

Válasz KUN FERENCNEK

„Hőmérsékleti egyensúlytól távoli statisztikus fizikai rendszerek
numerikus modellezése”

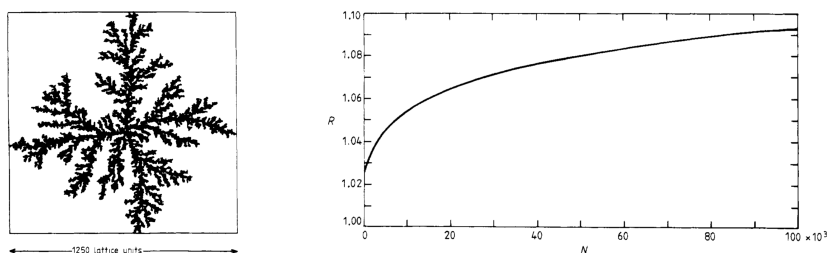
című MTA doktori értekezésem bírálata

Mindenek előtt nagyon köszönöm Kun Ferencnek az értekezésem igen gondos áttanulmányozását. A feltett kérdéseire az alábbiakban válaszolok.

(1) A nemlineáris növekedési modell (dielektromos letörési modell) egyik érdekes alkalmazása a szakirodalomban a heterogén anyagokban keletkező repedések növekedésének, illetve struktúrájának vizsgálata volt. Számítógépes szimulációval azt találták, hogy a repedések fraktáldimenziója az η paraméter és a külső terhelés típusa (húzás, nyírás, ...) mellett a diszkrétizációhoz használt rács típustól, sőt adott rácsnál a szomszédsági viszonyok kezelésétől is függött (például: J. Kertész, *Dielectric breakdown and single crack models*, in H. J. Herrmann and S. Roux (eds.), *Statistical models for the fracture of disordered media*, North Holland, Amsterdam). Mivel szimulációkat csak viszonylag kis rendszereken lehetett végezni, kérdéses volt, hogy a rácsjellemzők hatását véges méret effektus okozza. A hatékonyabb szimulációs módszerek használatával, nagyobb méretű rendszerek szimulációjával, hogyan sikerült tisztázni a nemlineáris növekedés ilyen jellegű problémáit?

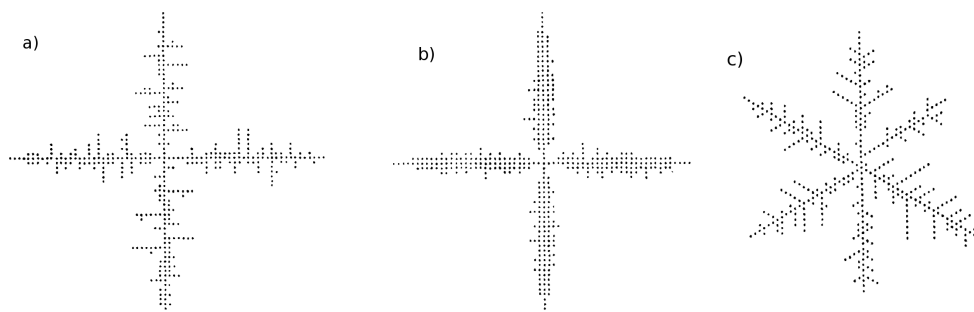
Jogos a probléma felvetése: a folytonos fázisátalakulások univerzalitás osztályaira gondolva azt várnánk, hogy egy rendszer lényeges tulajdonságait (mint például a fraktáldimenziót) csak kis számú tényező határozza meg: így a rendszer dimenziója, alapvető szimmetriája (mint például a repedések esetén a terhelés típusa), valamint egyéb „input” exponensek (például a kölcsönhatás hosszú távú lecsengése, vagy az adott kérdésben az η paraméter); egyéb körülmények, például a kölcsönhatás mikroszkopikus részletei vagy a rács típusa pedig irrelevánsak.

Az említett rácsról való függés már egyszerű DLA esetén is megnyilvánul [1], például 2D négyzetrács esetén erősen anizotróp fűrtök jelennek meg (1. ábra).



