

Szilárdtestek fragmentációja izotróp nyomás alatt

TDK dolgozat

Készítette
Husztek Anna
Fizika BSc

Témavezető
Dr. Kun Ferenc
Egyetemi tanár

Elméleti Fizikai Tanszék
Debreceni Egyetem
Debrecen
2024

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
1.1. Fragmentációs folyamatok	3
1.2. Univerzalitás	4
1.3. Fragmentációs folyamatok alkalmazásai	5
1.4. Célkitűzések	7
2. Szimulációs modell heterogén szilárd testek fragmentációjá- nak vizsgálatához	8
2.1. Diszkrét elem modell	8
2.2. A modell felépítése	9
2.3. Kontakt erő	10
2.4. Rúderő	12
2.5. Mozgásegyenlet	12
2.6. Törés	13
3. Korong fragmentációja	14
3.1. Összenyomott korong széttörésének szimulációja	14
3.2. Széttörési folyamat különböző energiákon	17
3.3. A fragmensek sokfélesége	19
3.4. A fragmensek tömegeloszlásának elemzése	23
3.5. A széttörési folyamat fázisai	26
4. Diskusszió	29
5. Saját eredmények	31
6. Köszönetnyilvánítás	33

1. fejezet

Bevezetés

Tudományos Diákköri munkámban heterogén szilárdtestek széttörési folyamatait vizsgálom analitikus számítások és számítógépes szimuláció segítségével. Kutatásomban elsősorban olyan folyamatokra fókuszálok, amelyek során a törés megkezdésekor homogén energia eloszlás van a testben. Ebben a fejezetben bemutatom azokat a motivációs tényezőket, amelyek a téma választására ösztönöztek, valamint részletezem a kutatás fő célkitűzéseit.

1.1. Fragmentációs folyamatok

Általános tapasztalat, hogy a szilárdtestek nagy mennyiségű energia rövididejű betáplálásának hatására egy gyors folyamatban nagyszámú darabra törnek (ha például elejtünk egy porcelántányért, az a padlónak csapódva sok darabra törik szét). A keletkező darabok méretei a test eredeti méreténél jelentősen kisebbek. Ilyen fragmentációs folyamatokkal a természetben is gyakran találkozhatunk, például: sziklaomlásoknál, gleccserszakadásoknál, valamint az iparban is nagy jelentőséggel bírnak többek között a bányászatban és a nyersanyag-feldolgozás során [1, 2, 3, 4, 5].

A törési folyamat kísérleti megvalósítása során az energia betáplálása általában robbantással, vagy lövedékbelövással történik. Az energiabetáplálás hatására a testben létrejön egy lökéshullám. Ez nagyszámú repedéshez vezet, amelyek mentén az anyag széttörik. A szilárdtestek széttörése egy egyensúlytól távoli folyamat, amely rendkívül gyorsan zajlik le, emiatt a folyamat megfigyelése mikroszkopikus szinten komplikált. A megfigyelések emiatt leginkább a különféle mennyiségeknek a fragmentációs folyamat lezajlása utáni eloszlásaira korlátozódnak. Már a hétköznapi tapasztalatainkból is megállapítható, hogy a legtöbb fragmens kisméretű és a méret növekedésével a darabszám egyre csökken.

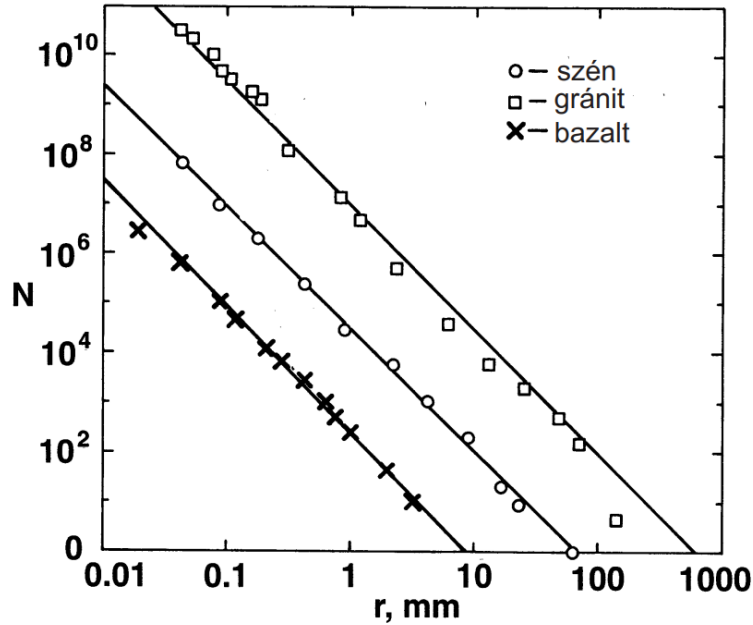
A fragmensek méretének és tömegének pontosabb vizsgálatát teszi lehetővé, ha a törési folyamatot számítógépes szimulációval vizsgáljuk. A fragmentációhoz szükséges minimális betáplált energia például meghatározható a legnagyobb és második legnagyobb fragmenstömeg vizsgálatával különböző mértékű energiabetáplálás mellett. Amíg a betáplált energia kicsi, a legnagyobb fragmens tömege alig kisebb a rendszer teljes tömegétől, míg a második legnagyobb ettől nagyságrendekkel kisebb. Ebben az esetben a minta még csak megrepedezik és belőle némi por száll ki belőle. Ennél az energiatarományánál még nem beszélhetünk fragmentációról, csak károsodásról. A betáplált energiának át kell lépnie az ún. E_c kritikus energia értéket, ahhoz hogy a minta széttörjön. Efölött az érték fölött már a legnagyobb és második legnagyobb fragmensek tömege közel azonos, nagyságuk együtt csökken a betáplált energia növelésével, ez az ún. fragmentált fázis.

1.2. Univerzalitás

Az elmúlt évtizedek kísérletei arra a következtetésre mutatnak, hogy kellően rendezetlen mikroszkopikus tulajdonságú test rideg törése esetén keletkező fragmensek méretének és tömegének gyakorisági eloszlása hatványfüggvény szerint csökken, függetlenül az anyagi minőségtől és az energia betáplálásának módjától. Az eloszlás csökkenésének gyorsaságát jellemző τ exponens értékét elsősorban a test geometriája határozza meg, ez alapján három univerzalitási osztályba lehet sorolni a fragmentációs folyamatokat: egy-, két- vagy háromdimenziós mintákról lehet szó. Egydimenziós test (például egy vékony üvegrúd) törésénél az exponens értéke $\tau \approx 1.5$. Kétdimenziós esetben, mint például vékony üveglapok törésénél $\tau \approx 1.5 - 2.0$. A háromdimenziós tömbi anyagok törése pedig $\tau \approx 2.3 - 2.7$ eredményre vezet [2, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13].

Az 1.1 ábrán három különböző anyag törése során keletkezett darabok méretének az eloszlása látható. A törések során az energia betáplálásának módszere is különbözött. A szenet bányában robbantották, a gránit egy földalatti atomrobbanásban zúzódott szét, a bazaltba pedig laboratóriumban lőttek lövedéket. A kétszer logaritmikus skálán ábrázolt egyenesek hatványfüggvény eloszlást mutatnak. Az egyenesek meredeksége, azaz a hatványfüggvény kitevője mindhárom esetben közel azonos.

Külön osztálytba sorolható továbbá a héjszerkezetek fragmentációja, ugyanígy ilyenkor az anyag lokális geometriai struktúrája kétdimenziós, de dinamikája három dimenzióban zajlik. A tartályok, repülőgépek és az űrállomás-modulok tipikus példái a héjszerkezeteknek. Így vizsgálatuk kiemelt fontosságú napjaink űrkutatásában is. A héjszerkezetek kísérleti vizsgálatánál az



1.1. ábra. Fragmensek méretének eloszlása három különböző anyagra, amelyeket három különböző módon törtek össze [4].

egyik legkiválóbb alany a tojáshéj, de műanyag- és üveggömbökkel is végeztek méréseket. A végzett kísérletek alapján a héjszerkezetek fragmentációjánál keletkezett fragmensek tömegeloszlásának exponense $\tau \approx 1.35$. Ez azt jelenti, hogy a zárt héjak széttörése valóban új univerzalitási osztályt ad, hiszen az exponens eltérő az egy-, két- és háromdimenziós esetek exponenseitől [4, 15].

A törési folyamatok univerzális viselkedésének megértése a szakterület egyik legfontosabb kihívása. Az univerzalitás egyik elfogadott magyarázata, hogy az energiabetáplálás egy lökéshullámot hoz létre, amelynek haladó frontja mentén elágazó, majd összeolvadó repedések keletkeznek. Az elágazás-összeolvadás mechanizmus egy fraktál fát hoz létre, ami univerzális terület, illetve térfogateloszlást hoz létre a fa ágai között [2, 8].

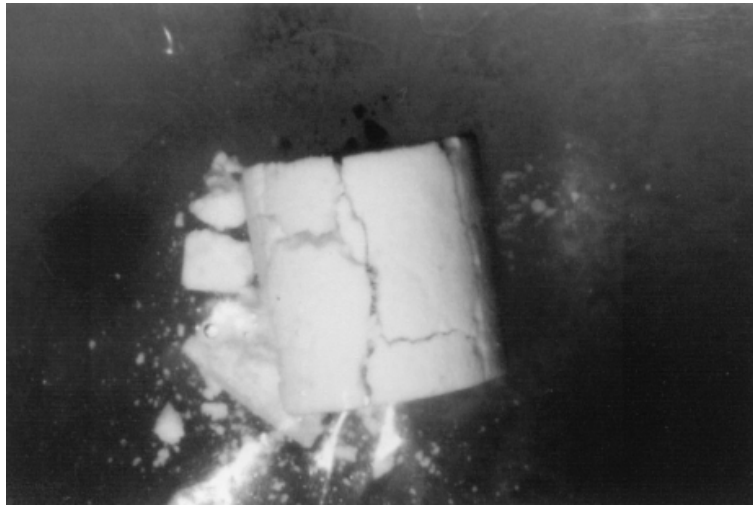
1.3. Fragmentációs folyamatok alkalmazásai

Fragmentációs folyamatokat kiterjedten használnak az iparban, például a bányászatban robbantással törik össze a kőzeteket, amiket aztán tovább zúznak, hogy feldolgozhatóvá váljanak.

