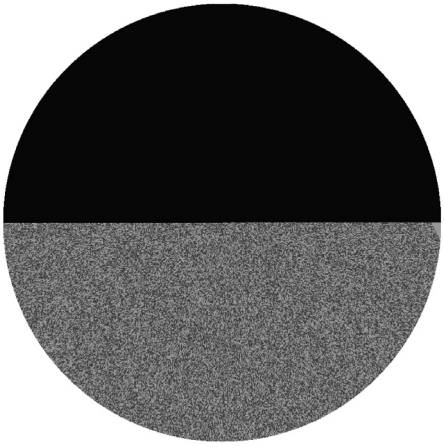
Rezultati su grupisani u četiri celine. U prvoj celini predstavljen je primer nastanka i evolucije radijalne segregacije. Drugi deo se odnosi na radijalnu segregaciju usled različitih masa, a treći usled trenja. četvrti deo posvećen je kombinovanom uticaju efekata masa i trenja na radijalnu segregaciju.

Svi rezultati koji su predstavljeni u radu dobijeni su na osnovu simulacija sa $n = 200$ slojeva granula.

I Nastanak i evolucija radijalne segregacije

Radijalna segregacija nastajala je pri svakoj razlici osobina dva tipa granula, ali različitog oblika i izraženosti. Ovde je prikazano nastajanje

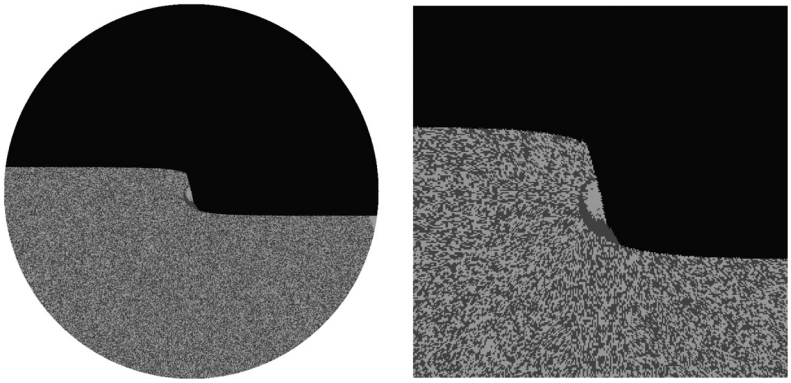
segregacije na najizraženijem primeru. Pritom su parametri imali sledeće vrednosti: $m_A = m_B = 0$ i $f_{AA}, f_{AB}, f_{BB} = (0.34, 0.7, 1)$



Slika 3.
Početno stanje smeše

Figure 3.
The initial mixture state

U početnom trenutku sve granule se nalaze u donjoj polovini, dok je gornja polovina sistema prazna. Na slici 3 prikazano je početno stanje, a pritom crna boja odgovara prazim ćelijama, dok tamno, odnosno svetlo, siva boja odgovara granulama vrste A, odnosno vrste B. Nakon nekoliko desetina iteracija, površina je već izmenjena i vidljiv je začetak nastajanja radijalne segregacije. Na slici 4a prikazan je ceo sistem u trenutku $t = 50$. Tada je u samom centru vidljiva segregacija, sa oblastima popunjenim samo jednim, odnosno drugim tipom granula. To je prikazano na slici 4b.

