VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS
STATYBOS FAKULTETAS
GELŽBETONINIŲ IR MŪRINIŲ KONSTRUKCIJŲ KATEDRA

Gvidas Pocius

BETONO UŽPILDŲ MIŠINIO STRUKTŪROS TYRIMAS

STRUCTURE ANALYSIS OF CONCRETE AGGREGATES MIXTURE

Baigiamasis magistro darbas

Statinių konstrukcijų studijų programa, valstybinis kodas 621H21001
Pastatų konstrukcijų specializacija
Statybos inžinerija 02T

Vilnius, 2012

VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS
STATYBOS FAKULTETAS
GELŽBETONINIŲ IR MŪRINIŲ KONSTRUKCIJŲ KATEDRA

TVIRTINU
Katedros vedėjas

_____
(Parašas)
Juozas Valivonis
(Vardas, pavardė)

_____
(Data)

Gvidas Pocius

BETONO UŽPILDŲ MIŠINIO STRUKTŪROS TYRIMAS

STRUCTURE ANALYSIS OF CONCRETE AGGREGATES MIXTURE

Baigiamasis magistro darbas

Statinių konstrukcijų studijų programa, valstybinis kodas 621H21001
Pastatų konstrukcijų specializacija
Statybos inžinerija 02T

Vadovas doc. dr. Robertas Balevičius _____ _____
(Moksl. laipsnis/pedag. vardas, vardas, pavardė) (Parašas) (Data)

Konsultantas _____ _____ _____
(Moksl. laipsnis/pedag. vardas, vardas, pavardė) (Parašas) (Data)

Konsultantas _____ _____ _____
(Moksl. laipsnis/pedag. vardas, vardas, pavardė) (Parašas) (Data)

Lietuvių kalbos konsultantas lekt. Lina Rutkienė _____ _____
(Moksl. laipsnis/pedag. vardas, vardas, pavardė) (Parašas) (Data)

Vilnius, 2012

VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS
STATYBOS FAKULTETAS
GELŽBETONINIŲ IR MŪRINIŲ KONSTRUKCIJŲ KATEDRA

TVIRTINU
Katedros vedėjas

_____
(Parašas)

_____
(Vardas, pavardė)

_____
(Data)

Technologijos mokslų sritis
Statybos inžinerijos mokslo kryptis
Statybos inžinerijos studijų kryptis
Statinių konstrukcijų studijų programa, valstybinis kodas 621H21001
Pastatų konstrukcijų specializacija

BAIGIAMOJO MAGISTRO DARBO UŽDUOTIS

…..……..Nr. .....
Vilnius

Studentui Gvidui Pociui

Baigiamojo darbo tema: Betono užpildų mišinio struktūros tyrimas

patvirtinta 2012 m. vasario 23 d. dekano įsakymu Nr. 92ST

Baigiamojo darbo užbaigimo terminas 2012 m. birželio 1 d.

BAIGIAMOJO DARBO UŽDUOTIS:

Ištirti betono užpildams būdingomis fizinėmis-mechaninėmis savybėmis pasižyminčio sferinių dalelių mišinio struktūrą ir elgseną kvazistatinio būvio sąlygomis, atsižvelgiant į mišinio makro- ir mikrorodiklius. Analizei taikyti diskrečiųjų elementų metodą.

Baigiamojo darbo rengimo konsultantai:

.....

.....
(Vardas, pavardė, mokslinis laipsnis ir vardas)

Vadovas ..... doc. dr. Robertas Balevičius
(Parašas)

Užduotį gavau

.....
(Parašas)

…….
(Vardas, pavardė)

.....
(Data)

Vilniaus Gedimino technikos universitetas

Statybos fakultetas

Gelžbetoninių ir mūrinių konstrukcijų katedra

ISBN ISSN

Egz. sk.

Data

Baigiamasis magistro darbas

BETONO UŽPILDŲ MIŠINIO STRUKTŪROS TYRIMAS

Gvidas Pocius

Kalba

[X] lietuvių

[ ] užsienio

Anotacija

Baigiamajame magistro darbe nagrinėjama dalelių mišinio dinaminė elgsena kvazistatiniame pusiausvyros būvyje. Pagrindinis dėmesys skiriamas mišinio makro- ir mikrobūsenai charakterizuoti.

Darbo tikslas – ištirti betono užpildams būdingomis fizinėmis-mechaninėmis savybėmis pasižyminčio sferinių dalelių mišinio struktūrą ir elgseną fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis.

Dalelių mišinio elgsenos dinaminis modeliavimas atliktas diskrečiųjų elementų metodu (DEM). Modeliuoti viendispersis ir daugiadispersis mišiniai. Pagal gautus rezultatus, mišinio makrobūsena charakterizuojama struktūros užimama tūrio dalimi (tankumu), dalelių kontaktinėmis jėgomis bei koordinacijos skaičiumi. Atskirų mišinio dalelių mikrobūsena charakterizuojama taikant unikalų geometrinį metodą, sukurtą pagal Hamiltono mechanikos, bendrosios reliatyvumo teorijos ir kvantinės gravitacijos teorijų principus. Metodui realizuoti parengtas kompiuterinis algoritmas patvirtino iškeltas hipotezes.

Viendispersių ir daugiadispersių dalelių mišinių mikrobūsenų tyrimas yra ypatingos inžinerinės svarbos, kadangi struktūros formavimosi suvokimas ne tik leidžia projektuoti patvarias šiuolaikines gelžbetonines konstrukcijas, bet ir yra žingsnis naujos kartos konstrukcijų, paremtų savaiminės organizacijos biologinėse sistemose koncepcija, plėtotėje. Atsiribojant nuo konkretaus materialaus pritaikymo, tyrimo rezultatai gali turėti fundamentalios reikšmės Visatos suvokimui.

Darbo apimtis – 128 p. teksto be priedų, 105 paveikslai, 5 lentelės, 166 bibliografiniai šaltiniai. Atskirai pridedami darbo priedai.

Reikšminiai žodžiai: viendispersis ir daugiadispersis dalelių mišiniai, makrobūsena, mikrobūsena, kvazistatinis pusiausvyros būvis, diskrečiųjų elementų metodas, Hamiltono mechanika, reliatyvumo teorija, magnetizmas, kvantinė gravitacija.

Vilnius Gediminas Technical University

Faculty of Civil Engineering

Dept. of Reinforced Concrete and Masonry Structures

ISBN ISSN

Copies No.

Date

Master of Science thesis

STRUCTURE ANALYSIS OF CONCRETE AGGREGATES MIXTURE

Gvidas Pocius

Thesis language

[X] lithuanian

[ ] foreign

Annotation

In the Master Thesis an investigation of dynamical behavior of the mixture of particles under quasistatic equilibrium conditions was performed. It focuses on a characterization of the macro- and microstate of the mixture.

The purpose of the research is to explore structure and behavior of the mixture of spherical particles, characterized by the typical physical-mechanical properties of concrete aggregates, in a fluctuating environment under quasistatic equilibrium conditions.

Dynamic simulation of the behavior of the particles was performed via the discrete element method (DEM). According to the results obtained, the macrostate of the mixture was investigated in view of a volume fraction, contact forces of particles and a coordination number. A characterization of the microstate of distinct particle was done using the unique geometrical method which had been created according to Hamiltonian mechanics, the theory of relativity and the principles of quantum gravity. The developed computer algorithm allowed to confirm the hypotheses of the method.

Analysis of the microstates of the monodispersed and polydispersed mixtures is of particular engineering importance, since the perception of the self-organization of the structure not only contributes to a stable development of the modern reinforced concrete structures, but it also helps to make a step towards the next-generation design concept, based on the self-organization in biological systems. Simultaneously with the specific physical applications, the obtained results may be of a fundamental significance in an understanding of a universe.

Thesis consists of: 128 p. of text without appendixes, 105 pictures, 5 tables, 166 bibliographical entries. Appendixes included.

Keywords: monodispersed and polydispersed granular material, macrostate, microstate, quasistatic equilibrium, discrete element method, Hamiltonian mechanics, theory of relativity, magnetism, quantum gravity.

TURINYS

Paveikslų sąrašas 7
Lentelių sąrašas 10
ĮVADAS 11
1. VIDINĖS STRUKTŪROS ĮTAKOS BETONINIŲ IR GELŽBETONINIŲ KONSTRUKCIJŲ EKSPLOATACINĖMS SAVYBĖMS SUVOKIMO LITERATŪRINĖ APŽVALGA 13
1.1. Problema ir uždaviniai 30
2. TYRIMO METODINIAI ASPEKTAI 32
2.1. Diskrečiųjų elementų metodas 32
2.1.1. Kontakto modelis 32
2.1.2. Judėjimo lygtys 39
2.1.3. Judėjimo lygčių integravimas 40
2.2. Niutono mechanika varžančioje aplinkoje 42
2.3. Hamiltono mechanika 46
2.3.1. Integruojama tiesinė Hamiltono sistema 46
2.3.2. Integruojama netiesinė Hamiltono sistema 49
2.3.3. Disipatyvi Hamiltono sistema 51
2.3.4. Artima integruojamai Hamiltono sistema 52
2.4. Chaoso teorija 54
3. METODAS KVAZISTATINIO PUSIAUSVYROS BŪVIO DALELIŲ MIŠINIO MIKROBŪSENAI FLIUKTUOJANČIOJE APLINKOJE CHARAKTERIZUOTI 56
4. DALELIŲ MIŠINIŲ SKAITINIS MODELIAVIMAS IR MAKRO- BEI MIKROBŪSENŲ ANALIZĖ 94
4.1. Modeliavimo rezultatų kontrolė 94
4.2. Makrobūsenų analizė 97
4.3. Mikrobūsenų analizė 100
IŠVADOS 112
LITERATŪROS SĄRAŠAS 114
PRIEDAI 129
A Priedas. Mišinio dalelių paviršiaus tekstūrų ir tūrinių gaubtinių sudarymo programos tekstas 130
B Priedas. Mišinių dalelių paviršiaus tekstūros 140
C Priedas. Straipsnių kopijos 155

Paveikslų sąrašas

1.1 pav. Fullerio ir Thompsono gradacijos kreivė 13
1.2 pav. Pagrindo trinties koeficiento įtaka takumo zonų struktūrai 15
1.3 pav. Granuliuotos medžiagos anizotropinė struktūra 15
1.4 pav. Betono mišinio sąstingio ir takumo zonos Abramso kūgyje 16
1.5 pav. Gniuždomojo stiprio, normalizuoto pagal V/C santykį, priklausomybė nuo vidutinio atstumo tarp stambaus užpildo dalelių 18
1.6 pav. Betono valkšnumo principinė schema pagal sluoksniuotos struktūros modelį 19
1.7 pav. Deformacijos, dėl netolygaus užpildo dalelių pasiskirstymo sijos gniuždomojoje zonoje, mechanizmas 20
1.8 pav. Apibendrintoji ilgalaikės cemento akmens deformacijos greičio kreivė 21
1.9 pav. Dislokacijos sukeltas santykinis kristalo dalių pasislinkimas 23
1.10 pav. Kristalo dislokacinė deformacija 23
1.11 pav. Dislokacinio judėjimo terminės aktyvacijos schema 24
1.12 pav. Valkšnumo kreivė 26
1.13 pav. FitzHugho-Nagumos modelio fazinė erdvė 28
1.14 pav. Sužadintos dviejų kintamųjų (x_1, x_2) sistemos atsakas 28
1.15 pav. Granuliuotos medžiagos tankinimas vibravimu 29
1.16 pav. Sistemos būsenos stabilumas 30
1.17 pav. Architektūrinė morfogenezė 31
2.1 pav. Diskrečiųjų elementų metodo principinė schema 32
2.2 pav. Dalelių kontaktas 33
2.3 pav. i -osios ir j -osios dalelių normalinis kontaktas 34
2.4 pav. Klampiosios ir Herco kontakto jėgos-persiklojimo modelis 36
2.5 pav. Tangentinės kontakto jėgos modelis 36
2.6 pav. i -osios ir j -osios dalelių tangentinis kontaktas 37
2.7 pav. Dalelės ir sienos kontaktas 39
2.8 pav. Paviršiaus $h_n(\boldsymbol{r}_o, t) = 0$ suvaržytas taškinės dalelės judėjimas 43
2.9 pav. Nuo laiko priklausantis suvaržymų paviršius 45
2.10 pav. Trajektorijos $\boldsymbol{r}_o(t)$ atraktorius $\boldsymbol{r}_{oh}$ 48
2.11 pav. Integruojamos Hamiltono sistemos dvimatis energijos paviršius (atraktorius) fazinėje erdvėje, išreikštas elgsenos kintamaisiais $\boldsymbol{I}_{j.1}$, $\boldsymbol{I}_{j.2}$, γ_j, α_j 49

2.12 pav. Vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės neslopinamas tiesinis judėjimas 49
2.13 pav. Integruojama netiesinė Hamiltono sistema 50
2.14 pav. Disipatyvios Hamiltono sistemos fazinė erdvė 51
2.15 pav. Normalinio slopinimo parametro η įtaka vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinės trajektorijos pavidalui 51
2.16 pav. Fazinės trajektorijos dvimačio energijos toro paviršiuje 52
2.17 pav. Sutrikdytas dvimatis energijos toras 53
2.18 pav. Deterministinio chaoso plėtotė 54
2.19 pav. Chaotinis atraktorius 55
3.1 pav. Fermi-Ulamo modelis 56
3.2 pav. Dalelės greitėjimas laiko atžvilgiu, kintant atstumui h 57
3.3 pav. Trijų kūnų problema 58
3.4 pav. Dviejų kūnų gravitacinė sąveika 58
3.5 pav. Potvynio jėgų deformuojamas m_2 masės kūnas 59
3.6 pav. m_2 masės kūno priešinimasis deformacijai 60
3.7 pav. Dalelės sukimosi režimai 61
3.8 pav. Dalelės nutacija apie kampinio judesio kiekio vektorių $\boldsymbol{L}_1$ 62
3.9 pav. Cikloidinės problemos 63
3.10 pav. Masyvaus kūno išlenktas erdvėlaikis ir išlinkio veikiamo mažo kūno judėjimas 64
3.11 pav. Sferinio paviršiaus suvaržyta taškinė dalelė keturmatėje erdvėje 64
3.12 pav. Taškinės dalelės erdvėlaikis 65
3.13 pav. Minkowskio erdvėlaikis 66
3.14 pav. Juodosios skylės koncepcija 67
3.15 pav. Penrose diagrama 68
3.16 pav. Kerro metrika 68
3.17 pav. Kerro juodoji skylė 69
3.18 pav. Elektromagnetinės indukcijos gravitacinis analogas 69
3.19 pav. Didžiojo Atšokimo efektas 70
3.20 pav. Fermi-Ulamo modelio m_2 masės dalelės linijinio greičio vektoriaus $\boldsymbol{v}_j$ normalinė plokštuma (taškinis horizontas) 71
3.21 pav. Laukų fiziniai analogai 72
3.22 pav. Sukinio fiziniai analogai 73
3.23 pav. Trijų kūnų problemos ir transformatoriaus sąryšis 74