Fragmentációs folyamatok egy nagyon fontos gyakorlati alkalmazása a vesekőnek (és epekőnek) az emberi testen belül történő összezúzása. A módszer

neve lökeshullám-litotripszia (ESWL), amelyet a [17] tanulmány mutat be vesekő nem invazív módon történő zúzására. Az ESWL célja olyan fókuszált lökeshullámot létrehozni az emberi testben, amely ismételt alkalmazásával a kövek kisebb darabokra törhetők.

Kísérleteket végeztek küldönböző méretű ($5mm$, $12mm$, $15mm$) gömb és henger szimmetrikus mesterséges kövekkel (1.2 ábra), melyek mechanikai tulajdonságai a vesekőéhez hasonlóak [17]. A kísérletek során különböző nyomású, időtartamú és fókuszszélességű lökeshullámmal törték szét az egyes mintákat, és vizsgálták ezen paraméterek hatását a törési folyamatra [17, 18].



1.2. ábra. ESWL módszerrel szétzúzott henger alakú mesterséges kő.

Az eredmények azt mutatták, hogy a kő törésében az egyik legmeghatározóbb szerepe egy ún. "facsaró mechanizmusnak" van, amely a kő nagy felületen történő radiális irányú összenyomását jelenti. Ez a mechanizmus mikrorepedéseket okoz a kőben, melyek egyesülése a kő hasadását okozza. A töréshez szükséges impulzusok száma függ a próbatest méretétől (nagyobb méretű kő szétaprósításához több impulzus kell). A tanulmány alapján az ESWL módszer hatékonysága javítható olyan paraméterek optimalizálásával, mint a fókuszszélesség, az impulzus időtartama és a nyomás amplitúdója.

A folyamat komplexitása miatt a számítógépes szimulációk alapvető fontosságú információval szolgálhatnak a különböző paraméterekkel rendelkező lökeshullámok által kiváltott szétaprósítás pontos megértéséhez.

1.4. Célkitűzések

TDK munkám célja heterogén szilárdtestek fragmentációjának vizsgálata számítógépes szimulációval. A kutatómunkám során olyan fragmentációs folyamatokat vizsgálok, amelyeknél az energia betáplálása a test izotróp összenyomásával történik, hasonlóan a vesekő zúzására kidolgozott eljáráshoz. Az egyszerűség kedvéért a folyamatot két dimenzióban vizsgálom úgy, hogy egy kétdimenziós, korong alakú szilárdtestben összenyomással homogén kezdeti energiaeloszlást hozunk létre. A test a geometriai kényszerek miatt az energia betáplálása során még nem törik szét. Amikor a kellő mennyiségű energia-betáplálás megtörtént, kis relaxáció után megszüntetjük a kényszereket és a testet szabadon engedjük tágulni. A deformációban tárolt rugalmas energia egy része a tágulás közben repedések keltésére fordítódik, és ez sugárirányban kirepülő fragmenseket eredményez.

Kutatásomban részletesen megvizsgálom a széttörési folyamat időfejlődését, dinamikai és statisztikus jellemzőit. A terhelési eljárást egy korábban kidolgozott kétdimenziós diszkrét elem modell szimulációs programjának keretében implementálom, és szimulációkkal vizsgálom a rendszer időfejlődését különböző mennyiségű betáplált energia mellett. A szimulációval nyert adatok kiértékelésére egy külön feldolgozó programot fejlesztettem, amellyel meghatároztam a bennünket érdeklő mennyiségeket. Vizsgálataim elsődleges célja annak feltárása, hogy az általam alkalmazott speciális terhelési mód, amely jó közelítést adja az ESWL módszerrel megvalósított terhelésnek, hogyan befolyásolja a széttörés folyamatát és a végállapotban előálló darabok statisztikus jellemzőit. Mivel kezdetben homogén energia eloszlást hozunk létre a testben, várható, hogy a korábban azonosított univerzalitási osztályoktól eltérő viselkedést figyelhetünk meg [5, 8, 9, 10, 11, 12, 13]. Szimulációim hozzájárulhatnak az ESWL módszerrel keltett lökéshullám paramétereinek optimalizálásához [17, 18].

2. fejezet

Szimulációs modell heterogén szilárd testek fragmentációjának vizsgálatához

A szilárd testek törésének vizsgálatában az analitikus számítások lehetőségei igen korlátozottak, ezért kutatómunkám számítógépes szimulációkra épül. Ebben a fejezetben a kutatásomhoz használt kétdimenziós diszkrét modellt mutatom be a [6, 7] referenciák alapján. A modellben az anyag diszkrét szemcsékből áll, melyeket konvex poligonok reprezentálnak és egyszerű rudak segítségével vannak összekötve a szomszédos szemcsékkel. A modellt témavezetőm kutatócsoportja dolgozta ki és sikerrel alkalmazta szilárdtestek törési jelenségeinek vizsgálatára.

2.1. Diszkrét elem modell

A heterogén szemcsés anyagok - mint például a beton vagy a kerámia - fragmentációja nagyon komplex módon jellemezhető, mivel a törés anizotróp hajlamú az inhomogén mikrostruktúra miatt. Ebből kifolyólag a törési folyamat numerikus leírása nagyon összetett. A klasszikus numerikus módszerekben parciális differenciálegyenleteket kell megoldani, amelyekkel komplikált leírni az egész törési folyamatot. Alternatívául szolgálnak a Diszkrét Elem Modellek (DEM), ahol a rugalmas közeget nem tekintjük folytonosnak, helyette az anyag diszkrét elemekből áll. Az elemek mikroszkopikus kölcsönhatása olyan kell legyen, hogy a modell jól írja le az makroszkopikus anyag rugalmas viselkedését. A modell a rendszer időfejlődését az egyedi elemek klasszikus mechanikai mozgásegyenleteinek numerikusan megoldásával állítja elő, ezt hívjuk molekuláris dinamikának. Ezt a módszert leggyakrabban a konden-

zált anyagok fizikájában használják.

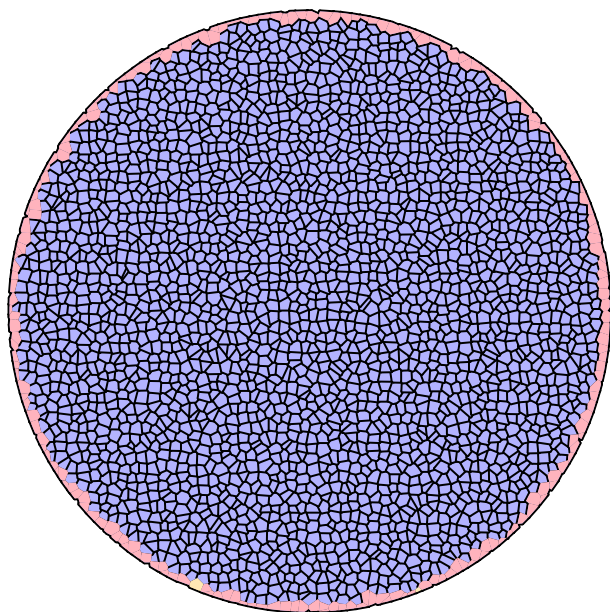
A munkámban olyan kétdimenziós rúd-részecske modellt használtam, amelyben az anyagot egy összefüggő szemcsés test reprezentálja. A szemcsék tömegközéppontjai rudak segítségével vannak összekötve, melyek terhelés alatt rideg módon törhetnek. A szemcséket törhetetlen poligonok modellezik, amelyek rugalmas taszító erőt fejtenek ki, ha egymásnak vannak nyomva. Az ilyen rúd-részecske modellek legfőbb előnye, hogy a terhelési folyamat alatt a repedési felületek egymásra kifejtett taszító erejét is figyelembe veszi.

2.2. A modell felépítése

Az általunk használt modell a heterogén anyagok mechanikai viselkedésének tanulmányozására szolgál [6, 7]. A modell felépítéséhez először a vizsgált szilárd testet konvex poligonok rendezetlen rácsán diszkretizáljuk. Ezután a sokszög alakú részecskék kölcsönhatásának meghatározása következik, és végül a rendszer időfejlődésének leírásához a mozgásegyenletek numerikus megoldása szükséges.

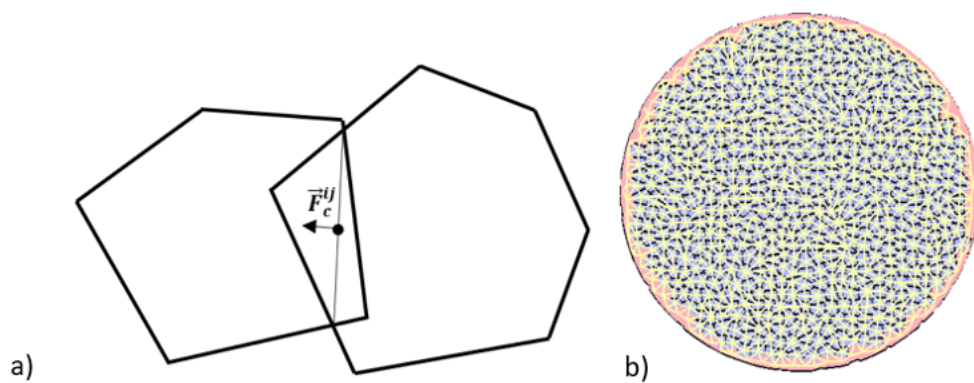
A modellben a szemcsés szerkezetet ún. Voronoi poligonok reprezentálják. A Voronoi konstrukció egyik speciális fajtáját használjuk, azaz úgynevezett vektorizálható véletlen rácsot hozunk létre. Ehhez egy négyzetrácsból indulunk ki, amelynek minden plaketjének közepére egy kisebb, a oldalhosszúságú négyzetet centrálunk. Ebbe a kis négyzetbe véletlenszerűen egy pontot helyezünk el, majd ezekkel az alappontokkal végezzük el a Voronoi konstrukciót. Minden ponthoz a hozzá legközelebb eső felületdarabot rendeljük és így alakulnak ki a poligonok. A Voronoi konstrukció véletlenszerűségét a kis négyzet a oldalélének hossza kontrollálja, amelynek értéke 0 és a négyzetrács rácsállandója között változhat. Igazolható, hogy ennél a módszernél az egyes poligonok szomszédainak száma korlátos. Ez nagyon hasznos a számítógépes program futási idejének optimalizáláshoz, és nagyobb rendszer szimulációját is lehetővé teszi. A 2.1 ábrán látható az általunk Voronoi konstrukcióval generált szemcsés próbatest. A generált négyzet alakú mintából kör alakú próbatestet vágtunk ki.

