



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI
EGYETEM

TDK DOLGOZAT

Szemcsés anyagok nyírásának modellezése és szimulálása

Szerző:
Lévay Sára

Konzulens:
Dr. Török János

2014. október 27.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
1.1. Motiváció	2
1.2. Rövid áttekintés	3
2. A használt módszerek és modellek ismertetése	4
2.1. Szemcsés anyagok	4
2.2. A vizsgált rendszer	5
2.3. Módszerek és modellek	7
2.3.1. Bak-Sneppen-modell	7
2.3.2. Molekuláris dinamika	13
3. Eredmények bemutatása és értelmezése	17
3.1. Mezoszkopikus modell	17
3.1.1. Különböző megközelítések, dinamika	18
3.1.2. Egyszerű nyírás esete	20
3.1.3. Eredmények	21
3.2. Molekuláris dinamika	26
3.2.1. Szimuláció megvalósítása	26
3.2.2. Eredmények	31
3.3. Eredmények összehasonlítása, összefoglalás	36
3.3.1. Konklúzió	36
3.3.2. Fejlesztési lehetőségek	36
Appendices	38
A. Elvégzett saját feladatok és a használt módszerek jelentősége	39
B. Vörös királynő hipotézis	40
C. Numerikus integrálási módszerek, Verlet-módszer	41

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Motiváció

A szemcsés anyagok nyírásának vizsgálata nagy múltra tekint vissza, a téma gyakorlati jelentősége miatt. Makroszkopikus és mezoszkopikus elméletek sokasága áll rendelkezésre, hogy az anyag viselkedését minél pontosabban leírja, azonban ezen modellek túlnyomó többsége igen specifikus, nagy általánosságban használható elmélet még mindig hiányzik. Talán az egyik legnehezebb tartomány, ahol még mindig nincs általánosan elfogadott elmélet, a kvázistacionárius folyamatos nyírás állapota. A dolgozatban ezzel az esettel foglalkozunk.

A kvázistacionárius nyírás során, a lassan feszültséggel telítődő minta időről időre, egy nyírási sáv formájában tehermentesíti az anyagot. A nyírási sáv folyamata azonban nem kvázistacionárius, mivel igen gyorsan játszódik le, miközben jelentős hatással van az anyag szerkezetére, és ezáltal a következő lehetséges nyírási sáv helyére. Több próbálkozás van [1] [2], hogy ezt az önszervező folyamatot modellezzék, mégis mi egy új, egyszerű megközelítést fogunk választani.

A modellünk lényege, hogy a nyírási sáv helyét egy minimalizációval tudjuk meghatározni [3] [4], majd az esemény lokálisan módosítja az anyag szerkezetét és ebben az új módosult szerkezetben keressük meg a következő nyírási sávot. Megmutatjuk, hogy az így definiált mezoszkopikus modell kétdimenziós egyszerű nyírás esetén analóg a Bak–Sneppen evolúciós modellel [5]. Megmutatjuk továbbá, hogy a fal súrlódási együtthatójának függvényében skálázó, illetve lokális állapotokat kapunk. Megvizsgáljuk az egymás utáni nyírási sávok közti távolság eloszlását és a modellen tapasztalt eredményeket molekuláris dinamika szimulációval ellenőrizzük.

1.2. Rövid áttekintés

A dolgozatban elsőként ismertetjük a legfontosabb elméleti tudnivalókat majd ezek után részletezzük eredményeinket. Az 1. fejezetbeli bevezetést követően a 2. fejezet tartalmazza az általános elméleti tudnivalókat: kezdve a szemcsés anyagok bemutatásával, vizsgált rendszerünk leírásán át a két fő modellünk és módszerünk bemutatásáig. A 3. fejezetben található mezoszkopikus modellünk leírása, megvalósításának folyamata és az elért eredmények. Szintén itt található az alkalmazott molekuláris dinamika szimuláció leírása, fontosabb paramétereinek ismertetése és az általa kiszámolt eredmények. Ebben a fejezetben hasonlítjuk össze a két módszerrel elért eredményeket, vonjuk le a végső konklúziót, majd ismertetjük a fejlesztési lehetőségeket. A függékben két, a dolgozatban korábban felmerülő kérdést részletesebben is kifejtünk, illetve ismertetjük a dolgozat elkészítése során végzett saját munka legfontosabb lépéseit.

2. fejezet

A használt módszerek és modellek ismertetése

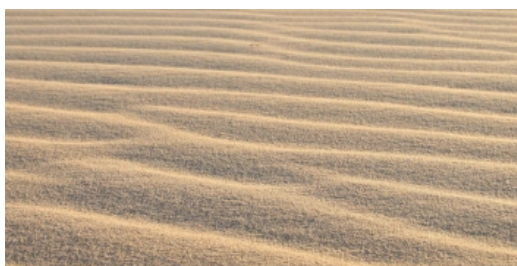
2.1. Szemcsés anyagok

A szemcsés anyagokat sok apró, disszipatív részecskéből álló rendszerként definiálhatjuk, melyben a részecskéknek saját *hőmérsékletük* van és mozgásuk ettől független. A részecskéknek elég nagyoknak kell lenniük ahhoz, hogy mozgásukat ne hőmérsékletfluktuációk határozzák meg, így méretükre szabott alsó korlátként az $1\mu\text{m}$ -t adhatjuk. Felső határt viszont nem tudunk egyértelműen megfogalmazni, mivel a szemcsés anyagok fizikáját igen széles méretskálán alkalmazhatjuk: jéghegyekre vagy akár aszteroidákra. Mindennapi életünkben számos helyen találkozunk granuláris anyagokkal. Ilyen például a cukor, só, rizs, különböző magvak vagy éppen a homok. Mind az iparban, mind a mezőgazdaságban betöltött fontos szerepük és felhasználási lehetőségeik miatt mind az alkalmazott, mind az elméleti kutatások nagy múltra tekintenek vissza ezen a téren.

Sokrétűségüket bizonyítja, hogy érdekes jelenségeket figyelhetünk meg viselkedésükben: nem határozható meg egyértelműen a halmazállapotuk, viszont mind a szilárd, a folyadék és a gáz halmazállapot különböző jellemzői megfigyelhetők a szemcsék energiájának függvényében. További érdekes jelenség a mintázatok kialakulása, a szegregálódás. Annyira sok jelenséget tapasztalunk a szemcsés anyagok vizsgálata során, hogy nincsen általános, minden esetben jól működő elmélet a granuláris anyagok viselkedésére. Általános elterjedtségük révén az egyik legfontosabb és legtöbbet vizsgált téma a szemcsés anyagok nyírása. Mi ezen belül is a folytonos, lassú nyírást vizsgáljuk, mely a természetben is sokszor megvalósul. Akármilyen lassú nyírás is gyors, inerciális nyírási sávokat eredményez, melyekben a nyírás során feszültséggel



2.1. ábra. Szemcsés anyagok: cukor, rizs, jéghegyek és aszteroidák



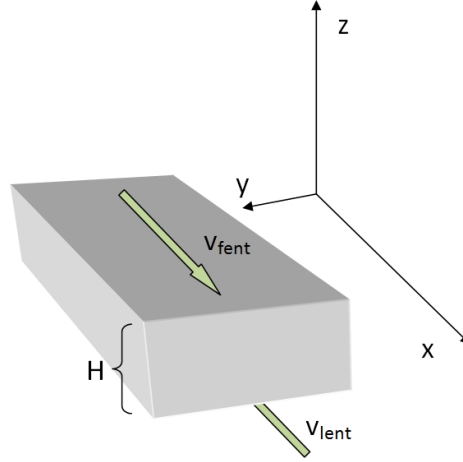
2.2. ábra. Mintázatok kialakulása szemcsés anyagokban: homokdűnék

telítődő minta megcsúszik. Mi ennek az inerciális effektusnak a vizsgálatát tűztük ki célul.

Az említett bonyolult jelenségek magyarázatára komplex modellek, leírások születtek, azonban hiányzik egy egyszerűbb, széleskörűen alkalmazható modell, mely sok esetben akár pontosabb leírását adhatja a vizsgált jelenségeknek. Célunk egy ilyen, egyszerűbb modell megalkotása és helyességének vizsgálata.

2.2. A vizsgált rendszer

Vizsgált rendszerünkben a kvázistacionárius nyírás hatását és az így létrejövő deformációt tanulmányozzuk. Erre a legkézenfekvőbb eszköz az ún. plane shear geometry [6] alkalmazása, mely a 2.3. ábrán látható. A vizsgált anyag



2.3. ábra. Plane shear geometry - a vizsgált rendszer.

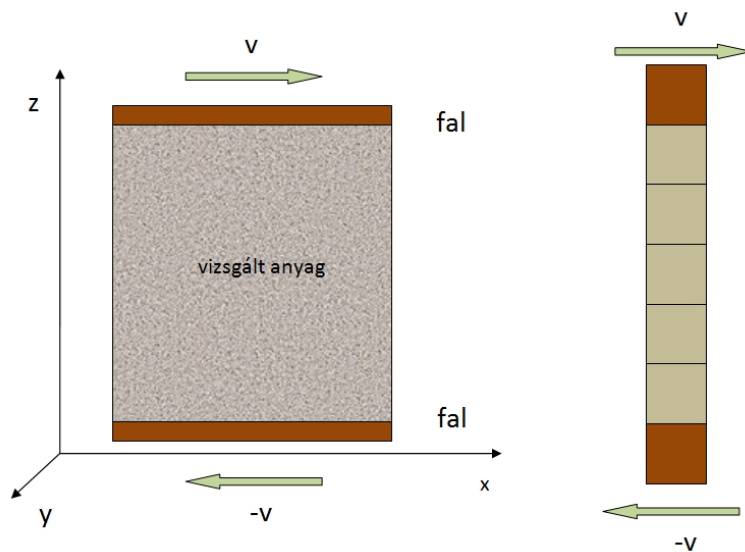
két, egymástól H távolságra levő, z normájú párhuzamos lemez között található, mely lemezre z irányban állandó nyomás hat, miközben x irányban nagyon lassan, egymással ellentétes irányban mozognak (sebességük nagysága megegyezik). x és y irányban periodikus határfeltételeket alkalmazunk.

Bár kísérletileg ez nem valósítható meg, numerikusan mégis ez a lehető legegyszerűbb nyírási elrendezés. A kvázistacionárius nyírás feltétele, hogy az inerciális effektusok elhanyagolhatóak legyenek. Az inerciális szám [16] pedig a következő:

$$I = \dot{\gamma} d \sqrt{\rho/p} \quad (2.1)$$

ahol d az átlagos részecskeátmérő, p a nyomás, ρ a részecske sűrűsége, továbbá $\dot{\gamma}$ a nyírási ráta. A kvázistacionárius nyírás megvalósul, ha $I < 10^{-3}$. Mivel esetünkben $p = 1$, $\rho = 1$ és $d = 1$, ez a $\dot{\gamma} = \Delta v/H < 10^{-3}$ feltételt jelenti, ahol Δv a felső és az alsó határolófal közötti sebességkülönbség ($\Delta v = v_{fent} - v_{lent}$).

A két és háromdimenziós problémát (2.4. ábra bal oldala) szimmetriabeli megfontolások miatt vissza lehet vezetni z irányú, 1 dimenziós esetre (2.4. ábra, jobb oldal). Az x irányú periodikus határfeltételek csak x irányú sebességet tesznek lehetővé, míg a 3. dimenzióbeli y irány kiátlagolható. Ebben az esetben a rendszert egyértelműen meghatározza a z irányú átlagos sebességprofil.



2.4. ábra. A rendszer modellje és az 1 dimenziós rendszer

2.3. Módszerek és modellek

A 2.2. szakaszban leírt rendszerünk vizsgálatát kétféle módszerrel végezzük el. (1) Mezoszkopikus modellünk 1 dimenzióban a határfeltételektől eltekintve megegyezik a Bak–Sneppen-moddal. Elsőként e modellt és legfontosabb eredményeit ismertetjük.