3.24 pav. Plazmos greitintuvas „Tokamak“ 74
3.25 pav. Krūvių atskyrimas gravitaciniame ir elektriniame laukuose 75
3.26 pav. Magnetinis veidrodis 76
3.27 pav. Weisso domenai feromagnetike, atskirti koherentinėmis magnetizacijos vektorių sienomis 76
3.28 pav. Weisso domenų nykimas veikiant išoriniam magnetiniam laukui 77
3.29 pav. Magnetiniai momentai feromagnetike, pašildytame virš Kiuri temperatūros 77
3.30 pav. m_2 masės dalelės viskoelastinio sluoksnio deformacija analogijoje su magnetizmu 78
3.31 pav. Orbitinio kampinio judesio kiekio vektorinis modelis 79
3.32 pav. Zeemano efektas 80
3.33 pav. Reakcijos aktyvacijos energija 81
3.34 pav. Sukinio poliarizacijos pasukimas apie x ašį 81
3.35 pav. Magnetizacijos būsenos 82
3.36 pav. Magnetizacijos ($\boldsymbol{M}$) relaksacija 83
3.37 pav. Išilginė relaksacija 84
3.38 pav. Skersinė relaksacija 85
3.39 pav. Fermi-Ulamo modelio dalelės energijos toro skerspjūvio vizualizacija 88
3.40 pav. Fermi-Ulamo modelio dalelės greičio vektoriaus kryptys erdvėje kvazistatiniame pusiausvyros būvyje 88
3.41 pav. Elgsenos kintamieji polinėje koordinačių sistemoje 89
3.42 pav. Argando kompleksinių skaičių plokštuma 91
3.43 pav. Efektyvusis magnetinis laukas besisukančioje koordinačių sistemoje 93
4.1 pav. Modeliavimo pradinės sąlygos 95
4.2 pav. Laisvasis dalelių kritimas 95
4.3 pav. Dalelių mišinių suminės kinetinės energijos kitimas laiko atžvilgiu 96
4.4 pav. Skaičiuojamosios erdvės pagrindo reakcijos ir suminio dalelių svorio balansas 97
4.5 pav. Dalelių kontaktinių jėgų grandinės 98
4.6 pav. Voronoi diagramos sudarymas *i*-ajai dalelei 99
4.7 pav. Dalelių užimamos tūrio dalies (tankumo) kitimas laiko atžvilgiu 99
4.8 pav. Neaktyvioji zona kvazistatinio pusiausvyros būvio dalelių mišinyje 100
4.9 pav. Dalelių mišinio *i*-osios dalelės padėties vektoriaus z komponentės kitimas laiko atžvilgiu 101
4.10 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio struktūra kvazistatiniame pusiausvyros būvyje 101

4.11 pav. Kampai α_j ir γ_j linijinio greičio vektoriaus $\boldsymbol{v}_j$ viršūnei esant konkrečiame taške 102
4.12 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinė 102
4.13 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinės evoliucija..... 103
4.14 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių lauko evoliucija varžančioje aplinkoje 103
4.15 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių ir taškinio perimetro normalinių plokštumų laukai 104
4.16 pav. Daugiadispersio mišinio dalelės padėtis skaičiuojamojoje erdvėje ir greičio vektorių normalinių plokštumų taškinio perimetro suformuota tekstūra 105
4.17 pav. Greičio vektorių normalinių plokštumų tūrinės gaubtinės sudarymo principas..... 105
4.18 pav. Viendispersio dalelių mišinio linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas 106
4.19 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas 106
4.20 pav. Dalelių linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių procentinis pasiskirstymas mišiniuose 107
4.21 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas, paveikus bandinį smūgiu į šonus..... 107
4.22 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas, paveikus bandinį smūgiu į dugną 108
4.23 pav. Dalelių linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių procentinis pasiskirstymas smūgių paveiktuose mišiniuose 108
4.24 pav. Greičio vektorių normalinių plokštumų vieno taško (bozono) pasaulio linija mišinio dalelės paviršiuje skirtingais laiko momentais 109
4.25 pav. Magnetinio veidrodžio efekto sukeltas slydimas 110
4.26 pav. Fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos diagramos aksonometrinė interpretacija dalelei su charakeringąja Penrose diagramos pavidalo tekstūra 111

Lentelių sąrašas

4.1 lentelė. Dalelių modeliavimo charakteristikos..... 94
4.2 lentelė. Daugiadispersio mišinio granuliometrinė sudėtis..... 94
B.1 lentelė. Greičio vektorių normalinių plokštumų dalelių paviršiuose suformuotų tekstūrų pavyzdžiai..... 140
B.2 lentelė. Dalelių paviršiaus tekstūras atitinkančios fazinių trajektorijų polinės diagramos..... 143
B.3 lentelė. Tekstūros formavimasis *i*-osios dalelės paviršiuje ir fazinės trajektorijos plėtotė..... 146

ĮVADAS

Mus supanti aplinkos medžiaga, o kartu ir mes patys, neatskiriamoje sąjungoje su erdvėlaikiu, sudarome visa apimančią Visatą. Viena svarbiausių materijos savybių yra jos kintamumas, nulemtas sudėtingos sąveikos su erdvėlaikiu. Žmogus, būdamas sistemos dalis, nenori aklai priimti keistų Visatos reiškinių tik kaip faktų, todėl siekia elgsenos dėsnių supratimo. Izaokas Niutonas (orig. *Isaac Newton*) pateikė deterministinį pasaulėvaizdį – jis manė, jog Visata yra absoliučiai tvarkinga, kad ji vientisa, todėl, jo teigimu, žinant kūno padėtį dabar ir anksčiau kūno užimtas koordinates, galima nustatyti, kur jis bus ateityje. Albertas Einšteinas (orig. *Albert Einstein*) sukūrė reliatyvumo teoriją, kuri papildė ir praplėtė Niutono pasaulėvaizdį. Einšteino teorijos kartu su kvantine mechanika padarė milžinišką įtaką moksliniam pasaulio suvokimui, suteikiant lygią reikšmę tiek determinizmui, tiek atsitiktinumui (Mefisto 2010). Kvantinėje mechanikoje turint dvi koordinates, nebegalima tiksliai nustatyti vėlesnės padėties – galimas tik tikimybinis vertinimas. Šis matomos Visatos nevisavertis suvokimas palaiko idėją, kad yra daug didesnis nematomas erdvėlaikis, kurio fliuktuacijos atsakingos už mūsų lokalios kaimynystės reiškinius (Grigas 2009). Fundamentalus antrasis termodinamikos dėsnis teigia, kad uždaros sistemos entropija negali mažėti, tai yra, jei Visata prasidėjo kaip labai tvarkinga, netvarka joje nuolat tik didėja. XIX a. austrų fizikas Liudvikas Bolcmanas (orig. *Ludwig Boltzmann*) molekulinėje kinetinėje dujų teorijoje entropiją apibūdino kaip objekto makrobūsenos priklausomybę nuo ją sudarančių dalių mikrobūsenų, tačiau entropija nėra visiškai suprasta veikiant gravitacijai. Kai gravitacija nežymi, chaotiškas dalelių pasiskirstymas atitinka didžiausią entropiją ir sistemos pusiausvyrą, bet jei gravitacija yra žymi ir tūris ribotas, sistema nebūna didžiausios entropijos būsenoje. Kosminėje erdvėje gravitacija verčia daleles jungtis į žvaigždes ir galaktikas ir jų entropija didėja. Didžiausia entropija yra sutelkta riboto tūrio juodosiose skylėse (Grigas 2009). Įprasta manyti, kad astronomai skverbiasi tik kuo giliau į kosmosą, į begalinį žvaigždžių ir galaktikų pasaulį, tačiau tuo pačiu metu, dirbdami kartu su fizikais, jie sprendžia ir mikropasaulio problemas, pavyzdžiui, žvaigždės virtimas juodąja skyle, susispaudžiant į nedidelį tūrį, arba begalinė Visata, atsiradusi iš mikroskopinės dalelės (Stygų pasaulio... 2006). Makro- ir mikropasaulių fizikos sujungimas yra vienas pagrindinių teorinės fizikos tikslų. Tokia teorija galėtų paaiškinti viską, todėl šiuolaikiniai fizikai kuria bendrą – Visatos teoriją, kuri sujungtų reliatyvumo teoriją su kvantine mechanika bei suderintų gravitacinę sąveiką su kitomis gamtoje egzistuojančiomis sąveikomis (Stygų lauko... 2007). Visatos teoriją iš principo galima įsivaizduoti kaip kompiuterinę programą, imituojančią Visatos vystymąsi nuo pat pradžių, tačiau Giodelio (orig. *Gödel*) ir Turingo teiginiai tokio vystymosi rezultatą paverčia abejonėmis (Mokslo... 2012). Jie iškelia klausimą, ar bet kuri kompiuterinė programa duotiems

pradiniams duomenims baigs darbą. Vis dėlto abejonių gausa dar nereiškia, kad Visuotinė teorija negalima. Gali būti, kad fizika niekada negalės nuspėti rytojaus, tačiau Giodelio teorema neatima galimybės bandyti. Jei Visatos teorija yra ne daugiau nei kompiuterinė programa, niekas nedraudžia diskrečiųjų elementų metodo (DEM) simuliacijai ja būti.

Tiriamajame darbe diskrečiųjų elementų metodu modeliuojama dalelių mišinio elgsena fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis. Pagrindinis dėmesys skiriamas mišinio makro- ir mikrobūsenai charakterizuoti. Kiekvienos dalelės būsenos charakterizavimas mišinyje leidžia tikimybiškai įvertinti būsenos pasireiškimą, tinkamai parinkti granuliometrinę sudėtį bei medžiagos fizikines charakteristikas, gaunant didžiausią sistemos atsaką į poveikį, o tai, savo ruožtu, užtikrina efektyvaus dalelių mišinių tankinimo ir jų struktūros organizavimo galimybes. Daugiadispersių dalelių mišinių mikrobūsenų tyrimas yra taip pat svarbi betono gamybos užduotis, kadangi dalelių pasiskirstymas cemento tešloje turi tiesioginį ryšį su ilgalaikėmis konstrukcijų deformacijomis, be to, plėtojantis modernioms architektūros formoms, atsiranda būtinybė konstrukcijų darbą suprasti nuo paties mažiausio, tai yra užpildų kontakto, lygio.

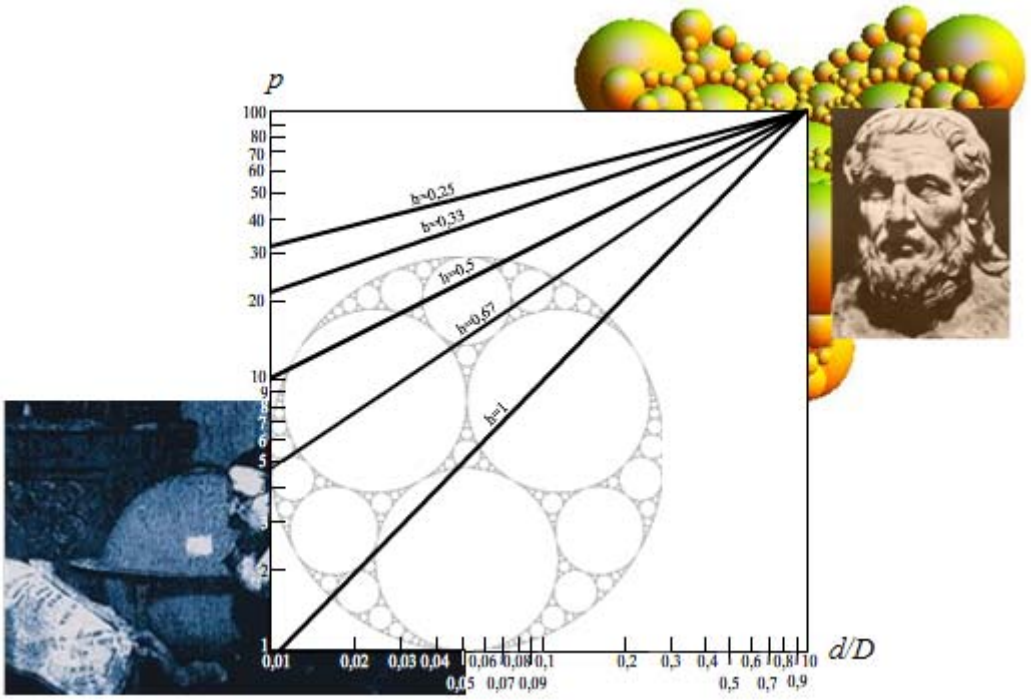
Darbą sudaro keturi skyriai ir išvados. Pirmajame skyriuje atliekama literatūros apžvalga, formuluojamas tikslas bei iškeliami uždaviniai. Antrajame skyriuje supažindinama su diskrečiųjų elementų metodu bei modeliavimo rezultatų analizei naudotų Hamiltono mechanikos ir chaoso teorijos esminiais principais. Trečiajame skyriuje yra aprašomas bendrosios reliatyvumo teorijos, Hamiltono mechanikos ir kvantinės gravitacijos teorijų pagrindu sukurtas unikalus metodas, skirtas dalelių mišinio mikrobūsenai kvazistatiniame būvyje charakterizuoti. Ketvirtajame skyriuje pateikiami mišinio makrobūsenos tyrimo rezultatai bei įvertinamas sukurto metodo tinkamumas dalelių mikrobūsenoms charakterizuoti. Darbo pabaigoje pateikiamos išvados.

Autoriaus žodis

Pagrindinė Universiteto misija – ugdyti kūrybingą, išsilavinusią, iniciatyvią ir savarankišką asmenybę. Kūrybiškumas yra sugebėjimas naujai, neįprastai analizuoti iš pirmo žvilgsnio elementarų objektą. Tiriamajame darbe pateikta nuosekli minčių eiga perteikia sudėtingų teorijų, kurios gali pasirodyti tolimos nagrinėjamam klausimui, suvokimą ir sujungimą į visumą, vedančią tikslo link. Pažymėtina, jog mikrobūsenos yra kvantinės mechanikos efektas, neatskiriamas nuo gravitacijos, kurią išsamiai paaiškina bendroji reliatyvumo teorija. Ekskursą į šias teorijas reikia vertinti ne kaip tiesioginį taikymą, tačiau kaip jomis aprašomų reiškinių ir tiriamo objekto galimą analogiją.

1. VIDINĖS STRUKTŪROS ĮTAKOS BETONINIŲ IR GELŽBETONINIŲ KONSTRUKCIJŲ EKSPLOATACINĖMS SAVYBĖMS SUVOKIMO LITERATŪRINĖ APŽVALGA

Sudėtinga granuliuotų medžiagų elgsena buvo daugelio praėjusio ir tebėra šiandieninio XXI amžiaus knygų ir žurnalų aktyvaus nagrinėjimo objektas (Dintwa 2006). Intensyvų domėjimąsi lėmė nenumaldomas žmogiškasis noras pažinti, paskatintas suaktyvėjusio viendispersių ir daugiadispersių dalelių mišinių pagrindu pagamintų medžiagų naudojimo įvairioms pramonės reikmėms, ypač statybos sektoriuje. Statybos pramonėje gaminamos įvairios keramikos, betonai, gelžbetonio gaminiai, todėl, sparčiai mažėjant gamtos ištekliams, optimalios dalelių mišinio sudėties parinkimas, charakterizuojamas didžiausiu struktūros tankiu, tampa vis aktualesne siekiamybe. Struktūros tankis, kuris gali būti apibūdintas kaip dalelių tūrio dalis nagrinėjamos erdvės tūryje, yra pagrindinis rodiklis, plačiai naudojamas mišinių sudėties projektavimui.