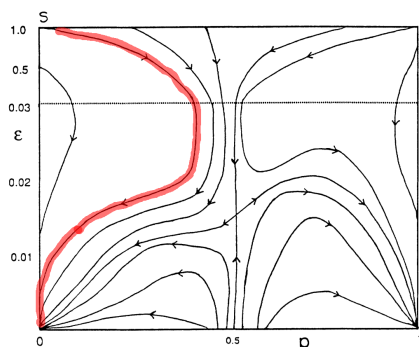
1. ábra: DLA fűrtök anizotrópiája négyzetrácson. A baloldali panel egy 100 000 részecskéből álló fűrtöt mutat, amelyben jól látszik a vízszintes és függőleges rácsirányok preferálódása. A jobboldali panel a fűrtöknek a 45°-os ill. rácsirányú vetítésekor kapott „árnyékok” hosszúságának arányát mutatja a részecskeszám függvényében. Az 1-től való eltérés kvantitatívan mutatja az anizotrópiát. [1]

A probléma azonban ennél súlyosabb: aszimptotikusan – amely a sörétzaj csökkentésével már kisebb, numerikusan könnyebben hozzáférhető részecskeszám mellett is tapasztalható [2] – a fűrtök rácsirányú dendritekből állnak (2. ábra). A fraktáldimenzió, amelyet a dendritek hosszúságának ill. szélességének részecskeszám szerinti skálázásából kaphatunk, $D = 1.5$ -nek adódik [3], szemben a $D \approx 1.71$ izotróp értékkel.



2. ábra: Anizotróp DLA fűrtök, amelyekre az aszimptotikus viselkedést zajcsökkentéssel segítették elő: (a) négyzetrácson $H = 20$ zajcsökkentés mellett, (b) szintén négyzetrácson $H = 400$ esetén, és (c) háromszögrácson $H = 40$ mellett. [2]

Történtek kísérletek a négyzetrácson a rácsirány–átlós irány anizotrópia kiegyenlítésére [4]. Az eredeti DLA rácsmodelljét úgy változtatták, hogy a fűrthöz átlós irányból is ragadhatnak részecskék, méghozzá p valószínűséggel, ahol $0 \leq p \leq 1$ a modell paramétere. A zajcsökkentés és p függvényében valós térbeli renormálás útján vizsálták a modell tulajdonságait. Azt találták, hogy az izotróp alaknak egy instabil fixpont felel meg, amelyben p értéke nem sokkal tér el $1/2$ -től. A renormálás-áramlás diagramm (3. ábra) arra is utal, hogy mekkora az effektív anizotrópia egy fűrt növekedése során: az eredeti modell zajcsökkentés nélkül az S pontból indul. Egyre nagyobb skálán nézve (amit effektíven úgy is értelmezhetünk, hogy egyre nagyobb fűrtökre) a pirossal jelölt trajektóriát járja be a paraméterterben, ami során először megközelíti az izotróp instabil fixpontot annak vonzó iránya felől, majd a stabil anizotróp fixpontba konvergál. Ez összhangban van azzal az említett numerikus észle-



3. ábra: Valós tér renormálási áramlás az ε (inverz zajcsökkentés) és p diagonális iránypreferencia függvényében. [4]

léssel, hogy közepes méretű fürtök közel izotrópok, és csak nagy méret esetén (vagy ha már eredetileg is jelentős zajcsökkentésből indultunk ki) mutatkozik az anizotrópia.

Elmondhatjuk, hogy a DLA esetén a rács okozta anizotrópia nem kis méretű szimulációkban látható tranziens effektus, hanem ellenkezőleg, elsősorban nagy méreteknél mutatkozik meg, és aszimptotikusan releváns. Növekedési folyamatokban az instabilitásoknak nagyon nagy szerepük van, amelyek hatására kicsi (mint például rács-anizotrópia hatására kialakult) perturbációk felerősödhetnek, és dominánssá válhatnak. Esetünket úgy interpretálhatjuk, hogy a rácsirányok enyhe geometriai preferenciája a Mullins-Sekerka instabilitás miatt válik dominánssá. (Vannak olyan esetek is, amikor az anizotrópia éppen elnyom egy instabilitást, mint például egykristály dendritek növekedésekor a csúcs kettéhasadásának instabilitását.) A gyakorlatban sokszor az izotróp viselkedést kívánjuk vizsgálni (például kísérletekben ez makroszkópikus, polikristályos anyagot jelent), amihez a megfelelő numerikus megközelítés a rácsmentes szimuláció, amit a disszertációban használtam. Ebben a kontextusban kiemelném a rácsmentes DLA-ra kidolgozott zajcsökkentés módszerét (5. fejezet), valamint a rácsmentes, mintavételezésen alapuló nemlineáris DBM modellt (6. fejezet).