(2) Ezt követően molekuláris dinamika szimulációval vizsgáljuk ugyanezen rendszert, ellenőrizve előző modellünket és vizsgálva annak további tulajdonságait. Ennek legfontosabb elemeit is itt ismertetjük.

2.3.1. Bak–Sneppen-modell

E modell [5], [10] egy egyszerű evolúciós játékmodell, mely kölcsönható egységek ökológiáját írja le. A rendszer különböző méretű lavinák sorozatával önszervezően kritikus (angolul self-organized critical - SOC) állapotba kerül. Ez nagy dinamikus rendszerek azon maguktól kialakuló tulajdonságát jelenti, hogy külső paraméter hangolása nélkül kritikus állapotba kerülnek, melynek jellemzője a skálainvariancia. Azaz a SOC olyan dinamikus folyamatot jelöl, melyben a rendszer kezdetben korrelálatlan viselkedése az időfejlődés során erősen korrelálttá válik és egy komplex állapotot eredményez. Az ehhez szükséges idő a rendszermérettel növekszik, azaz nagy rendszerekre az önszervező folyamat meglehetősen lassú.

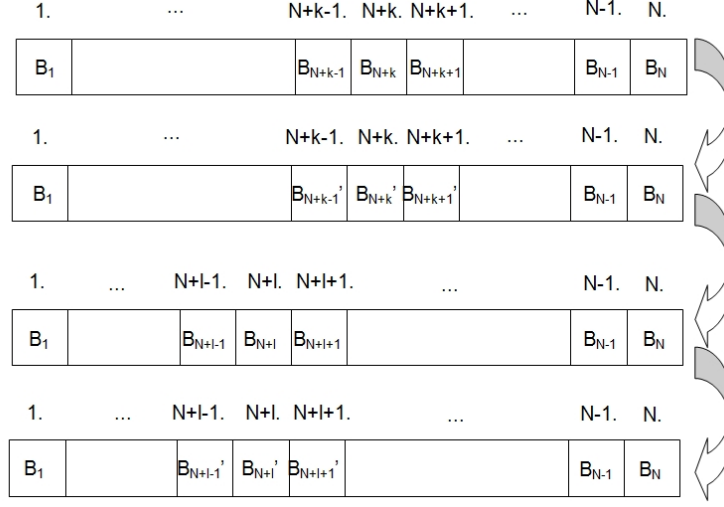
A Bak–Sneppen-modell legfontosabb eleme, hogy a különálló egyedek szintjén történő kiválasztódás ellenére egy fittségi mutatót vezet be, mely adott egyedet jellemez ugyan, de értéke hatással van a többi egyedére és tükrözi az őt körülvevők hatását. Így adott egyed alkalmazkodás érdekében tett változtatásai módosítják az ökoszisztéma egészének fittségi képét, különösen a vele szoros kapcsolatban álló egyedek fittségi értékét. Ezek a változtatások elég gyorsak, így egyedeink fittsége az idő nagy részében lokális maximumértéket vesz fel.

Minden egyedet jellemzünk továbbá egy stabilitási mutatóval (B_i), mely a saját fittségi maximumát elvlasztja a többi egyed (esetleg nagyobb) maximumától. Amikor egy egyed fittsége magas, nehéz ennél nagyobb értéket találnunk, így az állapot stabilnak mondható, a B_i stabilitási mutató nagy. A fittség alacsony értéke esetén nagyobb valószínűséggel találunk nála nagyobb lokális maximumot, így a stabilitási mutató kicsi. Minden egyed esetén a nála előforduló legkisebb B_i stabilitási mutatót vesszük számításba.

A biológia alapvető hajtóereje, hogy a különböző egyedek hatással vannak egymásra és környezetükre. Ez megvalósulhat földrajzi de tápálékláncbeli kapcsolatok útján is. A lényeg az, hogy egy alkalmazkodás érdekében tett változtatás módosítja a szomszédok fittségét és alkalmazkodási képességét is. (Ezt Red Queen effect-nek vagy Vörös királynő hipotézisnek hívjuk; lásd a B függelék.) Egy nagy stabilitási mutatóval rendelkező egyed, mely magától nem lenne képes változtatásra, befolyásolható egy alkalmazkodó szomszéd hatására: lecsökken a stabilitási mutatója, mely nagyobb valószínűséggel eredményez jövőbeli változtatást.

A Bak–Sneppen-modell a fent részletezett tulajdonságok alapján szimulálja a rendszer működését: N egyedet elrendezünk egy egydimenziós vonal mentén, periodikus határfeltételeket alkalmazva. Véletlenszerű B_i stabilitási mutatókat rendelünk minden egyedhez (0 és 1 közötti egyenletes eloszlású valós számokat). Minden időpillanatban változik a rendszer azáltal, hogy a legkisebb stabilitású egyed kihal és helyét egy új faj foglalja el (egy új véletlenszerű stabilitási mutató hozzárendelésével). Az egymásra utaltság miatt ugyanez történik két szomszédjával is (azok helyére is új faj és így új stabilitási mutató kerül). A szimuláció így folytatódik az időlépések sokszori ismétlődésével (lásd a 2.5. ábrát). Ez a folyamat bizonyos esetekben nagy kihalási hullámokhoz (lavinákhoz) vezet (részletesebben a *A fejlődés szaggatottsága, lavinák* szakaszban).

A modell számos érdekes eredményről számol be, mely saját vizsgálatainkhoz is fontos lesz. Ezeket tekintjük most át [5] és [10] alapján:



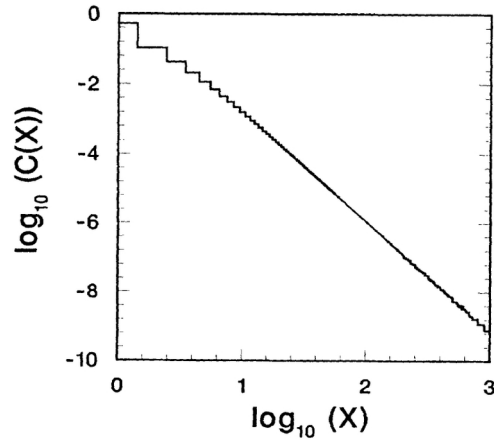
2.5. ábra. Bak–Sneppen modell: kölcsönható egyenek ökológiája. N egyed és azok B_i stabilitási mutatójának változása. Először az $N+k$. egyed stabilitási mutatója minimális, ezt követően pedig az $N+l$ -é.

Események távolságának eloszlása. Ilyen az alkalmazkodó egyedek közötti távolság eloszlása. Kezdetben az egymást követő alkalmazkodó lépések (továbbiakban események) térben korrelálatlanok, ám időben előrehaladva egyre gyakorabb, hogy egy adott helyen bekövetkező eseményt követően valamelyik szomszédos elem fog megváltozni. Azaz az események térben korreláltak lesznek és egy kezdeti tranziens periódus után az események távolságának eloszlása állandósul. Ezt figyelhetjük meg a 2.6. ábrán is. Az események térbeli távolságának (d) függvényében az egymást követő események $C(d)$ eloszlása hatványfüggvényt eredményez:

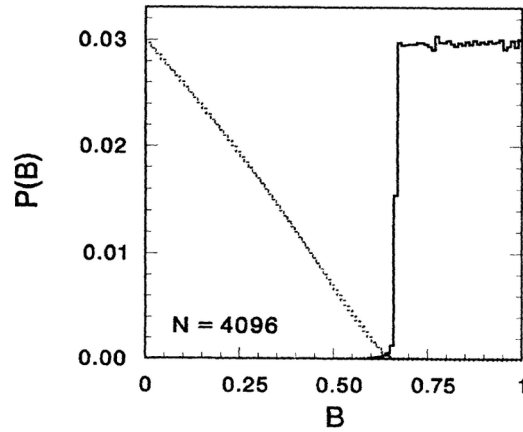
$$C(d) = d^{-3,23 \pm 0,02} \quad (2.2)$$

Stabilitási mutatók eloszlása a stacionárius állapotban. A következő fontos eredmény a stabilitási mutatók eloszlása a kritikus állapotban, mely a 2.7. ábrán látható. Az események azon helyeken következnek be, ahol a stabilitási mutatók kisebbek a kritikus értéknél, mely $B_c = 0,66702$ [10].

Egy olyan rendszerben, ahol az előlények változása nincs hatással a környezetükre, *nagyon lassan* megvalósulna az az állapot, amiben minden egyed fittsége 1, a legmagasabb. Még akkor is, ha a legkisebb fittségű egyedek

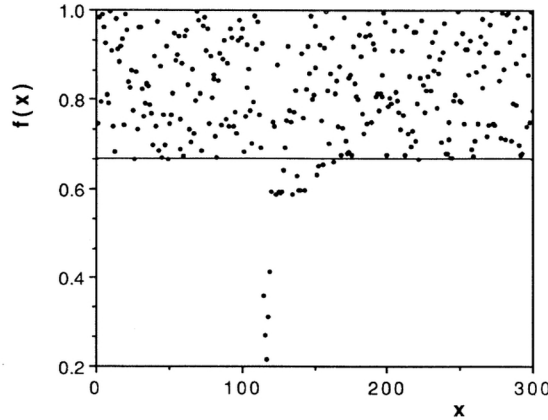


2.6. ábra. Egymást követő események távolságának $C(d)$ eloszlása log-log ábrázolásban. A hatványfüggvény mutatja, hogy a rendszer SOC állapotba került. (Az ábra x változója jelöli a távolságot, mely esetünkben d .) Forrás: [5]



2.7. ábra. Kritikus állapotbeli stabilitási mutatók eloszlása (vastag vonallal). A spontán bekövetkező eseményeknek a $B_c = 0,66702$ küszöbérték szab határt. E fölött az eloszlás egyenletes, kis statisztikus fluktuációval. Az eseményekhez tartozó stabilitási mutatók (minimumértékek) eloszlása a (világos vonallal) pedig e küszöbérték fölött eltűnik. Forrás: [5]

minden lépésben kihalnának, modellünk alapján a rendszer olyan állapotba kerülne, mely ettől nagyon távol van [15]. Itt ismételtén utalhatunk a B függelékben részletezett Vörös királynő hipotézisre.



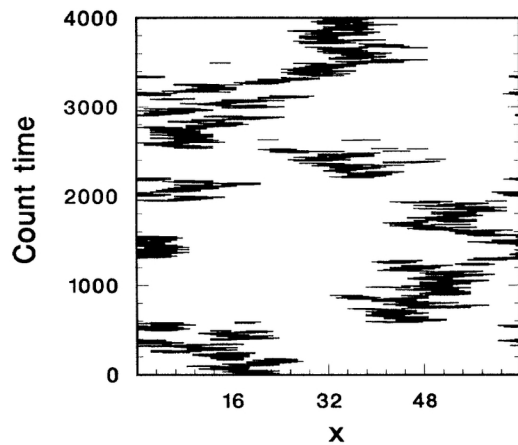
2.8. ábra. Az egydimenziós modell pillanatképe a kritikus állapotban. Egy lokális tartományban, ahol a lavina zajlik, kis stabilitási mutatókat találunk, viszont az összes többi helyen ezek a kritikus érték feletti. Forrás: [10]

A 2.8. ábrán a kritikus állapot egy pillanatképét láthatjuk. A B_i -kre vonatkozólag megfigyelhetjük, hogy a kritikus állapotban szinte mindegyik érték B_c fölött van, csak a lavina pillanatnyi helyén találunk kisebb értékeket.