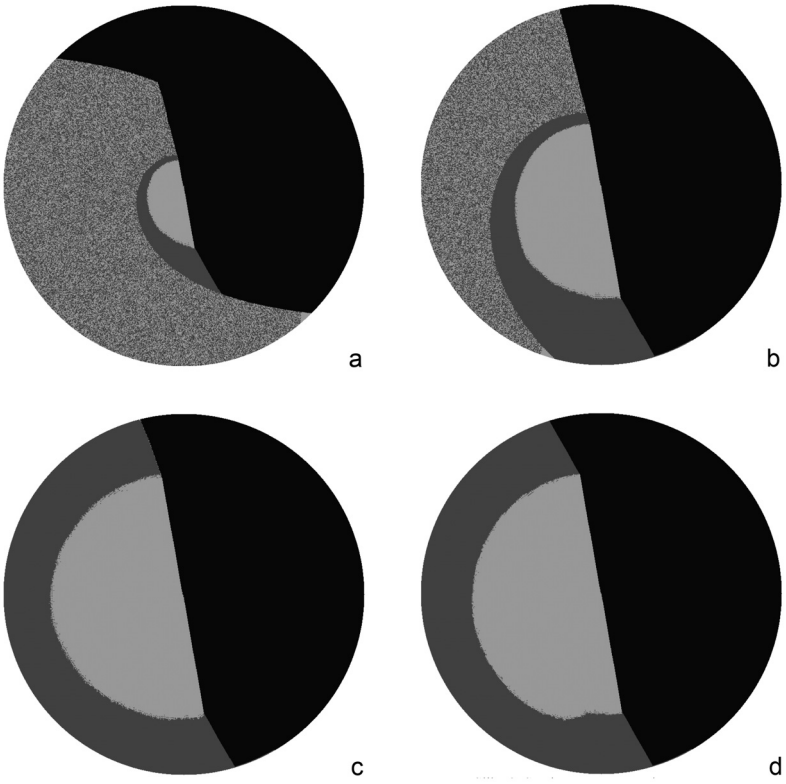


Slika 4.
Stanje smeše u trenutku $t = 50$ (a) i centar sistema u tom trenutku (b)

Figure 4.
The state of the mixture at $t = 50$ (a), and the center portion of the system at that moment (b)

Daljim rotiranjem i obrusavanjem nastavlja se evolucija sistema: njegova površina se izdiže, segregacija postaje sve izraženija a na spojevima između oblasti sa različitim tipom granula površina se „lomi“

usled različitog ugla obrušavanja za različite granule. Na slici 5a prikazan je trenutak $t = 300$, gde je jasno uočljivo različito ponašanje u oblastima segreacije i smeše. Nakon toga, površina smeše se sve više naginje, sa sve većim oblastima u kojima vlada segregacija (slika 5b, trenutak $t = 700$).



Slika 5.
Stanje smeše u trenutku: $t = 300$ (a), $t = 700$ (b), $t = 1700$ (c) i $t = 5000$ (d).

Figure 5.
The state of the mixture at $t = 300$ (a), $t = 700$ (b), $t = 1700$ (c) and $t = 5000$ (d).

Nastavak iteriranja vodi smanjenju oblasti u kojoj se nalazi smeša granula, dok ona potpuno ne iščezne. Osim toga nema drugih promena u ponašanju sistema. U trenutku $t = 1700$ (slika 5c), sistem je potpuno segregiran i to stanje se kasnije ne menja tokom vremena (trenutak $t = 5000$, prikazan je na slici 5d).

I pri drugim vrednostima parametara brzina nastajanja radijalne segregacije bila je gotovo nepromenjena, sistem je uvek dostizao stabilno stanje do trenutka $t = 2000$, koje je nakon toga i zadržavao. Osim razlika u izgledu i definisanosti segregacije, pri promeni parametara način nastajanja i evolucije nije se menjao: isti ključni trenuci prisutni su i u svim drugim primerima. Iz tog razloga, evolucija neće biti predstavljana u drugim slučajevima već samo stacionarna stanja segregacija.

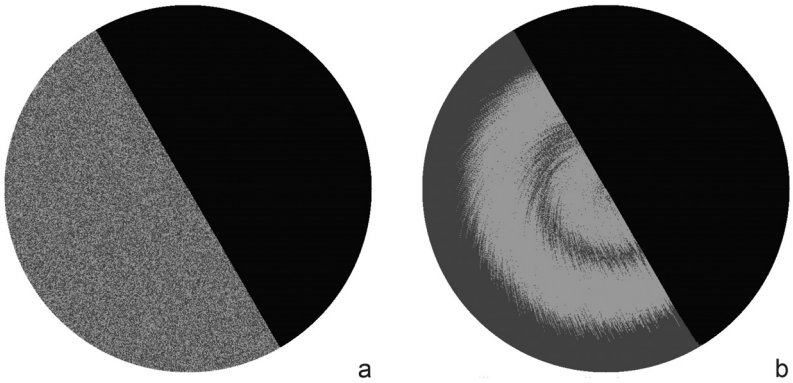
Ovakav izgled i definisanost segregacije biće dodatno prokomentarisan u odeljku III, nakon predstavljanja rezultata ispitivanja uticaja trenja.