1.1 pav. Fullerio ir Thompsono gradacijos kreivė (pagal Brandt 2009)

Granuliuotos medžiagos struktūra gali įgyti įvairius pavidalus ir šie pavidalai priklauso nuo dalelių prigimties, ypač jų formos ir dydžių pasiskirstymo, apibūdinamo gradacija. Pirmasis ir iki šiol vis dar plačiai taikomas dalelių mišinių sudėties projekavimo metodas yra paremtas Fullerio ir Thompsono (Alexander ir Mindess 2005; Sobolev *et al*. 2004) gradacijos kreive (1.1 pav.), suformuota remiantis geometrine analize, kurios ištakos siekia antikos laikus (Aste ir Weaire 2000). Ši kreivė, teoriškai užtikrinanti mažiausią mišinio tuštymėtumą, yra išreiškiama apibendrinta (1.1) priklausomybe.

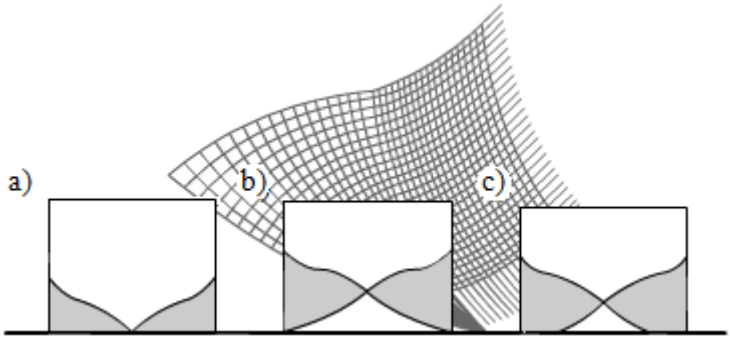
$$p = 100 \cdot \left(\frac{d}{D} \right)^h , \tag{1.1}$$

čia p – procentinė mišinio dalis, praeinanti per sietą, kurio akučių skersmuo d; D – didžiausios mišinio dalelės skersmuo; h – koeficientas, apibūdinantis gradacijos stambumą.

Koncentruodamasis į betono mišinio sudėties projektavimą, Bolomey išplėtė Fullerio ir Thompsono gradacijos koncepciją (Koehler 2007), įtraukdamas empirinę konstantą f, įvertinančią betono technologiškumo laipsnį (žr. (1.2) formulė). Tai buvo vienas iš pirmųjų bandymų atitrūkti nuo tik geometrija paremtų modelių, atsižvelgiant į medžiagos kaip sudėtingos sistemos elgsenos specifiką, ilgainiui peraugęs į didžiulį empirikos raizginį. Fullerio ir Thompsono gradacijos teorija ir jos išvestinės formos buvo nagrinėtos Powerso (Koehler 2007), kuris, apibendrinęs ilgamečių tyrimų rezultatus, iš dalies paneigė idealios betono užpildų gradacijos kreivės egzistavimo hipotezę, remdamasis tuo, jog reikiamas betono technologiškumas gali būti gautas esant kelioms skirtingoms užpildų gradacijoms.

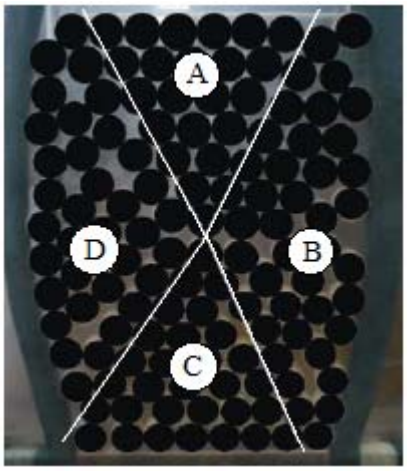
$$p = f + (1 - f) \cdot \left(\frac{d}{D} \right)^h . \tag{1.2}$$

Betono mišinio technologiškumas yra nesukietėjusio betono savybių rinkinys, dažniausiai charakterizuojamas Abramso kūgio nuoslūgiu (Tattersall 1991; De Larrard 1999; Utsi 2008; Hendrickx 2009). Literatūroje randama daugybė bandymų sukurti tikslų nuoslūgio evoliucijos modelį (Zhou 2004; Salomon ir Zhai 2006; Roussel *et al*. 2007; Gram 2009; Lagree *et al*. 2011; Guo *et al.* 2010), tačiau sėkmingai charakterizuoti tik ribiniai konsistencijos atvejai (Roussel *et al*. 2005; Roussel 2006). Bendru ir visuotinai pripažintu principu galima išskirti taip vadinamų takumo zonų susidarymą (Chamberlain *et al*. 2001; Chamberlain *et al*. 2002). Takumo zonos – tai iš plastiškumo teorijos žinomi irimo takų tinklai bandinyje nuo likusios sveikos medžiagos dalies kokybiškai besiskiriantys spontaniškai susiformavusia savita mikrostruktūra, priklausančia nuo bandinio geometrijos ir pagrindo trinties sąlygų (1.2 pav.).



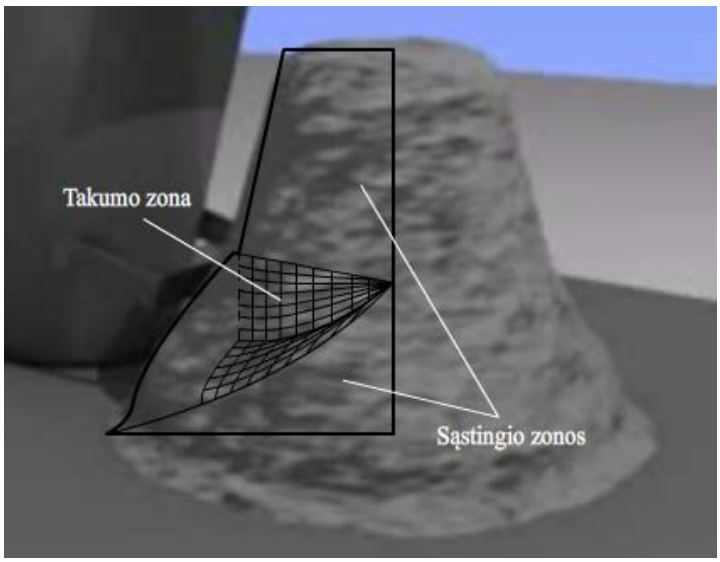
1.2 pav. Pagrindo trinties koeficiento įtaka takumo zonų struktūrai: a) idealus slydimas; b) idealiai šiurkštus pagrindas; c) vidutinė trintis (pagal Chamberlain *et al*. 2002)

Panašus į 1.2 pav. parodytą anizotropinės struktūros tinklinis skaidymasis yra pastebimas ir granuliuotoje medžiagoje (Sengupta 2010). 1.3 pav. parodytas cilindrinių dalelių rinkinys, patalpintas tarp dviejų lanksčių sienų. Bandinį paveikus vertikalia gniuždančia apkrova, susiformuoja dvi tankios zonos (A ir C) bei dvi tuštymėtos zonos (B ir D). Atlikus keletą tokių bandymų, nustatyta, jog sienų išlinkį lemia B ir D zonos, o A ir C zonų pavidalas beveik nepakinta.



1.3 pav. Granuliuotos medžiagos anizotropinė struktūra (pagal Sengupta 2010)

Aprašytą bandymą atliekant 1.3 pav. pavaizduotą granuliuotą medžiagą patalpinus į cemento tešlos mišinį, akivaizdu, jog A ir C zonų dalelių struktūros tankis vis vien išliks didesnis nei B ir D, tačiau užimamas tūris (zonų dydis) taps priklausomas nuo vandens ir cemento santykio (V/C). Tai patvirtina 1.4 pav., kuriame parodyta tam tikros konsistencijos betono Abramso kūgio nuoslūgio skaitinio modeliavimo galutinė stadija (Chisolm 2010). 1.4 pav. aiškiai išskiriamos dvi sąstingio zonos, kurių vidinė struktūra nepakinta evoliucionuojant bandinio nuoslūgiui. Šių dviejų zonų tarpe susiformuoja betono tėkmės stipriai paveikta takumo zona, atsakinga už nuoslūgio dydį (Diamond 2007).



1.4 pav. Betono mišinio sąstingio ir takumo zonos Abramso kūgyje (pagal Chisolm 2010)

Betonas – plačiausiai naudojama kompozitinė statybinė medžiaga, sudaryta iš cemento, vandens, smėlio ir skaldos. Prognozuoti šios sudėtingos sistemos elgseną ir užtikrinti konstrukcijų saugumą bei patvarumą galima tik gerai suvokus atskirų komponentų – neatsiejamų sistemos grandžių elgsenos specifiką.

Smėlis gali būti pilamas kaip vanduo, todėl kyla mintis, jog granuliuotą medžiagą galima laikyti skysčiu (Tegzes 2002; Amenabar 2009), charakterizuojamu Navjė-Stokso (orig. *Navier-Stokes*) lygtimi (Lagree *et al*. 2011). Ši lygtis yra antrojo Niutono dėsnio kontinuumo versija ir tinka niutoninio skysčio elgsenai apibūdinti. Toks apibūdinimas turi kelias prielaidas: normaliniai įtempiai yra izotropiniai, o šlyties įtempiai yra proporcingi deformacijos greičiui, be to, iškyla nesuspaudžiamumo problema. Bandant šią teoriją pritaikyti granuliuotai medžiagai, susiduriama su sunkumais. Vienas jų – disipacijos mechanizmas, kai, priklausomai nuo greičio, gali dominuoti arba netamprūs susidūrimai, arba trinties jėgos. Skysčių mechanikoje daroma prielaida, jog judėjimą charakterizuojantys dydžiai yra tolydžios erdvės atžvilgiu diferencijuojamos funkcijos, tačiau granuliuotoms medžiagoms tai netinka, kadangi nėra skysčių molekulėms būdingo terminio judėjimo, panaikinančio netolydumus (Tegzes 2002).

Į klojinius supiltas betonas turi kompoziciją, sudarytą iš netaisyklingai pasiskirsčiusių tuštumų, kurios daro neigiamą įtaką paviršiaus išvaizdai ir medžiagos savybėms. Be konsolidacijos sukietėjęs betonas būna netolygus, silpnas, poringas ir silpnai susietas su armatūra. Siekiant pašalinti oro tuštumas ir užtikrinti tinkamą ryšį tarp betono ir armatūros – būtinas tankinimas. Tankinimas yra procesas, kurio metu gaunamas glaudesnis dalelių išsidėstymas betono mišinyje. Klojimo metu tam tikras tankėjimas įvyksta dėl gravitacijos poveikio, tačiau reikalingi papildomi metodai.

Granuliuotų medžiagų modeliavimas dažnai yra atliekamas pagal kontinuumo modelius (Kanit *et al.* 2003; Latzel 2003; Wu 2008; Lagree *et al*. 2011). Šiuose modeliuose, kurių pavyzdžiu gali būti baigtinių elementų metodas, diskreti medžiagos struktūra yra idealizuojama tūryje sujungtų elementų rinkiniu. Šio tūrio homogenizacija reiškia, kad bet kuriose dviejose jo dalyse galima rasti panašų komponentų skaičių, užtikrinantį fizinių ar mechaninių savybių vidutinę reikšmę visoje medžiagoje. Odos ir Iwashitos (1999) pateikė detalią granuliuotos medžiagos homogenizacijos strategijos apžvalgą. Homogenizaciją taip pat sėkmingai taikė Waltonas (1987), Changas ir Gao (1996), Kruytas ir Rothenburgas (2004).

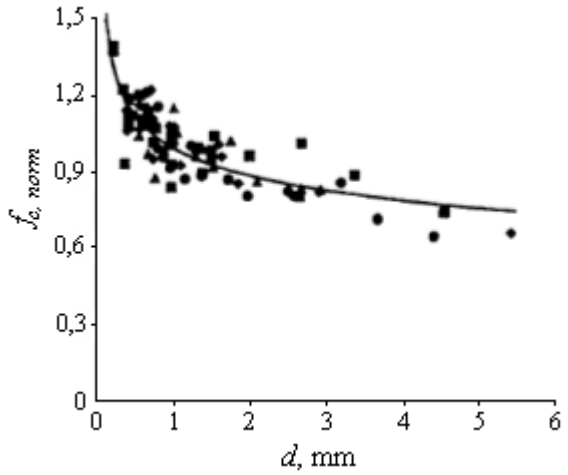
Kontinuumo prielaida teigia, jog fizinis kintamasis, priimtas kaip tam tikros savybės vidurkis, gali būti apibūdintas tolydžia erdvės ir laiko atžvilgiu diferencijuojama funkcija. Įvairaus dydžio dalelių mišiniui toks apibūdinimas yra klaidingas, nes dėl kontaktinių jėgų grandinių heterogeniškumo neaišku, kokį reprezentatyvųjį elementą pasirinkti įtempių ir deformacijų tenzoriaus formavimui (Tegzes 2002).

Progresas medžiagų moksle pateikė principą, jog vidinė struktūra nulemia medžiagos savybes, kitaip sakant, savybes galima modifikuoti arba pagerinti atliekant tam tikrus struktūros pakeitimus. Nors betonas yra plačiausiai naudojama kompozitinė statybinė medžiaga, tačiau jo heterogeninė ir labai sudėtinga struktūra vis dar nėra visiškai suprasta. Struktūros-savybių ryšio suvokimas yra esminis dalykas prieš pradedant nagrinėti įtaką aplinkos faktorių, veikiančių betono inžinerines savybes, tokias kaip: stiprumas, susitraukimas, valkšnumas, pleišėjimas ir patvarumas.