(2) A mérés technika nagyon sokat fejlődött az elmúlt két évtizedben a szemcsés anyagok területén is. Fotoelasztikus anyagból készült részecskék használatával az erőláncok megjeleníthetők és bizonyos mértékű kvantitatív kiértékelésükre is van lehetőség. Történtek-e laboratóriumi mérések arra vonatkozóan, hogy az erőláncok statisztikájára, az erőláncok alapján definiált részecske klaszterek méreteloszlására vonatkozó elméleti jóslataikat kísérletileg is megerősítsék?

A szemcsés és azokhoz hasonló rendszerek erőhálózatait valóban többen vizsgálták kísérleti úton az utóbbi időben. A fotoelasztikus mérés technikán kívül például vizsgáltak sűrődásmentes folyadékcseppekből álló háromdimenziós konfigurációkat [5], amelyekben a részecskék közötti erőkre a kontaktusok méretéből következtettek (a fluorescens nanorészecskékkel jelölt folyadék-folyadék felületet konfokális mikroszkópiai úton térképezték fel).

Egy másik újonnan fejlesztett módszer segítségével nagy felbontású felvételek alapján következtetnek az erőhálózatra [6]. Ezen módszer előnye, hogy nem igényel speciális anyagot (fotoelasztikus vagy folyadékcsepp), szükséges viszont hozzá olyan felbontású felvétel, amelyen az egyes részecskék deformációját észlelni lehet. A deformálatlan és a deformált rendszerről készült felvételek összehasonlításával következtetnek az egyes részecskék deformációjára, ebből a részecskéken belüli mechanikai feszültségre, abból pedig becsülik a részecskék közötti erőket. Végül inverz lineáris problémaként megkeresik azt az erőhálózatot, amely kielégíti az erő- és forgatónyomaték egyensúlyt minden részecskére, és egy megfelelő norma szerint legközelebb áll az előzőleg kapott zajos becsléshez.

Nem tudok arról, hogy eddig valaki elvégezte volna az általunk javasolt perkoláció jellegű analízist kísérleti úton kapott erőhálózatra. Bízom benne azonban, hogy a mérés technika gyors fejlődésének köszönhetően erre a közeljövőben sor kerülhet.

(3) A statikus erőhálózat alapján definiált részecskeklaszterek skálázási exponensei a rendszer számos paraméterétől függetlennek bizonyultak. Mi történik akkor, ha a rendszer nem izotróp, például ha az erőláncok egy kétdimenziós homokdombban jönnek létre a gravitációs erő hatására, vagy egy kétdimenziós cellában, amit nyírásnak teszünk ki? Hogyan változnak a skálaexponensek?

Az anizotrópia valóban okoz szimmetriatörést, aminek következtében akár meg is változhatnak a skálaexponensek.

Munkatársaim vizsgálták a statikus erőhálózatok skálázási tulajdonságait nyírási feszültség alatt levő rendszerekben [7], és azt találták, hogy a skálázás *gyengén anizotróp*. Ez azt jelenti, hogy például ha definiálunk egy korrelációs távolságot (egy adott f küszöbnél nagyobb erők által definiált fürtök méretét), akkor az izotróp esetben kapott $\xi \sim |f - f_c|^{\nu}$ skálázás helyett a nyírási deformáció kijelölt két egymásra merőleges irányt (2D-ben), amelyekben különböző a korrelációs hossz:

$$\xi_{\max} \approx \xi_{\max}^{(0)} |f - f_c|^{\nu}, \quad \text{illetve} \quad \xi_{\min} \approx \xi_{\min}^{(0)} |f - f_c|^{\nu}, \quad (1)$$

de azonos a ν skálaexponens, amely megegyezik az izotróp rendszerben kapottal. Tehát a két irányban csak a prefaktor különbözik, azaz ha a rendszert a megfelelő irányban $r = \xi_{\min}/\xi_{\max}$ arányban átskálázzuk (ahol r csak a nyírási feszültségtől függ), akkor az izotróp rendszerrel azonos esetet kapjuk vissza. Ez a viselkedés tapasztalható a kis polidiszperzitású közel szabályos háromszögrácsot alkotó konfigurációknál, a nagy polidiszperzitású rendezetlen rendszereknél, a torlódási átmenettől távol és ahhoz közel is.