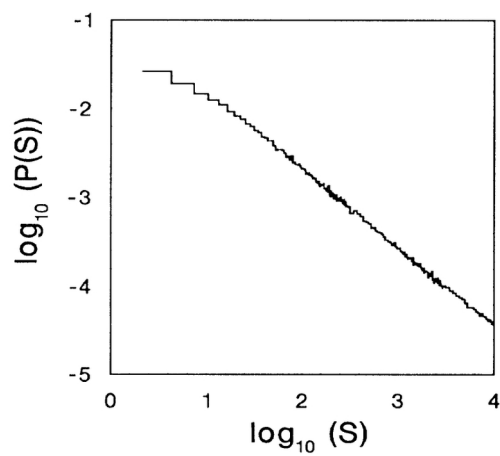
A fejlődés szaggatottsága, lavinák. A 2.9. ábrán megfigyelhetjük a fejlődés szaggatottságát. Itt 64 kölcsönható egyedből álló rendszeren vizsgálhatjuk a mutációs aktivitást. Az idő a mutációk (események) számában került feltüntetésre. Látható, hogy az aktivitás adott időtartamban egymáshoz közeli helyekre koncentrálódik. Szükséges definiálnunk a dinamika fontos építőköveit, a lavinákat, melyek itt jól megfigyelhetők. A láthatóan sokszor térben is elkülönülő lavinák akkor indulnak, ha egy B_c -nél nagyobb minimum került kiválasztásra. Az új véletlen értékek között lehetnek olyanok, amik B_c -nél kisebbek, a lavina addig folytatódik, amíg ilyen értékek megtalálhatók. Csak ezután lesz korrelálatlan a következő lépésben megkeresett minimum. Így jellemezhetjük a fajkihalási hullámokat, melyek magyarázata volt a Bak–Sneppen-modell megalkotásának egyik célja.

A lavinák méretét jelölje s , mely az egymást követő mutációk száma addig, amíg a stabilitási mutatók eléri a kritikus értéket. A lavinák s méretének eloszlása hatványfüggvényt ad (2.10. ábra):

$$P(s) = s^{-0,9 \pm 0,1}. \quad (2.3)$$



2.9. ábra. Mutációs aktivitás az események számában mérve. Forrás: [5]



2.10. ábra. Lavinaméretok eloszlása a kritikus állapotban. Ez esetben a lavina a $B_c = 0,66702$ kritikus érték alatti egymást követő eseményekként lett definiálva. Forrás: [5]

Jól látható tehát, hogy a modell minden külső paraméter hangolása nélkül kerül egy olyan kritikus állapotba, amelyet divergáló átlagos lavinaméret és hatványfüggvény-szerű viselkedés jellemez.

A biológiai motiváción túl a modell sikeres leírását adta számos geofizikai és asztrofizikai jelenségnek is. Meglepő és rendkívül érdekes, hogy egymástól nagyon elkülönülő területeken alkalmazzák ezt a megközelítést. Az alapvetően evolúciós modellként bemutatott módszer eredetileg kölcsönható egyedek populációját vizsgálja, de számos más területen is megállja a helyét. A szemcsés anyagok vizsgálatában való alkalmazása tovább bővíti a sort, kihasználva teljesen különböző rendszerek időbeli fejlődésének hasonlóságát, párhuzamait.

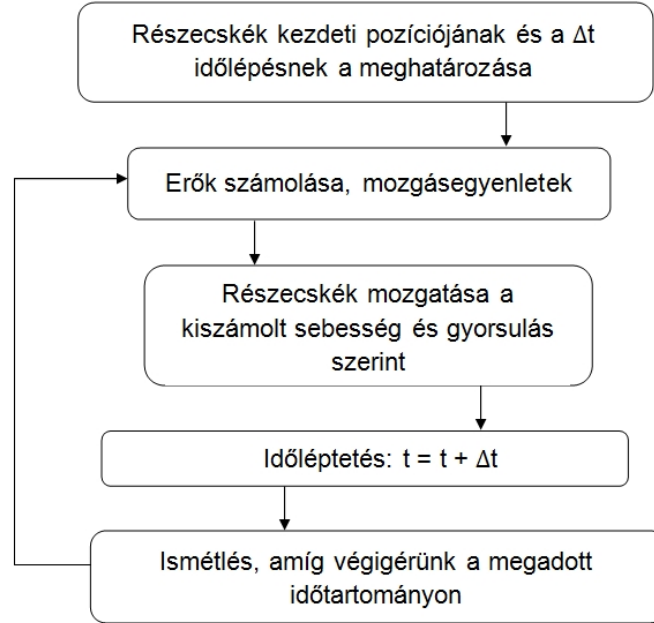
2.3.2. Molekuláris dinamika

A molekuláris dinamika (MD) vagy diszkrét elem módszer (DEM) adott részecskék mikroszkopikus dinamikájának követésével foglalkozik. Az esetek nagy részében célja a természet modellezése, melyet a Newton harmadik törvénye alapján felírt mozgásegyenletek numerikus integrálásával valósít meg. Azokban a helyzetekben alkalmazható nagyszerűen, melyekben nem elegendő vagy nem lehet kísérleteket elvégezni az anyag minden részletre kiterjedő vizsgálatakor. Számos területen alkalmazható sikerrel, legyen az molekuláris rendszer (biofizika, biológia, amorf anyagok, folyadékok), gyalogosok, autók a városban, csillagászati rendszerek vagy éppen az általunk is vizsgált szemcsés anyagok.

A molekuláris dinamikai vizsgálatok során sokrészecske-rendszereket modellezünk és így kapunk képet a rendszer belső állapotáról. Expliciten meghatározzuk a jelenlevő párkölcsönhatásokat, majd a Newton-egyenletek felírásával és megoldásával eljutunk az egyes részecskék mozgásának meghatározásához, trajektóriájának leírásához. A mai számítógép-kapacitás nem teszi lehetővé a valóságban megjelenő $\sim 10^{23}$ részecske modellezését, de *elég sok* részecskét vizsgálva azok viselkedése jól megközelíti a természetét.

Az algoritmus

Az algoritmus [7] vázlata egyszerű (2.11. ábra): minden részecske kezdeti pozíciójának és egy elegendően kicsi Δt időlépésnek a megválasztása után a potenciál ismeretében kiszámoljuk az összes részecskére ható eredő erőt, majd ebből a gyorsulást. A mozgásegyenletek integrálásából megkapjuk a



2.11. ábra. Molekuláris dinamika algoritmusának blokkvázlata

rendszer időbeli fejlődését, majd ezen paramétereknek megfelelően mozgatjuk a részecskéket Δt ideig. Ekkor újra kiszámoljuk az erőket és a fenti algoritmust ismétljük tovább, a vizsgálni kívánt időtartomány teljes hosszáig.

Erők számolása. Az algoritmust ismerve láthatjuk, hogy az erőhatások ismerete és érvényességük megválasztása döntő szimulációnk sikeressége szempontjából. Általános esetben az erők távolságfüggő függvényként adhatók meg:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji} = f(r_{ij}) \quad (2.4)$$

Potenciál létezése esetén pedig annak gradienséből számolhatók:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji} = -\nabla V(\mathbf{r}_j) \quad (2.5)$$

A fenti képlet párpotenciált ír le, de természetesen nem csak párpotenciálok jelenhetnek meg rendszerünkben. Például 3 részecskés esetben a Stillinger-Weber potenciált használhatjuk.

A súrlódási erők meghatározása nem egyszerű. Nem elég, hogy ismerjük a

R_i	$0,8 - 1,2^*$
$k_n = k_t$	10^5
$\gamma_n = \gamma_t$	30
μ_{mic}	$0,3$
v	$0,01$
p	1
ρ	1

2.1. táblázat. A MD szimulációban általunk használt paraméterek. v a falak sebességének nagysága, p a rájuk ható nyomás és ρ a részecskék sűrűsége. (*: egyenletes eloszlással)

részecskék pozícióját, korábbi helyzetük és kölcsönhatásaik ismeretében tudjuk csak helyesen meghatározni a közöttük fellépő súrlódást, azaz a történetre (angolul history) is szükségünk van számításaink során. Ezért a Hertz-formulát alkalmazzuk, melyben két részecske (az i . és a j .) között ható súrlódási erő az átlapolásuk (δ) 3/2-dik hatványával arányos:

$$F_{ij,Hertz} = \sqrt{\delta} \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} F_{ij,Hooke} =$$

$$= \sqrt{\delta} \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} [(k_n \delta \mathbf{n}_{ij} - m_{eff} \gamma_n \mathbf{v}_n) - (k_t \Delta \mathbf{s}_t + m_{eff} \gamma_t \mathbf{v}_t)] \quad (2.6)$$

ahol $F_{ij,Hooke}$ a Hooke-formula alapján számolandó. R_i és R_j a részecskék sugara és δ az átlapolásuk. Az első kerek zárójelben levő kifejezés a normális, míg a másodikban levő a tangenciális erőkomponens. Utóbbi $k_t \Delta \mathbf{s}_t$ tagja tartalmazza a súrlódás helyes számolásához szükséges *előzményeket*. k_n és k_t a normális illetve tangenciális irány rugalmassági állandója, γ_n és γ_t az említett irányok viszkoelasztikus csillapítása, m_{eff} a két részecske effektív tömege ($m_{eff} = \frac{M_i M_j}{M_i + M_j}$), $\Delta \mathbf{s}_t$ a részecskék kontaktpontjának integrált relatív elmozdulása (ez a tag tartalmazza a szükséges *előzményeket*), $\mathbf{n}_{ij}$ a részecskéket összekötő vektor normáltja, $\mathbf{v}_n$ és $\mathbf{v}_t$ pedig rendre a két részecske relatív sebességének normális és tangenciális komponense. A részecskék közötti súrlódási együttható: μ^{mic} .

Az általunk használt paramétereket a 2.1. táblázat tartalmazza.

Kölcsönható részecskék meghatározása. Már említésre került, hogy N részecske esetén N^2 erőhatást kellene kiértékelnünk, melyet célszerű elkerülni óriási számításigénye miatt. Erre használjuk az ún. bucketing algoritmust rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetén. Ennek lényege, hogy

mintánkat az L kölcsönhatási távolságnak megfelelően cellákra osztjuk és adott cellabeli részecske kölcsönhatását csak szomszédos cellabeli elemekkel vizsgáljuk. Ez lényegesen megkönnyíti vizsgálatunkat.

Gyorsulás és sebesség meghatározása, időléptetés. A gyorsulás és sebesség meghatározása a mozgásegyenletek integrálásával elsőre egyszerűnek tűnik, ám ennek numerikus megvalósítása és megfelelő pontosságú kivitelezése bonyolult feladat. Ennek részleteit lásd a C függelékben.

Molekuláris dinamikában elfogadott és elterjedt az ún. Verlet-módszer használata (vagy a Leapfrog-algoritmus, mely a Verlet speciális esetének tekinthető). Ezen algoritmusok előnye, hogy nem igényelnek túl sok számítási kapacitást, illetve időben megfordíthatóak: a $t + \Delta t$ időpillanatbeli helyzetből visszaszámolhatjuk a t időpontbelit és az energiamegmaradás is teljesül (ami alapkövetelmény). Előnyük továbbá, hogy egy időlépésben csak egyszer kell erőt számolnunk. Ezen kívül az általunk is alkalmazott mikrokanonikus¹ sokaság csak ezzel az algoritmussal kezelhető. Minden esetben $\Delta t = 10^{-4}$ -es lépésközt alkalmaztunk.

¹A mikrokanonikus sokaság a zárt rendszer statisztikus modellje. Itt az ismert makroszkopikus feltétel az, hogy a teljes energia E és $E + \delta E$ között legyen.

3. fejezet

Eredmények bemutatása és értelmezése

3.1. Mezoszkopikus modell

A mezoszkopikus modell alkalmazásakor alapvetően három feltételezéssel élünk:

1. A Coulomb-modell jól alkalmazható szemcsés anyagok vizsgálatakor.
2. A nyírási sáv egy keskeny, szűk része a vizsgált mintának.
3. A nyírási sáv kiválasztása a peremfeltételeknek megfelel és a disszipációs ráta minimumhelyeként határozható meg.