II Uticaj masa granula

Masa granule utiče na razdaljinu koju granula može da pređe nakon što se obruši. Kada se u smeši nalaze dve komponente sa različitim masama, one će se različito ponašati: granule veće mase će prevaliti veće rastojanje nego granule manje mase. Na osnovu toga, one se grupišu u različitim oblastima, što dovodi do segregacije. Treba imati u vidu da je ovakvo kretanje ipak nasumično, pa bez obzira što većina granula neke vrste pređe istu razdaljinu, neke će pasti na drugo mesto. To dovodi do mešanja, pa je za očekivati manju definisanost granice između segregiranih komponenti, što se i dešava.

Prilikom ispitivanja uticaja masa granula, parametri trenja bili su sledeći: $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (0.34, 0.34, 0.34)$. To što su oni jednaki dovodi do toga da površina granula u stacionarnom stanju bude prava. Takođe, to znači da nastanak segregacije potiče isključivo od različitih masa granula.

Kada je $(m_A, m_B) = (0, 0)$, do segregacije ne dolazi jer su granule istovetne po svim parametrima (slika 6a).



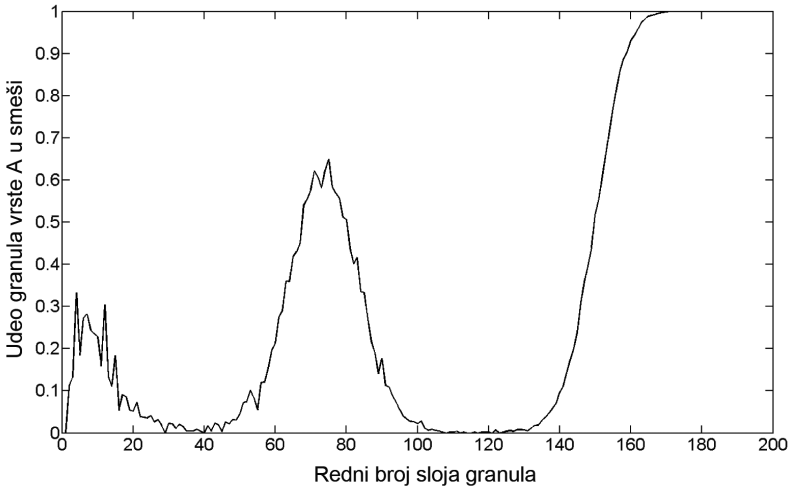
Slika 6.
a) Odsustvo segregacije pri jednakosti svih parametara;
b) segregacija pri $(m_A, m_B) = (0.5, 0)$.

Figure 6.
a) The absence of segregation produced by the equality of all the parameters;
b) Segregation in the case of $(m_A, m_B) = (0.5, 0)$.

Kada je $(m_A, m_B) = (0, 0)$, granule vrste A po obrušavanju imaju mogućnost daljeg kretanja, dok se granule vrste B obrušavaju na prvo slobodno mesto. Za očekivati je onda da granule B formiraju radijalno jezgro, dok se granule A slažu oko njih. Na slici 6b prikazano je stacionarno stanje segregacije za ove parametre.

Na slici se primećuje da pored sredine sačinjene od granula B i omotača sačinjenog od A, postoji još jedna zona grupisanja granula A tipa. Da bismo to objasnili, razmotrimo raspodelu granula duž radijusa sistema, prikazanu na slici 7.

