

A kutatási eredmények összefoglalása

1. Börzsönyi T, Unger T, Szabó B, Wegner S, Angenstein F, Stannarius R: **Reflection and Exclusion of Shear Zones in Inhomogeneous Granular Materials**, submitted to Soft Matter, 2011 (pdf letölthető: <http://www.phy.bme.hu/~unger/bme-files/epubl.html>)
2. Unger T: **Collective rheology in quasi static shear flow of granular media**, submitted to PRE, arXiv:1009.3878 [cond-mat.soft], 2010
3. Börzsönyi T, Unger T, Szabó B;: **Shear zone refraction and deflection in layered granular materials**, Phys. Rev. E 80, 060302, 2009
4. Shaebani MR, Unger T, Kertész J: **Extent of force indeterminacy in packings of frictional rigid disks**, PHYSICAL REVIEW E: 79, 052302, 2009
5. Shaebani MR, Unger T, Kertész J: **Generation of homogeneous granular packings: Contact dynamics simulations at constant pressure using fully periodic boundaries**, IJMPC 20: 847-867, 2009
6. Shaebani MR, Unger T, Kertész J: **Unjamming due to local perturbations in granular packings with and without gravity**, PHYSICAL REVIEW E 78, 011308, 2008

A három év alatt végzett kutatás legfontosabb eredményét mutatja be a fenti publikációs lista [2.] pontja, mellyel fontos előrelépést sikerült tenni a kvázisztatikus reológia megértésében. Az eredmény megfelel az eredeti célkitűzésünknek, melyben a következő alaproblémára kerestük a megoldást. A szemcsés anyag kvázisztatikus deformációja során a lokális nyírási deformáció mértéke és sebessége is függetlenné válik a lokális feszültségtenzortól. Honnan tudja akkor az anyag, hogy hogyan kell deformálnia? Milyen mechanizmus határozza meg a deformáció térbeli eloszlását? Fő célunk az volt, hogy megértsük a jelenséget és ennek alapján kidolgozzunk egy kontinuum leírást, ami alternatívát jelenthet a lokális feszültség - deformációs ráta típusú összefüggéseken alapuló modelleknek, melyek érvényüket veszítik a kvázisztatikus határesetben.

A fizikai kép, amit tanultunk a kutatásból az, hogy a lokális deformáció agitációt jelent a közvetlen környezet számára, véletlen perturbációt okoz annak erőhálózatában. A perturbáció hatására időről időre a környezet belső szerkezete megbicsaklik (azaz, a kontaktus hálózat lokálisan nem képes tartani a rá eső terhelést és átrendeződik). Az átlagos átrendeződés a lokális nyírófeszültség irányába történik. A következmény az, hogy a helyi deformáció önmagával arányos deformációt generál a szomszédos anyagrészben. Ezt a képet sikerült egy differenciálegyenlet formájába önteni stacionárius nyírási deformáció esetén, melynek lényege, hogy a lokális nyírási deformáció mértéke illetve annak Laplace-a arányos egymással és az arányossági tényező a lokális feszültség függvénye. A modellünk nem tartalmaz időt és időderiváltakat, ami formailag alkalmassá teszi a kvázisztatikus reológia vizsgálatára.

Lényeges eredmény, hogy megterveztünk és szimulációkban teszteltünk egy olyan nyírási elrendezést, ami ideális a „kvázisztatikus rejtély” világos bemutatására és vizsgálatára. A lehető legegyszerűbb rendszert akartuk megtalálni, ami alkalmas a nemtriviális nyírási profilok előállítására, de ezen túl nem tartalmaz felesleges komplikációkat, mint pl. a görbült nyírási felületek a hagyományosan használt kísérleti elrendezésekben. A cella nagyon jól bevált. Felhívta a figyelmünket arra, hogy kvázisztatikus reológia egy kollektív jelenség, nem értelmezhető lokálisan homogén nyírással. Például olyan stacionárius állapotba tudja hozni az anyagot (sűrűség, nyírási ellenállás), ami homogén nyírási cellákban nem létezhet. Ez a jelenség és több más tulajdonság kiválóan értelmezhető és jósolható a modellünk keretében.