A következőkben megvizsgáljuk e három feltétel jelentését és teljesülését.

1. A szemcsés anyagok vizsgálatát a Coulomb-modellben végezzük, melyet Coulomb-féle súrlódási modellnek is hívnak, mely a száraz súrlódás egyszerű modellje: segítségével megbecsülhetjük két száraz felülettel érintkező test súrlódásának nagyságát és irányát.

$$F_t \leq \mu_{eff} F_n, \quad (3.1)$$

ahol F_t az érintkező felületekkel párhuzamos súrlódási erő, iránya ellentétes az érintkező felületek relatív sebességével. μ a súrlódási együttható, F_n pedig a felületekre ható normális irányú erő. Fontos, hogy $\mu \equiv \mu_{eff} \neq \mu^{mic}$ [16] ennek magyarázatát lásd a 3.2.1. szakaszban.

2. A nyírási sáv vékony voltát számos kísérlet és szimuláció igazolja [17]. A nyírási sáv kb. 10 szemcseméretnyi, azaz megfelelően keskeny és a minta többi része tömbszerűen viselkedik.

3. A mezoszkopikus modell lényeges eleme, hogy a 2.2. szakaszban bemutatott elrendezés vizsgálata során a nyírási sáv helyének meghatározásakor a minimális disszipáció elvét vesszük alapul [9]. A pillanatnyi nyírási sáv a rendszer leggyengébb pontjában található, nevezetesen ott, ahol a disszipációs ráta minimális, azaz:

$$\dot{E} = \int_{\beta} \mu \Delta v P dl = \min, \quad (3.2)$$

ahol μ az effektív súrlódási együttható, Δv az integrálási görbe, vagyis a nyírási sáv által elválasztott tartományok közötti sebességkülönbség, P pedig a nyomás. Az integrálást, azaz a minimumkeresést az összes lehetséges, a határfeltételeknek megfelelő görbe (β) mentén el kell végezni. A lehetséges nyírási sávok a periodikus határfeltételek miatt csak a falakkal párhuzamos síkok lehetnek.

Mindezt saját rendszerünkre a következő módon alkalmazhatjuk: mivel homogén anyagot vizsgálunk, benne a P nyomás állandó. Az említett sebességkülönbség pedig a két fal sebességkülönbsége lesz. Az effektív súrlódási együttható is állandó a rendszerben, de a várható értéke körüli kis fluktuációkat tapasztalunk. Továbbá a legtöbb esetben a fal-részecske (μ_w) effektív súrlódási együttható különbözik a részecske-részecske (μ_i) effektív súrlódási együtthatótól [4].

Láttuk tehát, hogy a mezoszkopikus modell alkalmazásának feltételei teljesülnek. Felmerül a kérdés, hogy mi történik a nyírási sáv és helyének megtalálása után? Azaz milyen a rendszer dinamikája? Akármilyen finom terhelést alkalmazunk a vizsgált mintára, a kialakuló nyírási sáv nem kvázistacionárius folyamatként valósul meg. Lokális és környezetbeli átrendeződést eredményez. Ennek módjára különböző megközelítések, modellek ismertek, melyeket a 3.1.1. szakaszban ismertetünk.

3.1.1. Különböző megközelítések, dinamika

Aktivitás-modell. Az első megközelítés [16] kulcsa, hogy a lokális deformáció szolgál a későbbi dinamika forrásául is. A bemutatott modellek közül mindegyik mezoszkopikus, azaz egy bizonyos szemcsméretnél nagyobb, kiátlagolt egységekkel dolgozik, melyek a rendszerméretnél sokkal kisebbek. A modell minden egyes mezoszkopikus rácsponthoz egy γ_i nyírási deformációt rendel, míg a τ nyírási feszültséget a peremfeltételek határozzák meg. Feltételezi, hogy a γ_i deformáció csak két mennyiségtől, a lokális nyírási feszültségtől és az i . réteget ért hatásoktól függ. Az i . réteget ért hatást

a szomszédos rétegek deformációjaként értelmezi, azaz γ_i -t az alábbi képlet alapján számítja:

$$\gamma_i = (\gamma_{i-1} + \gamma_{i+1}) f(\tau), \quad (3.3)$$

vagyis az okozott γ_i deformáció arányos az őt létrehozó $\gamma_{i-1} + \gamma_{i+1}$ deformációval. A τ -függést az $f(\tau)$ monoton növekvő függvényen keresztül értelmezi, mely anyagonként változik. Azaz a szomszédos részek destabilizálják az anyagot, míg az ott létrejövő megcsúszás stabilizálja azt. Folytonos leírás esetén ez az alábbi differenciálegyenletet adja $\gamma(y)$ -ra:

$$\frac{\partial^2 \gamma}{\partial y^2} = C(\tau) \gamma, \quad (3.4)$$

ahol $C(\tau)$ a nyírási feszültség anyagfüggő függvénye, előjele a peremfeltételtől függ. Láthatjuk, hogy ez *Laplace*-os összefüggést fogalmaz meg a deformációra, melynek megoldása $C(\tau)$ előjelének függvényében $\gamma(y) = \sin(y)$, illetve $\gamma(y) = \cosh(y)$. Ha $\tau < \tau_{crit}$, $C(\tau)$ pozitív, ha $\tau > \tau_{crit}$, $C(\tau)$ negatív, ahol τ_{crit} a kritikus nyírási feszültség.

Diszkrét esetben az egymást követő aktív pontok közti távolság eloszlása a távolság -2 . hatványával cseng le.

Kineto-Elasztoplasztikus modell. A második megközelítés [18], [19] lényege, hogy maga a nyírás elasztikus folyamatok és lokális plasztikus rendeződések sorozataként definiált. A tipikus részecskeméret szerint blokkokra osztott rendszer minden blokkja σ nyírási feszültséget hordoz és a rendszert a $P(\sigma, t)$ feszültségeloszlás írja le adott időpillanatban. A fejlődés az alábbi szabályokat követi: $\dot{\gamma}$ -nak megfelelő nyírást alkalmazva a rendszerre, dt idő alatt minden blokkbeli nyírási feszültség $G_0 \dot{\gamma} dt$ -vel nő. Ha ez egy adott blokkban nagyobb lesz, mint a kritikus σ_c (anyagfüggő) érték, a blokk plasztikus eseményen megy keresztül: a feszültsége 0 lesz τ karakterisztikus időn belül. Ez a módszer kontrollálja a feszültséget a teljes mintában. Az egységnyi idő alatt bekövetkezett plasztikus rendeződések száma az anyag folyékonyságának mértéke, mely a lokális nyírási feszültség függvényében nő. Kiderül, hogy az események száma függ a szomszédos blokkok viselkedésétől. Mindez a plasztikus eseményeket követő elasztikus relaxáció következménye, mely a pillanatnyi eseményhez közeli blokkok lokális feszültségét növeli. Egyszerű nyírás esetén ez a modell is a 3.4. egyenlehez hasonló összefüggést ad.

Shear transformation zone. Harmadik megközelítésként [20] a shear transformation zone (STZ) modellt említhetjük, mely sokkal bonyolultabb

az előzőeknél. Lényege, hogy a plasztikus események hatását megőrizve szimulálják a következő eseményeket. Ennek érdekében belső állapotjelzőket vezetnek be, melyek információt hordoznak a korábbi eseményekről és meghatározzák a rendszer következő pillanatbeli válaszát.

A bemutatott modellekkel szemben mi egy egyszerűbb közelítéssel próbálkozunk: feltesszük, hogy egy eseményt követően az esemény helyéhez és annak szomszédjaihoz rendelt értékek véletlenszerűen változnak.

3.1.2. Egyszerű nyírás esete

Ahogy a 2.3. szakasz bevezetésében ismertettük, mezoszkopikus modellünk 1 dimenzióban megegyezik a Bak–Sneppen-moddal. Az egyetlen különbség a határfeltételekben rejlik, hiszen azok esetünkben nem periodikusak, így a falnál lévő részecskének csak 1 szomszédja van.

A bemutatott modellekkel szemben alkalmazott egyszerűbb megközelítésünk értelmében a szomszédos elemek hatását véletlenszerűnek tételezzük fel, ami alapvető különbség az előző modellekhez képest. Mindez azért jellemezhető jobban a valóságot, mert a nyírási sáv nem záródik jól, így az általa létrehozott hatás erősítheti de gyengítheti is a szomszédokat. Kézenfekvőnek látszik tehát a véletlenszerű módosítás. (Az előző modellekkel ellentétben, ahol a nyírási sáv helyén erősítés, mellette gyengítés következett be.)

Feladatunk tehát az, hogy egy véletlenszámokkal (μ_i) feltöltött sor legkisebb elemét kell keresnünk, legyen ez μ_j . Ezt feleltetjük meg a nyírási sáv pillanatnyi helyzetének. A nyírást magát és az utána bekövetkező átrendeződést pedig úgy valósítjuk meg, hogy véletlenszerűen módosítjuk az effektív sűrűlési együtthatót, μ_{j-1} -et, μ_j -t és μ_{j+1} -et a nyírási sáv körül. A következő időpontbeli pozíciót ezt ismételve határozzuk meg.

A Bak–Sneppen-modellben stabilitási mutatóként megjelenő B_i számok a mi esetünkben a részecskéket jellemző μ_i effektív sűrűlési együtthatók lesznek. A kihalás eseménye adott helyen pedig a nyírási sáv adott helyen történő megjelenését jelenti.

Az 1 dimenziós rendszert egy N cellából álló rácsként jelenítettük meg. Minden cellához hozzárendeltünk egy egyenletes eloszlású véletlenszámot az alábbiak szerint:

$$\mu_i = \begin{cases} [0, 1] & i \in [2, N - 1], \\ [0, \mu_w] & i = 1, N, \end{cases} \quad (3.5)$$

ahol 1 jelenti a maximális részecske-részecske effektív súrlódási együtthatót, míg μ_w a maximális fal-részecske közötti súrlódási együtthatót. Természetesen csak a két érték hányadosa a lényeges [4].

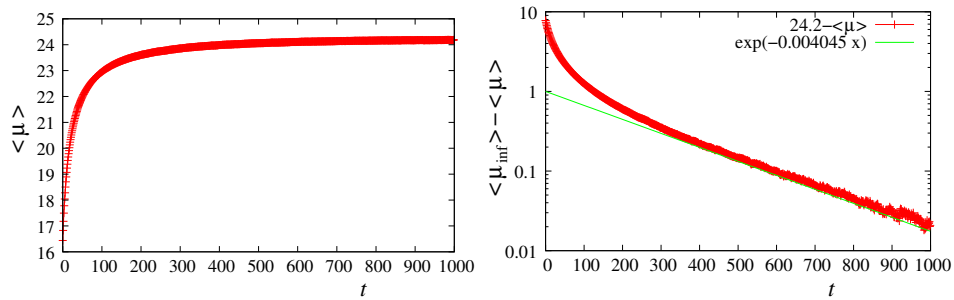
Tehát összefoglalva az algoritmus a következő:

- minden részecskéhez a 3.5. egyenlet alapján egyenletes eloszlású véletlenszámot rendelt
- megkereste a minimumhelyet
- új randomnesszámokat rendelt a minimumhelyhez és két szomszédjához a 3.5. egyenlet szerint figyelve arra, hogy a szélső elemeknek csak egy szomszédja van
- kiszámolta az adott részecskéhez rendelt számok átlagértékét, az adott időpontbeli, majd az összes szimulációra vonatkozó sokaságátlagot
- az összegyűjtött adatokat és az ezekből számolt átlagokat kiírta fájlba

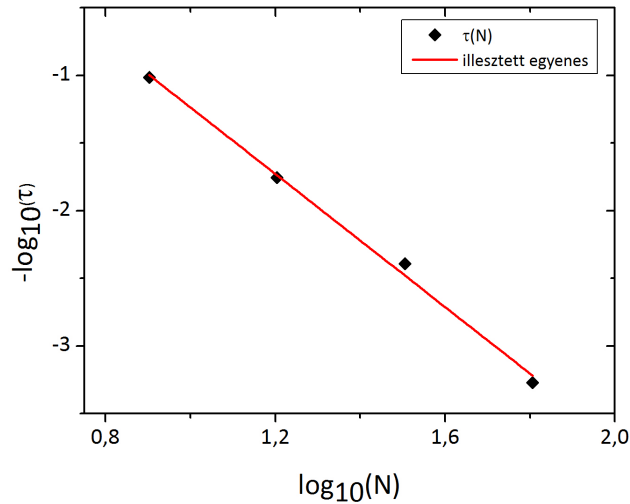
Bemenetként megadhattuk többek között a rendszer részecskeszámát, a vizsgált időtartamot és μ_w -t. Így ezen paramétereket változtatva sok különböző eset szimulációját megvalósíthattuk.

