



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Önszerveződő folyamatok szemcsés anyagokban

PHD TÉZISFÜZET

Szerző:

Lévay Sára

Témavezető:

Dr. Török János

Egyetemi docens

Elméleti Fizika Tanszék

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

2021

A kutatások előzménye

*Ki tudja tehát kiszámítani egy molekula útját? Mit tudjuk mi, hogy világok keletkezése nem függ-e homokszemek hullásától?
(Victor Hugo, A nyomorultak)*

Valóban hozzájárul az egyes homokszemcsék mozgása a körülöttünk levő világ viselkedéséhez? A makroszkopikus világ tényleg különösen érzékeny az egyes mikroszkopikus alkotóelemek precíz viselkedésére? Victor Hugo gondolatai nemcsak engem ihlettek meg a szemcsés anyagokról való gondolkodásban, hanem mások számára [Bak96, Jaeger96] is inspirációt jelentettek már a témában.

Az általunk is vizsgált szemcsék súrlódó kontaktusok által kölcsönható szilárd testeknek tekinthetők. Az egyes szemcsék lokális kölcsönhatása egyszerűen megérthető, ám a szemcsék sokaságából álló rendszer már komplex viselkedést mutat. A szemcsés anyagok vizsgálata során sokféle jelenséget megfigyelhetünk. Ilyen például a folyás során vagy rázás hatására megjelenő konvekció, a méret szerinti szegregáció, és a mintázatképződés is.

Egyes források szerint [deGennes99] az emberiség által legnagyobb mennyiségben mozgatott anyag a víz, és ezt másodikként a szemcsés anyagok követik. Becslések szerint [Nedderman05] a vegyipari termékek közel fele, és az alapanyagok legalább háromnegyede szemcsés jellegű, az anyagok tömegét figyelembe véve. Mindez egyértelművé válik, ha belegondolunk, hogy naponta mennyi gabona, cukor, érc, építési alapanyag, homok mozgatására, feldolgozására van szükség.

Többek között a szemcsés anyagok mutatta sokrétű jelenségeknek köszönhetően máig nincs egy egységes, elfogadott elmélet, mely leírná viselkedésük alapjait. Más anyagokkal ellentétben, legyenek azok akár szilárd, gáz vagy folyadék halmazállapotú rendszerek, a szemcsés anyagok esetén csak egy ilyen átfogó elmélet töredékei állnak rendelkezésünkre. Emiatt a szemcsés anyagok viselkedése még mindig aktív kutatások tárgyát képezi. A szemcsés rendszerek viselkedésének megértése kis méretskálán óriási előrelépést jelent a nagy méretskálájú alkalmazások számára. Az elmúlt évszázadokban olyan neves tudósok fektették le a téma alapjait, mint Coulomb, Faraday, Hagen, Hertz, Huygens, Reynolds, de Gennes, Edwards, és még sokan mások.

A szemcsés anyagok legismertebb példája a homok, mely nagyrészt szilícium-dioxid szemcsékből áll. A szemcsék körülbelül 100 mikron átmérőjűek, alakjuk az ütközéseknek köszönhetően folyamatosan változik. Éppen emiatt nem meglepő, hogy a kezdeti vizsgálatok, kísérletek sivatagokban, például a Szaharában történtek. Bagnold egyike volt azon úttörő tudósoknak, akik a homok viselkedését vizsgálták. Bagnold eredményeit a *Physics of Blown Sand and Sand Dunes* [Bagnold54] című könyvben foglalta össze, mely első kiadása 1941-ben készült el és azóta is fontos referenciát jelent a témát vizsgálók számára.

A szemcsés anyagok definícióját [Jaeger92] alapján a következőképpen fogalmazhatjuk meg: A szemcsés anyagok sokrészecske-rendszerek, “*diszkrét, makroszkopikus szemcsék nagy sokaságából álló rendszerek*”, melyekben a szemcsék között rövid hatótávolságú, disszipatív kölcsönhatás lép fel. A szemcsés anyagok mozgásának fenntartásához folyamatos külső energiaközlésre van szükség, mely ellensúlyozni tudja a szemcsék közötti kölcsönhatás által okozott energiaveszteséget.