Odatle se vidi da je rastojanje između ivica ovih oblasti približno jednako. To znači da se granule tipa A grupišu u područja koja su

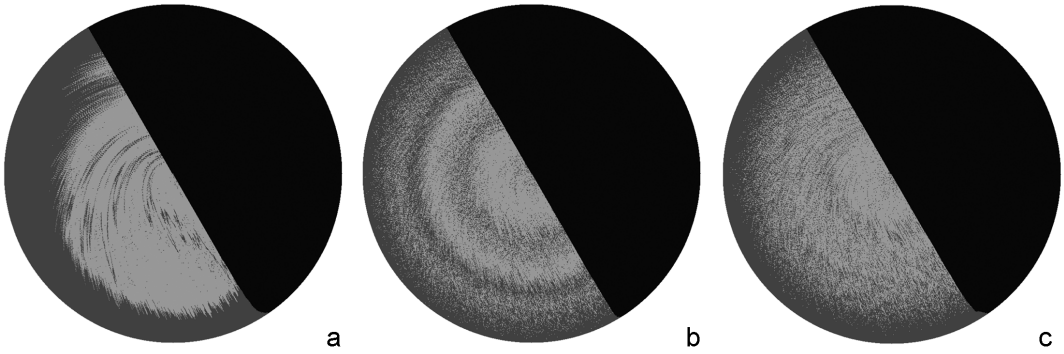


Slika 7.
Raspodela granula duž radijusa sistema

Figure 7.
The distribution of granules along the radius

međusobno jednako udaljena. Granule koje su uz levu ivicu sistema, mogu preleteti do leve ivice srednjeg područja, ali ne i dalje od toga. Odatle mogu preleteti do centra, pa iz centra do desne ivice srednjeg područja, odakle konačno mogu ponovo stići do ivice sistema. Zbog toga što je domet kretanja granula ograničen i mali, segregacija poprima ovaj oblik.

Kada se parametri promene na $(m_A, m_B) = (0.8, 0)$, uspostavlja se drugi vid segregacije. Kako granule mogu preći veći put, segregacija je izraženija, ali kako je i kretaje nasumičnije, granica između dve komponente u segregaciji je slabije definisana. To je prikazano na slici 8a.



Slika 8. Segregacija pri: a) $(m_A, m_B) = (0.8, 0)$; b) $(m_A, m_B) = (0.8, 0.1)$; c) $(m_A, m_B) = (0.8, 0.3)$

Figure 8. Segregation at the case of a) $(m_A, m_B) = (0.8, 0)$; b) $(m_A, m_B) = (0.8, 0.1)$; c) $(m_A, m_B) = (0.8, 0.3)$

Ako se vrednost m_A zadrži iz prethodnog primera, uz m_B = 0.1, segregacija poprimi izgled kao na slici 8b. Ponovo se uočavaju naizmenične oblasti granula A i B tipa. To se dešava jer se sada i granule B tipa mogu kretati. Po mehanizmu koji je već opisan, one prave nekoliko oblasti u kojima se grupišu. Te oblasti su sada uže, ali ih ima više, zbog male vrednosti m_B.

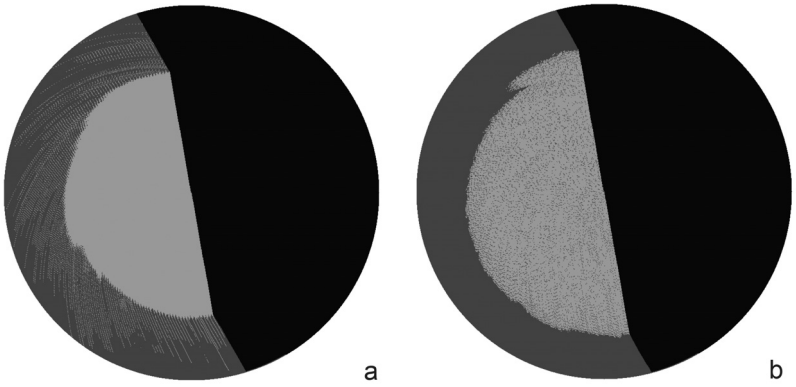
Ako se m_B poveća na 0.3, ovaj efekat se znatno smanjuje usled povećanog mešanja granula, te se dobija gotovo standardan izgled radijalne segregacije, uz nešto veću izmešanost (slika 8c).

III Uticaj trenja između granula

Kao što je u prvom delu ovog poglavlja već pokazano, razlike u trenju između granula mogu dovesti do radijalne segregacije smeše. U ovom odeljku detaljnije je predstavljen uticaj trenja na segregaciju.