3.1.3. Eredmények

A súrlódási együttható sokaságátlagának időbeli lefutása, kritikus állapot elérésének időállandója. Érdekes megvizsgálnunk, hogy a szimulációk során a különböző méretű rendszerek mikor érik el a kritikus állapotot (steady state), azaz hogy alakul μ_i -k időbeli futása. Ezt a sokaságátlag kiszámolásával szemléltethetjük. M db szimuláció futtatásakor az adott rendszerre minden időpillanatban kiszámoljuk az aktuális μ_i -k átlagát és az így kapott M db adatsor értékeit átlagoljuk. Az így kapott $\langle \mu_{avg} \rangle$ -k időbeli lefutását láthatjuk a 3.1. ábra jobb oldalán egy 32 elemszámú, $\mu_w = 1$ rendszerre. Az átlagos effektív súrlódási együttható időfüggésének megmérése után meghatároztuk annak stacionárius állapotbeli értékét ($\langle \mu_{avg} \rangle(t \rightarrow \infty)$). A jobb oldali ábrán látható, hogy a rendszer exponenciálisan éri el ezt az értéket. Az exponenciális együtthatója lesz a relaxációs idő inverze. Fontos, hogy csak a hosszú idejű relaxációs idő számít, így ezt határozzuk meg, amit a rendszerméret függvényében a 3.2. ábrán és a 3.1. táblázatban jelenítettünk



3.1. ábra. Az átlagos effektív sűrűdési együttható időfüggése $N = 32$ elemű rendszerre. Bal oldalon az időfüggés, jobb oldalon a stacionárius állapotbeli és a pillanatnyi érték különbsége.



3.2. ábra. Az átlagos effektív sűrűdési együttható exponenciális időfüggésének relaxációs ideje az N elemszám függvényében.

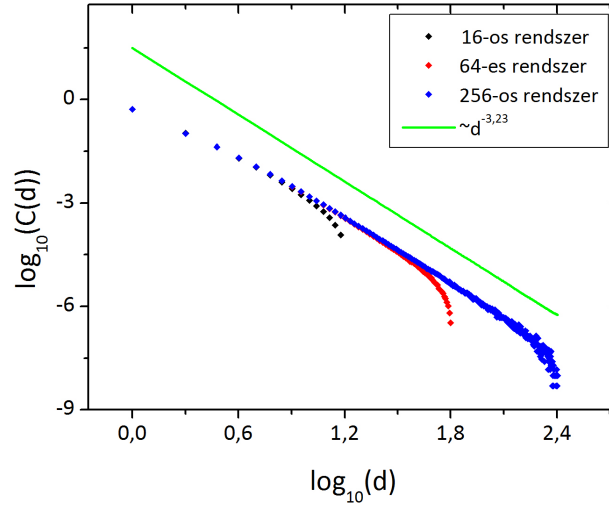
meg.

A relaxációs idő a rendszerméret $2,46$. hatványával nő, ami igen jó közelítéssel megfelel a Bak–Sneppen-modell lavina-dimenziójának ($2,43$). Ez az exponens azt méri, hogy a lavina időbeli hossza hogyan aránylik annak méretével. Amikor a méret eléri a rendszerméretet, akkor áll be a stacionárius állapot.

Nyírási sávok távolságának eloszlása. A megvalósított modellünk eredményeit vizsgálva kiszámítottuk az egymást követő nyírási sávok térbeli tá-

N	τ
8	10,309
16	56,818
32	247,219
64	1858,736

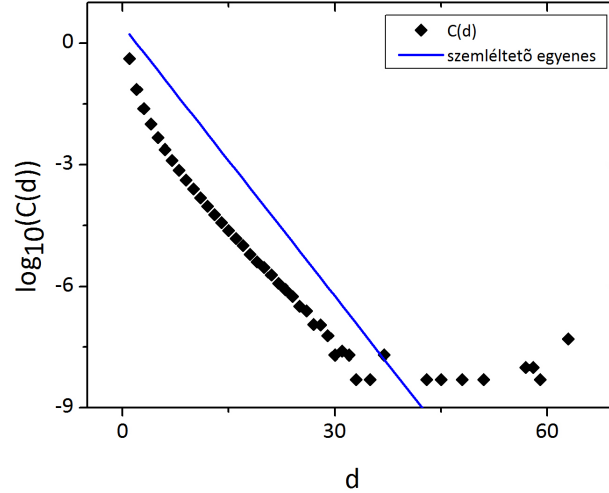
3.1. táblázat. A renszerméret (N) függvényében tapasztalt τ időállandók.



3.3. ábra. Nyírási sávok távolságának eloszlása 16-os, 64-es és 256-os cellaszámú rendszerek esetén logaritmikus ábrázolásban, $\mu_w = 1$ értéke mellett. Zölddel a Bak–Sneppen-modell hatványfüggvénye ($\sim d^{-3,23}$).

volságának eloszlását, melyre hatványfüggvényt kaptunk. A 3.3. és a 3.4. ábrán ezeket figyelhetjük meg. A 3.3. ábrán feltüntettük a 16, 64 és 256 cellás eseteket logaritmikus rendszerben, mindegyik esetben $\mu_w = 1$ volt. Látható, hogy kisebb rendszerre görbültebb alakot kapunk, míg nagy rendszerekre a térbeli korreláció nagyon jól megfigyelhető. Feltüntettük a Bak–Sneppen-modell eredményeként megjelenő $C(d) \sim d^{-3,23}$ hatványfüggvényt is az egyezés láthatóságának érdekében.

Ábráztuk továbbá a távolságok eloszlását a 64 cellaszámú rendszerre $\mu_w = 0,5$ értéke esetén. Ez a 3.4. ábrán látható. A log–lin ábrán szereplő szemléltető egyenes egy exponenciális függvény, azaz a nemskálázó állapotban az aktív helyek közti távolság eloszlása nem hatványfüggvény, hanem exponenciális.

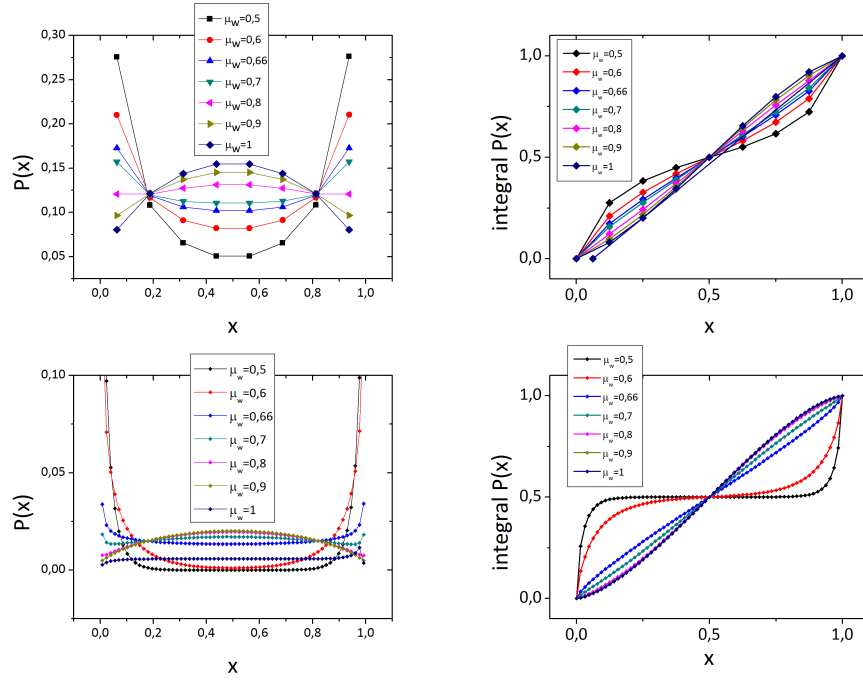


3.4. ábra. Nyírási sávok távolságának eloszlása 64-es cellaszámú rendszer esetén féllogaritmikus ábrázolásban, $\mu_w = 0,5$ értéke mellett. A kézzel berajzolt egyenest a jobb szemléltetés céljából jelenítettük meg.

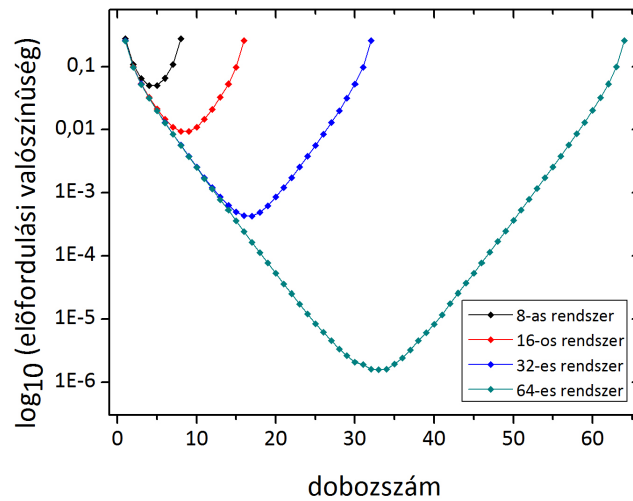
Nyírási sávok pozíciójának eloszlásfüggvénye. Megvizsgálhatjuk, hogy a különböző időpontokban meghatározott nyírási sávok adott helyen milyen valószínűséggel fordulnak elő. Az így kapott eloszlásfüggvények alapvetően kétfélek lehetnek: a $B_c = 0,66702$ kritikus érték alatti μ_w -k esetén a nyírási sávok a minta szélén találhatók nagy valószínűséggel, a lavinák a tartomány szélére lokalizálódnak. A kritikus érték feletti μ_w -k esetén viszont a nyírási sáv nagyobb valószínűséggel található a minta közepén. Fontos különbség még a kétféle eloszlásfüggvény között, hogy utóbbi a rendszermérettel skálázódik, míg az előbbi nagyobb rendszerméretekre annyiban változik, hogy a középső, vízszintes szakasza (nagyon kicsi valószínűségek) kiszélesedik.

Alább a 8-as és a 64-es rendszerméret eloszlásfüggvényeit, illetve azok integráljait láthatjuk μ_w különböző értékei mellett (3.5. ábra). (Az integrálok jelentőségével a következő bekezdésben foglalkozunk részletesebben.) A skálázódó tulajdonság szemléltetésére pedig ábrázoltuk a 8-as, 16-os, 32-es és 64-es rendszerek eloszlásfüggvényeit $\mu_w = 0,5$ esetén (3.6. ábra).

Sebességprofilok. A 3.5. ábra jobb oldalán található integrálok (a nyírási sávok pozíciójának eloszlásfüggvényét integráljuk) lesznek a mintában tapasztalt sebességprofilok.