A modellben az egyes részecskéknél három szabadsági foka van, a tömegközéppont két koordinátája és az elfordulás szöge, így az i -edik részecske helyzetét az $X^i = (x^i \ y^i \ \varphi_z^i)^T$ vektorral jellemezhetjük. A φ_z^i forgás szög a részecske teljes elfordulását adja meg az eredeti helyzetéhez képest. A részecskéket törhetetlennek és deformálhatatlannak tekintjük, ezért csak translációs és forgási elmozdulásuk lehet, ami teljesen jellemezhető az X^i vektorral.



2.1. ábra. A próbatest szemcsés szerkezete, amit egy négyzet Voronoi konstrukciójával állítottunk elő. A négyzetből kivágtunk egy kör alakú testet. A modellben a poligonok mezoszkopikus méretű anyagdarabokat reprezentálnak.

2.3. Kontakt erő



2.2. ábra. A deformálhatatlan poligonok mozgás közben átlapolódhatnak (a), ez reprezentálja a deformációt. A poligonok között fellépő tasztító erő($\mathbf{F}_c^{ij}$) arányos az átlapolt területtel. A kezdetben egymással szomszédos poligonokat rugalmas rudakkal kötjük össze (b), ezek biztosítják a kohéziós erőket.

Mivel a poligonok kölcsönhatásának leírása analitikusan lehetetlen a véletlenszerű formájuk miatt, ehelyett közelítő eljárást kell használni. Feltételezzük, hogy érintkezéskor a poligonok nem deformálódnak, hanem átlapolódnak egymással, s az átlapolódás mértéke a deformációjukat reprezentálja (lásd a 2.2(a) ábra). Az átlapolódó poligonok között egy taszító erőt vezetünk be, amely arányos az átlapolt területtel, iránya pedig merőleges a poligonok két metszéspontját összekötő egyenesre. A két szemcse metszéspontjai által meghatározott egyenessel egyirányúnak választjuk a tangenciális, arra merőlegesnek pedig a normális irányt, az ilyen irányú egységvektorokat $\mathbf{t}$ -nel és $\mathbf{n}$ -vel jelöljük. Ezekkel a kölcsönható erő

$$\mathbf{F}_c^{ij} = F^{N,ij} \mathbf{n} + F^{T,ij} \mathbf{t} \quad (2.1)$$

alakba írható. Két kölcsönható i és j szemcse között ható erő normális és tangenciális komponenseit a következőképpen definiáljuk:

$$\begin{aligned} F^{N,ij} &= -\frac{E_p A_p}{l_c} - m_{eff}^{ij} \gamma^N v_{rel}^N \\ F^{T,ij} &= -\min(m_{eff}^{ij} \gamma^T |v_{rel}^T|, \mu |F^{N,ij}|), \end{aligned} \quad (2.2)$$

ahol a γ^N és γ^T a viszkozus disszipatív csillapítást, μ pedig Coulomb súrlódási törvényt veszi figyelembe. E_p -vel a rugalmassági modult jelöljük és A_p az átfedő terület nagysága. Ha elhanyagoljuk az elfordulást, a kölcsönható részecskék relatív sebessége, az effektív tömeg és karakterisztikus hossz a következők:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{rel} &= \mathbf{v}^j - \mathbf{v}^i \\ m_{eff}^{ij} &= \frac{m^i m^j}{m^i + m^j} \\ \frac{1}{l_c} &= \frac{1}{d^i} + \frac{1}{d^j}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

A d^i és d^j olyan körök átmérője, melyek területe egyenlő az i és j poligonok területével. A kontakt erő forgatónyomatékokat is kifejt a részecskékre $M_{p,z}^{ij} = \mathbf{F}_c^{ij} \times \mathbf{r}_c^i$, ahol $\mathbf{r}_c^i$ az i poligon tömegközéppontjából a metszővonal középpontjába mutató vektor. Így formálisan a kontaktust hatása az alábbi kifejezéssel írható le

$$\mathbf{F}_p^{ij} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_c^{ij} \\ M_{p,z}^{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{p,x}^{ij} \\ F_{p,y}^{ij} \\ F_{p,z}^{ij} \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

2.4. Rúderő

A szemcsékből álló szilárdtest kohéziójának biztosítására azokat a poligonokat, amelyek a kezdeti konfigurációban szomszédosak egymással, rudakkal kötjük össze (lásd a 2.2(b) ábra). A rudaknak két szerepe van a modellben, egyrészt összetartják a szemcsékből álló testet, másrészt eltörhetnek, ami repedések keltését jelenti. A poligonok mozgása közben a rudak deformálódnak ezért erőt és forgatónyomatékokat fejtenek ki a hozzájuk kapcsolt poligonokra. Ezt az erőt egy előre definiált törési törvénnyel korlátozzuk, azaz a túlfeszített rudak eltörnek és kikerülnek a számításból. A részecskékre ható rúderőt a következő alakba írjuk

$$\mathbf{F}_b^{ij} = \begin{bmatrix} F_{b,x}^{ij} \\ F_{b,y}^{ij} \\ F_{b,z}^{ij} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{F}_b^{ij} \\ \mathbf{F}_b^{ji} \end{bmatrix} = \mathbf{K}_b^{ij} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^i \\ \mathbf{u}^j \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

ahol a $\mathbf{K}_b^{ij}$ a szimmetrikus merevségi mátrix, ami Timoshenko rúdelmélete alapján a rúd normális, nyíró és hajlítási rugalmasságait tartalmazza [6].

2.5. Mozgásegyenlet

A rendszer időfejlődését úgy állítjuk elő, hogy numerikusan megoldjuk a poligonok mozgásegyenlet rendszerét

$$\mathbf{M}^i \ddot{\mathbf{x}}^i = \sum_{j=1}^{n_p} \mathbf{F}_p^{ij} + \sum_{k=1}^{n_b} \mathbf{F}_b^{ik}; \quad i = 1, \dots, N$$

$$\mathbf{M}^i = \begin{bmatrix} m^i & 0 & 0 \\ 0 & m^i & 0 \\ 0 & 0 & \theta^i \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

ahol a mátrixban m^i az i -edik poligon tömege, és θ^i pedig a tehetetlenségi nyomatéka. A mozgásegyenletben n_p és n_b a kölcsönható poligonok száma, N pedig az összes részecske száma a mintában. Az egyenletek numerikus megoldása ötöd rendű prediktor-korrektor módszerrel történik [16].

2.6. Törés

A poligonok mozgása közben az őket összekötő rudak deformálódnak és ha túlfeszülnek, akkor eltörnek. A modellben egy rúd törését a nyújtási és hajlítási (nyírási) deformáció okozza. A két törési módus szerepét egy-egy konstans parameter $\varepsilon_{b,max}$ és ϕ_{max} szabályozza a következő formula alapján

$$\left(\frac{\varepsilon_b^{ij}}{\varepsilon_{b,max}} \right)^2 + \frac{\max(|\phi_z^i|, |\phi_z^j|)}{\phi_{max}} \geq 1, \quad (2.7)$$

ahol $\varepsilon_b^{ij} \geq 0$ az i és j poligonokat összekötő rúd lokális tengely irányú megnyúlása, ϕ_z^i és ϕ_z^j pedig a rúd két végének hajlítási szöge. A fenti törési kritériumot az időfejlődés minden iterációs lépésében kiértékeljük az összes rúdra, és azokat a rudakat, amelyek teljesítik a feltételt, kivesszük a rendszerből. A model fontos eleme, hogy az $\varepsilon_{b,max}$ és ϕ_{max} törési paraméterek konstansak, de a rudak törése mégis rendezetlen lesz a poligon rács szerkezeti rendezetlensége miatt [6, 7].

3. fejezet

Korong fragmentációja

TDK munkám során számítógépes szimulációval vizsgáltam egy izotróp módon összenyomott korong széttörésének folyamatát változtatva a betáplált energia mennyiségét. A fejezetben ismertetem a a korong összenyomására kidolgozott módszerünket és a széttörés időfejlődésének legfontosabb jellemzőit.