Literatūroje randama nemažai dalelių sistemų tyrimo darbų. Vieni iš pirmųjų – Bernalio ir Masono (1960), Scotto (1962) ir Masono (1968) darbai, kuriuose rentgeno spinduliais bandyta pažvelgti į dalelių suformuotą trimatę struktūrą. Aste ir Weaire (2000) kompiuterinės tomografijos metodais analizavo mišinių struktūrą, siekdami įvertinti dalelių organizuotumo laipsnį. Yu ir Zou (1998), Džiugio ir Peterso (2001) bei kitų autorių darbuose daug dėmesio skirta dalelių sąveikos modeliams ir jų taikymui įvairiems uždaviniams spręsti. Betono vidinės struktūros tyrimo atvejų yra kur kas mažiau, o ir esami elgseną charakterizuojantys modeliai daugiausia yra fenomenologiniai, apipinti empirinėmis koreliacijomis, ir nepaiso struktūros pokyčių eksploatavimo metu arba įvertina tam tikrais saugos koeficientais. Mišinio elgsena priklauso nuo atskirų komponentų sąryšio, todėl mikrostruktūrai modeliuoti reikalingas gerai išplėtotas dalelių deformacijos mechanizmas. Nijboeris (1948) atliko asfaltbetonio mikrostruktūros modeliavimą, taikydamas analogiją su gruntų mechanika. Hillsas (1990) pagal vidutinį rišiklio sluoksnio storį išplėtojo ilgalaikio valkšnumo modelį vidine struktūra charakterizuojamam asfaltbetonio mišiniui. Boutinas ir Auriaultas (1993) taikė poringos masės viskoelastiniame skystyje analogiją, bandydami pagal porų dydį suklasifikuoti makroskopinę asfaltbetonio elgseną. Zhongas ir Changas (1997) pritaikė mikromechaninį modelį

dviejų dalelių, sujungtų rišikliu, elgsenai nagrinėti. Pastarasis modelis paremtas prielaidomis, jog rišiklis turi pradinius mikroplyšius ir dėl išorinės apkrovos šie mikroplyšiai didėja, suardydami rišiklio medžiagą. Wangas (2007) nagrinėjo viskoelastinės medžiagos sluoksnio storio įtaką stambiųjų užpildų kontakto elgsenai.

Ilgalaikės apkrovos sukeltų deformacijų analizė yra viena tipiškiausių projektuojant betonines ir gelžbetonines konstrukcijas. Projektavimo normos įtraukia kai kurias supaprastintas priklausomybes valkšnumui ir susitraukimui nuspėti, mišinio proporcijas įvertinant pagal gniuždomąjį stiprį. De Larrardas (1999) pateikė pusiau empirinį metodą stambiųjų užpildų ir betono gniuždomojo stiprio ryšiui įvertinti (1.5 pav.). Metodas paremtas didžiausiu rišiklio sluoksnio storiu, kuris gali būti inerpretuojamas kaip vidutinis atstumas tarp stambaus užpildo dalelių, tačiau ryšį tarp mišinio sudėties ir uždelstųjų deformacijų reikia nustatyti unikaliai apibūdinant medžiagos struktūrą.



1.5 pav. Gniuždomojo stiprio, normalizuoto pagal V/C santykį, priklausomybė nuo vidutinio atstumo tarp stambaus užpildo dalelių (pagal Alexander ir Mindess 2005)

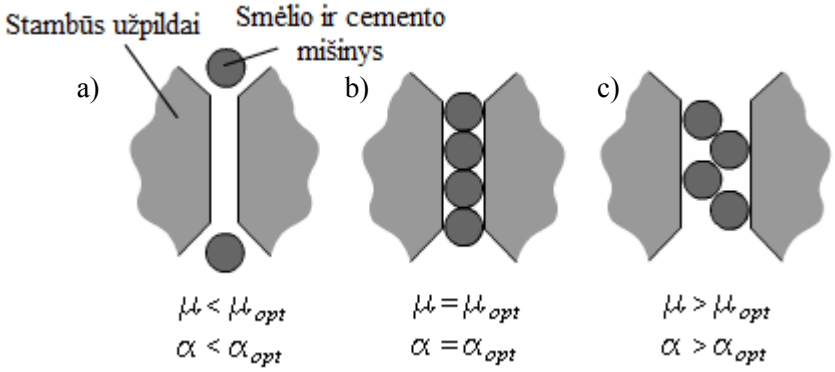
Konsistencinį nevienalytį betono mišinį sudaro stambiosios ir smulkiosios dalelės bei jungiančioji fazė. Tankios struktūros gaminiui gauti jungiančiosios fazės tūris turi būti nemažesnis už užpildų tuštumų tūrį. Iš standaus mišinio sunku suformuoti tankią struktūrą, todėl jungiančiosios fazės reikia daugiau nei yra tuštumų tarp kietosios fazės dalelių. Šis tūrio padidėjimas įvertinamas betono mišinių sudėties projektavimui naudojamu užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientu (Dvorkin, L. I. ir Dvorkin, O. L. 2006; Rudžionis 2007). Eksperimentai įrodė, jog kuo didesnis jungiančiosios fazės perviršis mišinyje, tuo betonas yra labiau linkęs deformuotis, todėl akivaizdu, jog, norint susieti konstrukcijų deformacines savybes su jų struktūra ir medžiagos kompozicija, tinkamiausias parametras yra užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu

koeficientas. Pluginas *et al*. (2009) pateikia (1.3) formulę betono nuostovaus režimo valkšnumo deformacijoms įvertinti pagal užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientą.

$$\varepsilon_b = \varepsilon_{c.t.} \cdot \sqrt[3]{\left(\frac{\mu - \mu_{opt}}{\mu}\right) \cdot \left(\frac{\alpha - \alpha_{opt}}{\alpha}\right)}, \tag{1.3}$$

čia ε_b – betono deformacijos; $\varepsilon_{c.t.}$ – santykinės cemento akmens deformacijos; μ – stambaus užpildo praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientas; μ_{opt} – stambaus užpildo praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficiento optimali reikšmė; α – smulkaus užpildo praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientas; a_{opt} – smulkaus užpildo praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficiento optimali reikšmė.

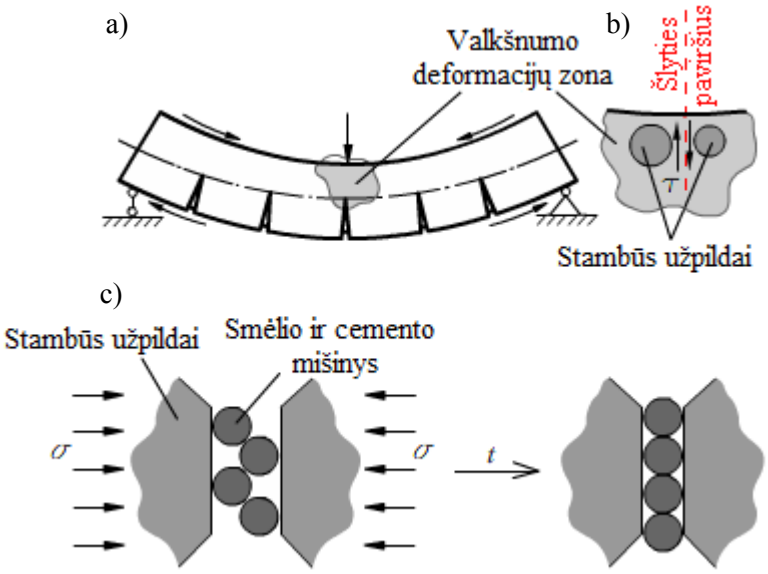
Kaip matoma iš (1.3) formulės, pagal optimalias (šiame modelyje minima sąvoka „optimalus“ neturi tikrosios prasmės, nes tai yra tik eksperimentais paremtas tam tikras atskaitos taškas) koeficientų reikšmes paruoštas betono mišinys pasižymi mažiausiomis valkšnumo deformacijomis ir pralaidumu. (1.3) formule išreiškiamo deformacijos mechanizmo iliustravimui, 1.6 pav. pateikta principinė schema.



1.6 pav. Betono valkšnumo principinė schema pagal sluoksniuotos struktūros modelį: a) mažesnės už optimalias užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientų reikšmės; b) optimalios užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientų reikšmės; c) didesnės už optimalias užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientų reikšmės (pagal Plugin *et al*. 2009)

1.6 pav. pavaizduota sluoksniuota mišinį sudarančių stambiųjų užpildų ir cemento bei smėlio dalelių struktūra. Ilgą laiką eksploatuojamos lenkiamos gelžbetoninės konstrukcijos, pagamintos iš betono su didesne už optimalią užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficiento reikšme, gniuždomosios zonos betonas deformuojasi.

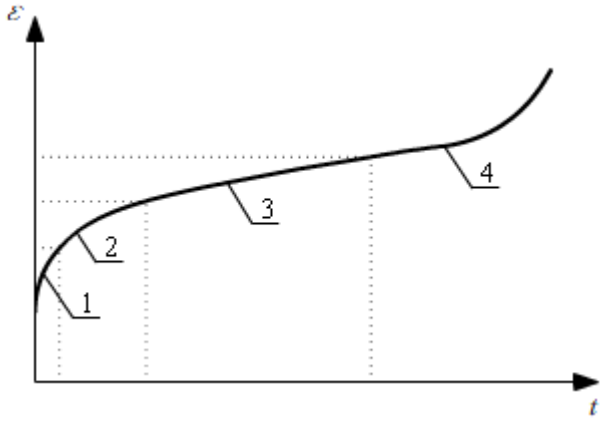
1.7 b pav. parodyta, jog stambieji užpildai suformuoja šlyties paviršių gniuždomojoje sijos zonoje, todėl nuo užpildų išsidėstymo priklauso šlyties paviršiaus orientacija bei šlyties įtempiai, sukeliantys dislokacinį judėjimą (Messerschmidt 2010). Šie šlyties įtempiai sukuria energiją, kuri yra disipuojama trimis mechanizmais, atsakingais už ilgalaikes deformacijas. Pirmasis mechanizmas pasireiškia trinties įveikimu tarp užpildų, padengtų rišikliu, ir priklauso nuo užpildų mineralogijos, šiurkštumo bei rišiklio savybių (Rowe 1962). Antrasis mechanizmas yra medžiagos dilatacija. Dilatacijos lygis priklauso nuo užpildų gradacijos, aštrumo ir formos (Kaloush 2001). Trečiasis mechanizmas yra susijęs su energijos disipacija įveikiant ryšį tarp rišiklio elementų arba tarp rišiklio ir stambiųjų užpildų. Ši energija sudaro mikroplyšius, dėl kurių, veikiant ciklinei apkrovai, medžiaga suminkštėja ir deformuojasi (Wang 2011). Minėtieji trys mechanizmai yra tik sudėtingos valkšnumo deformacijos (1.8 pav.) abstrakcija, reikalaujanti tvirto eksperimentinio pagrindimo.



1.7 pav. Deformacijos, dėl netolygaus užpildo dalelių pasiskirstymo sijos gniuždomojoje zonoje, mechanizmas: a) lenkiama gelžbetoninė sija; b) šlyties paviršius sijos gniuždomojoje zonoje; c) sijos gniuždomosios zonos betono mikrostruktūros pakitimai laiko atžvilgiu (pagal Plugin *et al*. 2009)

Tuštumų perpildymo skiediniu koeficientas projektuojant betono sudėtį apibūdina mišinio technologiškumą, o šis, pagal Powersą (Koehler 2007), yra priklausomas nuo kombinuoto trijų poveikių efekto:

- cemento tešlos kiekio;
- cemento tešlos klampos, priklausančios nuo sudedamųjų medžiagų kiekio ir savybių;
- gradacijos ir užpildų tipo.



1.8 pav. Apibendrintoji ilgalaikės cemento akmens deformacijos greičio kreivė: 1 – sąlyginai tampri deformacija (iki 1 s) ir greitai pasireiškiantis valkšnumas (keletas ar keliasdešimt minučių); 2, 3 – normalaus valkšnumo stadija (keletas metų) – netiesinis (2) ir tiesinis (3); 4 – ilgalaikio valkšnumo stadija (kelios dešimtys metų) (pagal Plugin *et al*. 2009)

Ukrainoje taikomoje betono sudėties projektavimo metodikoje (Dvorkin 1981), parengtoje Powerso (Brandt 2009) ir Kennedy (1940) teorijų pagrindu, užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientui apskaičiuoti pateikiama (1.4) formulė.

$$\mu_{opt} = \frac{V_{c.t.} + r \cdot V_z}{V_z \cdot p_{a.sk.0} \cdot (1 - r)}, \tag{1.4}$$

čia $V_{c.t}$ – cemento tešlos kiekis; r – smėlio dalis užpilduose; V_z – užpildų absoliutinis kiekis; $p_{a.sk.0}$ – stambaus užpildo tuštymėtumas.

(1.4) formulė rodo, jog parinkus artimą optimaliai gradaciją bei optimalų smėlio kiekį, μ_{opt} koeficientas labiausiai priklauso nuo cemento tešlos kiekio, tiesiogiai susijusio su betono mišinio technologiškumu, o šis dažniausiai charakterizuojamas slankumu. Pagal Dvorkiną (1981), struktūrinis kriterijus N (žr. (1.5) formulė) apibūdina betono mišinio slankumą. Jis lygus cemento tešlos sluoksnio storio δ ir užpildo dalelių paviršiaus ploto A santykiui.

$$N = \frac{\delta}{A} = \frac{(V_{c.t.} - p_a \cdot V_z)}{(u_z \cdot V_z)^2}, \tag{1.5}$$

čia p_a – užpildo tuštymėtumas; u_z – užpildo dalelių savitasis paviršiaus plotas.

Žinoma (Salomon ir Zhai 2006), jog klampos logaritmas tiesiogiai priklauso nuo vandens ir cemento santykio. Cemento tešlos konsistencijos rodiklis yra dydis s (Dvorkin 1981), išreiškiamas

(1.6) formule. Įvertinant rodiklį s, kūgio nuoslūgio charakteristika L_{OK} (Dvorkin 1981) su struktūriniu kriterijumi N susiejama (1.7) priklausomybe.

$$s = \left(\frac{V}{C} - 1{,}68 \cdot k_{N.t.} \right), \tag{1.6}$$

čia $k_{N.t.}$ – cemento tešlos normalusis tirštumas; V – vandens kiekis; C – cemento kiekis.

$$L_{OK} = \frac{N}{\eta_{00}}, \tag{1.7}$$

čia η_{00} – struktūrinis klampos kriterijus, kurio reikšmė kinta nuo 0 iki 1. Jis priklauso nuo vandens ir cemento santykio, o apskaičiuojamas Arrhenius lygties pavidalo (1.8) išraiška.

$$\eta_{00} = e^{-m \cdot s}, \tag{1.8}$$

čia m – koeficientas.

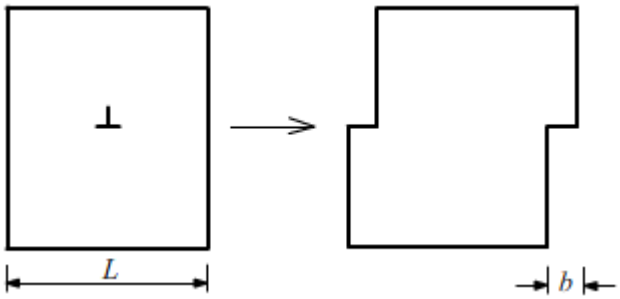
Iš statistiškai apdorotų duomenų gauta (Dvorkin 1981), jog Abramso kūgio nuoslūgio dydis apskaičiuojamas (1.9) priklausomybe.

$$OK = a_0 \cdot L_{OK} + b_0, \tag{1.9}$$

čia a_0 – koeficientas, priklausantis nuo maksimalaus užpildų dalelių dydžio; b_0 – koeficientas, priklausantis nuo stambaus užpildo dalelių formos.