Da bismo bili sigurni da segregacija potiče od razlike u trenju, mase obe vrste granula bile su jednake nuli.

Kada su parametri trenja bili postavljeni na (f_{AA}, f_{AB}, f_{BB})= (0.34, 0.34, 1), dolazilo je do formiranja oblasti koja sadrži samo granule B tipa i oblasti u kojoj se nalazi smeša oba tipa granula. To se dešava iz razloga što se granule B tipa ponašaju kao i granule A tipa kada su okružene njima (sledi iz $f_{AA} = f_{AB}$). Ovaj slučaj prikazan je na slici 9a.

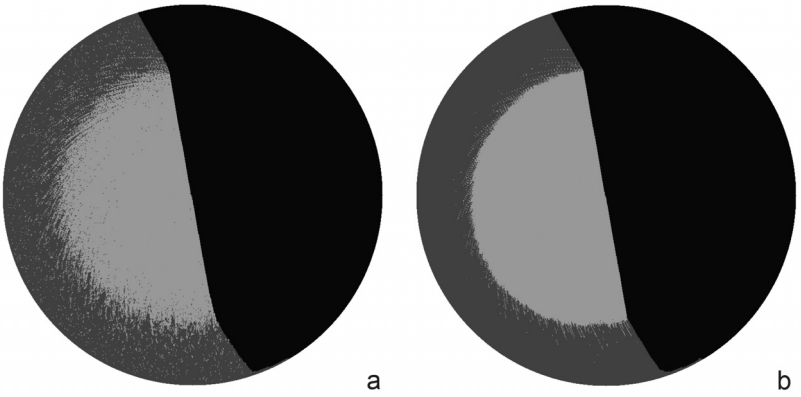


Slika 9.
a) Izolovane granule B tipa u centru, okružene smešom obe vrste granula; b) smeša obe vrste granula u sredini, okružena granulama A tipa.

Figure 9.
a) Isolated B type granules in the center, surrounded by a mixture of both types of granules; b) amixture of both types of granules in the center surrounded by A type granules.

Analogno tome, kada je (f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (0.34, 1, 1), dolazi do obrnute situacije: postoji oblast sačinjena isključivo od granula A i oblast smeše obe vrste granula (slika 9b).

U slučajevima kada $f_{AA} = f_{AB} = f_{BB}$, granule se takođe mešaju na spoju dve vrste granula. Na slici 10a prikazan je slučaj (f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = = (0.34, 0.5, 1). Opet je vidljivo mešanje granula A i B u zoni domi-



Slika 10.
a) Segregacija pri $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (0.34, 0.5, 1)$;
b) izrazita segregacija u slučaju $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (1, 2, 3)$.

Figure 10.
a) Segregation at $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (0.34, 0.5, 1)$; b) distinct segregation in the case of $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (1, 2, 3)$.

nantnoj granulama B tipa, ali u znatno manjoj meri nego u prethodnim slučajevima.

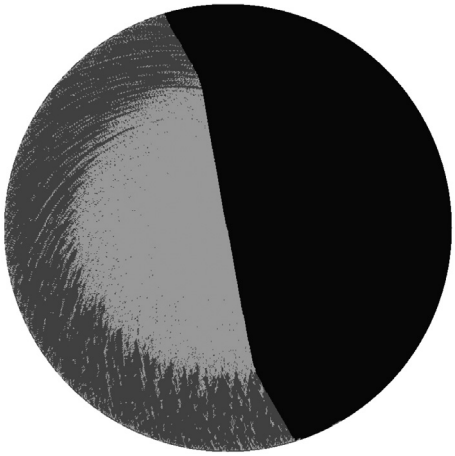
Uočen je još jedan specijalan slučaj. Slučaj kada $f_{AA} \neq f_{AB} \neq f_{BB}$, uz uslov da granule A tipa, smeša obe vrste granula, kao i granule B tipa imaju različite uglove obrušavanja, dovodi do gotovo potpune segregacije. Pošto je $f_{AA} \leq f_{AB} \leq f_{BB}$, u istom poretku su i uglovi obrušavanja. Mehanizam koji dovodi do ovoliko izražene segregacije je sledeći: kada se slučajnim premeštanjem grupiše nekoliko granula B tipa zajedno, zbog velikog međusobnog trenja, one zajedno i ostaju. To dovodi do povećane koncentracije granula A u smeši, koje se zbog malog trenja lako obrušavaju, razdvajajući smešu na komponente. Jedan takav slučaj već je prikazan u prvom odeljku ovog poglavlja (slike 5a i 5b). U slučaju $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (1, 2, 3)$ isti se fenomen može videti, samo uz veće nagibne uglove zbog većeg trenja između granula (slika 10b).