3.5. ábra. Fent balra a 8-as rendszer eloszlásfüggvényei, jobbra pedig ezek szimmetrizált integráljai μ_w különböző értékei mellett. Lent ugyanez a 64-es rendszerre.



3.6. ábra. Skálázódó tulajdonság szemléltetése $\mu_w = 0,5$ értéke esetén különböző rendszerméretekre. Látható, hogy az események bekövetkezésének valószínűsége a falakhoz közel, a minta szélén a legvalószínűbb.

3.2. Molekuláris dinamika

3.2.1. Szimuláció megvalósítása

A molekuláris dinamika szimuláció elméleti alapjait a 2.3.2. szakaszban ismertettük. Az algoritmus vázlata és legfontosabb lépései is ott találhatóak. Ebben a részben a szimuláció konkrét megvalósítását, annak folyamatát és a futtatása során kapott eredményeket ismertetjük.

Szimulációinkhoz a LAMMPS¹ Molecular Dynamics Simulator [11] programcsomagot használtuk.

Súrlódási együtthatók. A Bak–Sneppen-modell legfontosabb paramétere a fal és az együttmozgó tömeg (továbbiakban: bulk) közötti effektív súrlódási együttható közti különbség. Ezt a különbséget szeretnénk a molekuláris dinamika során is megvalósítani. A fal és a bulk közötti effektív súrlódási együtthatóknak az egymáshoz viszonyított aránya fontos számunkra. Ez az effektív súrlódási együttható függ a mikroszkopikus súrlódási együtthatótól μ_{mic} [21] és a geometriától olyannyira, hogy a súrlódásmentes gömböknek is van jelentős effektív súrlódási együtthatója. A Bak–Sneppen-moddal való összehasonlításhoz nagy effektív súrlódási együtthatóra van szükségünk. Ekkor azonban a falnál levő konfiguráció fontosabb, mint a mikroszkopikus súrlódás [13]. Az egyszerűség kedvéért μ_{micro} értékét szimulációinkban 0,3-ra rögzítettük és a fal érdességét változtattuk.

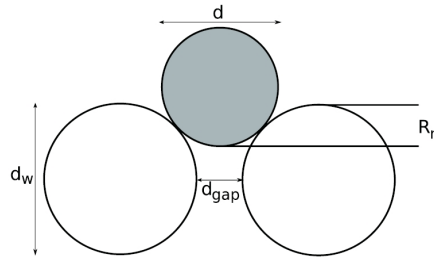
A fal effektív súrlódási együtthatója. [13] alapján tudjuk, hogy nagyobb részecskékből készített érdesebb falnak nagyobb az effektív súrlódási együtthatója. A fal részecskéinek konfigurációját vizsgálva azt találjuk, hogy a rácsszerűen elhelyezett részecskék nem alkalmazhatók, a kommenzurábiláts-inkommenzurábilátság miatt mely többek között azt eredményezi, hogy az effektív súrlódási együttható nem monoton függvénye a falat alkotó golyók átmérőjének. Tehát a fal részecskéit véletlenszerűen, a majd később ismertető véletlen parkolás modell szerint helyezzük el.

A fal érdességét érdemes valamilyen jellemző mérőszámmal mérni. Shojaaee et al. [13] javaslatára alapján ez az átlagos beülési mélység (R_n), ami megmondja, hogy egy átlagos méretű részecske átlagosan milyen távolságra ül

¹Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

μ_w	$R_n(10)^*$	$R_n(20)^*$
0,4	0,051445	0,0564823
0,6	0,142744	0,108877
0,8	0,166739	0,17359
1	0,295941	0,208715

3.2. táblázat. Átlagos R_n értékek μ_w függvényében 10 és 20 széles rendszerekre. (*: a rendszerek szélessége)

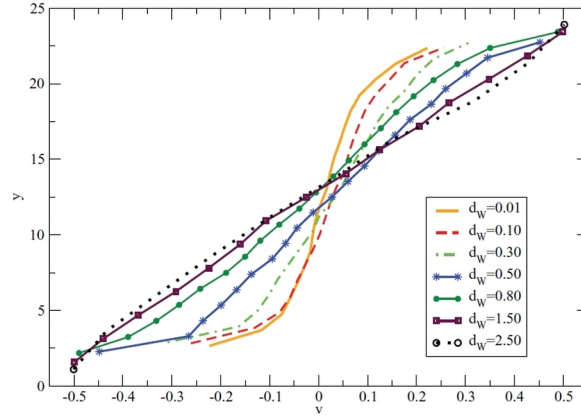


3.7. ábra. Részecske a fal elemei közötti résben. d a szemcseátmérő, d_w a falrészecskék átmérője, d_{gap} a falrészecskék réstávolsága és R_n a beülés mélysége. Forrás: [13].

be két falrészecske közé (lásd a 3.7. ábrát). A konkrét szimulációs elrendezéseinken megmértük R_n értékeit, melyeket a 3.2. táblázat foglal össze 10 és 20 részecske széles rendszerekre. A táblázatban látható adatok és azok láthatóan nagy szórása alapján arra a következtetésre juthatunk, hogy érdemes több adat figyelembevételével sokaságátlagot készítenünk, ám ezt az idő rövidsége nem tette lehetővé.

A falrészecskék közötti rés (gap) miatt előfordulhat, hogy a szimulációs dobozból megszöknek részecskék. Ezért létrehoztunk a falak mellett egy-egy további réteget, melynek részecskéi között már nem voltak rések (3.9. ábra). Ez csak a vizsgált szemcsék kiszökését hivatott megakadályozni, szimulációnk eredményére nincs hatással.

Sebességprofil. Egy adott pillanatbeli állapton megvizsgálhatjuk a 2 dimenziós rendszer keresztmetszetének sebességprofilját. A legszélső részecskékre (a fal részecskéire) az általunk meghatározott v sebesség lesz jellemző, a köztes részecskék sebességét pedig a numerikus integrálás során kaphatjuk meg. Ennek nagysága függ az előző szakaszban definiált és a 3.7. ábrán bemutatott d_w paraméteről is, ahogyan azt a 3.8. ábrán láthatjuk. Szimulációnk



3.8. ábra. Sebességprofilok d_w különböző értékeire. Forrás: [13]

egyik legfontosabb célja ezen sebességprofilok meghatározása.

Mintakészítés. A szimuláció sikeressége szempontjából alapvető jelentőségű a mintakészítés eljárása. Célunk egy homogén és izotróp rendszer létrehozása, mely nehezen megvalósítható. Két módszer ismert erre. Az első módszer lényege az, hogy (a dimenzióknak megfelelően a síkra vagy a térbe) beöntjük a részecskéket. A megoldás hatékonynak tűnik, ám mégsem célravezető, mert anizotrópiát okoz. A beöntés során függőleges irányú aszimmetria alakul ki a mintában: a létrehozott minta alja tömöttebb lesz, míg tetején ritkábban helyezkednek el a részecskék. Ennek következtében a szimuláció kezdetekor a nyírési sáv a minta szélére lokalizálódik és csak bizonyos idő elteltével éri el a vizsgálni kívánt állapotot.

Ezért mi egy olyan algoritmust használunk, mely az eredeti rendszerméretet sokszorosára növelve abban helyezi el a kívánt számú részecskét, véletlenszerűen és átfedés nélkül. Ezután a rendszert visszaállítjuk az eredeti méretére úgy, hogy minden részecskének a rendszer középpontjától vett távolságának függvényében sebességet adunk.

A véletlenszerű lepakolást alkalmazva érdemes tanulmányozni Rényi Alfréd parkolási problémáját [12], mely azt vizsgálja, hogy (1 dimenzióban) egy adott hosszúságú útszakaszra véletlenszerűen parkoló autók esetén vajon mennyi lesz az autók sűrűsége akkor, amikor nincs már több szabad parkolóhely. Eredményként azt kapjuk, hogy a rendelkezésre álló hely kb. 74,76%-át töltik ki az autók.

Főbb paraméterek, megfigyelendő hatások. Tehát a szimulációhoz szükséges mintát elkészítve megkezdhetjük a 2.11. ábra szerinti algoritmus végrehajtását. Ehhez számos paramétert be kell állítani szimulációs programunkban.

Vizsgált tartomány, részecskék, fal, méretdiszperzió. Elsőként rögzítenünk kell a vizsgált tartomány méreteit. Meg kell adnunk a részecske-típusokat (inhomogén anyag vizsgálatakor többféle részecskét definiálhatunk, melyek tulajdonságai eltérhetnek). Ezek után meg kell adni a részecskeszámot is. Mi egyféle, gömb alakú részecskéket vizsgálunk. Minden részecskéhez 3 sebességkoordinátát rendelünk a sebességvektor három komponensének megfelelően.

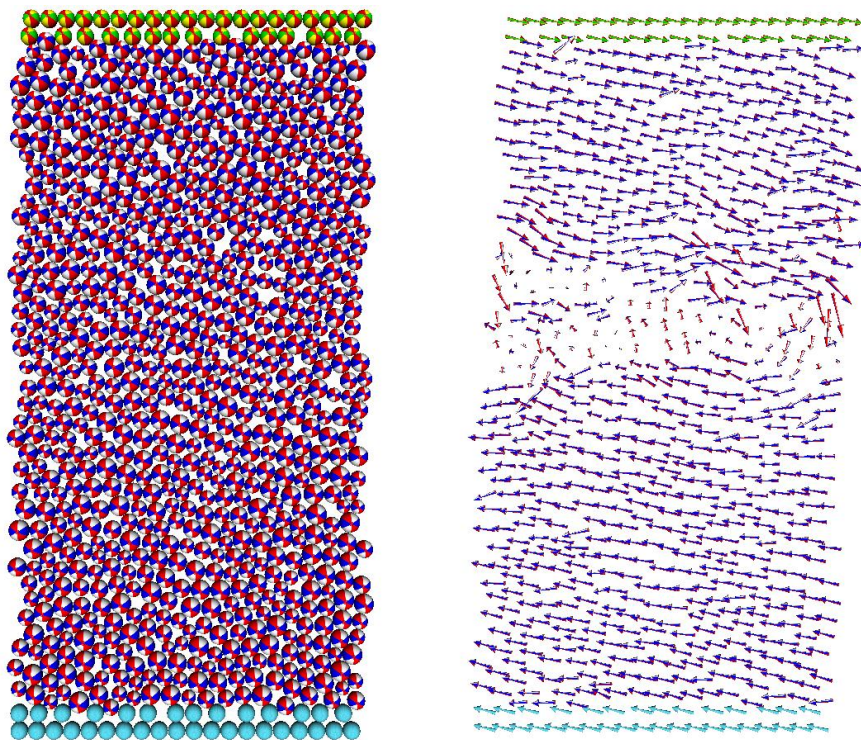
A mintánkat határoló falakat úgy valósítjuk meg, hogy a vizsgált szemcsékhez hasonló, de más méretű réteget hozunk létre a tartomány határain. Ezekkel a részecskékkel ugyanúgy számol a rendszer, mint a vizsgált anyag szemcséivel, így falként való viselkedésükről nekünk kell gondoskodni. z -irányban véges tömeget rendelünk hozzá, viszont x és y irányban végtelen tömeggel kell, hogy rendelkezzen.

A fal részecskéire ható erőket az összes többi részecskéhez hasonló módon számoljuk. Ezt követően viszont a falra ható erőket összegezzük és egyenletesen elosztjuk a fal részecskéi között, ezzel megvalósítva a falként való viselkedést. Lásd a 3.9. ábrát, ahol a fal részecskéi a szemcséktől eltérő színnel lettek jelölve.