Esminis pateiktos metodikos akcentas yra (1.7) formulė, rodanti, jog reikiamas cemento tešlos kiekis, pagal pasirinktą kūgio nuoslūgį, priklausys nuo cemento tešlos klampos, apibūdinamos Arrhenius lygties pavidalo (1.8) išraiška. Tai nėra reikšminga, jei domina tik technologiškumo užtikrinimas, tačiau siekiant užpildų praskyrimo ir tuštumų perpildymo skiediniu koeficientu prognozuoti valkšnumo deformacijas, reikalingas detalesnis tyrimas bei tam tikrų tikimybinių kriterijų įvertinimas. Arrhenius lygtis yra tikimybinio pobūdžio lygtis, dislokacijų teorijoje charakterizuojanti kristalų deformacijas, o valkšnumas apibūdinamas kaip laiko atžvilgiu didėjanti deformacija, kuri pasireiškia veikiant pastovaus dydžio statiniams ar cikliniams įtempiams (Penny ir Marriot 1995). Priklausomai nuo temperatūros ir įtempių, valkšnumas vyksta tam tikrais dislokaciniais mechanizmais. Kiekvienam mechanizmui literatūroje (Karato 2008) randami specifiniai nuostoviosios būsenos valkšnumo modeliai, paremti dislokacijų mechanikos teorija.

Dislokacijų teorijoje (Messerschmidt 2010) valkšnumo problema formuluojama kristalu (1.9 pav.) su judančiomis dislokacijomis (pažymėtina, jog analogiška situacija jau buvo pavaizduota kaip cemento ir smėlio dalelių mišinio apgniuždymas tarp dviejų stambaus užpildo dalelių). Šis judėjimas sukelia dviejų kristalo dalių (arba analogiškai stambiųjų užpildų) santykinį poslinkį b, vadinamą Burgerio vektoriumi.

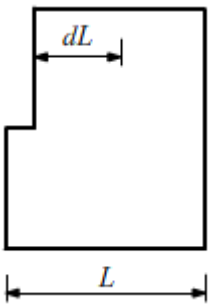


1.9 pav. Dislokacijos sukeltas santykinis kristalo dalių pasislinkimas (pagal Karato 2008)

Burgerio vektorius yra vektorius, reprezentuojantis kristalo tinklelio išsikreipimo dydį ir kryptį. Paprastumui tariama, kad dislokacijos yra pasiskirsčiusios tolygiai, tai yra nagrinėjamas vidutinis atstumas L su n dislokacijų tarp dviejų 1.7 a pav. parodytos sijos gniuždomojoje zonoje esančių stambiųjų užpildų. Gniuždant šį kristalą, dislokacija pajuda per jį ir vidutinė šlyties deformacija yra lygi $\sim b/L$. Jei n dislokacijų ne pereina visą kristalą, o tik pajuda vidutiniu atstumu dL (1.10 pav.), priklausančiu nuo cemento akmens polinkio deformuotis, tuomet deformacijų prieaugis išreiškiamas (1.10) lygtimi (Messerschmidt 2010).

$$d\varepsilon \approx \frac{b}{L} \cdot \frac{n \cdot dL}{L} = \rho \cdot b \cdot dL, \tag{1.10}$$

čia $\rho = n/L^2$ – dislokacijų tankis, apibūdinantis dislokacijų skaičių vienetiniame plote; b įvertina suminį dislokacijų skaičių kristale.



1.10 pav. Kristalo dislokacinė deformacija (pagal Karato 2008)

Jei deformacijų prieaugis yra sukuriamas per laiką Δt, tuomet deformacijų greitis išreiškiamas Orowano (1.11) lygtimi.

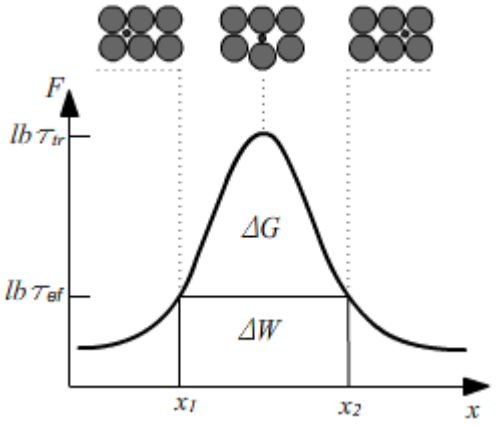
$$\dot{\varepsilon}_0 = \frac{d\varepsilon}{dt} = b \cdot \frac{dL}{dt} = b \cdot \rho \cdot v_m , \tag{1.11}$$

čia v_m – vidutinis dislokacijos greitis, kontroliuojamas kliūčių prigimties ir pasiskirstymo.

Lenkiamos sijos atveju (1.7 pav.) dislokacinį judėjimą šlyties zonoje galima iliustruoti terminės aktyvacijos schema (1.11 pav.). Šlyties paviršiuje (1.7 b pav.) dislokacinį judėjimą sukelia efektyvieji šlyties įtempiai τ_{ef}, tai yra įtempiai, išreiškiantys skirtumą tarp veikiančių įtempių ir vidinių pasipriešinimo įtempių. Jei šie įtempiai yra mažesni nei trinties įtempiai τ_{tr}, dislokacija negali pereiti kliūties ir lieka stabilioje padėtyje x_1 priekyje jos (1.11 pav.). Jei jėga $\boldsymbol{F}$ dislokacijos veikimo tašką perstumia į priekį dydžiu dL (1.10 pav.), yra atliekamas (1.12) formule išreiškiamas darbas ΔW (Messerschmidt 2010).

$$\Delta W = \tau_{ef} \cdot b \cdot l \cdot dL = F \cdot dL , \tag{1.12}$$

čia l – dislokacijos segmento ilgis.



1.11 pav. Dislokacinio judėjimo terminės aktyvacijos schema (pagal Messerschmidt 2010)

Suminė energija, reikalinga kliūčiai pereiti, yra išreiškiama Helmholtzo laisvąja energija $\Delta F = \Delta G + \Delta W$, kur $\Delta W = (x_1 - x_2) \cdot F$ yra efektyviųjų įtempių τ_{ef} atliekamas darbas. Kai temperatūra T yra didesnė už nulį, dėl terminių fliuktuacijų egzistuoja tikimybė pereiti kliūtį. Energijos barjeras (1.11 pav.), kuris turi būti įveiktas, yra apibūdinamas Gibbso laisvąja

energija ΔG. Esant pastoviam slėgiui ir temperatūrai, Gibbso laisvoji energija išreiškiama (1.13) formule (Messerschmidt 2010).

$$\Delta G = \int_{x_1}^{x_2} F(x)dL - (x_1 - x_2)\cdot F\,. \tag{1.13}$$

Tikimybė įveikti energijos barjerą (1.11 pav.) yra išreiškiama (1.14) lygtimi (Vineyard 1957).

$$P = e^{-\Delta G/kT}, \tag{1.14}$$

čia k – Bolcmano konstanta; T – absoliutinė temperatūra.

Mobilios dislokacijos pasižymi vidutiniu laukimo laiku $t_{l.m}$ (Messerschmidt 2010), po kurio jos greitai juda pro medžiagą į kitą įtvirtintą konfigūraciją, įveikdamos trinties įtempius τ_{tr}. Nuostoviosios būsenos sąlygomis Orowano (1.11) lygtis, susiejanti deformacijos greitį su vidutiniu dislokacijų greičiu v_m, įgauna (1.15) lygties pavidalą.

$$\dot{\varepsilon}_0 = \frac{\rho \cdot b \cdot d_m}{t_{l.m}}, \tag{1.15}$$

čia d_m – vidutinis atstumas tarp įtvirtinimo taškų.

Vidutinis laukimo laikas $t_{l.m}$ yra laikomas atvirkščiu vidutiniam barjero įveikimo greičiui ir išreiškiamas (1.16) lygtimi (Messerschmidt 2010).

$$t_{l.m} = \nu_0^{-1} \cdot e^{\Delta G/kT}, \tag{1.16}$$

čia ν_0 – bandymų dažnis.

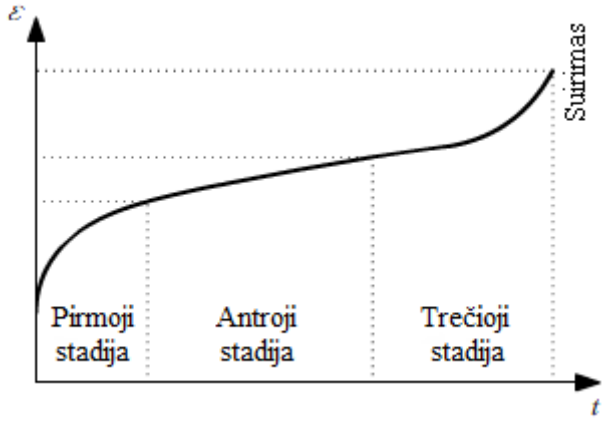
Galiausiai deformacijos greitis išreiškiama (1.17) lygtimi.

$$\dot{\varepsilon}_{ss} = \dot{\varepsilon}_0 \cdot e^{-\Delta G/kT}. \tag{1.17}$$

Galima įžvelgti analogiją tarp (1.17) formulės ir klampos (1.8) formulės. (1.8) formulėje vandens ir cemento santykis išreiškia aktyvacijos energiją, tačiau lieka neapibrėžta temperatūra T−svarbus termodinaminis rodiklis, nusakantis, kiek dislokacijų turi pakankamai energijos barjerui

įveikti. Dislokacijų egzistavimas dar nereiškia, kad įvyks dislokacinis judėjimas, todėl terminės fliuktuacijos turi didelę įtaką deformacijoms.

Nuostovioji valkšnumo deformacija yra reikšmingiausia inžinerijoje, tačiau yra tik dalis deformacijos greičio kreivės. Literatūroje randama valkšnumo kreivė (1.8 pav.) dažniausiai suskaidoma į tris stadijas (1.12 pav.). Pradinės deformacijos $\varepsilon_p = \sigma / E$ yra paprastas tamprus atsakas. Pirmoji stadija yra charakterizuojama mažėjančio greičio $\dot{\varepsilon} = d\varepsilon / dt$ valkšnumu. Antrajai stadijai būdingas nuostovusis $\dot{\varepsilon}_{ss}$ valkšnumas. Trečioji stadija pasižymi didėjančiu deformacijos geičiu (Time dependent... 2012).



1.12 pav. Valkšnumo kreivė (pagal Time dependent... 2012)

Trečioji 1.12 pav. stadija išreiškia konstrukcijos elgseną artėjant link suirimo, kai medžiagos struktūra yra stipriai pakitusi. Deformacijos pirmojoje ir antrojoje stadijose yra išreiškiamos (1.18) lygtimi (Time dependent... 2012).

$$\varepsilon_{I-II} = \varepsilon_p + \varepsilon \cdot \left(1 - e^{-mt}\right) + \dot{\varepsilon}_{ss} \cdot t, \tag{1.18}$$

čia ε_p – akimirksninė tamprioji deformacija; $\varepsilon \cdot \left(1 - e^{-mt}\right)$ – pirmosios stadijos (1.12 pav.) valkšnumo deformacija; $\dot{\varepsilon}_{ss} \cdot t$ išreiškia antrosios stadijos (1.12 pav.) valkšnumo deformaciją; m −eksponentinis parametras, kuris charakterizuoja deformacijos greičio slopimą pirmojoje valkšnumo stadijoje, ε − didžiausia deformacija pirmojoje valkšnumo stadijoje ir t atitinka laiką.

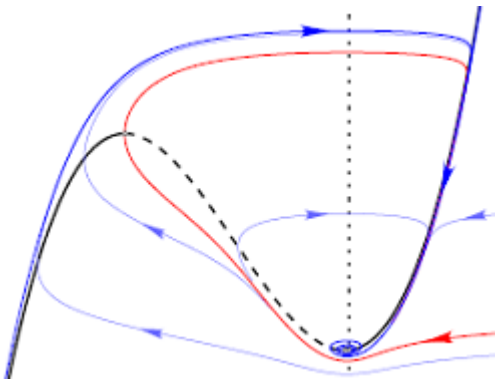
Didžiausia deformacija ε pirmojoje valkšnumo stadijoje yra išreiškiama Andrade (Cottrell 2004) pasiūlyta (1.19) priklausomybe.

$$\varepsilon = \chi \cdot t^{1/3}, \tag{1.19}$$

čia χ – konstanta.

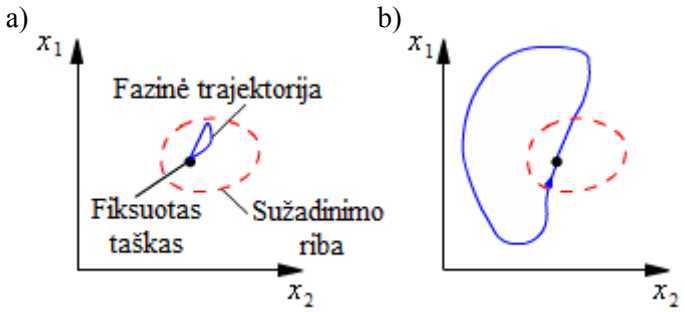
Nuo 70 % iki 80 % betono tūrio užima įvairaus dydžio užpildai, todėl suprantama, jog jie turi daug įtakos betono savybėms ir elgsenai. Fizikai apibūdina skirtinguose masteliuose vykstančius natūralius fenomenus, kadangi makrolygiu stebimo pasaulio sudėtingumas yra pasekmė didelio skaičiaus materiją sudarančių mikroskopinių dalelių. Statistinė mechanika siekia sujungti didelio dalelių rinkinio makroskopinę elgseną ir dėsnius, kurie valdo šias daleles. Vienas iš statistinės mechanikos pasiekimų yra ansamblių teorija (Greiner *et al*. 1995), susiejanti pusiausviros sistemos makroskopines savybes ir mikroskopinę dalelių sąveiką. Nagrinėjant realius procesus, pusiausvyros apibūdinimas atrodo labai ribotas, kadangi beveik nėra sistemų, kurios iš tikrųjų išlieka pusiausvyroje (Enns 2011). Nepusiausvirų sistemų fenomenologija yra daug sudėtingesnė nei pusiausvirų. Dėl šio sudėtingumo nėra bendro formalizmo stebimiems reiškiniams įvertinti, todėl būtinas nuodugnus tyrimas. Fundamentalus klausimas, kurį reikia nagrinėti, yra atsitiktinės fliuktuacijos gamtoje. Realios sistemos yra veikiamos atsitiktinių fliuktuacijų, kylančių dėl aplinkos kintamumo arba terminių efektų. Šiuo atveju stochastinis problemos formulavimas dažniausiai yra paprastesnis. Taikant stochastinį modelį (Beato 2006; Kamrin 2008) nebereikia daugybės deterministinių lygčių. Fliuktuojantis narys taip pat gali būti reikalingas, jei nagrinėjama tam tikros potencialo lokalaus minimumo būsenoje izoliuotos dalelės dinamika. Be išorinių jėgų poveikio dalelė niekada neišsilaisvins iš šio minimumo, todėl išsilaisvinimui apibūdinti į lygtis reikia įtraukti triukšmingą arba fliuktuojantį narį (Beato 2006). Fliuktuojantis narys yra mechanizmas, paaiškinantis tokius fenomenus kaip stochastinis rezonansas (Volkov *et al*. 2003), koherentinis rezonansas (Pikovsky ir Zaikin 2002) ir triukšmo sukelta pernaša (Schlesner *et al*. 2008; Bakunin 2011).