Tehát a nyírás által okozott anizotrópia nem változtatja meg a statikus erőhálózatok univerzalitás osztályát.

(4) Említi, hogy az erőhálózat skálaexponensei eltérnek a perkoláció esetén kapott értékektől, amelynek oka, hogy a kontaktus erők között hosszútávú korrelációk jönnek létre. Történtek-e próbálkozások arra, hogy ezeket a hosszútávú korrelációkat kvantitatív módon jellemezzék? Hogyan befolyásolja a rendezetlenség (polidiszperzitás) mértékének növelése ezeket a korrelációkat?

Súrlódásmentes részecskékre végzett mérések [5] azt jelölték meg konklúzióként, hogy az erők korrelációja exponenciálisan cseng le; a karakterisztikus hossz kb. $10\langle d \rangle$, amely uniaxiális nyomás hatására csökken (egy pontosabban nem specifikált nyomás hatására $7\langle d \rangle$ -re). Az eredmények (pl. [5] Fig.2) közelebbi vizsgálata azonban arra enged következtetni, hogy a lecsengés karakterisztikus távolsága függ a küszöberőtől, azaz a mért mennyiség csak egy adott küszöberőnél nagyok erők által definiált fürtök véges méretére utal, és nem jelzi azt, hogy az erőhálózatban csak egy rövid távú, jól definált karakterisztikus hosszúságú korreláció állna fenn.

Az erőhálózaton belüli korrelációk vizsgálatával szorosan összefügg az a kutatási irányvonal is, amely erőláncokat, azaz viszonylag nagy erőket hordozó kontaktusokkal összekötött részecskék közel egydimenziós struktúráit próbálja meghatározni. Ezek a megközelítések tipikusan egy véges méretskálát eredményeznek, például exponenciális méreteloszlás

következményeként [8]. Az erőláncok definíciója sokszor esetleges, vagy tartalmaz esetlegesen megválasztott paramétereket, és ahogy az előző bekezdésben is jeleztem, általában visszavezethető egy adott küszöberőnél nagyok erők által definiált fűrtök véges méretétre. Vannak olyan eredmények is, amelyek szerint viszont az erőláncok méreteloszlása hatványfüggvényt követ [9]; ez hosszú távú korrelációkra enged következtetni.

A polidiszperzitás valóban erősen hozzájárul a geometriai és topológiai rendezetlenséghez, különösen 2D-ban (vizuálisan ez jól látszik például a 39. ábrán). Ennek ellenére azt találtuk, hogy a polidiszperzitás változtatása nincs hatással a skálázási exponensekre és a skálafüggvényre: a erősen polidiszperz (20%) konfigurációk ugyanúgy viselkedtek, mint a szabályos háromszögrács Edwards sokasága. Azt várom tehát, hogy a polidiszperzitás nem változtatja meg a korrelációk alapvető tulajdonságait (hosszú távú-e a lecsengés), de a nem univerzális előfaktorok viszont erősen függhetnek tőle.

A polidiszperzitással kapcsolatban annyit tennék még hozzá, hogy az általánosan elfogadott vélekedés szerint 3D-ban ennek sokkal kisebb a jelentősége, monodiszperz rendszer is lehet teljesen rendezetlen. Azt találtuk azonban, hogy nyírás hatására monodiszperz rendszerekben az áramlási vonalak mentén 1D-s láncok alakulnak ki, amit a párkorrelációs függvény lassú lecsengése is mutat [10]. Ezt a rendezettséget már kis méretű polidiszperzitás (5% alatt) is megszünteti. A nyírás hatására kialakuló kristályosodással, valamint a polidiszperzitás erre való hatásával jelenleg egy MSc diplomamunka keretében foglalkozunk.

(5) A szemcsés anyagokban az impulzusterjedésre vonatkozó munkái alapján lát-e lehetőséget arra, hogy egy impulzusra adott válasz akusztikus mérésével kvantitatív információt nyerjünk az erőhálózat struktúrájáról?