Célitűzések

A disszertációban bemutatott munkám célja elsőként a gömb alakú szemcsék geometriailag frusztrált rendeződésének vizsgálata egy olyan tárolóban, ami a két és három dimenzió közötti átmenetként értelmezhető, így a továbbiakban $2+\varepsilon$ -dimenziós rendszernek hívom. Célunk az volt, hogy a rendszer rázás hatására történő viselkedését vizsgáljuk diszkrét elem módszer (DEM) szimulációkkal és kísérletekkel. Hasonló vizsgálatok történtek korábban koloid és szemcsés rendszerekben egyaránt [Han08, Harth15]. Elsődleges célunk az volt, hogy eldöntsük, hogy a rendszer a kétdimenziós vagy a háromdimenziós esethez hasonlóan viselkedik-e. A kétdimenziós rendszer mind lokálisan mind globálisan optimális, három dimenzióban viszont a helyzet bonyolultabb. Ennek következményeképp a kétdimenziós alapállapot elérhető egyszerű dinamikai folyamatok, például rázás hatására. Három dimenzióban ez nem valósul meg, hiszen a lokálisan optimális tetraéderez szerkezet alkalmazásával nem lehet lefedni a teret. Ennek vizsgálatára kísérleteket, DEM és Monte Carlo szimulációkat végeztünk.

Ez a rendszer megfelelően bizonyult arra, hogy Edwards elméletének alkalmazhatóságát vizsgáljuk [Edwards89, Mehta89, Mehta90, Edwards94, Edwards98, Edwards02, Blumenfeld06, Baule18] szemcsés anyagok esetén. Annak ellenére, hogy a szemcsés anyagok nemegyensúlyi, atermális rendszerek, Edwards elméletében javaslatot tett az egyensúlyi statisztikus fizika összefüggéseinek alkalmazására egyenlő valószínűségű szemcsés rendszerbeli állapotok sokaságaként. Célunk ennek az elméletnek a $2+\varepsilon$ -dimenziós rendszerünkre vonatkozó vizsgálata volt. Mivel a rendszerben megvalósuló konfigurációk száma véges, lehetséges a rendszer állapotösszegének és egyéb kapcsolódó mennyiségeknek az analitikus számolása. Ez a rendszer lehetővé teszi annak vizsgálatát is, hogy mi történik különböző részrendszerek csatolása esetén. Egy részrendszerek csatolásával létrehozott cella segítségével megvizsgáltuk a termodinamika nulladik főtételének esetét is a $2+\varepsilon$ -dimenziós rendszerre.

Ezt követően, a disszertáció második felében szemcsés anyagok viselkedését vizsgáltuk egy hengeres tárolóban, az ún. silóban. Elsőként a silóból való kifolyást megszakító bedugult állapotokat vizsgáltuk. Azokban az esetekben, amikor a siló alján található nyílás csak néhányszorosa a silóban tárolt szemcsék méretének, a kifolyás során olyan stabil struktúrák alakulhatnak ki a nyílás fölött, melyek akadályozzák a további kiáramlást [Garcimartín10, Tang11, Hidalgo13, Tang16]. Célunk az volt, hogy megértsük a kialakult bedugult struktúrák szerkezetét DEM szimulációk segítségével, illetve a szimulációkat alátámasztó kísérleti eredményekkel. A legfontosabb kérdés annak eldöntése volt, hogy a háromdimenziós silóban kialakuló stabil struktúrák háromdimenziós kupolaszerű szerkezetet jelentenek-e vagy inkább kétdimenziós ívekből álló komplex struktúráként értelmezhetők.

A bedugult rendszerek tárgyalását követően a silóból való folyamatos kifolyást, kiáramlást vizsgáltuk. Számos korábbi kísérleti és numerikus vizsgálat kimutatta, hogy kemény, súrlódó részecskék esetén a folyási ráta konstans, és független a siló töltési magasságától [Nedderman82, Mankoc07, Pacheco-Martinez08, Ahn08, Balevičius11, Oldal12]. Más vizsgálatok [Balevičius07] viszont időfüggő folyási rátát állapítottak meg a súrlódási együttható alacsonyabb értéke esetén, illetve egy kontinuum modell alapján történő számítások [Staron12] azt mutatták, hogy a szemcsés anyag súrlódási együtthatójának változtatásával átmenet figyelhető meg a szemcsés viselkedés (konstans folyási ráta) és a folyadékszerű viselkedés (csökkenő folyási ráta) között. Célunk az volt, hogy megvizsgáljuk a szemcsék tulajdonságainak hatását a kifolyás közben tapasztalható viselkedésükre. DEM szimulációinkban és az ezeket kiegészítő kísérletekben a szemcsék közötti súrlódási

együtthatót és a szemcsék keménységét változtattuk annak érdekében, hogy megértsük ezek kiáramlásra gyakorolt hatását.