Atsitiktinumai yra dažnas įvykis eksperimentuose. Dideliu darbų kiekiu įrodyta, jog nuo pusiausvyros nutolusiose netiesinėse sistemose atsitiktinės fliuktuacijos turi ypatingą svarbą (Enns 2011). Akivaizdus pavyzdys matomas šviesai jautrioje Belousovo-Zhabotinsky cheminėje reakcijoje (Belmonte *et al*. 1997). Šioje reakcijoje šviesai jautrus katalizatorius reguliuoja sistemos sužadinimą. Kita šviesai jautri cheminė reakcija yra CDIMA (Munuzuri *et al*. 1993), rodanti Turingo formas. Stochastinės koherencijos tyrimai išplėsti ir į globaliai apjungtas sužadinamas sistemas, tokias kaip neurotinklai (Arecchi 2003). Saileris (2006) nagrinėjo sužadinamą FitzHugho-Nagumos tipo sistemą (1.13 pav.), veikiamą triukšmo.



1.13 pav. FitzHugho-Nagumos modelio fazinė erdvė (pagal Izhikevich ir FitzHugh 2006)

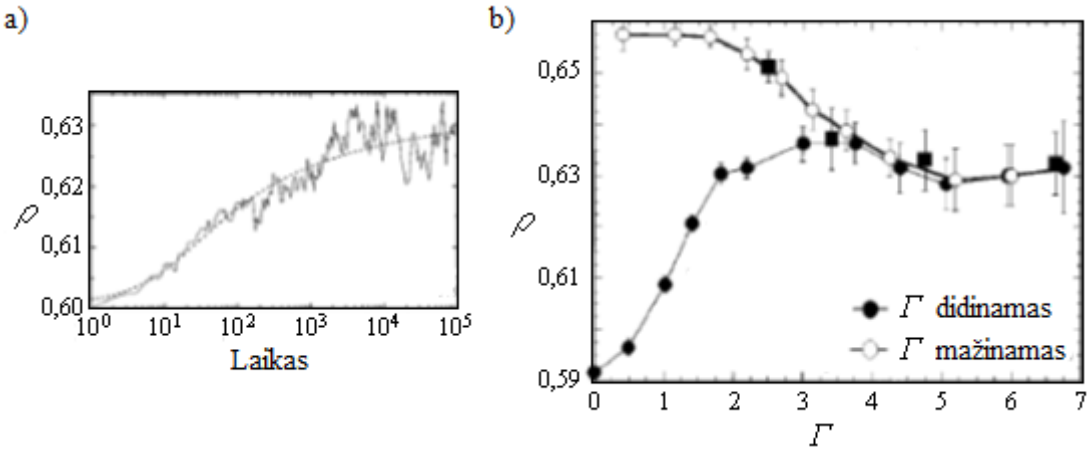
Sužadinama sistema turi stabilų fiksuotą tašką (1.14 pav.). Stabilumas yra tik lokali fiksuoto taško savybė. Tai reiškia, kad pakankamai mažas trikdis išnyksta, o trikdžiai viršijantys tam tikrą ribą sužadina sistemą, kuri atsako dideliu ekskursu fazinėje erdvėje, kol galiausiai grįžta į fiksuotą tašką (Sailer 2006). Laikas nuo sutrikdymo momento iki tol, kol sistema grįžta į fiksuoto taško aplinką, yra vadinamas neaktyviuoju, kadangi šio periodo metu sistema yra nejautri naujiems trikdžiams. Kai tik sistema grįžta į fiksuoto taško aplinką, ji vėl gali būti sužadinta.



1.14 pav. Sužadintos dviejų kintamųjų (x_1, x_2) sistemos atsakas į: a) silpną trikdį; b) stiprų trikdį (pagal Sailer 2006)

Galima įžvelgti panašumų tarp temperatūros vaidmens terminėje sistemoje ir vibracijų neterminėje sistemoje, tokioje kaip granuliuota medžiaga. Teoriškai šis klausimas buvo nagrinėtas Edwardso ir Oakeshotto (1989), kurie statistinę termodinamiką pritaikė granuliuotai medžiagai. Jų kontroversiška teorija pateikė visiškai naują požiūrį į granuliuotą medžiagą, akcentuodama dalelių mikrobūsenų tyrimo svarbą. Pagal teoriją, dalelės fazinėje erdvėje keliauja ne dėl terminių fliuktuacijų, bet dėl fliuktuacijų, sukeltų išoriniais triukšmo šaltiniais (pvz., vibravimas). Suteikiama energija turi būti triukšmo lygio (Makse *et al*. 2004), tai yra tokia, kad dalelės kontaktuotų viena su kita, tačiau galėtų ilgą laiką keliauti energijos paviršiumi. Tokiomis sąlygomis yra suteikiami tam tikri atsitiktiniai greičiai kaip priedas vidutiniam dalelių greičiui. Šie atsitiktiniai judesiai gali būti

laikomi granulių temperatūra. Nors visiška analogija su įprasta termodinamika negali būti pasiekta, ši granulių temperatūra yra atsakinga už daugumą pastebimų fenomenų, tokių kaip dalelių difuzija, pernašos reiškiniai.

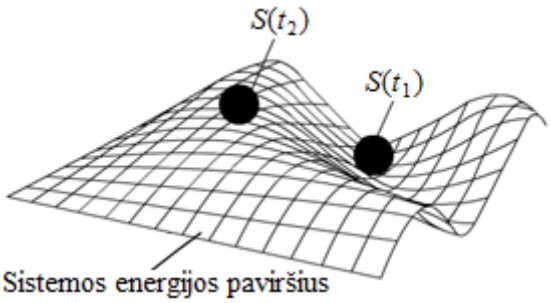


1.15 pav. Granuliuotos medžiagos tankinimas vibravimu: a) tūrinės dalies (tankumo) plėtotė laiko atžvilgiu; b) tūrinės dalies (tankumo) priklausomybė nuo normalizuoto vibravimo pagreičio (pagal Shokef 2006)

Žinoma, jog vibracijos veikiama granuliuota struktūra priklausomai nuo vibravimo sąlygų gali tankėti arba išsiplėsti. Tanki tam tikros gradacijos dalelių mišinio struktūra gali būti gauta tik tinkamai kontroliuojant vibravimo dažnį ir amplitudę. Nowakas *et al*. (1998) atliko tyrimus ir nustatė, jog struktūros tankis priklauso tik nuo vibravimo intensyvumo, tai yra vibravimo pagreičio ir laisvojo kritimo pagreičio santykio. Philippe ir Bideau (2003) teigė, kad tankėjimas yra panašus į terminės sistemos relaksaciją ir gali būti išreikštas eksponentiniu dėsniu. Idėja, kad konsoliduota medžiagos būsena gali būti gauta vibravimu aukštais dažniais ir santykinai mažomis amplitudėmis, buvo pasiūlyta Stewarto (Zhang ir Rosato 2006). Evansas ir Millmanas (1964) šį teiginį patvirtinto eksperimentais. D. D'Appolonia ir E. D'Appolonia (1967) matavo smėlio tūrinių pokyčių priklausomybę nuo bedimensio vibravimo pagreičio parametro $\Gamma = A \cdot \omega^2 / g$ (čia A – amplitudė; ω – kampinis dažnis; g – laisvojo kritimo pagreitis). Nustatyta, kad didžiausias tankis pasiektas prie $\Gamma = 2$. Dobry ir Whitmanas (1973), pratęsdami D. D'Appolonia ir E. D'Appolonia eksperimentus, stebėjo mažas Γ reikšmes ir gavo, jog sparčiausias tankėjimas vyko, kai $0{,}9 < \Gamma < 1{,}1$. Kaip matoma iš 1.15 pav. pateiktų grafikų, tankėjimas yra logaritmiškai lėtas, pasireiškiant tūrinėms fliuktuacijoms. Šios tūrinės fliuktuacijos leidžia granuliuotos medžiagos elgseną nagrinėti termodinaminiais principais.

1.1. Problema ir uždaviniai

Vibravimas yra populiariausias betono tankinimo būdas. Tankio fliuktuacijų nagrinėjimas granuliuotoje medžiagoje gali padėti suprasti tankėjimo fizinius fenomenus, tai yra kaip vibruota medžiaga, kuri nėra nuostovios būsenos, galiausiai ją pasiekia. Šių efektų supratimas yra svarbus ne tik fundamentiniu požiūriu, bet ir inžineriniam pritaikymui, tačiau sistemingos analizės šioje srityje vis dar trūksta, ypač tankėjimo procese erdviniu atveju. Įprastos teorijos nėra tinkamos apibūdinti granuliuotą medžiagą (Coniglio *et al*. 2004). Tai yra nepaprastos medžiagos, kadangi jos nepriklauso nei kietiems kūnams, nei skysčiams, nei dujoms. Kai kurie autoriai siūlo, jog tai keturių būsenų medžiaga (Jaeger *et al*. 1996). Tos pačios medžiagos savybės skirtingomis sąlygomis gali būti skirtingos, todėl reikia geresnio granuliuotų medžiagų supratimo ir fundamentalios teorijos jų elgsenai apibūdinti (Coniglio *et al*. 2004), tačiau tai yra sunkiai įgyvendinama dėl chaotiškos medžiagos prigimties. Kartais sistemos pavienio elemento pokytis gali sukelti ekstremalų jautrumą sistemos pradinės būsenos atžvilgiu, todėl kyla klausimas, kaip sistemos būsena $S(t_1)$ laiko momentu t_1 transformuojasi į būseną $S(t_2)$ laiko momentu t_2. Problemą galima iliustruoti tarsi energijos paviršių fazinėje erdvėje (Makse *et al*. 2004). Juo judėdama, sistema pereina iš vienos būsenos (energijos lygmens) į kitą (1.16 pav.).



1.16 pav. Sistemos būsenos stabilumas: $S(t_1)$ – stabili būsena; $S(t_2)$ – nestabili būsena (pagal Makse *et al*. 2004)

Siekiant visiškai suvokti dalelių mišinio būsenas, būtinas nuodugnus kiekvienos dalelės tikrosios padėties ir ją lėmusių veiksnių tyrimas, apimantis didžiulį kiekį informacijos. Didelė dalis šios informacijos yra perteklinė, kadangi keletas atskirų skirtingos mikroskopinės realizacijos būsenų dažnai gali turėti tas pačias eksperimente stebimas makrosavybes. Šiuo atveju dalelių mišinio elgsenai tirti pakankamai efektyviai gali būti taikomas diskrečiųjų elementų metodas (DEM), kuris, lyginant su gerai žinomais baigtinių elementų ir kitais metodais, dar tik kuriamas. Sparčiai didėjant kompiuterinės technikos pajėgumams, šis metodas įgyja praktinę reikšmę sprendžiant realius daugelio mechanikos sričių uždavinius.

Darbo tikslas – ištirti betono užpildams būdingomis fizinėmis-mechaninėmis savybėmis pasižyminčio sferinių dalelių mišinio struktūrą ir elgseną fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis.

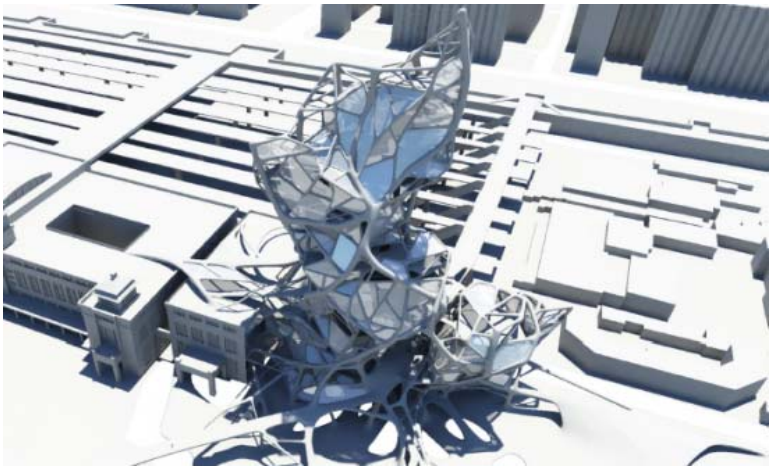
Fliuktuojanti aplinka – tai nagrinėjamos sistemos aplinka, sudaryta iš daugybės laisvės laipsnių, kuri, keisdamasi energija su sistema, atlieka šilumos baseino funkciją (Greiner *et al*. 1995) ir užtikrina nepusiausvirą būseną – kvazistatinį pusiausvyros būvį.

Kvazistatinė pusiausvyra yra sąlyginė pusiausvyra, kadangi ji reiškia makroskopinės būsenos stabilizavimąsi, kai dalelė yra suvaržoma apie ją susiformavusios tam tikros mišinio struktūros, tačiau mikrolygyje judėjimas vis dar yra įmanomas ir pasireiškia mikrobūsenų kitimu.

Tikslui pasiekti keliami šie uždaviniai:

- Įvertinti diskrečiųjų elementų metodo, paremto Niutono mechanika, tinkamumą fliuktuacijų veikiamo dalelių mišinio būsenų analizei.
- Diskrečiųjų elementų metodu atlikti viendispersio ir daugiadispersio sferinių dalelių mišinių laisvojo kritimo modeliavimą.
- Ištirti modeliuotų mišinių makrobūseną kvazistatinės pusiausvyros sąlygomis.
- Sukurti metodą atskirų mišinio dalelių mikrobūsenai charakterizuoti fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis.
- Pritaikius sukurtą metodą, atlikti skaitinio modeliavimo rezultatų tyrimą ir įvertinti metodo pagrįstumą.

Tyrimo rezultatas – tai žingsnis naujos kartos konstrukcijų, paremtų savaiminės organizacijos biologinėse sistemose koncepcija, plėtotėje (1.17 pav.).



1.17 pav. Architektūrinė morfogenezė (Ropolas 2012)

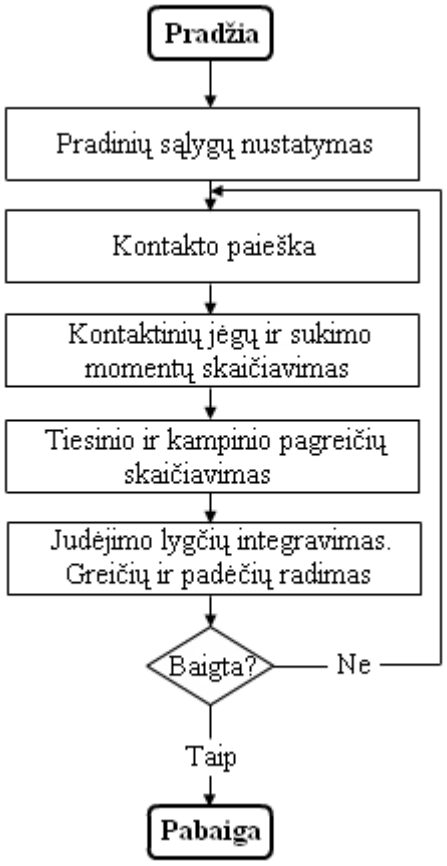
Vaizduotė yra svarbesnė nei žinios. Žinios yra ribotos, vaizduotė kuria pasaulį.