A roncsolásmentes diagnosztika a szemcsés anyagok körében is kíváncsú kísérleti megközelítés. Az anyag belső struktúráját különösen 3D-ban nem egyszerű vizsgálni. Az olyan megközelítések, mint például az azonos törési mutatójú de fluorescens folyadékkal körülvett átlátszó részecskék lézeres pásztázása [11] meglehetősen leszűkítik a lehetséges vizsgálható rendszereket, az NMR vagy Röntgen CT alapú mérések (például [10, 12]) is valamennyire resztriktívek és meglehetősen költségesek. Ráadásul, mivel ezen módszerek a részecskék pozícióját detektálják, az erőhálózatra csak közvetett, pontatlanabb becslést tudnak adni, pedig a rendszer mechanikai tulajdonságait elsősorban az erőhálózat határozza meg.

Ezek alapján annak idején nagy várakozással tekintettünk a 13. fejezetben részletezett szemcsés hullámterjedési vizsgálatainkra. Azt vártuk, hogy mivel az erőláncokban gyorsabban terjednek a rezgési hullámok a részecskék közötti nemlineáris (Hertz) kölcsönhatás miatt, az erőláncok karakterisztikus hosszának meg kell jelennie a transzmissziós spektrumban a megfelelő hullámhossznál. Viszont skálázási jelenségeket tapasztaltunk, vagyis karakterisztikus mennyiségek (távolság, idő) hiányát. Az erőhálózat közvetlen vizsgálata alapján (11. fejezet), amit időrendben később végeztünk, utólag visszatekintve ez nem meglepő.

Egyszerű következtetéseket mindenképpen tehetünk, így a repülési idő-hangsebességből és a részecskék rugalmassági Young modulusából következtethetünk a nyomásra (53. ábra); ennek például földrengéshullámok szemcsés rétegekben történő terjedésénél lehet jelentősége. Az is várható, hogy izolált, nagy méretű inhomogenitásokra (pl. idegen anyag) is lehet következtetni a hullámok ezeken történő szórásából.

Érdekes fejlemény, hogy vizsgálták kísérleti úton az erőhálózat dinamikáját (2D fotoelasztikus módszerrel, valamint piezoelektromos nyomássonzával) hullámterjedés közben [13, 14]. Találtak példát arra, hogy egy statikus állapotban nyitott kontaktus a vibrációs gerjesztés alatt periodikusan záródik (viszonylag kicsi forrás hangnyomás esetén is), tehát az erőhálózat topológiája is változik, ami a nemlineáris viselkedés egy lényeges forrása. Vizsgálták továbbá az egyes részecskék rezgési amplitudója és a lokális környezet különböző tulajdonságai közötti korrelációkat is.

Viszont olyan jól felhasználható látványos eredményről, mint például amely következnie tudna egy átmenő akusztikus jelből a skálázási exponensekre, nem tudok. Reményteljes azonban, hogy az akusztikus hullámok terjedését szemcsés anyagokban több csoport is aktívan tanulmányozza, például friss kutatások vizsgálták a koherens impulzus szélesedésének és a szórási mechanizmusok kapcsolatát [15].

(6) A dolgozatban bemutatott legújabb munkája a táguló térben lezajló növekedési folyamatokkal foglalkozik. Ha az ehhez kapcsolódó egyetlen publikációt nem tekintjük, kicsit talán meglepő, hogy a dolgozat alapjául szolgáló közlemények között a legfrissebb 2007-ben jelent meg. Milyen irányokban folytatta tovább a dolgozatban összefoglalt kutatásait?

Elsősorban szemcsés anyagokkal foglalkoztam, leginkább a nyírás hatására kialakuló áramlásokkal. Vizsgáltuk többek között elnyújtott részecskék nyírás hatására történő orientációját [16, 17], a nyírás és a nyírási orientáció kölcsönhatásának a szemcsés anyag sűrűségére, a nyírási zónára, valamint a párkorrelációs függvényre gyakorolt hatását [10, 18], valamint másodlagos áramlásokat [12]. Súrlódásmentes részecskékre pedig (amelyek például kolloidokat vagy nedves habot modelleznek) meghatároztuk a lineáris rugalmasság határait [19].