3.1. Összenyomott korong széttörésének szimulációja

A Voronoi konstrukcióval előállított korong alakú próbatestbe izotróp módon tápláljuk be az energiát, úgy, hogy közben az még nem törik szét. A szimulációban ezt úgy valósítjuk meg, hogy a poligonokat összekötő rudak nyugalmi hosszát a t idő függvényeként növeljük az eredetihez képest. Ez a következő összefüggéssel írható le:

$$l_{ij} = l_0^{ij}(1 + st), \quad (3.1)$$

ahol i és j a két összekötött poligon indexe, l_{ij} az összekötő rúd nyugalmi hossza, l_0^{ij} pedig a rúd aktuális nyugalmi hossza $t = 0$ időpillanatban. A rudak nyugalmi hosszának növelési sebességét az s paraméter határozza meg. Ha a nyugalmi hossz növelése közben engednénk, a próbatest fokozatosan tágulna és relaxálna. Ennek elkerülésére a korong szélét rögzítjük, így a poligonok a kezdeti helyzetükből nem mozdulnak el, a rudak aktuális hossza mindvégig megegyezik a kezdeti hosszukkal. Ez a terhelési mód gyakorlatilag a korong izotróp összenyomását valósítja meg, ahol a testtel közölt energia a rudak deformációjában tárolódik. A rudaknak a nyugalmi hossz növelése

miatt fellépő ε_{ij} deformációja az

$$\varepsilon_{ij}(t) = \frac{l_{ij}(t) - l_{ij}^0}{l_{ij}^0} \quad (3.2)$$

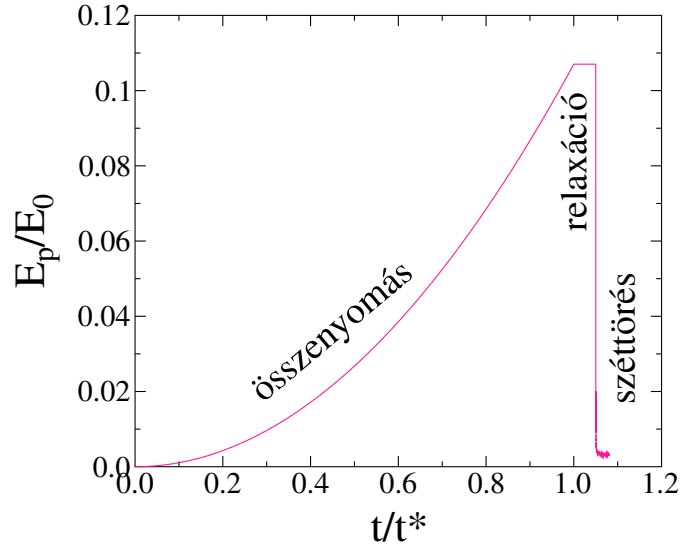
alakba írható. Behelyettesítve a (3.1) kifejezést, a rudak időfüggő deformációjára $\varepsilon_{ij} = st$ adódik, azaz minden rúd esetén azonos és a t idő lineáris függvényeként növekszik. Egy rúdban tárolt E_p energia a deformáció négyzetével növekszik $E_p = \frac{1}{2}E\varepsilon^2$. Mivel ε minden rúdra ugyanaz, N rúd esetén a rendszer teljes, deformációban tárolt energiája

$$E_p = \frac{1}{2}NE\varepsilon^2, \quad (3.3)$$

ahol a rudak N száma arányos a korong $R^2\pi$ területével. A rendszerbe izotróp összenyomással betáplált energia mennyiségét a deformáció maximális ε_0 értékével kontrolláljuk, amelynek elérésekor az összenyomási folyamatot leállítjuk. Ezt követi egy relaxációs szakasz, amikor rögzített perem mellett, a rudak hosszát állandó értéken tartva a poligonok mozgásegyenleteinek megoldásával engedjük a rendszert fejlődni. Ezzel elérjük, hogy a betáplált energia teljesen homogén módon legyen elosztva a rendszerben. A betáplált E_p energia időfejlődését illusztrálja a 3.1 ábra. Mivel az ε deformáció az idő lineáris függvényeként nő, a deformációs energia pedig négyzetesen függ ε -tól, az időfüggés is négyzetes lesz. A relaxációs szakaszban a teljes energia állandó.

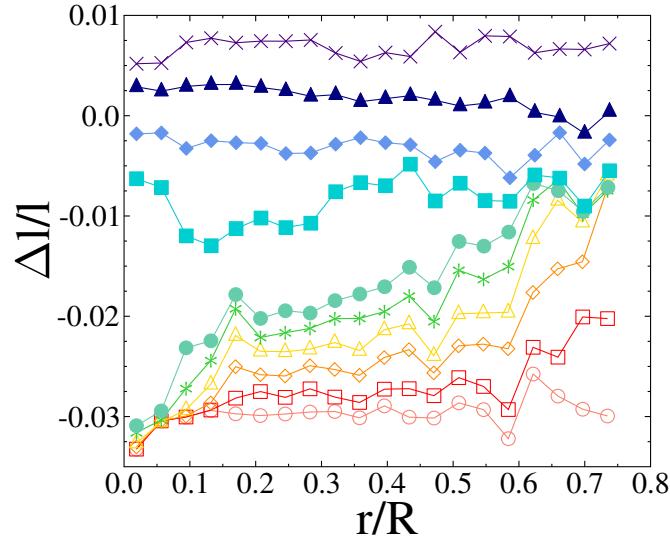
A relaxáció után megszüntetjük a geometriai kényszert, azaz a testet szabadon hagyjuk tágulni, aminek hatására a test darabokra törik. A rendszerünk fontos jellemzője, hogy a széttörési folyamat kezdetén a test már tartalmazta a teljes energia mennyiséget, ami a törésre fordítható. Szimulációink megmutatták, hogy a deformációban tárolt energia a kényszerek megszüntetése után egyrészt a repedések keltésére fordítódik, másrészt a keletkező fragmensek mozgási energiájában tárolódik.

A fragmentáció kezdetekor a korong széléről egy rugalmas hullám indul el a korong középpontja felé. A hullám időfejlődését a 3.2 ábra mutatja. A különböző görbék lentről felfelé egyre későbbi időpillanatokban mutatják a $\Delta l/l$ relatív megnyúlást a korong középpontjától való r távolság (normálva a korong teljes R sugarával) függvényében. A tágulást ez az ábra jól szemlélteti. A kezdetben negatív megnyúlás értékek azt jelentik, hogy a rudak össze vannak nyomva. Az időfejlődéssel, azaz a rugalmas hullám terjedésével az összenyomott rudak újra elérik nyugalmi hosszukat és kicsit meg is nyúlnak. Mivel nagyobb r értéknél a megnyúlás korábban bekövetkezik, az is látható, hogy a tágulási hullám valóban a korong széléről indul.



3.1. ábra. A test deformációs energiájának időfüggése. A korongba t^* ideig tápláltuk be az energiát összenyomással. Az összenyomás szakaszában a testben tárolt energia az idővel négyzetesen nő, mivel a deformáció lineáris függvénye az időnek. Az energia betáplálása után a relaxáció következik, ekkor az energia nagysága nem változik, a függvény konstans. Végül a geometriai kényszerek megszüntetése után a test széttörik. Ekkor az energia a repedések keletkezésére fordítódik, valamint a fragmensek kinetikus energiájában tárolódik.

A korong törésének időfejlődését, a rugalmas hullám terjedését, és ezzel együtt a sugár irányú repedések megjelenését a 3.3 ábra (a)–(e) képei mutatják. Az (a) és (b) ábrákon látható, ahogy a tágulási hullám elindul a korong széléről a közepe felé. Ekkor a legtöbb rúd még nem törik el, csak amikor a lökeshullám a korong közepéhez ér ((c) ábra). A hullám a korong közepének elérése után kifelé halad, a korong egésze tágulni kezd, ami radiális repedések keletkezését eredményezi ((d) ábra), majd ettől az egész korong széttörik ((e) ábra). Az (f) képen már a korong végállapota látható a törési folyamat lezajlása után. A poligonok itt vissza vannak helyezve eredeti helyükre, és az egy fragmenshez tartozó poligonok azonos színűek.

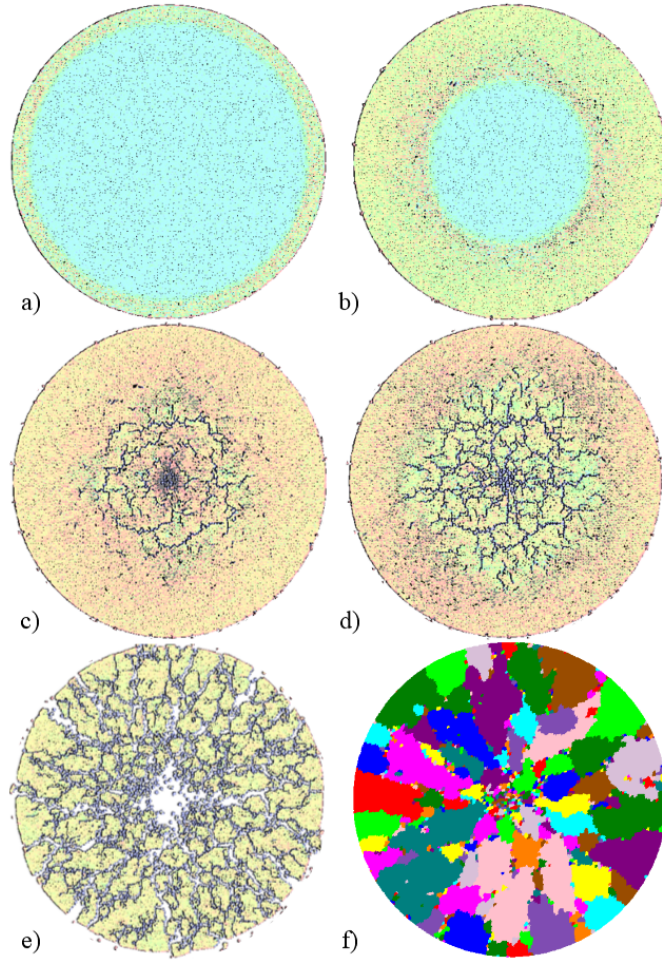


3.2. ábra. Rugalmas hullám időfejlődése. Letről felfelé az egyes görbék egymás utáni időpontokban ábrázolják a rudak relatív megnyúlását a korong középpontjától mért relatív távolság függvényében.

3.2. Széttörési folyamat különböző energiákon

Számítógépes szimulációval vizsgáltam a korong széttörési folyamatát a betáplált energia különböző értékei mellett. A rendszer természetes energia skáláját a test kötési energiájával definiálhatjuk, ami egyszerűen meghatározható, mert a test diszkrét anyagdarabokból áll. A törési folyamat során a poligonok nagyon kismértékű elfordulást szenvednek el, így a poligon-poligon kontaktusok legfontosabb igénybevétele a nyújtás. A (2.7) törési kritériumban szereplő $\varepsilon_{b,max}$ törési küszöb értéke $\varepsilon_{b,max} = 0.03$, így a test teljes E_b kötési energiája, ami minimálisan szükséges ahhoz, hogy a test darabokra (poligonokra) törjön szét, megkapható, ha kiszámítjuk az összes rúdban tárolt energiát, amikor deformációjuk megegyezik $\varepsilon_{b,max}$ -val. A továbbiakban az E_0 betáplált energia mennyiségét az E_0/E_b dimenziótlan aránnyal adom meg.