A tesztrendszerünkben a differenciálegyenlet analitikusan megoldható és a kapott megoldás szépen illeszkedik a nyírási profilra, szemben az eddig használt modellekkel.

Továbbá kiválóan számot ad az effektív súrlódás (eddig különösnek gondolt) gyengüléséről és (eddig nem ismert) felerősödéséről is, amit a modellel és szimulációval is elő tudunk állítani.

Megjegyezzük, hogy a munkatervben inhomogén feszültségállapotot kívántunk létrehozni a szimulációs nyírási cellában. A projekt közben kiderült, hogy egy fokkal egyszerűsíthető a vizsgálat két különböző anyag egymásra rétegezésével. Így előállítható nemtriviális deformációs mező akkor is, ha a feszültségállapot teljesen homogén az egész rendszerben. Ezzel még szebben szemléltethető, hogy a lokális nyírási ráta nem értelmezhető egyedül a lokális feszültség függvényeként.

A projekt ideje alatt korábban végzett kutatások nagy segítséget jelentettek a fent vázolt modell és tesztrendszer kitalálásában. Ezek címszavakban a következők: i) agitációs mező vizsgálata pontperturbációval [3.,4.,5.] , ii) speciális határfeltételek implementálhatósága [2., 5.] , iii) a szabad nyírási zónáknál alkalmazható mezoszkopikus szimulációs technika.

Agitációs mező vizsgálata pontperturbációval

Itt szemcsés rendszerek válaszát vizsgáltuk olyan erős lokális perturbációk hatására melyek megtörik a rendezetlen pakolás stabil szerkezetét és deformációhoz (a szemcsék mozgásához) vezetnek az anyagban. A vizsgálatot kontaktdinamika szimulációk segítségével végeztük. Itt az agitáció mechanizmusa geometriai, a térfogati kizáráson alapul, nem pedig rugalmas lökéshullámokon. Azt találtuk, hogy a perturbáció hatása hosszútávú, hatványfüggvény lecsengést mutat mind a deformáció, mind a mechanikai feszültség esetén. Többféle típusú perturbációt és nyomásviszonyokat is teszteltünk. A szemcsés rendszerek választulajdonságai direkt korrelációt mutatnak egy látszólag távoli, egyensúlyi viselkedéssel, a statikus szemcsés rendszerben lehetséges erőfluktuációkkal. A kapcsolatot részletesen vizsgáltuk a [4., 6.] publikációkban.

A szemcsék deformációjának hatását kontaktdinamika (KD) szimulációk segítségével teszteltük az eredendően merev részecskék koncepcióján alapuló algoritmus pseudo-rugalmas viselkedését használva. Ennek lényege, hogy a technikai paraméterek hangolásával (időlépés nagysága, erőiteráció pontossága) beállítható a részecskék effektív keménysége, a hangsebesség és a kontaktusok csillapítási tényezője. (Ezt a technikát a [PRE 65:061305 (2002)] publikáció ismerteti, mely nem képezi részét a jelen kutatási projektnek). A vizsgálataink azt mutatják, hogy a kvázisztatikus reológiában nincs fontos szerepe a részecskék deformációjának. Amíg a deformáció kicsi marad a részecskeméretre képest az anyag folyási tulajdonságai (kritikus sűrűség, effektív súrlódás, feszültségtenzor) nem függenek a kontaktusoknál fellépő deformációktól.