IV Kombinovan uticaj masa i trenja

Za prikazivanje zajedničkog uticaja oba faktora, koeficijenti trenja su fiksirani na $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (0.34, 0.5, 1)$. Te vrednosti su izabrane jer su neutralne: omogućavaju laku demonstraiciju različitih efekata. Segregacija pri ovim parametrima i masama jednakim nuli već je prikazana na slici 10a.

Kada se mase postave na veliku, ali jednaku vrednost (primer: $m_A = m_B = 0.8$), dolazi do smanjene definisanosti prelaza između oblasti u kojima su granule A, odnosno B, ali i do izmešanosti u maloj meri (slika 11). To se dešava zbog nasumičnog, ali izraženog kretanja obe vrste granula.

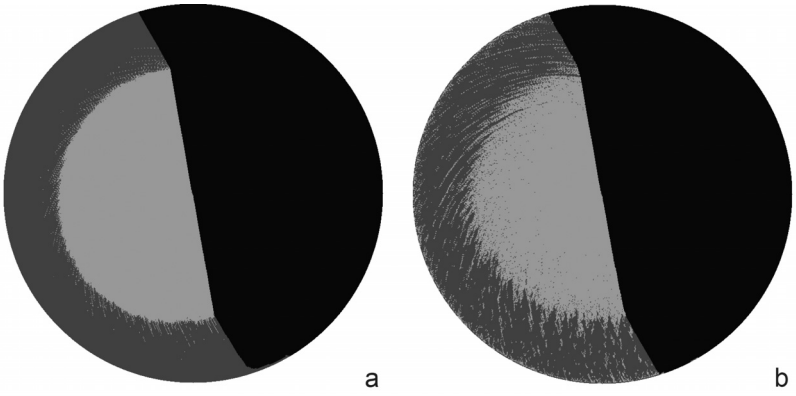
Postoje još dva bitna slučaja: prvi je kada su efekti masa i trenja u konstruktivnom slaganju, a drugi u destruktivnom. Intuicija nalaže da kada



Slika 11.
Segregacija u slučaju $m_A = m_B = 0.8$

Figure 11.
Segregation in the case of $m_A = m_B = 0.8$

su ova dva efekta u konstruktivnom slaganju, to dovodi izraženije segregacije, što se zaista i dešava. Analogno tome, kada efekti deluju u suprotnim smerovima, dolazi do razbijanja uređenosti, odnosno nepravilnosti u segregaciji. Konstruktivno, odnosno destruktivno, slaganje ovih efekata prikazano je na slici 12. Za konstruktivno slaganje su mase bile jednake $(m_A, m_B) = (0.8, 0.1)$, odnosno $(m_A, m_B) = (0.1, 0.8)$ za destruktivno.



Slika 12.
Konstruktivno (a) i destruktivno (b) slaganje efekata masa i trenja

Figure 12.
A constructive (a) and destructive (b) combination of the mass and friction effects

Zaključak

U ovom radu predstavljen je model celularnog automata koji, uz izvesna ograničenja, uspešno reprodukuje fenomen radijalne segregacije. Ispitivan je uticaj masa granula i trenja između granula na radijalnu segregaciju. Pokazano je da i mala razlika u osobinama granula dovodi do segregacije u radijalnom pravcu, kao i da povećavanjem te razlike segregacija postaje izraženija, odnosno smeša se u potpunosti razdvaja na komponente.

Pokazano je da čak i jednostavan fenomenološki model daje rezultate koji su u skladu sa eksperimentalnim, što omogućava dalji razvoj i primenu modela.