A törési folyamat részletes megértésére szimulációkat végeztem széles tartományon változtatva a betáplált energiát $0.1 \leq E_0/E_b \leq 40$. A 3.4 ábra a folyamat végállapotát mutatja különböző betáplált energiák mellett úgy, hogy a poligonokat visszatettük az eredeti helyükre. Alacsony energián még nem következik be a korong fragmentációja. Ilyenkor a korong csak néhány



3.3. ábra. A korong alakú próbatest széttörésének időfejlődése. A poligonokat összekötő rudakat deformációjuk alapján színeztük: kék-zöld és piros-fekete színek jelölik az összenyomott, illetve nyújtott rudakat. A kényszer megszüntetésekor egy tágulási hullám indul befelé (*a, b*), amely elérve a korong közepének környékét számos rúd eltörését eredményezi (*c*). Később a kifelé haladó tágulási hullám radiális repedéseket okoz (*d*), ami az egész korong szétesését okozza (*e*). Az (*f*) kép már a széttört korongot mutatja úgy, hogy a poligonokat visszatettük az eredeti (törés előtti) helyükre. A különböző fragmensek különböző színűek.

nagyobb darab fragmensre törik szét, melyeket sugár irányú repedések határolnak. A nagyobb darabokon kívül a korong közepénél keletkezik kisebb fragmensekből álló összezúzott terület. Az (*a*) ábrán, $E_0/E_b = 0.132$ betáp-

lált energiánál, és a (b) ábrán $E_0/E_b = 0.157$ esetén is ilyen eset figyelhető meg. A széttörési folyamatnak ezt az alacsony energiás fázisát szegmentációnak nevezzük.

Csak elegendő energia betáplálása mellett beszélhetünk fragmentációról, amikor a korong egésze széttörik, és sok különböző méretű fragmens jön létre úgy, hogy a legnagyobb is jóval kisebb a test kezdeti méreténél. A középső összezúzott tartomány is nő a betáplált energiával, de még mindig felfedezhető a repedések radiális iránya. Ez látható a (c) és (d) ábrán, $E_0/E_b = 0.439$, valamint $E_0/E_b = 0.992$ érték mellett. Még több betáplált energia esetén a fragmensek egyre kisebbek lesznek és a repedések rendezetlenné válnak. Ahogy ez a (e) ($E_0/E_b = 2.560$) és (f) ($E_0/E_b = 7.057$) ábrákon is látszik, ilyenkor a nagyon szétzúzódtott por (a modellben egyedi poligonok) dominál.

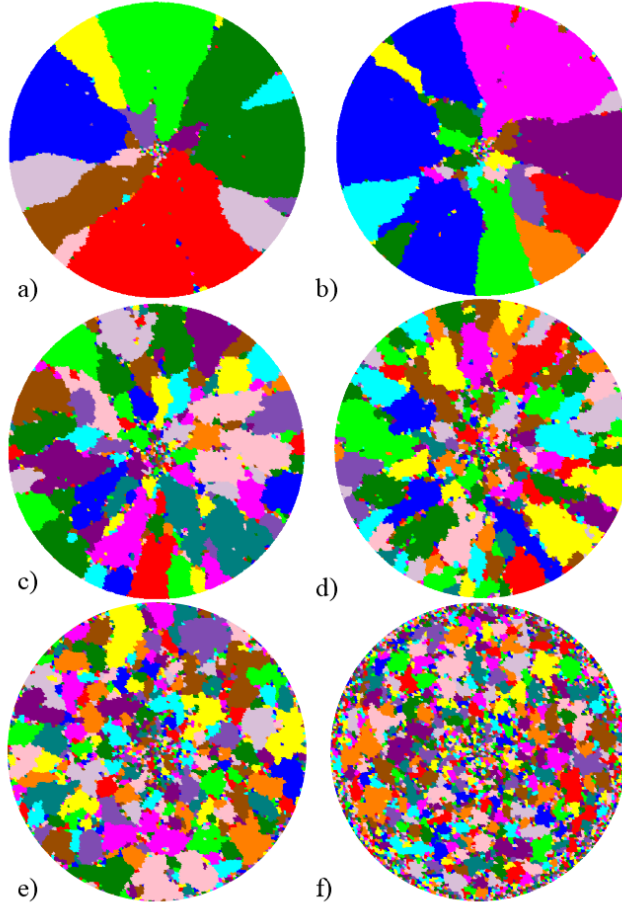
3.3. A fragmensek sokfélesége

Annak jellemzésére, hogy milyen mértékű a szilárdtest széttörése különböző energiákon, két újszerű mennyiséget vezettünk be, amelyeket fragmenspopulációkra még nem alkalmaztak. Ezek a mennyiségek a keletkező fragmensek sokféleségének adják egy mértékét, amellyel jól megragadható a szegmentációból fragmentációba történő átmenet.

A 3.4 ábrák alapján is megállapítható, hogy alacsony energián, amikor a korong szegmentálódik csak néhány különböző méretű fragmens van, amíg valódi fragmentációnál már sokkal többféle fragmens keletkezik. A betáplált energia növelésével az egyik legszembetűnőbb változás, hogy folyamatosan változik a fragmensek méretének sokfélesége. Egy fragmens méretét jellemezhetjük azzal, hogy hány diszkrét anyagdarabból, azaz poligonból áll. Ha s méretű (vagyis s darab poligonból álló) fragmensből n_s darab van egy széttörési folyamat végállapotában, akkor az s méretű fragmensekhez tartozó poligonok száma $n_s s$. Annak w_s valószínűsége, hogy egy véletlenszerűen kiválasztott poligon a törési folyamat végállapotában egy s méretű fragmenshez tartozik $w_s = \frac{n_s s}{\sum_{s=1}^K n_s s}$ alakban adható meg, ahol K a különböző fragmensméretek darabszáma. Ha véletlenszerűen egymástól függetlenül kiválasztunk 2 poligont, akkor azok $w_s w_s$ valószínűséggel tartoznak ugyanazon s méretű fragmenshez. Ha az ilyen valószínűséget felösszegezzük az összes lehetséges fragmensméretre, akkor megkapjuk a rendszer ún. Simpson diverzitását:

$$D = \sum_{s=1}^K w_s^2. \quad (3.4)$$

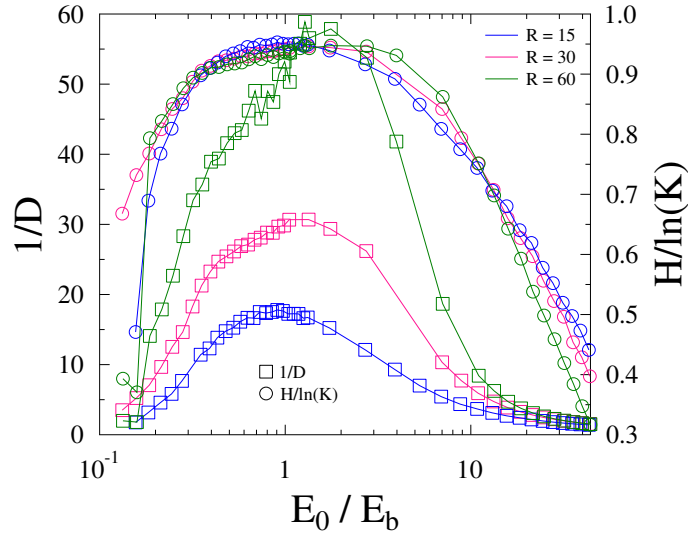
A D nulla és egy közé esik, értéke megadja annak valószínűségét, hogy két véletlenszerűen kiválasztott poligon ugyanolyan méretű fragmenshez tarto-



3.4. ábra. A széttörési folyamat végállapota különböző betáplált energiák mellett. Alacsony energiákon ((a) és (b)) a korong sugárirányú repedések mentén néhány nagy darabra esik szét (szegmentálódik), csak a korong közepének közelében keletkezik kisebb mennyiségű törmelék. Növelve a betáplált energiát a korong egésze széttörik, azaz fragmentálódik, de a nagy fragmenteket határoló repedések radiális irányítása még itt is felismerhető ((c) és (d)). Az energia további növelésével a repedési mintázat rendezetlen lesz és a fragmentek mérete nagyon kicsi ((e) és (f)).

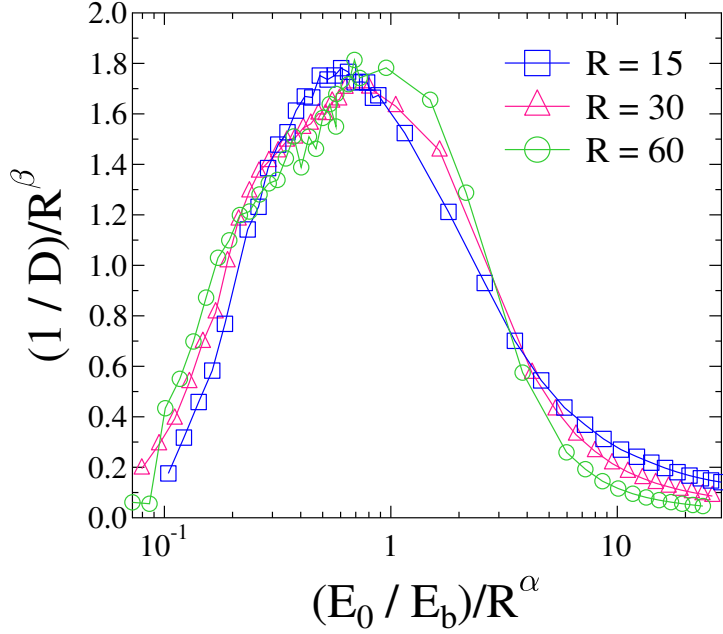
zik. A fragmentek sokféleségének D egy nagyon hasznos mértéke: ha csak néhány, közel azonos méretű fragment (szegment) keletkezik (esetleg kevés, tőlük sokkal kisebb méretű por kíséretében), akkor D értéke egyhez közeli lesz. Ahogy egyre többféle fragment lesz jelen a rendszerben úgy csökken D értéke. A darabok sokféleségének követéséhez a szegmentáció és fragmentáció

átmenetek során előnyösebb, ha a D reciprokát tekintjük. Ha a végállapotban k darab közel azonos nagyságú, nagy darab található és tőlük sokkal kisebb fragmensek, akkor $D \approx k(1/k)^2 = 1/k$ adódik. Így $1/D$ értéke közelítőleg a nagy, domináns fragmensek k darabszámát adja. A 3.5 ábrán négyzetekkel jelölve az $1/D$ értéke látható az E_0/E_b betáplált energia függvényeként. Alacsony értékű betáplált energia esetén a test szegmentálódik, ekkor $1/D$



3.5. ábra. A fragmensek sokféleségének jellemzésére két mennyiséget tekintetünk, a Simpson diverzitás $1/D$ reciprokát és a fragmenspopuláció Shannon entrópiját, amelyet normáltunk a fragmensfajták K számának logaritmusával $\ln(K)$. A betáplált energiát növelve a korong egyre több, változatos méretű darabra törik szét, ezzel növelve a fragmensméretek sokféleségét. Egy bizonyos energiánál ez az érték eléri a maximumát és csökkenni kezd. Ekkor már az korong sok darabra tört szét, minél többre, annál több lesz közöttük az egyforma méretű is.