Új tudományos eredmények (Tézispontok)

1. Monodiszperz gömbök vizsgálata egy $2+\varepsilon$ -dimenziós rendszerben DEM és Monte Carlo szimulációkkal.

Diszkrét elem módszer (DEM) szimulációk és kísérletek segítségével megmutattam, hogy a $2+\varepsilon$ -dimenziós, monodiszperz gömbökből álló keskeny rendszer rázás hatására megközelíti az alapállapotot, mely olyan háromszögrács, melyben a szemcsék csikokba és cikcakkos struktúrába rendeződve a cella első és hátsó falához érnek hozzá felváltva. Ezt az alapállapotot azonban a rázás hatására fejlődő rendszer nem éri el a kialakuló tökéletesen rendezett, de egymással inkompatibilis domének miatt. Megmutattam, hogy a rendszert a két szemcsényi sugarú konfigurációk területváltozása és az antiferromágneses függőleges rendeződés hajtja. Ezen eredményeket az elvégzett Monte Carlo szimulációk is alátámasztják. DEM szimulációk segítségével megmutattam, hogy a háromszögrácsban fellelhető hibáknak nagy jelentősége van a rendszer dinamikája szempontjából, mert elősegítik az optimális konfiguráció kialakulását. Monte Carlo szimulációim segítségével megmutattam, hogy a rendszer azért nem éri el rázás hatására az alapállapotot, mert ehhez szükség lenne kis valószínűségű, az optimalizálás szempontjából előnytelen átalakulásokra. Ezen eredményeket a [P1] publikáció foglalja össze.

2. Edwards elméletének vizsgálata a $2+\varepsilon$ -dimenziós, monodiszperz gömbökből álló rendszer esetén az állapotösszeg számításával, DEM szimulációk és kísérleti eredmények összehasonlításával.

Témavezetőm, Török János segítségével megmutattam, hogy a $2+\varepsilon$ -dimenziós rendszer leírható az Edwards sokaság segítségével, a rendszer állapotösszege analitikusan felírható és a rendszert jellemző mennyiségek analitikusan számolhatók. Megmutattam, hogy az Edwards sokaság alapján történő számítások jó egyezést adnak a szimulációkban mért eredményekkel. Megmutattam, hogy a két különböző alrendszer csatolásával létrehozott csatolt rendszer csak akkor írható le Edwards elmélete alapján, ha a feszültségek egyensúlyát mikroállapotok szintjén figyelembe vesszük, és a teljes rendszer állapotösszegét figyelembe véve végezzük el a számításokat. Az így elvégzett számítások és az ezeket alátámasztó DEM szimulációk segítségével megmutattam, hogy az Edwards elmélet nem alkalmas csatolt rendszerek leírására akkor, amikor térfogatcsere történik nemcsak a részrendszerek között, hanem a részrendszerek és a környezet között egyaránt. Ezen eredményeket a [P2] publikáció foglalja össze.

3. Silóból kiáramló szemcsés anyagok bedugulásának és folyamatos kiáramlásának vizsgálata DEM szimulációkkal és ezeket alátámasztó kísérletekkel.

- (a) DEM szimulációk segítségével megvizsgáltam a szemcsés anyagok silóból való kiáramlása közben keletkező bedugult konfigurációkat gömb alakú és elnyújtott alakú szemcsék esetén egyaránt és a szimulációk alapján megmutattam, hogy a kísérletekkel összhangban, a nyílás fölött kialakuló bedugult struktúra alakja átlagosan elnyújtott félgömb alakú, viszont az egyes eseteket vizsgálva ritkább részeket, a nyílástól távolabbi üres részeket fedezhetünk fel. Kifejlesztettem egy olyan háromszögelési módszert, mely lehetővé teszi a bedugult

struktúra nyílás fölötti felületének pontos meghatározását. DEM szimulációk segítségével megmutattam, hogy elnyújtott alakú részecskék esetén előfordul, hogy a nyílás körül vízszintesen rendeződő részecskék falat alkotnak és ezt a szerkezetet zárja le a gömbök esetén megfigyelhető félgömb alakú szerkezet. Megmutattam, hogy a bedugult struktúra egy elsődleges, kétdimenziós ívből áll, melyet másodlagos ívek támasztanak meg. A szemcsék közötti erők alkotta hálózat egy hagymahéj-jellegű réteges szerkezetet mutat, melyben kupolaszerű struktúrák láthatók fél-ellipszoid alakú, koncentrikusan egymás köré épülő rétegekben. A siló nyílásától távolabb eső kupolák nagyobb erőket hordoznak és azokat a nyílástól távol a siló oldalsó vagy alsó falára terhelik a Janssen effektushoz hasonlóan. Ezen eredményeket a [P3] publikáció foglalja össze.