Albertas Einšteinas

2. TYRIMO METODINIAI ASPEKTAI

2.1. Diskrečiųjų elementų metodas

Diskrečiųjų elementų metodas (DEM) – tai skaitinis metodas, skirtas didelio dalelių kiekio dinaminei elgsenai modeliuoti (Cundall ir Strack 1979). 2.1 pav. parodyta modeliavimo eigos principinė schema.



2.1 pav. Diskrečiųjų elementų metodo principinė schema
(pagal: Alkhaldi 2007; Kačianauskas *et al*. 2010)

2.1.1. Kontakto modelis

Taikomas minkšto potencialo kontakto modelis (Balevičius *et al*. 2006), kuriame dalelių kontaktas įvertinamas persiklojimu. Dalelę veikianti jėga apskaičiuojama pagal persiklojimo gylį h_{ij}. Bendroji jėgos forma tarp sąveikaujančių dalelių i ir j išreiškiama (2.1) normalinės ir tangentinės komponenčių suma.

$$\boldsymbol{F}_{ij} = \boldsymbol{F}_{ij}^{n} + \boldsymbol{F}_{ij}^{t}; \tag{2.1}$$

čia $\boldsymbol{F}_{ij}^{n}$ ir $\boldsymbol{F}_{ij}^{t}$ – normalinė ir tangentinė $\boldsymbol{F}_{ij}$ jėgos komponentės išreiškiamos taip:

$$\boldsymbol{F}_{ij}^{n} = F_{ij}^{n} \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_{n}; \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{F}_{ij}^{t} = F_{ij}^{t} \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_{t}; \tag{2.3}$$

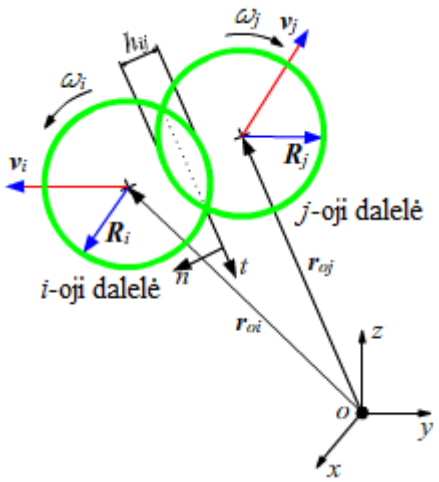
čia $\hat{\boldsymbol{i}}_{n}$ ir $\hat{\boldsymbol{i}}_{t}$ – normalinės ir tangentinės krypties vienetiniai vektoriai.

Kontaktai yra dviejų tipų:

- dalelės kontaktas su kita dalele;
- dalelės kontaktas su siena.

Dalelės kontaktas su kita dalele

Minkšto potencialo kontakto modelyje, kurį išsamiai aprašo Tsuji *et al.* (1991), deformacijos mechanizmą sudaro dvi dalys: viena, kuri yra atsistatanti kaip spyruoklė ir jos darbas priklauso tik nuo persiklojimo dydžio, ir kita, kaip slopinimo elementas, susijęs su persiklojimo h_{ij} (2.2 pav.) pokyčio greičiu.

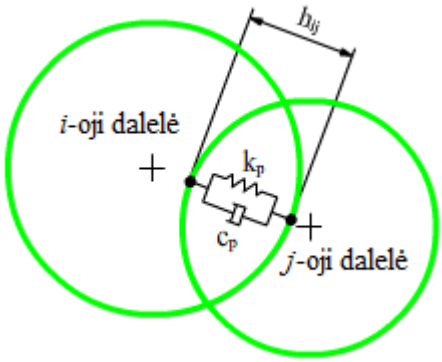


2.2 pav. Dalelių kontaktas (pagal: Alkhaldi 2007; Balevičius *et al*. 2006)

Normalinė jėga $\boldsymbol{F}_{ij}^{n}$ tarp dviejų sąveikaujančių i ir j dalelių yra tamprios atstumties jėgos spyruoklėje ir disipatyvios klampios jėgos slopinimo elemente (2.4) suma (Alkhaldi 2007).

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{ij}}^{\boldsymbol{n}} = \left(k_p \cdot h_{ij}^{3/2} + c_p \cdot \dot{h}_{ij}\right) \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_{\boldsymbol{n}}, \tag{2.4}$$

čia k_p ir c_p – spyruoklės standumas ir slopinimo koeficientas (2.3 pav.); h_{ij} ir $\dot{h}_{ij}$ – atitinkamai, persiklojimas ir santykinis persiklojimo greitis normaline kryptimi tarp dviejų sąveikaujančių i ir j dalelių.



2.3 pav. i-osios ir j-osios dalelių normalinis kontaktas (pagal Alkhaldi 2007)

Dalelių persiklojimas h_{ij} (2.3 pav.) išreiškiamas (2.5) formule (Alkhaldi 2007).

$$h_{ij} = \left(R_i + R_j\right) - \left(\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{oi}} - \boldsymbol{r}_{\boldsymbol{oj}}\right)^T \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_n, \tag{2.5}$$

čia R_i ir R_j – i-osios ir j-osios dalelių spinduliai; $\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{oi}}$ ir $\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{oj}}$ – i-osios ir j-osios dalelių padėties vektoriai.

Tsuji *et al*. (1991) parodė, kad slopinimo koeficientas c_p, išreiškiamas (2.6) formule, priklauso nuo dalelės masės, standumo ir restitucijos koeficientų.

$$c_p = \mu_h \cdot h_{ij}^{3/2}; \tag{2.6}$$

$$\mu_h = \frac{3 \cdot k_p \cdot \left(1 - e_n^2\right)}{4 \cdot v_n^{pr}}; \tag{2.7}$$

čia μ_h – slopinimo koeficientas, išreiškiantis slopinimo histerezę; e_n – normalinis restitucijos koeficientas; v_n^{pr} – dalelės normalinis greitis prieš smūgį.

Susidūrimo normalinis slopinimas yra charakterizuojamas normalinės restitucijos koeficientu e_n, laikomu kontakto tamprumo matu. Šis koeficientas išreiškiamas (2.8) formule ir parodo greičio normalinio komponento po ir prieš smūgį santykį (Alkhaldi 2007).

$$e_n = \left| \frac{v_n^{po}}{v_n^{pr}} \right|, \; 0 \le e_n \le 1, \tag{2.8}$$

čia v_n^{po} – dalelės normalinis greitis po smūgio.

Kontakto spyruoklės standumo koeficientas k_p yra apskaičiuojamas pagal Herco (orig. *Hertz*) kontakto teoriją normalinei kontakto jėgai. Normalinis standumo koeficientas priklauso nuo kontaktuojančių dalelių efektyviojo spindulio bei efektyviojo tamprumo modulio ir išreiškiamas (2.9) formule (Yohannes 2009).

$$k_p = \frac{4}{3} \cdot \sqrt{R_{ij}} \cdot E_{ij}, \tag{2.9}$$

čia R_{ij} – efektyvusis spindulys:

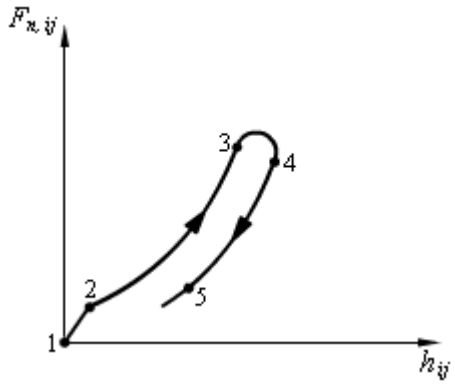
$$\frac{1}{R_{ij}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}, \tag{2.10}$$

E_{ij} – efektyvusis tamprumo modulis:

$$\frac{1}{E_{ij}} = \frac{1-\nu_i^2}{E_i} + \frac{1-\nu_j^2}{E_j}, \tag{2.11}$$

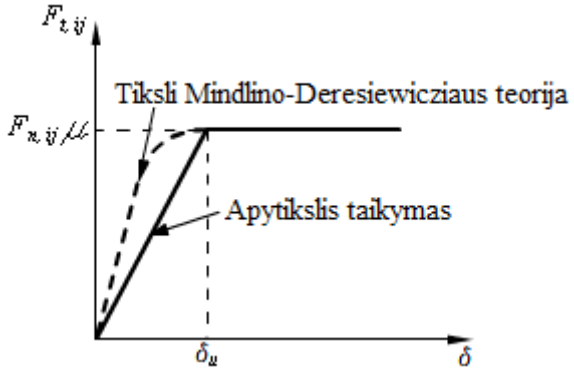
čia ν_i ir ν_j – i-osios ir j-osios dalelių Puasono (orig. *Poisson*) koeficientai; E_i ir E_j – i-osios ir j-osios dalelių tamprumo moduliai.

Kontakto normalinės jėgos-poslinkio priklausomybės galima grafinė interpretacija parodyta 2.4 pav.



2.4 pav. Klampiosios ir Herco kontakto jėgos-persiklojimo modelis deformavimo kelyje 1–5: 1–2 – lemiantis poveikis priklauso klampaus kontakto traukos jėgai; 2–3 – lemiantis poveikis priklauso Herco kontakto traukos jėgai; 3–4 – lemiantį poveikį daro klampaus kontakto stūmos jėga; 4–5 – lemiantį poveikį daro Herco kontakto stūmos jėga (vėliau dalelė gali prarasti kontaktą dėl stūmos jėgos)

Tangentinės kontakto jėgos modelis (2.5 pav.; 2.6 pav.) apima Mindlino ir Deresiewicziaus (1953) teorijos taikymą (Džiugys ir Peters 2001; Balevičius *et al*. 2004). Modelis yra pagrįstas apytiksliu kontaktuojančių dalelių mikropraslydimo tangentine linkme vertinimu, kai daleles spaudžia normalinė kontakto jėga, o tangentinė kontakto jėga gali kisti. Modeliuojant laikoma, kad iki tol, kol bus įveikta statinė trinties jėga, tai yra kai dalelių kontaktinio paviršiaus spindulys sumažės iki nykstamai mažo dydžio ir viena dalelė pradės slysti kitos atžvilgiu, apytiksliai galioja tiesinė priklausomybė tarp tangentinės jėgos ir poslinkio (2.5 pav.). Ribinis mikroposlinkis δ_u, kurį viršijus dalelė pradeda slysti priešinantis mažesnei dinaminės trinties jėgai, nustatomas pagal Mindlino ir Deresiewicziaus (1953) teoriją (2.5 pav.).



PASTABA: δ_u yra ribinis mikroposlinkis.

2.5 pav. Tangentinės kontakto jėgos modelis (be klampiosios dedamosios)

Tangentinė jėga yra aktyvi kontaktuose, kuriuose dalelės santykinis tangentinis greitis nėra lygus nuliui. Santykinis normalinis ir tangentinis greičiai (Alkhaldi 2007) yra tokie:

$$v_{ij}^{n} = \dot{h}_{ij} = \left(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j\right)^T \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_n; \tag{2.12}$$

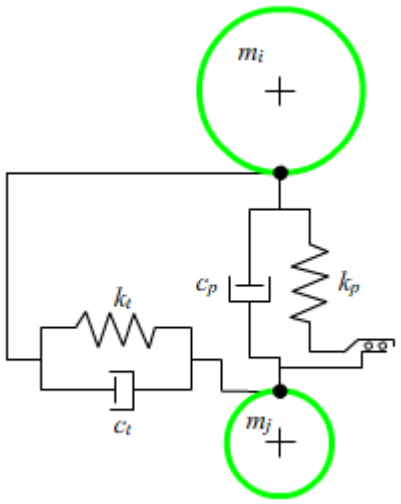
$$v_{ij}^{t} = \left(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j\right)^T \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_t + \omega_i \cdot R_i + \omega_j \cdot R_j; \tag{2.13}$$

čia $\boldsymbol{v}_i$ ir $\boldsymbol{v}_j$ – i-osios ir j-osios dalelių linijinio greičio vektoriai; ω_i ir ω_j – i-osios ir j-osios dalelių kampiniai greičiai.

Jei prieš kontaktą tangentinis greitis šlyties plokštumoje yra lygus nuliui, kontaktas yra normalinis, priešingu atveju – tangentinis. Tangentinė ir normalinė jėgos yra susietos Kulono (orig. *Coulomb*) dėsniu, išreiškiamu (2.14) sistema (Alkhaldi 2007).

$$F_{ij}^{t} = \begin{cases} F_{stat.}^{t} \le \mu \cdot F_{ij}^{n}, & kai\ v_{ij}^{t} = 0, \\ F_{din.}^{t} = \mu \cdot F_{ij}^{n}, & kai\ v_{ij}^{t} \neq 0, \end{cases} \tag{2.14}$$

čia μ – trinties koeficientas. Ženklas „$\le$“ reiškia, jog statinės trinties atveju jėga F_{ij}^{t} tik kompensuoja kontakte veikiančią nežinomą išorinę šlyties jėgą $F_{ij}^{apl.}$, taip kad $v_{ij}^{t} = 0$. Jei $F_{ij}^{apl} > \mu \cdot F_{ij}^{n}$, pereinama į dinaminės trinties režimą, kuriame $F_{ij}^{t} = \mu \cdot F_{ij}^{n}$, ir dalelė slysta.