értéke az 1-10 intervallumon a nagy darabok számát adja meg. A betáplált energia növekedésével a nagy darabok feltörnek, így a fragmensek száma és sokfélesége nő, ennek megfelelően az $1/D$ érték is, amíg el nem ér egy maximumot. Ezután a fragmensek száma már nagy és méretük jóval kisebb a test kezdeti méreténél. Tovább növelve a betáplált energiát, a legnagyobb fragmens egyre kisebb lesz, a fragmensek tömege egyre keskenyebb intervallumon belül tud csak változni. Rohamosan nő a kis fragmensek darabszáma, de a sokféleségük csökkenni fog az $1/D$ görbe csökkenő ága mentén.



3.6. ábra. A $d = 1/D$ diverzitás skálaanalízise. A vízszintes tengelyen az E_0/E_b energiát az R sugár megfelelően választott α , míg a függőleges tengelyen a d diverzitás a sugár egy β hatványával átskálázva a különböző R rendszerméreteknél kapott görbék jó pontossággal egymással ejthetők. A két exponens értéke $\alpha = 0.15$ és $\beta = 0.85$.

Egy másik mennyiség, ami a fragmenspopuláció sokféleségének jellemzésére használható, a Shannon entrópia. Ennek H értéke a következőképpen számítható

$$H = - \sum_{s=1}^K w_s \ln w_s. \quad (3.5)$$

Ezt az értéket minden esetben normáltam a fragmensfajták K számának természetes alapú logaritmusával. A H entrópia a fragmensek méreteloszlásának bizonytalanságát jellemzi, minél nagyobb az értéke, annál nagyobb a fragmensméret, mint véletlenváltozó bizonytalansága. A normált $H/\ln K$ entrópia nulla és egy közé esik úgy, hogy az értéke már nem függ a fragmensfajták K darabszámától. A diverzitáshoz képest ez a mennyiség érzékenyebb a fragmensek méreteloszlásának függvényalakjára, míg a Simpson diverzitás értékét a fragmensfajták dominálják.

Az entrópia betáplált energiától való függését a 3.5 ábrán a körök mu-

tatják, és $H/\ln(K)$ értéke a jobb oldali tengelyről olvasható le. Hasonlóan a diverzitáshoz, ennek a görbének is van egy maximuma, ugyanazon E_0/E_b értéknél, ahol az $1/D$ -nek. vagyis a rendszer ennél az energia értéknél a legrendezetlenebb. Összevetve a három különböző R rendszerméretnél kapott eredményeket megállapítható, hogy a normált entrópia görbéi gyakorlatilag egymásra esnek. Ez azt jelzi, hogy a fragmensméret (tömeg) eloszlás függvényalakja robusztus. Az $1/D$ diverzitás függvényalakja szintén megegyezik a három rendszerméret esetén, de a maximum értéke nő, a helye pedig nagyobb energiák felé tolódik R növelésével. Az 3.6 ábrán látható, hogy az R sugár megfelelően választott α és β hatványával átskálázva a tengelyeket, a három különböző rendszerméretnél kapott görbék egymásra ejthetők. Az eredmények azt mutatják, hogy a $d = 1/D$ diverzitás energia és rendszerméret függését leírhatjuk az alábbi összefüggéssel

$$d(E_0, R) = R^\beta \Phi(E_0/R^\alpha), \quad (3.6)$$

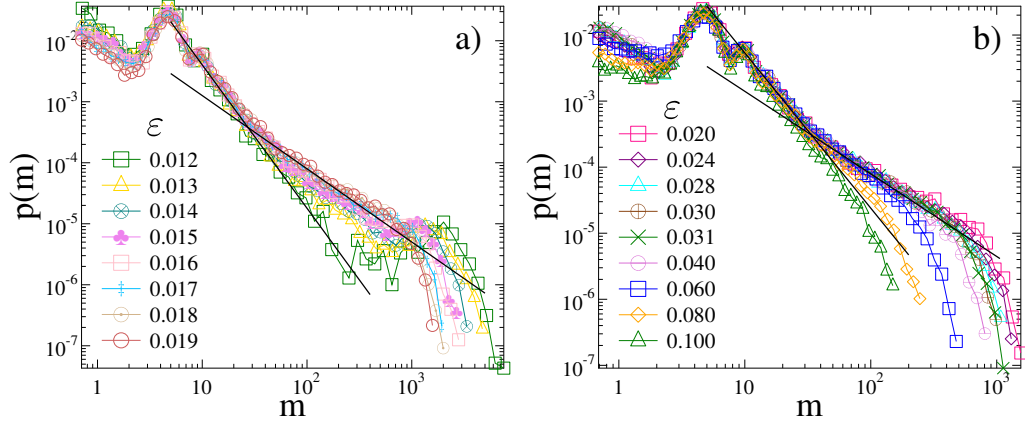
ahol a két exponens értéke $\alpha \approx 0.15$ és $\beta \approx 0.85$, a $\Phi(x)$ pedig a skálafüggvényt jelöli.

3.4. A fragmensek tömegeloszlásának elemzése

A széttörési folyamat legfontosabb jellemzője a fragmensek $p(m)$ tömegeloszlása a folyamat végállapotában, ezt mutatja be a 3.7 különböző betáplált energiák mellett. Az áttekinthetőség kedvéért az 3.7(a) ábrán kis ε kezdeti deformációk (azaz alacsony betáplált energiák) mellett látható a tömegeloszlás görbék fejlődése. Megfigyelhető, hogy a nagy fragmensek tartományán a korong szegmensei egy lokális maximumot hoznak létre a $p(m)$ eloszláson, ami arra utal, hogy ezeknek a fragmenseknek van egy jól definiált karakterisztikus méretük. A kis fragmensek tartományán viszont egy gyorsan csökkenő függvényalakot kapunk. Növelve a betáplált energiát a nagy fragmensek feltöredeznek, ezért a jobboldali maximum balra tolódik majd fokozatosan eltűnik, s a kis fragmensekre egy közel másfél nagyságrendnyi tömegtartományon megjelenik egy hatványfüggvény szakasz (egyenes szakasz a kétszer logaritmikus skálán)

$$p(m) \sim m^{-\tau}, \quad (3.7)$$

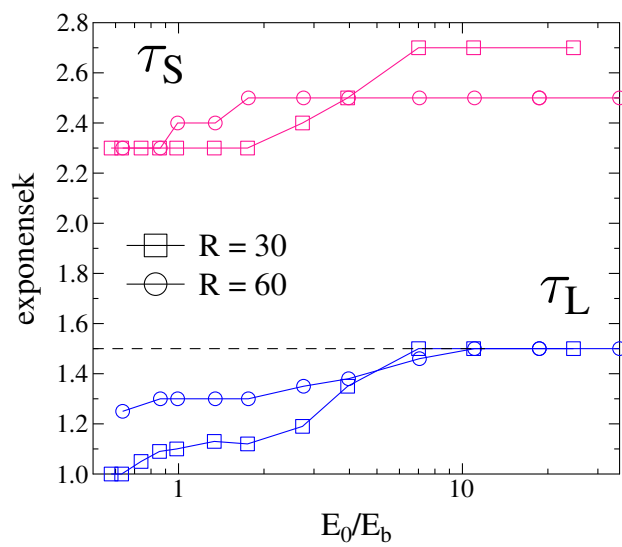
ahol a τ exponens értéke $\tau_S \approx 2.3$ -nek adódott. Még magasabb energiákon a szegmensek teljesen széttörnek és a nagy fragmensek tartományán megjelenik egy második, kisebb meredekségű hatványfüggvény szakasz, amelynek exponensét szintén illesztéssel határoztam meg $\tau_L = 1.2$.



3.7. ábra. Fragmensek $p(m)$ tömegeloszlása egy $R = 30$ sugarú rendszer szét-törési folyamatának végállapotában. A kisebb (a) és nagyobb energiákon (b) külön válogattuk az eloszlásokat. Az egyenesek illesztett hatványfüggvényeket reprezentálnak, amelyek exponense $\tau_S = 2.3$ és $\tau_L = 1.2$ (a), valamint $\tau_S = 2.35$ és $\tau_L = 1.25$ (b).

Még magasabb energiákon a 3.7(b) ábra mutatja be a tömegeloszlás fejlődését. Itt megfigyelhető, hogy az energia növelésével a görbe levágása balra tolódik el, mivel növekvő energiával eltűnnek a nagyon nagy tömegű fragmensek. A levágás eltolódásával nagyon nagy energiáknál a kisebb meredekségű hatványfüggvényszakasz fokozatosan eltűnik és csak a meredekebb ($\tau_S \approx 2.3$) marad meg a kis fragmensek tartományán.