- (b) DEM szimulációk segítségével megvizsgáltam a szemcsék keménységének és súrlódásának a silóból való kifolyásra gyakorolt hatását. A kísérleti eredményekkel összhangban megmutattam, hogy a szemcsék közötti súrlódás változtatása nagyobb hatással bír a puha szemcsék esetén, mint kemény szemcsék esetén. Megmutattam, hogy puha szemcsék esetén nagy súrlódás konstans folyási rátát eredményez (szemcsés viselkedés), míg kisebb súrlódási együtthatók esetén a folyási ráta fokozatosan csökkenő viselkedést mutat. Megmutattam továbbá, hogy a kemény szemcsék viselkedése ettől eltérő, a folyási ráta minden esetben konstans, a súrlódásmentes szemcsék speciális esetét leszámítva. Ezen eredményeket a [P4] publikáció foglalja össze.

Irodalmi hivatkozások listája

- [Ahn08] H. Ahn, Z. Başaranoglu, M. Yilmaz, A. Buğutekin, and M. Z. Gül, “Experimental investigation of granular flow through an orifice”, *Powder Technology*, **186**, 65–71 (2008).
- [Bagnold54] R. A. Bagnold, *Physics of Blown Sand and Desert Dunes*, Methuen, London (1954).
- [Bak96] P. Bak, *How nature works: the science of self-organized criticality*, Springer Science & Business Media, New York (1996).
- [Balevičius07] R. Balevičius, R. Kačianauskas, Z. Mroz, and I. Sielamowicz, “Microscopic and macroscopic analysis of granular material behaviour in 3D flat-bottomed hopper by the discrete element method”, *Archives of Mechanics*, **59**, 231–257 (2007).
- [Balevičius11] R. Balevičius, I. Sielamowicz, Z. Mroz, and R. Kačianauskas, “Investigation of wall stress and outflow rate in a flat-bottomed bin: A comparison of the DEM model results with the experimental measurements”, *Powder Technology*, **214**, 322–336 (2011).
- [Baule18] A. Baule, F. Morone, H. J. Herrmann, and H. A. Makse, “Edwards statistical mechanics for jammed granular matter”, *Reviews of Modern Physics*, **90**, 015006 (2018).
- [Blumenfeld06] R. Blumenfeld and S. F. Edwards, “Geometric partition functions of cellular systems: Explicit calculation of the entropy in two and three dimensions”, *The European Physical Journal E*, **19**, 23–30 (2006).