A vizsgált anyag szemcséire 20% méretdiszperziót alkalmazunk, azaz nem minden golyó egységnyi átmérőjű, hanem 0,8 és 1,2 között egyenletes eloszlással választjuk meg a vizsgált részecskék átmérőjét. Ha nem így tennénk, szinte biztos, hogy az anyag már a mintakészítéskor vagy legkésőbb a nyírás megkezdésekor kikristályosodna, azaz szabályos elrendeződést mutatna.

Golyók közötti kölcsönhatás. A szimuláció megvalósításakor meg kell adnunk, hogy milyen, a részecskék között fellépő, kölcsönhatással számoljon a program. Esetünkben ez párpotenciál vagy egyszerű távolságfüggő függvény, súrlódási erők esetén pedig a Hertz-kölcsönhatás [14], melyeket a 2.3.2. szakasz *Erők számolása* részében ismertettünk.

Részecskék rugalmassága, rezgőmozgásuk csillapítása. Szintén a 2.3.2. szakasz *Erők számolása* részében bevezettük a γ_n és γ_t normális és tangenciális irányú viszkoelasztikus csillapításokat, melyek szerepe, hogy



3.9. ábra. A molekuláris dinamika szimuláció pillanatképei. Bal oldalon a vizsgált rendszer és a szemcsék, jobb oldalon pedig a nyírási sáv a nyilak az adott szemcse sebességének nagyságát és irányát jelzik. Alul és felül eltérő színnel a falak láthatók. A fal részecskéi együtt mozognak, sebességük állandó.

a sebességtől függő csillapítást valósítsanak meg a részecskékre. Meg kell állapítanunk egy ún. határcsillapítást is, mely nem engedi, hogy egy-egy ütközés után túl sokáig rezegjenek a részecskék.

Numerikus integrálási módszer. Programunk a korábban említett és a C függelékben bemutatott Verlet-féle algoritmust használja a sebességek és elmozdulások meghatározására a numerikus integrálás során. Ennek időlépését is be kell állítanunk, mely $\Delta t = 0,0001$ lesz minden esetben.

Szimulációnkat három dimenzióban valósítottuk meg, viszont részecskéinket két dimenzióban helyeztük el.

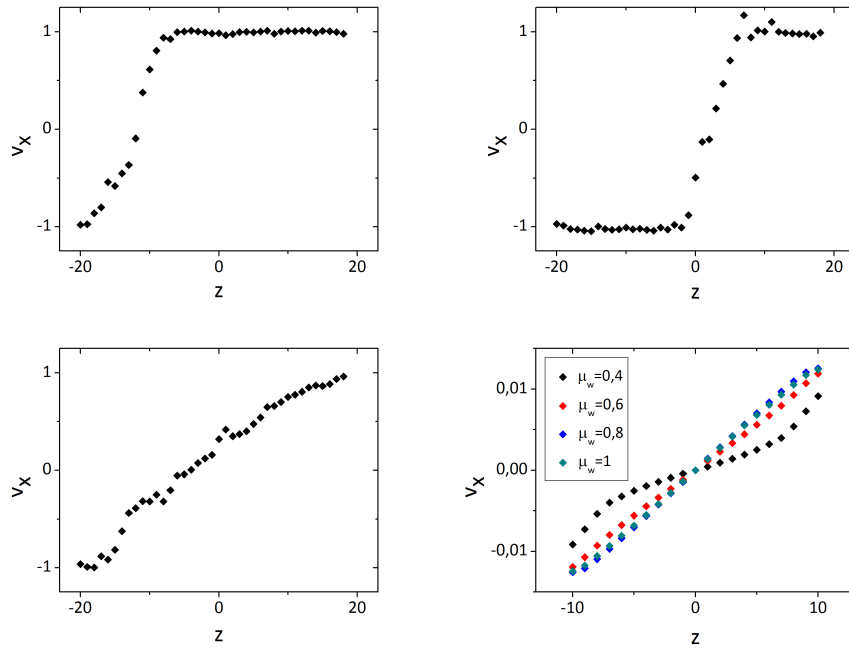
3.2.2. Eredmények

A 3.9. ábrán láthatjuk a szimuláció pillanatfelvételeit. Bal oldalon a vizsgált szemcsék láthatók, a falak eltérő színnel lettek jelölve eltérő viselkedésük miatt. A jobb oldali ábrán minden egyes részecske sebességvektora került feltüntetésre. A fal részecskéinek sebessége a szimuláció során végig állandó. A nyírási sáv a rendszer azon részén található, ahol a két „részecsketömb” sebességének iránya megfordul. Jól látható, hogy ez nem egy éles határvonal, de a rendszermérethez képest keskeny sáv, amely minden esetben a falakkal párhuzamos.

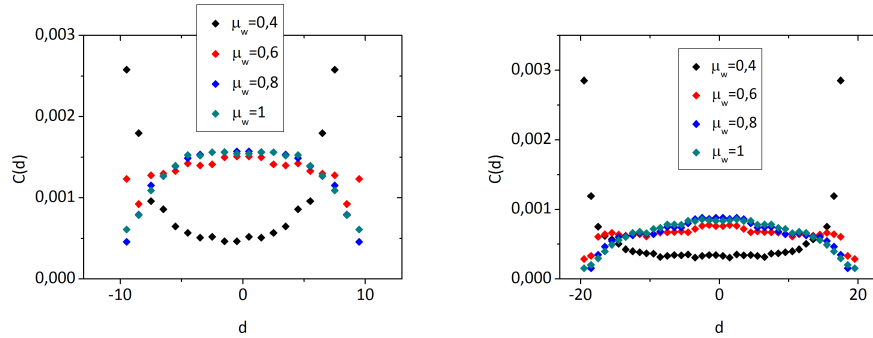
Sebességprofilok. Elsőként megvizsgáltuk a szimuláció során létrejövő sebességprofilokat. Ezek a 3.10. ábrán láthatók (felső sor és alsó sor bal oldala). Vízszintes tengelyen a z irányú pozíció, míg a függőleges tengelyen a sebesség x komponense látható. Az első két esetben (felső sor) deformációnak lehetünk tanúi: először a minta alsó felében, majd a közepén történik megcsúszás az anyagban. Első esetben kb. a -18 . szemcsénél, második esetben az $1-2$. szemcsénél történik a sebesség előjelváltása, azaz itt található a nyírási sáv közepe. Fontos megfigyelnünk, hogy a nyírási sávok a rendszermérethez képest kicsik, tényleg maximum 10 részecske szélességűek [17]. A harmadik esetben (alsó sor bal oldala) homogén nyírásnak lehetünk a tanúi. A plasztikus deformációt elasztikus rendeződés követi, azaz sebességprofil lineáris. Az ilyen pillanatképeket nem vettük figyelembe analíziseink során.

A 3.10. ábra alsó sorának jobb oldalán szimmetrizált sebességprofilokat találunk. Mivel a rendszer szimmetrikus a középpontra, ezért a jobb statisztika érdekében a középponttól két irányban összeátlagolhatjuk a vizsgált mennyiségeket (ezt a módszert a későbbiekben is alkalmazzuk). Ez esetben megfigyelhetjük a sebességprofilok változását a fal részecskéinek átmérője (d_w), azaz a fal-részecske súrlódási együttható (μ_w) függvényében.

Nyírási sávok pozíciójának eloszlásfüggvénye. A következőkben a nyírási sávok helyének eloszlásfüggvényeit vizsgáltuk. A Bak–Sneppen-modell esetén a sebességprofilokat ezen eloszlásfüggvények integráljaként állítottuk elő (3.5. ábra). Most azt vizsgáljuk, hogy a MD szimulációk során kapott sebességprofilok deriválása során a várt eloszlásfüggvényeket kapjuk-e és azok megegyeznek-e a nyírási sávok pozíciójából kiszámolt eloszlásfüggvényekkel. A 3.11. ábrán sebességprofilok deriváltjait láthatjuk különböző fal-részecske súrlódási együtthatók esetén. Jól látható, hogy a görbék jellege a Bak–Sneppen-modellben vizsgáltakéval egyezik, az átalakulás a falhoz lokalizált és a skálázódó mintázatok között gyorsan megy végbe. Ennek további vizsgálá-



3.10. ábra. Sebességprofilok a molekuláris dinamika szimulációban. Első két esetben „szabályos” nyírási sávok, a harmadik esetben elasztikus rendeződés figyelhető meg. Ez esetekben 40 szemcse szélességű rendszerekkel dolgoztunk. A negyedik grafikonon szimmetrizált sebességprofilokat tüntettünk fel μ_w különböző (0,4, 0,6, 0,8 és 1) értékei esetén. Ekkor a részecskeszám 377, a rendszer szélessége 20, a magassága ~ 40 volt.

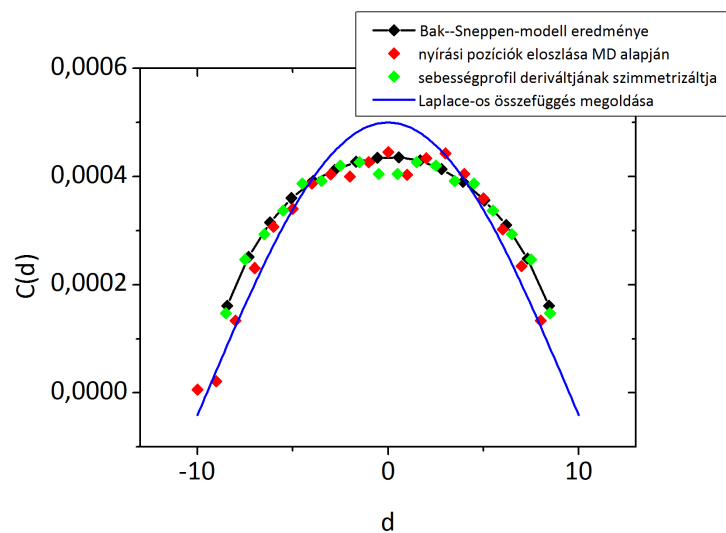


3.11. ábra. Sebességprofilok deriváltja két rendszerméretre: bal oldalon 191 részecske vizsgálatának eredménye egy kb. 20 golyó magasságú rendszerre, jobb oldalon pedig egy 389-es részecskeszámú, kb. 40 golyó magasságú rendszer eredménye μ_w különböző értékei esetén. Szimulációnk 10^6 ideig futott minden esetben, kivéve $\mu_w = 1$ esetét, ahol ez $2 \cdot 10^6$ volt.

latát a 3.12. ábrán láthatjuk, ahol a különböző modellek eredményeit hasonlítottuk össze egy 20 szélességű rendszeren, $\mu_w = 1$ értéke esetén. Feketével a Bak–Sneppen-modell eredménye, pirossal a MD szimulációkból számolt eloszlásfüggvény, zölddel pedig a kapott sebességprofil deriváltjának szimmetrizáltja látható. E három eredmény egyezősége jól megfigyelhető. A MD szimulációból úgy számoltunk eloszlásfüggvényt, hogy minden időlépésben megkerestük a részecskék sebességének előjelváltásának helyét. Ez a nyírási sáv pozíciója. Csak azokat vettük viszont figyelembe, ahol 2, 5-szer nagyobb ugrást tapasztaltunk a deriváltgörbében, mint az a teljes homogén esetben adódna. Kékkel ábrázoltuk az *Aktivitás-modell* Laplace-os összefüggésének (3.4. egyenlet) megoldását, a $\cos(\frac{x}{6,05}) \cdot 0,0005$ függvényt. Ez igazolni látszik modellünk helyességét a többi modellel szemben, ám ennek bizonyosságát további vizsgálatok kell, hogy megelőzzék.