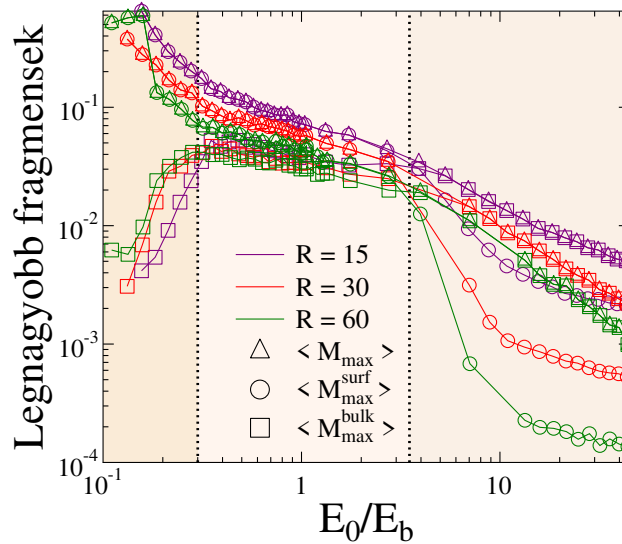
Az $R = 30$ és $R = 60$ méretű próbatetek esetén illesztéssel meghatároztam a tömegeloszlás két τ_S és τ_L exponensét a kis és nagy méretű fragmensek tartományán. Az eredmények a 3.8 ábrán láthatók az E_0 betáplált energia (normálva az E_b kötési energiával) függvényeként. Megfigyelhető, hogy mindkét exponens τ_S és τ_L értéke növekszik E_0 növelésével és nagy energiákon egy-egy határértékhez tartanak. A nagytömegű fragmenseket jellemző τ_L exponens $3/2$ -hez tart, ami a kétdimenziós fragmentációs jelenségek univerzális fragmenstömeg exponensei [8, 2]. A kistömegű fragmensek τ_S exponense jelentősen nagyobb τ_L -nél minden energián. A két különböző rendszerméretre kapott eredményeket összevetve fontos kiemelni, hogy a nagyobb rendszerre kapott exponensek jelentősebb szűkebb intervallumon változnak, mint a kisebb rendszer exponensei. Ezek a vizsgálatok arra mutatnak rá, hogy kellően nagy rendszerméretre ezek az exponensek konstansak lesznek. Ennek megerősítésére szimulációkat tervezünk $R = 120$ -as sugararú korongokkal is.



3.8. ábra. A tömegeloszlások τ_S és τ_L exponensei a betáplált energia függvényében $R = 30$ és $R = 60$ sugarú próbatestek esetében. A vízszintes szaggatott vonal a kétdimenziós fragmentációs jelenségek $\tau = 3/2$ univerzális fragmenstömeg exponensének értékét mutatja.

3.5. A széttörési folyamat fázisai

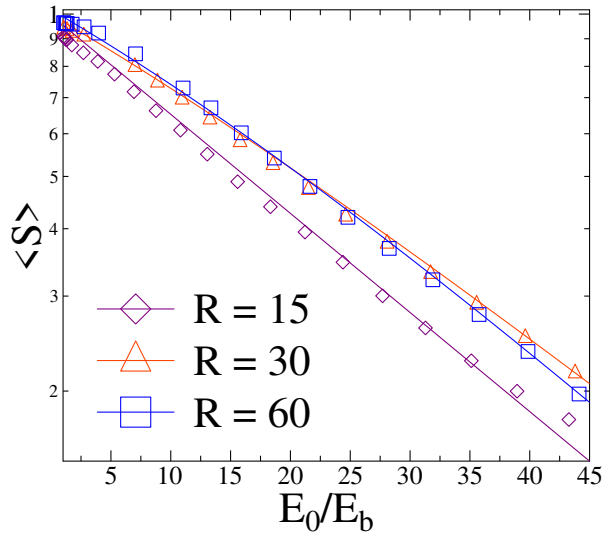
A fenti eredmények alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy a betáplált energia növelésével a széttörési folyamatnak három, jól elkülöníthető fázisa van. Az egyes fázisok bemutatásához érdemes elemezni a legnagyobb fragmensek tömegének fejlődését E_0 növelésével. A legnagyobb fragmens $\langle M_{max} \rangle$ átlagos tömegét összevetve a test kezdeti tömegével, a széttörés mértékéről kapunk információt. Mivel az alacsony energián keletkező szegmensek a test felületén helyezkednek el, az $\langle M_{max} \rangle$ mellett külön meghatároztam a felületi és a test belsejében keletkezett fragmensek közül is a legnagyobb $\langle M_{max}^{surf} \rangle$ és $\langle M_{max}^{bulk} \rangle$ átlagos tömegét.



3.9. ábra. A legnagyobb fragmensek átlagos tömege normálva a test kezdeti tömegével. Külön meghatároztam a test felületén és a belsejében keletkezett fragmensek $\langle M_{max}^{surf} \rangle$ és $\langle M_{max}^{bulk} \rangle$, valamint a teljes fragmens populáció legnagyobbjának $\langle M_{max} \rangle$ átlagos tömegét. Az egyes átlagokat osztottam a test kezdeti tömegével. A függőleges, szaggatott vonalak a fázishatárokhöz tartozó E_f és E_s energiákat jelölik.

A 3.9 ábrán megfigyelhető, hogy alacsony E_0 energián a felszíni fragmensek (szegmensek) nagyságrenddel nagyobbak, mint a test belsejében keletkezők $\langle M_{max}^{surf} \rangle \gg \langle M_{max}^{bulk} \rangle$. Ez az energia tartomány a széttörési folyamat szegmentációs fázisa, ahol a fragmenstömeg domináns része a szegmensek formájában van jelen. Az energia növelésével azonban $\langle M_{max}^{surf} \rangle$ csökken, míg

$\langle M_{max}^{bulk} \rangle$ nő, azaz a szegmensek egyre nagyobb része feltörik és belső (bulk) fragmenssé válik. Minden R rendszerméretnél van egy karakterisztikus E_f energia érték, amelynél a felületi és a belső fragmensek közötti különbség eltűnik $\langle M_{max}^{surf} \rangle \approx \langle M_{max}^{bulk} \rangle$. Innentől kezdve, azaz $E_0 > E_f$ energia esetén tekinthetjük a széttörési folyamatot fragmentációnak, így E_f definiálja a fragmentációhoz szükséges küszöbenergiát. Az $E_0 < E_f$ energia tartományon a test szegmentálódik. Nagyon érdekes, hogy E_0 növelésével egy második karakterisztikus pont is azonosítható a legnagyobb tömegek fejlődésén: egy E_s energia értéken a felületi és belső fragmensek viszonya megfordul, míg $E_0 < E_s$ esetén a felületi fragmensek dominálták a legnagyobbakat, addig az $E_0 > E_s$ tartományon $\langle M_{max}^{surf} \rangle < \langle M_{max}^{bulk} \rangle$ teljesül. A fragmentációs fázisban $E_f < E_0 < E_s$ a legnagyobb fragmenstömeg $\langle M_{max} \rangle$ csak lassan változik, összhangban a $p(m)$ tömegeloszlások levágásának 3.7 ábrán megfigyelhető viselkedésével, ugyanakkor E_s fölött a nagy fragmensek tömegcsökkenése felgyorsul.



3.10. ábra. Azon fragmensek $\langle S \rangle$ átlagos tömegaránya, amelyek még nem zúzódtak porrá, az E_0 betáplált energia függvényeként. A függőleges tengelyen logaritmikus skálát használtam, így könnyen megállapítható, hogy az E_s energia fölötti tartományon $\langle S \rangle$ exponenciálisan csökken E_0 -al.

Annak kvantitatív jellemzésére, hogy mi történik az E_s energia fölött, meghatároztuk a por fragmensek (a modellben egyedi poligonok) s tömegarányát. Ehhez egy próbatest széttörési folyamatának végállapotában felösze-

geztem az egyetlen poligonból álló fragmensek tömegét, amit elosztottam a test kezdeti tömegével. A nagy fragmensek tömegfogyásának jellemzéséhez meghatároztam a nem por fragmensek $S = 1 - s$ tömegarányát, amit adott energián a szimulációk felett átlagoltam. A 3.10 ábrán látható, hogy a nem por fragmensek $\langle S \rangle$ átlagos tömegaránya monoton csökken a betáplált energiával, de kezdetben csak nagyon lassan (kis energiákon $\langle S \rangle$ közel konstans), viszont a függvényalak a 3.9 ábrán megállapított E_s energiától kezdődően jól közelíthető egy exponenciális függvénnyel. A 3.10 ábrán minden egyes R rendszerméret mellett az $\langle S \rangle$ görbék a következő függvényalakokkal illesztettem meg

$$\langle S \rangle = \frac{A}{B + \exp(C(E_0 - E_s))}, \quad (3.8)$$

ami exponenciális viselkedést mutat az $E_0 > E_s$ energia tartományon. A C paraméter az exponenciális csökkenés gyorsaságát kontrollálja, míg az A és a B értéke a $E_0 \rightarrow 0$ határesetben határozza meg a függvény értékét. Ez a skálaviselkedés a széttörési folyamat összezúzódás (angolul shattering) fázisának jellemzője [4, 14].

A fentiek alapján megállapítottuk, hogy a széttörési folyamatnak három fázisa különböztethető meg, amelyeket az 3.9 ábrán háttérszínekkel is elkülönítettem: alacsony $E_0 < E_f$ energiákon a korong szegmentálódik, a széttörési folyamat végállapotát a közel azonos méretű, a kiinduló test méretével még összevethető fragmensek dominálják. Fragmentációról akkor beszélünk, amikor az E_f küszöbenergia átlépésével a felületen és a test belsejében keletkező fragmensek közötti különbség eltűnik. Ekkor a fragmensek tömegeloszlása hatványfüggvénnyel jellemezhető. Tovább növelve a betáplált energiát, egy E_s kritikus energia fölött a nagy fragmensek tömegfogyása felgyorsul, a fragmensek nagy része por formájában lesz jelen. Az E_s energia definiálja az összezúzódási fázis küszöbenergiáját, ami fölött a nagy fragmensek tömegaránya exponenciálisan csökken, a fragmensek tömegeloszlása pedig gyorsan tart egy exponenciális alakhoz (lásd a 3.7 ábrát).