A 2016 februárjában kezdődő OTKA (K 116036) pályázatomban is a szemcsés témakörre alapul: nem gömbszerű részecskék áramlását és reológiáját fogjuk vizsgálni, különös tekintettel az alacsony szimmetriájú részecskék áramlására, elnyújtott részecskékből álló rendszerek reológiájának kvantitatív leírására, valamint szintén az elnyújtott részecskékből álló rendszerekben létrejövő másodlagos áramlások kiváltó okainak vizsgálatára.

Budapest, 2016. február 1.

Somfai Ellák

Hivatkozások

- [1] Meakin P: The structure of two-dimensional Witten-Sander aggregates; J. Phys. A-Math. Gen. **18**, L661-L666 (1985)

- [2] Kertész J, Vicsek T: Diffusion-limited aggregation and regular patterns - fluctuations versus anisotropy; *J. Phys. A-Math. Gen.* **19**, L257-L262 (1986)
- [3] Meakin P, Ball RC, Ramanlal P, Sander LM: Structure of large two-dimensional square-lattice diffusion-limited aggregates - approach to asymptotic-behavior; *Phys. Rev. A* **35**, 5233-5239 (1987)
- [4] Barker PW, Ball RC: Real-space renormalization of diffusion-limited aggregation; *Phys. Rev. A* **42**, 6289-6292 (1990)
- [5] Zhou J, Long S, Wang Q, Dinsmore AD: Measurement of forces inside a three-dimensional pile of frictionless droplets; *Science* **312**, 1631-1633 (2006)
- [6] Hurley R, Marteau E, Ravichandran G, Andrade JE: Extracting inter-particle forces in opaque granular materials: Beyond photoelasticity; *J. Mech. Phys. Solids* **63**, 154-166 (2014)
- [7] Ostojic S, Vlugt TJH, Nienhuis B: Universal anisotropy in force networks under shear; *Phys. Rev. E* **75**, 030301 (2007)
- [8] Peters JF, Muthuswamy M, Wibowo J, Tordesillas A: Characterization of force chains in granular material; *Phys. Rev. E* **72**, 041307 (2005)
- [9] Sun Q, Jin F, Liu J, Zhang G: Understanding force chains in dense granular materials; *Int. J. Mod. Phys. B* **24**, 5743-5759 (2010)
- [10] Wegner S, Stannarius R, Boese A, Rose G, Szabó B, Somfai E, Börzsönyi T: Effects of grain shape on packing and dilatancy of sheared granular materials; *Soft Matter* **10**, 5157-5167 (2014)
- [11] Dijkstra JA, Rietz F, Lorincz KA, van Hecke M, Losert W: Invited Article: Refractive index matched scanning of dense granular materials; *Rev. Sci. Instrum.* **83**, 011301 (2012)
- [12] Wortel G, Börzsönyi T, Somfai E, Wegner S, Szabó B, Stannarius R, van Hecke M: Heaping, secondary flows and broken symmetry in flows of elongated granular particles; *Soft Matter* **11**, 2570-2576 (2015)
- [13] Owens ET, Daniels KE: Sound propagation and force chains in granular materials; *EPL* **94**, 54005 (2011)
- [14] Bassett DS, Owens ET, Daniels KE, Porter MA: Influence of network topology on sound propagation in granular materials; *Phys. Rev. E* **86**, 041306 (2012)
- [15] Langlois V, Jia X: Sound pulse broadening in stressed granular media; *Phys. Rev. E* **91**, 022205 (2015)

- [16] Börzsönyi T, Szabó B, Törös G, Wegner S, Török J, Somfai E, Bien T, Stannarius R: Orientational order and alignment of elongated particles induced by shear; Phys. Rev. Lett. **108**, 228302 (2012)
- [17] Börzsönyi T, Szabó B, Wegner S, Harth K, Török J, Somfai E, Bien T, Stannarius R: Shear-induced alignment and dynamics of elongated granular particles; Phys. Rev. E **86**, 051304 (2012)
- [18] Szabó B, Török J, Somfai E, Wegner S, Stannarius R, Böse A, Rose G, Angenstein F, Börzsönyi T: Evolution of shear zones in granular materials; Phys. Rev. E **90**, 032205 (2014)
- [19] Boschan J, Vagberg D, Somfai E, Tighe BP: Beyond linear elasticity: Jammed solids at finite shear strain and rate; arXiv:1601.00068 (2016)