Speciális határfeltételek megvalósítása a kontaktdinamika programban

A kvázisztatikus reológia vizsgálatához tovább kellett fejlesztenünk a saját készítésű kontaktdinamika elvén működő szimulációs programot. A fejlesztés két lépésben folyt. Elsőként kidolgoztunk egy Andersen-típusú algoritmust, ami tökéletesen merev részecskék esetén is alkalmazható ([5.] publikáció ismerteti a módszert). Hasonló határfeltételt eddig csak lágyrészecskés szimulációkban alkalmaztak. Ezzel lehetővé vált a nyomás kontrollálása határolófalak nélkül. Második lépésként Lees-Edwards-határfeltétel implementálása volt a feladat, hogy lehetővé váljon a szerkezetében homogén, határolófalaktól mentes nyírás. Az így kialakított nyírási cella minden pontja ekvivalens, nincsenek széleffektusok. Az Andersen- és a Lees-Edwards-határfeltételek felhasználásával született a [2.] publikáció.

Szabad nyírási zónák mezoszkopikus szimulációja

Kitaláltunk egy Monte Carlo szimulációs technikát, mely véletlen izotróp rácson értelmezett és egy korábbi modell (variációs keskeny sáv modell) fluktuációkat is tartalmazó változatának tekinthető. Ennek az a lényege, hogy a pillanatnyi deformáció egy végtelen vékony sáv mentén jön létre. Ez a sáv a leggyengébb csúszási felületet jelöli az anyagban az adott véletlen reprezentáció esetén. A nyírási zónát ebben a modellben a csúszási sávok sokasága adja. Ez a véletlen reprezentációkra vett sokaságátlag végül egy sima deformációsmezőhöz vezet, mely kiváló egyezést mutat a kísérleti viselkedéssel. A módszert részletesen ismerteti az [1.] publikáció.

Nyírási zónák kísérleti vizsgálata

Az előzetes elméleti kutatások egy érdekes effektus jeleztek előre, a nyírási zónák fénytöréshez hasonló viselkedését határfelületek közelében (Unger, PRL 2007). Az elméleti jóslatnak eddig nem volt kísérleti igazolása vagy cáfolata. Megterveztünk és elvégeztünk egy kísérletsorozatot a zónatörés tesztelésére. A törési effektust tisztán sikerült kimutatnunk kísérletileg [3]. A kísérleti viselkedés összhangban van az elvégzett számítógépes szimulációkkal. Itt a kapcsolódó szimulációkat a fluktuációs keskeny sáv modell alapján végeztük. A kísérleti elrendezést úgy választottuk meg, hogy a geológiai körülményeknek minél jobban megfeleljen. Itt szempont volt, hogy a rendszer nyomását az anyag saját súlya biztosítsa és a nyírási zónákra nézve felül szabad határfeltétel legyen. A kísérletben osztott alapú egyenes nyírási cellát használtunk.

Megvizsgáltuk a variációs modell következményét arra az esetre is, amikor a nyírási zóna kezdő és végpontja is a nehezebben nyírható anyagban helyezkedik el, vagyis a két anyag határfelületéhez képest azonos oldalon. Ez felel meg a tükrözésnek az optikában. A zónatükrözés azonban nem követi a geometriai optikában megszokott viselkedést. A nyírási zónák esetében a következő képet jósolja a variációs modell: a zóna a határszög alatt éri el a határfelületet, majd a határfelület közvetlen közelében halad a könnyen nyírható anyagban, majd a határszög alatt újra belép a nehezen nyírható közegbe. Ez az geometria jelenti a globális optimumot a zóna számára. A fluktuációs keskeny sáv modell és a kísérletek alátámasztják a modell jóslatát [1.].

A kísérleti eszközök használata nem szerepelt az eredeti tervekben, de rendkívül eredményesen segítették a kutatási projektet.

Együtműködés

A fenti beszámolóban összefoglalt munka együtműködés keretében készült. Az együtműködő kutatók közül fontos kiemelni M.R.Shaebanit (KD szimulációk, Duisburg-Essen Egyetem) és Börzsönyi Tamást (kísérletek, SzFKI).

Konferencia előadások

A projekt kutatási eredményeiből tartott konferenciaelőadások:

- 2009 Cambridge, Isaac Newton Institute, IMA Conference on Dense Granular Flows

Meghívott előadóként:

- 2009 Vina del Mar, Chile, Southern Workshop on Granular Materials