4. fejezet

Diszkusszió

TDK munkám keretében egy korong alakú, heterogén anyagi tulajdonságokkal rendelkező szilárd test fragmentációs folyamatát vizsgáltam, amelyet izotróp összenyomással váltunk ki. A terhelési mód megválasztásának két fő oka volt: (1) az izotróp összenyomással homogén kezdeti energia eloszlást hozunk létre a testben, ami jelentősen eltér a test felületén történő, hirtelen, nagy mennyiségű energia betáplálásának esetétől, ezért újszerű, a korábban feltárt fragmentációs univerzalitási osztályoktól eltérő viselkedést várhatunk. (2) A terhelési módunk jó közelítését adja annak a mechanikai terhelésnek, amelyet a vesekő zúzására alkalmazott ESWL technikával állítanak elő. Így vizsgálataim hosszabb távon segíthetnek az ESWL lökéshullám paramétereinek optimalizálásához.

Szimulációim kimutatták, hogy alacsony betáplált energiákon a korong alakú testet sugárirányú repedések szegmentálják, amit a test közepének közelében kisebb mennyiségű por keltése kísér. Fokozatosan növelve a kezdeti energiát, egyre több szegmens keletkezik és a test belsejében kialakul egy kör alakú, összezúzott zóna kisebb fragmensekkel. Még magasabb energiákon a nagy darabok egyre kisebbekre törnek, s a középső zúzott tartomány a test egészére kiterjed.

Olyan fragmentációs folyamatok esetén, amikor az energia betáplálása a test felületén keresztül történik például lövedék belövésével, vagy ütköztetéssel, a széttörési folyamatnak korábban két jól elkülönülő fázisát, károsodást és fragmentációt lehetett megkülönböztetni. A két fázis közötti átmenet egy kritikus energia értéken következik be, amikor a testben keltett repedések egy összefüggő hálózatot alkotnak, amely mentén a test darabokra esik szét. Szimulációim megmutatták, hogy a lassú, izotróp összenyomás esetén nem jön létre hirtelen károsodás - fragmentáció átmenet, már alacsony energiákon jelentős méretcsökkenés állhat elő azáltal, hogy a test néhány, közel azonos méretű darabra esik szét (szegmentálódik).

A széttörési folyamat fejlődésének kvantitatív leírására az energia növekedésével, bevezettünk két mennyiséget, a Simpson diverzitást, amely a fragmensek sokféleségét jellemzi, és a Shannon entrópiát, amely a fragmensméret eloszlás függvényalakjára érzékeny. Az entrópia elemzése megmutatta, hogy különböző rendszerméretekre kapott entrópia-energia görbék egymásra esnek, ami a fragmensek tömegeloszlásának robosztusságát jelzi. Ezzel szemben a fragmensek diverzitása érdekes skálázást mutat a rendszermérettel.

A fragmensetömegeloszlás legfontosabb jellemzője, hogy nem egy, hanem két hatványfüggvény szakaszból áll: A test belsejében keletkező kis fragmensek statisztikáját egy gyorsan csökkenő hatványfüggvény írja le, míg a felület közelében lévő szegmensek töredezéséből származó darabok hatványfüggvény eloszlása egy szignifikánsan kisebb exponenssel rendelkezik. Az exponensek enyhe energia függést mutattak, növekedtek a betáplált energiával. Azonban különböző rendszerméretek eredményeit összevetve arra következtetésre jutottam, hogy nagy rendszerekre a kis és a nagy fragmensek hatványfüggvény eloszlásának exponense konstans lesz.

A széttörési folyamat dinamikáját elemezve megállapítottam, hogy a korong tágulásakor fellépő lokális húzófeszültség okozza a radiális repedéseket, amelyek növekedés közben elágaznak majd az ágaik összeolvadnak, azaz a fragmensek az elágazás - összeolvadás mechanizmussal jönnek létre. Ez az oka annak, hogy a nagy fragmensek exponense konvergál a kétdimenziós fragmentációs folyamatok univerzális exponenséhez. Ugyanakkor a kis fragmensekre kapott nagy exponens értéket a lokális húzó feszültség és nyírás együttes hatása okozza, amit a (2.7) törési kritérium figyelembe vesz. Tovább növelve a betáplált energiát, a kisebbik exponensű hatványfüggvény szakasz fokozatosan eltűnik és a rendszer teljesen összezúzódik. Ez a "shattering" átmenet, amelyet egy külön skálatörvénnyel lehet leírni.

Kutatómunkám fontos eredményeként sikerült feltárni, hogy az izotróp nyomással kiváltott széttörési folyamatnak három jól elkülönülő fázisa van: az alacsony energián létrejövő szegmentációt egy kritikus energia fölött a fragmentáció követi. A fragmentációs fázisban eltűnik a test felületén és a belsejében keletkezett fragmensek közötti méretkülönbség és tömegeloszlásukat hatványfüggvény jellemzi. Mivel azonban a felszíni és a belső fragmensek más lokális repedési mechanizmussal keletkeznek, két eltérő exponensű hatványfüggvényt kapunk. Tovább növelve a betáplált energiát egy második kritikus energia fölött felgyorsul a nagy, azaz a sokkal nagyobb fragmensek tömegcsökkenése. Ez az energia érték az összezúzás (shattering) átmenet kritikus pontját definiálja. Megállapítottam, hogy ebben a fázisban a nagy fragmensek tömegvesztését egy exponenciális függvény írja le.

Az eredményeimet összefoglaló publikációt 2025 tavaszán tervezzük beküldeni a szakterület egyik vezető folyóiratához.

5. fejezet

Saját eredmények

TDK munkám célja heterogén szilárdtestek széttörési folyamatainak vizsgálata izotróp nyomás alatt. Vizsgálataim elméleti jellegűek, diszkrét elem módszerrel végzett számítógépes szimulációkra épülnek. A kutatómunkám során használt diszkrét elem modellt és ennek alap szimulációs programját témavezetőm kutatócsoportja korábban dolgozta ki. Dolgozatomban bemutatam a modell konstrukciójának legfontosabb lépéseit hivatkozva a kutatócsoport korábbi publikációit. A kutatómunkám során elvégzett önálló feladatok:

- A Fortran nyelvű szimulációs programot kibővítettem az általam vizsgált terhelési feltétellel. A programot így alkalmassá tettem egy korong alakú próbatest lassú összenyomás által kiváltott széttörésének vizsgálatára.
- A módosított programmal szimulációkat végeztem változtatva a próbatest méretét és a betáplált energia mennyiségét. Szimulációimhoz a kutatócsoport Linux klaszterét használtam. A három rendszermérettel végzett szimulációk összesen kb. 300 Gbyte adatot eredményeztek.
- Önálló adatfeldolgozó programot fejlesztettem C nyelven, amellyel a szimulációkkal kapott nyers adatokból kinyertem a rendszert jellemző mennyiségeket. A feldolgozó programot folyamatosan bővítettem, fejlesztettem a felmerülő kutatási feladatok megoldásához.
- Elvégeztem az adatfeldolgozással kapott eredmények grafikus kiértékelését, amihez a GLE graphics programcsomagot használtam. Az adathalmazok illesztését gnuplot-al végeztem.
- Az eredmények grafikus megjelenítéséhez ábrákat és animációkat készítettem.

- Megállapítottam, hogy lassú, izotróp összenyomás esetén nem jön létre károsodás – fragmentáció átmenet, hanem a széttörési folyamatnak három fázisa van: szegmentáció, fragmentáció, összezúzás (shattering).
- Megállapítottam, hogy a fragmensek tömegeloszlása nem egy, hanem két exponenssel jellemezhető és illesztéssel meghatároztam ezek értékét.

6. fejezet

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném megköszönni témavezetőmnek, Dr. Kun Ferencnek a sok segítséget és szakmai tudást, amit nyújtott. Tanácsai, folyamatos figyelmessége és kitüntető bizalma fontos támogatást jelentett számomra a TDK dolgozatom megírásához és tanulmányaimhoz.

Külön szeretném megköszönni Szatmári Rolandnak ötletadó gondolatait és támogatását.

Irodalomjegyzék

- [1] S. Steacy and C. Sammis, *Nature* **353**, 250 (1991).
- [2] J.A. Astrom, *Advances in Physics* **55**, 247 (2010).
- [3] N. Brilliantov, P.L. Krapivsky, A. Bodrova, F. Spahn, H. Hayakawa, V. Stadnichuk, and J. Schmidt, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **112**, 9636 (2015).
- [4] D.L. Turcotte, *Fractals and chaos in geology and geophysics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [5] S. Kooij, G. van Dalen, J.-F. Molinari and D. Bonn, *Nature Communications* **12**, 2521 (2021).
- [6] F. Kun and H. J. Herrmann, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **138**, 3 (1996).
- [7] F. Kun and H. J. Herrmann, *Int. Jour. Mod. Phys. C* **7**, 837 (1996).
- [8] J.A. Astrom, F. Ouchterlony, R.P. Linna, and J. Timonen, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 245506 (2004).
- [9] T. Kadono, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1444 (1997).
- [10] H. Inaoka, E. Toyosawa, and H. Takayasu, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3455 (1997).
- [11] G. Timar, J. Blomer, F. Kun, and H. J. Herrmann, *Physical Review Letters* **104**, 095502 (2010).
- [12] F. Kun, I. Varga, S. Lennartz-Sassinek, and I.G. Main, *Physical Review Letters* **112**, 065501 (2014).
- [13] F.K. Wittel, F. Kun, H.J. Herrmann, and B.-H. Kroplin, *Physical Review Letters* **93**, 035504 (2004).

- [14] A. Osinsky and N. Brilliantov, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **603**, 127785 (2022).
- [15] S. Biswas, P. Ray, and B.K. Chakrabarti, *Statistical Physics of Fracture, Beakdown, and Earthquake: Effects of Disorder and Heterogeneity*, (Wiley& Son, New York, 2015).
- [16] Kun Ferenc, *Számítógépes modellezés és szimuláció*, egyetemi jegyzet (2011).
- [17] Eisenmenger, W. *The Mechanisms of stone fragmentation in ESWL*, *Ultrasound Med. Biol.* **27**, 683-693 (2001).
- [18] A.J. Sharp, C.E. Lovegrove, R. Sreekumar, et al., *Urolithiasis* **53**, 11 (2025).