Dalji rad bi svakako trebalo da obuhvati ozbiljniju matematičku analizu raspodela granula, pogotovo tokom evolucije radijalne segregacije.

Ideja za ovaj model nastala je tokom eksperimentalnog proučavanja radijalne i aksijalne segregacije. S tim u vezi, prelaskom sa 2D prostora na 3D, mogla bi se ispitati sposobnost ovog modela za istovremenu reprodukciju kako radijalne, tako i aksijalne segregacije.

Zahvalnost. Zahvaljujem se mentoru dr Slobodanu Vrhovcu sa Instituta za fiziku za smernice i idejnu pomoć tokom realizacije rada, kao i saradnicima seminara fizike u IS Petnici, za tehničku pomoć tokom rada na projektu.

Literatura

Duran J. 1999. *Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials*. New York: Springer

Hill K. M., Caprihan A., Kakalios J. 1997. Axial segregation of granular media rotated in a drum mixer: Pattern evolution. *Physical Review E*, **56**: 4386.

McCarthy J. J., Shinbrot T., Metcalfe G. 1996. Mixing of granular materials in slowly rotated containers. *AIChE Journal*, **42** (12): 3351.

Nguyen T. T. M., Sederman A. J., Mantle, M. D., Gladden L. F. 2011. Segregation in horizontal rotating cylinders using magnetic resonance imaging. *Physical Review E*, **84**: 011304.

Rapaport D. C. 2007. Simulated three-component granular segregation in a rotating drum. *Physical Review E*, **76**: 44.

Yanagita T. 1998. Three-Dimensional Cellular Automaton Model of Segregation of Granular Materials in a Rotating Cylinder. *Physical Review Letters*, **82**: 17.

Marko Kuzmanović

Simulation of Radial Segregation by the Use of Cellular Automata

Radial segregation of a two component mixture of granular materials has been studied by the use of cellular automata. The model used in this paper is based on an existing one (Yanagita 1998), however, the geometry used in this paper is different. The lattice that was used for the cellular automation was a triangular one (Figure 1 depicts the lattice) and cells were grouped into hexagonal layers (Note: although the layers were hexagonal,

all the results are represented in a circular fashion, for reasons of convenience). Friction between the granules was modeled in a similar fashion to that in Rapaport (2007), but the effect of different masses was also modeled. The granules with large masses have more momentum, therefore they can travel farther than those with small masses. The probability that a granule of mass m travels a distance k is given by $p_k = m^{k-1}$. In each cycle all the layers were rotated, and then avalanches occurred until all the granules became stable (stability occurs when the component of gravitational force parallel to the surface is less than or equal to the force of friction.).

The effects of the masses of granules, and the effects of friction were separately studied, and in the end, their combined effect was also investigated.

It has been shown that even the slightest difference of these parameters results in radial segregation, and that the further increasement of that difference leads to total separation of the mixture to its components. After a sufficiently long period of rotation each mixture achieved a stationaty state.

A typical pattern of formation and evolution of the segregation is shown on figures 3 through 9. The parameters in this case were $m_A = m_B = 0$ and $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (0.34, 0.7, 1)$.

When the masses were non-zero, their effects resulted in a segregation. This is represented on figures 11 through 15. In these cases granules grouped themselves into regions (rings) separated by a distance equal to their mean travel distance. One case of this type of distribution is shown on figure 12 (a different representation of the same case as on figure 11).

The friction affected the system in a similar fashion. The bigger the difference between the friction coefficient, the stronger the segregation. The case of $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (a, a, b)$ or $(f_{AA}, f_{AB}, f_{BB}) = (a, b, b)$ led to an interesting formation: a region composed of solely one type of granules and a region composed of their mixture (figures 16 and 17). When the difference between the coefficients was large, the segregation was distinct (figure 19).

The effects of masses and friction can be combined both constructively (figure 21) and destructively (figure 22).

The use of this simple model was sufficient to reproduce and describe radial segregation on a phenomenological level. Further work should include a detailed mathematical analysis of the phenomenon, especially during the evolution of the segregation, in order to achieve a better understand the mechanisms involved.