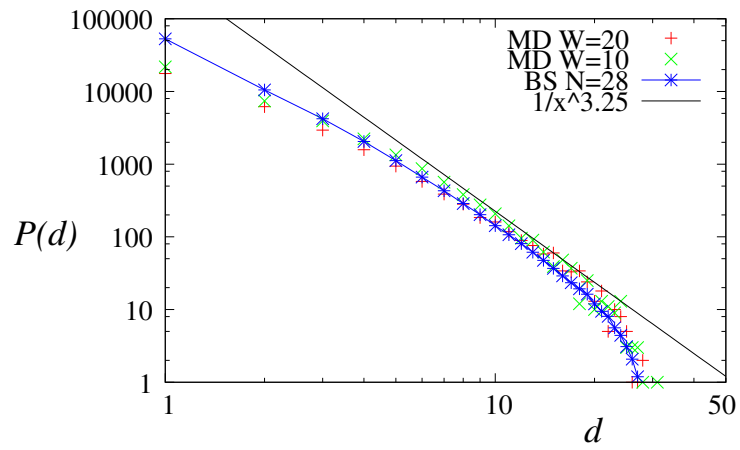
Nyírási sávok távolságának eloszlása. Megvizsgáltuk továbbá az egymást követő nyírási sávok távolságának eloszlását is. Ennek eredménye a 3.13. ábrán látható. Itt feltüntettük két MD szimuláció eredményét (piros és zöld), illetve a Bak–Sneppen-modell eredményét is (kék). Feketével pedig berajzoltuk az elméletileg várt hatványfüggvényt. Mind az elméleti és a szimulált, mind a Bak–Sneppen modell és a szimulációk egyezősége jól megfigyelhető.

Ez az egyezés sokkal pontosabb, mint amit az események eloszlásfüggvényeinél tapasztaltunk. Ennek oka az, hogy míg az eseményeloszlás sok-sok lavina átlagából alakul ki, addig a sávok ugrálásának korrelációja már egy lavinán belül mérhető, ezért rövidebb szimuláció is jó eredményt ad. Fontos megje-



3.12. ábra. A Bak–Sneppen modellből, a MD szimulációból és a derivált sebességprofilokból számolt eloszlásfüggvények összehasonlítása. Kékkel a Laplace-os összefüggés megoldása. Minden esetben $\mu_w = 1$ értéke esetén.

gyezni, hogy az Aktivitás-modell -2 -es exponenst vár, ami láthatóan nem jó.



3.13. ábra. Egymást követő nyírási sávok távolságának eloszlása. Pirossal és zölddel 20 illetve 10 szélességű, 20 magasságú rendszerre, 766 és 389 részecskével futattott MD szimulációk, kékkel $N = 28$ -as rendszerre a Bak–Sneppen-modell eredménye. Minden esetben $\mu_w = 1$ -et vizsgáltuk. Feketével az elméletileg várt hatványfüggvény.

3.3. Két módszerrel kapott eredmények összehasonlítása, összefoglalás

3.3.1. Konklúzió

Munkánk során a szemcsés anyagok egyszerű nyírását modelleztük és a modellt ellenőriztük molekuláris dinamika szimuláció segítségével. A modell bonyolultabb változatait korábban használták már, de direkt hitelesítés eddig még nem történt.

Vizsgálataink eredményeképp megmutattuk, hogy:

- a fal-részecske sűrűlódás függvényében jelentős átalakulás megy végbe a rendszer viselkedésében (sebességprofilok),
- a sebességprofil pillanatszerű nyírási sávok sokaságátlagából áll elő,
- a modell jól illeszkedik a mért adatokra, ám annak eldöntésére, hogy az általunk alkalmazott egyszerűbb modell vagy a korábban bemutatott bonyolultabbak a helyesek, az ugrásközök eloszlásának vizsgálatára is szükség volt (utóbbi esetben $\sim d^{-2}$, míg előbbi esetben $\sim d^{-3,23}$ hatványfüggvényt vártunk).

Láttuk, hogy az események eloszlásának vizsgálatakor a molekuláris dinamika szimulációk görbéi nem voltak annyira „szépek”, mint azt vártuk volna. Ennek okaként a szimulációk futtatási idejének rövidegét találtuk. Tapasztalatunk alapján viszont a távolság-eloszlás görbék nagyon szépen mutatják az elméletileg várt értékeket. Ennek oka, hogy már egy lavinán belül is előfordul majdnem minden, a rendszerméret miatt lehetséges ugrás, így a viszonylag rövid szimulációk elegendőnek bizonyulnak. Az események eloszlásának görbéihez viszont sok lavinát kell vizsgálnunk, azaz hosszabb ideig kell szimulációinkat futtatni.

3.3.2. Fejlesztési lehetőségek

Az előző szakaszban említetteknek megfelelően célunk a molekuláris dinamika szimulációk hosszabb ideig történő futtatása illetve nagyobb sokaságátlag vizsgálata. Ezt követően a távolság-eloszlás és az események eloszlásának vizsgálata során célunk, hogy előntsük melyik modell helytálló az egyszerű nyírás megvalósítására: az amelyik a nyírási sávban erősít, mellette gyengít [16], vagy az általunk elképzelt, mely szerint erősítés és gyengítés egyaránt

megvalósulhat, azaz a hatás véletlenszerű. A dolgozatban is bemutatott eredmények alapján modellünk helyessége beigazolódni látszik, ám ennek bizonyosságához mindenképpen szükséges további elemzések elvégzése is.

Fontos kérdés, hogy eredményeink 3 dimenzióban is megállják-e a helyüket, ezért egy-két jól megválasztott esetben szeretnénk 3 dimenzióban is ellenőrizni eredményeinket.

Appendices

A. Függelék

Elvégzett saját feladatok és a használt módszerek jelentősége

- Kezdetben a szemcsés anyagokra vonatkozó irodalom elolvasása, fontosabb eredmények, kísérleti és szimulációs módszerek megismerése.
- A feladat gyakorlati szempontból való fontosságának megismerése, lehetséges alkalmazási területek keresése.
- Mezoszkopikus modell különböző megközelítéseinek vizsgálata (Aktivitás-modell, Kinetó-Elasztoplastikus modell, Shear transformation zone).
- Bak–Sneppen modell megismerése és legfontosabb eredményeinek megértése, alkalmazása az általunk vizsgált rendszerre. A modell megvalósítása (C++ nyelven).
- Molekuláris dinamika szimulációk módszerének megismerése, a szimuláció paramétereinek, elméleti hátterének megértése.
- A saját modellünk és a szimulációk által szolgáltatott eredmények vizsgálata, kiértékelése és diszkussziója.

B. Függelék

Vörös királynő hipotézis

A Vörös királynő hipotézis [8] azt állítja, hogy a különböző egyedek nem elszigetelve valósítanak meg az alkalmazkodás érdekében változtatásokat, hanem hatnak azokra az élőlényekre, melyekkel kapcsolatban vannak, és ezek hatásai is befolyásolják a viselkedésüket. Példának okáért a zsákmányállat gyorsan fut, menekül a ragadozó elől. Ezért a ragadozó is gyorsabban fog futni, hogy elkaphassa áldozatát. Erre válaszul a zsákmányállat még gyorsabban próbál menekülni. A Vörös királynő elnevezés Lewis Carol *Alice Tükkörországban* című regényéből ered, ahol az embereknek rohanniuk kell, hogy egy helyben maradhassanak.

A Bak–Sneppen-modellben ez a hipotézis úgy nyer értelmet, hogy a legkisebb fitnessű elem bal és jobb oldali szomszédjai is módosulnak. Az a logikus, ha a változó egyed a szomszédaira gyakorolja a legnagyobb hatást.

C. Függelék

Numerikus integrálási módszerek, Verlet-módszer

A numerikus integrálás legegyszerűbb algoritmus az Euler-módszer, mely gyorsulásból sebességet, sebességből elmozdulást határoz meg integrálással, ám eléggé pontatlan (lásd. a C.1. táblázatot). Ennél jobb módszer a negyedrendű Runge-Kutta módszer, melyben a választott rövid lépésköz zsugorításával annak negyedik hatványával zsugorodik a hibára adott felső becslés. Ez az időlépés harmadolása esetén körülbelül háromszor annyi számolás után $(\frac{1}{3})^4 = \frac{1}{81}$ -szeresére zsugorítja a hibakorlátot. Mindez megfelelő pontosságot biztosít, de számításigénye miatt mégsem ezt alkalmazzuk.

A legtöbb molekuláris dinamikával foglalkozó program az ún. Verlet-módszert használja (vagy a Leapfrog-algoritmust, mely a Verlet speciális esetének tekinthető). Ennek lényege, hogy adott t időpontban ismerve a rendszer $\mathbf{x}(t)$ kitérését, $\mathbf{v}(t)$ sebességét és $\mathbf{a}(t)$ gyorsulását, meghatározzuk a $t + \frac{1}{2}\Delta t$ pillanatbeli sebességét:

$$\mathbf{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t \quad (\text{C.1})$$

Ennek ismeretében ki tudjuk számolni a $t + \Delta t$ időpontbeli kitérését:

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t)\Delta t \quad (\text{C.2})$$

Továbbá a $t + \Delta t$ -beli gyorsulást az eredő erőből kifejezhetjük, mely segítségével a $t + \Delta t$ -beli sebesség:

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t \quad (\text{C.3})$$

Módszer	Hiba	Kumulatív hiba
Euler	Δt^3	Δt
Runge-Kutta	Δt^5	Δt^4
Verlet	Δt^4	Δt^2

C.1. táblázat. Numerikus integrálási módszerek: hibáik és kumulatív hibáik összehasonlítása. Forrás: [7]

Irodalomjegyzék

- [1] D.L. Henann and K. Kamrin, *PNAS* **110**, 6730 (2013).
- [2] M. L. Falk, J. S. Langer and L. Pechenik, *Phys. Rev. E* **70**, 011507 (2004).
- [3] J. Török, T. Unger, J. Kertész and D. E. Wolf, *Phys. Rev. E* **75**, 011305 (2007).
- [4] Robabeh Moosavi, M. Reza Shaebani, Maniya Maleki, János Török, Dietrich E. Wolf and Wolfgang Losert, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 148301 (2013).
- [5] Per Bak and Kim Sneppen, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4083 (1993).
- [6] Abhinendra Singh, *Micro-Macro and Rheology in sheared Granular Matter*, University of Twente, Enschede, 2014.
- [7] <http://www.phy.bme.hu/torok/tanit/SzamSzim/2013/ea03.pdf>, 2014. 10. 05.
- [8] http://en.wikipedia.org/wiki/Red_Queen_hypothesis, 2014. 09. 30.
- [9] T. Unger, J. Török, J. Kertész, D. E. Wolf, *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 214301 (2004).
- [10] Maya Paczuski, Sergei Maslov and Per Bak, *Phys. Rev. E* **53**, 1 (1996).
- [11] S. Plimpton, *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*, *J Comp Phys*, **117**, 1-19 (1995)., <http://lammps.sandia.gov>
- [12] <http://mathworld.wolfram.com/RenyisParkingConstants.html>, 2014. 10. 05.
- [13] Zahra Shojaaee, Lothar Brendel, János Török and Dietrich E. Wolf, *Phys. Rev. E* **86**, 011302 (2012).

- [14] http://lammps.sandia.gov/doc/pair_gran.html, 2014. 10. 06.
- [15] J. Török, S. Krishnamurthy, J. Kertész and S. Roux, *Eur. Phys. J. B* **18**, 697 (2000).
- [16] T. Unger, arXiv:1009.3878 (2010).
- [17] S. Fazekas, J. Török and J. Kertész, *Phys. Rev. E* **75**, 011302 (2007).
- [18] V. Mansard, A. Colin, P. Chauduri and L. Bocquet, *Soft Matter* **7**, 5524 (2011).
- [19] P. Jop, V. Mansard, P. Chauduri, L. Bocquet and A. Colin, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 148301 (2012).
- [20] J. S. Langer and L. Pechenik, *Phys. Rev. E* **68**, 061507 (2003).
- [21] T. Unger, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 018301 (2007).

Lezárás dátuma: 2015. január 6.