-
- [deGennes99] P.-G. de Gennes, “Granular matter: a tentative view”, *Reviews of Modern Physics*, **71**, S374 (1999).
- [Edwards89] S. F. Edwards and R. B. S. Oakeshott, “Theory of powders”, *Physica A*, **157**, 1080–1090 (1989).
- [Edwards94] S. F. Edwards, “The role of entropy in the specification of a powder”, in A. Mehta (Editor), “Granular Matter: an interdisciplinary approach”, pp. 121–140, Springer (1994).
- [Edwards98] S. F. Edwards and D. V. Grinev, “Statistical mechanics of vibration-induced compaction of powders”, *Phys. Rev. E*, **58**, 4758–4762 (1998).
- [Edwards02] S. F. Edwards and D. V. Grinev, “Granular materials: towards the statistical mechanics of jammed configurations”, *Advances in Physics*, **51**, 1669–1684 (2002).
- [Garcimartín10] A. Garcimartín, I. Zuriguel, L. A. Pugnaloni, and A. Janda, “Shape of jamming arches in two-dimensional deposits of granular materials”, *Physical Review E*, **82**, 031306 (2010).
- [Han08] Y. Han, Y. Shokef, A. M. Alsayed, P. Yunker, T. C. Lubensky, and A. G. Yodh, “Geometric frustration in buckled colloidal monolayers”, *Nature*, **456**, 898–903 (2008).
- [Harth15] K. Harth, A. Mauney, and R. Stannarius, “Frustrated packing of spheres in a flat container under symmetry-breaking bias”, *Physical Review E*, **91**, 030201 (2015).
- [Hidalgo13] R. C. Hidalgo, C. Lozano, I. Zuriguel, and A. Garcimartín, “Force analysis of clogging arches in a silo”, *Granular Matter*, **15**, 841–848 (2013).
- [Jaeger92] H. M. Jaeger and S. R. Nagel, “Physics of the granular state”, *Science*, **255**, 1523–1531 (1992).
- [Jaeger96] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer, “Granular solids, liquids, and gases”, *Reviews of Modern Physics*, **68**, 1259 (1996).
- [Mankoc07] C. Mankoc, A. Janda, R. Arevalo, J. Pastor, I. Zuriguel, A. Garcimartín, and D. Maza, “The flow rate of granular materials through an orifice”, *Granular Matter*, **9**, 407–414 (2007).
- [Mehta89] A. Mehta and S. F. Edwards, “Statistical mechanics of powder mixtures”, *Physica A*, **157**, 1091–1100 (1989).
- [Mehta90] A. Mehta and S. F. Edwards, “A phenomenological approach to relaxation in powders”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **168**, 714–722 (1990).
- [Nedderman82] R. Nedderman, U. Tüzün, S. Savage, and G. Houlsby, “Flow of granular materials-I. Discharge rates from hoppers”, *Chem. Eng. Sci.:(United Kingdom)*, **37** (1982).

-
- [Nedderman05] R. M. Nedderman, *Statics and kinematics of granular materials*, Cambridge University Press, New York (2005).
- [Oldal12] I. Oldal, I. Keppler, B. Csizmadia, and L. Fenyvesi, “Outflow properties of silos: The effect of arching”, *Advanced Powder Technology*, **23**, 290–297 (2012).
- [Pacheco-Martinez08] H. Pacheco-Martinez, H. J. Van Gerner, and J. Ruiz-Suárez, “Storage and discharge of a granular fluid”, *Physical Review E*, **77**, 021303 (2008).
- [Staron12] L. Staron, P.-Y. Lagrée, and S. Popinet, “The granular silo as a continuum plastic flow: The hour-glass vs the clepsydra”, *Physics of Fluids*, **24**, 103301 (2012).
- [Tang11] J. Tang and R. P. Behringer, “How granular materials jam in a hopper”, *Chaos*, **21**, 041107 (2011).
- [Tang16] J. Tang and R. P. Behringer, “Orientation, flow, and clogging in a two-dimensional hopper: Ellipses vs. disks”, *Chaos*, **114**, 34002 (2016).

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

- [P1] S. Lévay, D. Fischer, R. Stannarius, B. Szabó, T. Börzsönyi, and J. Török, “Frustrated packing in a granular system under geometrical confinement”, *Soft Matter*, **14**, 396–404 (2018).
- [P2] S. Lévay, D. Fischer, R. Stannarius, E. Somfai, T. Börzsönyi, L. Brendel, and J. Török, “Interacting jammed granular systems”, *Physical Review E*, **103**, 042901 (2021). A cikkhez kapcsolódó kiegészítő videók itt és itt érhetők el.
- [P3] J. Török, S. Lévay, B. Szabó, E. Somfai, S. Wegner, R. Stannarius, and T. Börzsönyi, “Arching in three-dimensional clogging”, *EPJ Web of Conferences*, **140**, 03076 (2017). Itt található az eredményeket összefoglaló videó absztrakt.
- [P4] T. Pongó, V. Stiga, J. Török, S. Lévay, B. Szabó, R. Stannarius, R. C. Hidalgo, and T. Börzsönyi, “Flow in an hourglass: particle friction and stiffness matter”, *New Journal of Physics*, **23**, 023001 (2021). Itt található az eredményeket összefoglaló videó absztrakt.

További tudományos közlemények

- [O1] S. Lévay and J. Török, “Multiple shear bands in granular materials”, *EPJ Web of Conferences*, **140**, 03084 (2017).
- [O2] T. Finger, F. von Rüling, S. Lévay, B. Szabó, T. Börzsönyi, and R. Stannarius, “Segregation of granular mixtures in a spherical tumbler”, *Physical Review E*, **93**, 032903 (2016).