2.6 pav. i-osios ir j-osios dalelių tangentinis kontaktas (pagal Alkhaldi 2007)

Tangentinės kontakto jėgos modelyje (2.5 pav.), išreikštame (2.15) sistema, taikomos tos pačios išraiškos kaip ir normalinės jėgos atveju, tik įvedami tangentiniai standumo ir slopinimo koeficientai (Yohannes 2009).

$$F_{din.}^{t} = \min\begin{cases} \left| k_t \cdot h_{ij} + c_t \cdot \dot{h}_{ij} \right|, \\ \left| \mu \cdot F_{ij}^{n} \right|. \end{cases} \tag{2.15}$$

Tangentinis standumo koeficientas k_t (žr. (2.16) formulė) yra išvestas iš Mindlino ir Deresiewicziaus (1953) kontakto teorijos. Jis priklauso nuo sąveikaujančių dalelių efektyviojo spindulio (2.10) ir efektyviojo šlyties modulio (2.17).

$$k_t = 8 \cdot \sqrt{R_{ij}} \cdot G_{ij}, \tag{2.16}$$

čia G_{ij} – efektyvusis šlyties modulis:

$$\frac{1}{G_{ij}} = \frac{2\left(1+\nu_i\right)\left(2-\nu_i\right)}{E_i} + \frac{2\left(1+\nu_j\right)\left(2-\nu_j\right)}{E_j}. \tag{2.17}$$

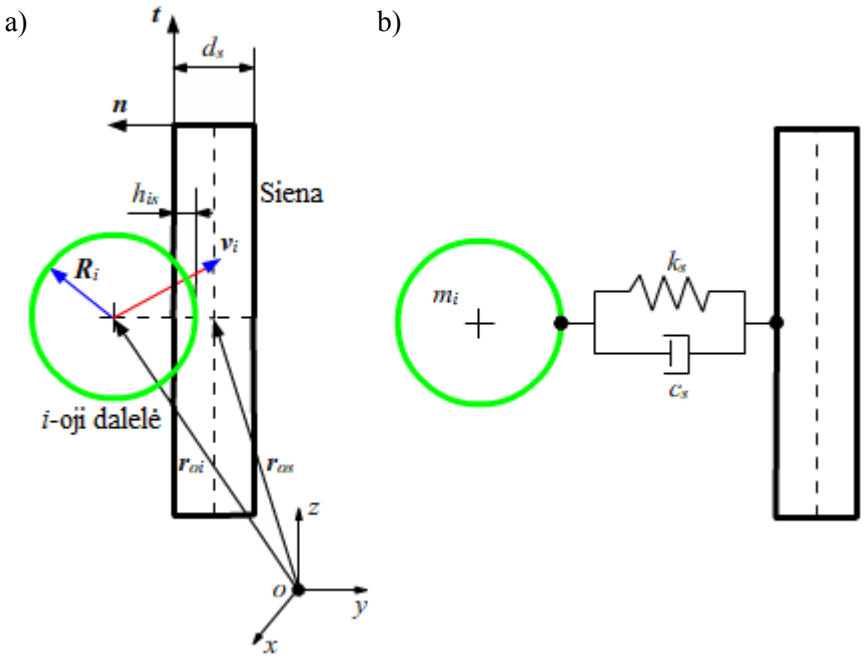
Kontakto modelyje taip pat atsižvelgiama į galimą mišinio dalelių riedėjimo trinties poveikį dėl sukimo momentų (Balevičius *et al*. 2011).

Dalelės kontaktas su siena

Šiuo atveju sienos spindulys ir masė yra laikomi begalinio dydžio, todėl kontakto metu efektyvusis spindulys (2.10) yra lygus dalelės spinduliui. Taip pat pažymėtina, jog siena nejuda. Dalelės persiklojimo su siena dydis h_{is} (2.7 pav.) išreiškiamas (2.18) formule (Alkhaldi 2007).

$$h_{is} = \left(R_i + \frac{d_s}{2} \right) - \left(\boldsymbol{r}_{oi} - \boldsymbol{r}_{os} \right)^T \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_{\boldsymbol{n}}, \tag{2.18}$$

čia d_s – sienos storis; $\boldsymbol{r}_{oi}$ ir $\boldsymbol{r}_{os}$ – i-osios dalelės ir sienos centrų padėties vektoriai.



2.7 pav. Dalelės ir sienos kontaktas: a) kontakto persiklojimas; b) i -osios dalelės ir sienos normalinis kontaktas (pagal Alkhaldi 2007)

Dalelei susilietus su siena, atsiranda priešingos krypties kontaktinė jėga, reprezentuojama tamprios spyruoklės ir klampaus slopinimo jėgų suma (2.7 b pav).

2.1.2. Judėjimo lygtys

DEM nežinomieji – tai dalelių padėtys, greičiai ir pagreičiai, nustatomi sprendžiant antrojo Niutono dėsnio lygtį slenkamajam ir sukamajam judėjimui, kai yra žinomos daleles veikiančios jėgos. Taigi i-osios dalelės judėjimui apibūdinti galima taikyti literatūroje (Džiugys ir Peters 2001; Balevičius *et al*. 2004; Balevičius *et al*. 2011) žinomas lygtis:

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{r}_{oi}}{dt^2} = \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \boldsymbol{F}_{ij} + m_i \cdot \boldsymbol{g}\,; \tag{2.19}$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \boldsymbol{d}_{c.ij} \times \boldsymbol{F}_{ij} + \boldsymbol{M}_{ij.rol}\,; \tag{2.20}$$

čia $\boldsymbol{r}_{oi}$, $\boldsymbol{\omega}_i$ – atitinkamai i-osios dalelės masės centro padėties ir kampinio greičio vektoriai; m_i – i-osios dalelės masė ($i = 1,...,n$); I_i – i-osios dalelės inercijos momentas; t – nagrinėjamas laikas; $\boldsymbol{g}$ – laisvojo kritimo pagreičio vektorius; $\boldsymbol{d}_{c.ij}$ – vektorius, nusakantis kontaktinio taško padėtį kontaktuojančių dalelių centrų atžvilgiu; $\boldsymbol{M}_{ij,rol}$ – sukimo momentas, kurį lemią riedėjimo trintis.

2.1.3. Judėjimo lygčių integravimas

Dalelių kinematiniai parametrai kiekviename laiko žingsnyje randami iš (2.21) lygčių, pasinaudojus (2.19) ir (2.20) lygtimis apskaičiuotais pagreičiais.

$$\begin{cases} \Delta \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{a}_i \cdot \Delta t, \\ \Delta \boldsymbol{\omega}_i = \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \Delta t, \\ \Delta \boldsymbol{r}_{oi} = \boldsymbol{v}_i \cdot \Delta t, \end{cases} \tag{2.21}$$

čia Δ rodo kiekvieno dydžio pokytį laiko atžvilgiu; $\boldsymbol{v}_i$ – i-osios dalelės linijinio greičio vektorius; $\boldsymbol{a}_i$ – i-osios dalelės linijinio pagreičio vektorius; $\boldsymbol{\omega}_i$ – i-osios dalelės kampinio greičio vektorius; $\boldsymbol{\alpha}_i$ – i-osios dalelės kampinio pagreičio vektorius; Δt – integravimui taikytas laiko žingsnis.

Laiko žingsnio dydis parenkamas remiantis įprasta slopinamos svyruoklės antrosios eilės diferencialine (2.22) lygtimi (Alkhaldi 2007).

$$\ddot{h}_{ij} + 2 \cdot \eta \cdot \dot{h}_{ij} + \omega_0^2 \cdot h_{ij} = 0, \tag{2.22}$$

čia $\eta = \eta_0 \cdot \omega_0$; $2 \cdot \eta$, η_0 ir ω_0 – atitinkamai slopinimo parametras, slopinimo santykis ir neslopinamos sistemos dažnis.

Slopinimo parametras ir neslopinamos sistemos dažnis dydžiais k_p, c_p ir m_{ij} gali būti išreikšti (Alkhaldi 2007) taip:

$$2 \cdot \eta = \frac{c_p}{m_{ij}}; \tag{2.23}$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k_p}{m_{ij}}}; \tag{2.24}$$

čia m_{ij} – sąveikaujančių dalelių masė:

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}. \tag{2.25}$$

Laiko žingsnis Δt turėtų būti mažesnis nei atvirkščias savųjų svyravimų dažnio Ω dydis, kuris apskaičiuojamas (2.26) formule (Alkhaldi 2007).

$$\Omega = \sqrt{\omega_0^2 - \eta^2} = \sqrt{\frac{k_p}{m_{ij}} - \frac{c_p^2}{4 \cdot m_{ij}^2}}. \tag{2.26}$$

Dalelių kontakto trukmė gali būti apskaičiuota savųjų svyravimų periodo (2.27) formule.

$$T = \frac{2 \cdot \pi}{\Omega}. \tag{2.27}$$

Tol, kol $\eta < \omega_0$, kontakto trukmė yra laikoma lygia pusei svyravimų periodo (2.27) ir gali būti išreikšta taip:

$$t_c = \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\Omega}. \tag{2.28}$$

Laiko žingsnis integravimui turi būti parinktas mažesnis nei kontakto savųjų svyravimų dažnis. Santykis $1:20$ yra pakankamas skaitiniam stabilumui užtikrinti (Alkhaldi 2007; Kačianauskas *et al*. 2010), todėl laiko žingsnis parenkamas pagal šią sąlygą:

$$\Delta t < \frac{t_c}{20}. \tag{2.29}$$

Kai jėga tiesiogiai proporcinga persiklojimui ir nėra slopinimo, Munjizos (2004) parodė, jog laiko žingsnis taip pat turėtų būti mažesnis nei $t_{\max}$:

$$t_{\max} = 2 \cdot \sqrt{\frac{m}{k}}, \tag{2.30}$$

čia m – bandinio mažiausios dalelės masė; k – didesnysis standumo koeficientas (normalinis arba tangentinis).

Netiesinių diferencialinių judėjimo (2.19), (2.20) lygčių skaitinis integravimas atliekamas pagal penktosios eilės Gearo prediktoriaus-korektoriaus schemą (Balevičius *et al*. 2006).

2.2. Niutono mechanika varžančioje aplinkoje

Niutono mechanika nagrinėja vienos dalelės padėties nustatymo problemą, žinant ją veikiančią jėgą. Dalelės judėjimą išreiškianti diferencialinė lygtis yra tokia:

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}_{oi}}{dt^2} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_{oi}\right). \tag{2.31}$$

Antrosios eilės diferencialinės (2.31) lygties sprendimas reikalauja pradinių sąlygų apibrėžimo. Tiksliai žinant pradines sąlygas, egzistuoja unikalus lygties sprendinys. Iš tikrųjų realybėje nieko neįmanoma nustatyti tiksliai, tad suprantama, jog ir pradinės sąlygos yra tik apytikslis dydis, verčiantis nagrinėti sprendinio stabilumą. Klasikinės mechanikos eksperimentuose pradinės sąlygos negali būti nustatytos absoliučiu tikslumu, todėl visuomet bus tam tikras atsitiktinumas. Be to, egzistuoja dinaminės sistemos, kuriose dvejos pradinių sąlygų būsenos yra tokios artimos, kad neįmanoma jų atskirti. Šis atvejis yra dažnas nagrinėjant dinamines sistemas fliuktuojančioje aplinkoje (Lhotka 2008). Gaunama, jog nors tokia sistema formaliai yra deterministinė, tačiau jos būsenos nustatymas reikalauja preciziško pradinių sąlygų žinojimo, o tai, savaime suprantama, yra neįmanoma, todėl sistema tampa chaotine (Schuster ir Just 2005).

Niutono mechanika nagrinėja judėjimą inercinėje atskaitos sistemoje, tai yra euklidinėje trimatėje erdvėje, charakterizuojamoje Dekarto (orig. *Descartes*) koordinatėmis. Gali egzistuoti situacija, kai sistemą sudaranti dalelė laisvai juda ne visoje trimatėje Euklido (orig. *Euclid*) erdvėje, o tik tam tikrame ribotame jos plote. Tokia sistema yra suvaržyta: jos judėjimo plotas, arba konfigūracinė daugdara, nėra nei euklidinė, nei trimatė, todėl judėjimo lygtys privalo turėti informaciją apie suvaržymus sudarančias jėgas (José ir Saletan 1998).

Dinaminės sistemos judesys dažnai yra suvaržytas išorės jėgų, kurios iš pradžių nėra žinomos. Pavyzdys gali būti fliuktuojantis kaimyninių dalelių poveikis kvazistatiniame pusiausvyros būvyje. Jei nagrinėjama sistema iš N dalelių, suvaržymai yra išreiškiami S rinkiniu suvaržymų (2.32) lygčių:

$$h_n\left(\boldsymbol{r}_{o1},...,\boldsymbol{r}_{oN},t\right) = 0\ ,\ n = 1,...,S < 3N\ , \tag{2.32}$$

čia h_n – diferencijuojama funkcija su žinomu nuo dalelių judėjimo nepriklausomu suvaržymų kitimu laiko t atžvilgiu.

(2.32) lygtimis įvertinami suvaržymai yra holonominiai (José ir Saletan 1998). Holonominė sistema – tai sistema, kurios visi ryšiai varžo sistemos taškų padėtį, bet ne greitį. Bendrieji

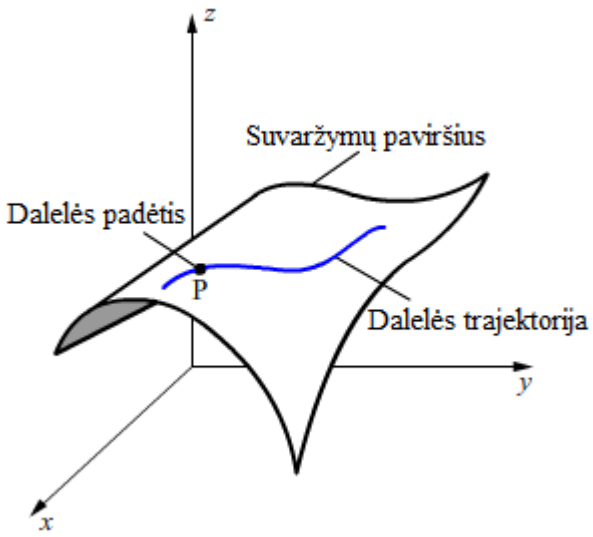
suvaržymai (tarp jų yra ir sukimosi suvaržymai) taip pat priklauso ir nuo greičio. Jie išreiškiami (2.33) lygtimis (José ir Saletan 1998).

$$h_n\left(\boldsymbol{r}_{o1},...,\boldsymbol{r}_{oN};\dot{\boldsymbol{r}}_{o1},....,\dot{\boldsymbol{r}}_{oN},t\right)=0,\ n=1,...,S<3N. \tag{2.33}$$

Taip pat egzistuoja suvaržymai, kurie neišreiškiami lygtimis (José ir Saletan 1998):

$$h_n\left(\boldsymbol{r}_{o1},...,\boldsymbol{r}_{oN},t\right)<0,\ n=1,...,S<3N. \tag{2.34}$$

(2.34) yra atvejis dalelių, suvaržytų tam tikrame paviršiaus plote (2.8 pav.).



2.8 pav. Paviršiaus $h_n\left(\boldsymbol{r}_o,t\right)=0$ suvaržytas taškinės dalelės judėjimas (pagal José ir Saletan 1998)

2.8 pav. pavaizduota taškinė dalelė, judanti (2.35) lygtimi išreiškiamame paviršiuje.

$$h_n\left(\boldsymbol{r}_o,t\right)=0. \tag{2.35}$$

Šiuo atveju $N=1$ (viena dalelė) ir $S=1$ (viena suvaržymų lygtis). Judėjimo (2.31) lygtis įvertinus suvaržymus pertvarkoma į (2.36) lygtį (José ir Saletan 1998).

$$m\cdot\ddot{\boldsymbol{r}}_o=\boldsymbol{F}+\boldsymbol{F}_S. \tag{2.36}$$

čia $\boldsymbol{F}$ – žinoma išorinė jėga ir $\boldsymbol{F}_S$ – nežinoma jėga dėl judėjimo suvaržymų.

Gaunamos keturios lygtys: viena paviršiaus (2.35) lygtis ir trys judėjimo (2.36) lygtys, tačiau turimos šešios nežinomos laiko funkcijos: trys nežinomieji $\boldsymbol{r_o}$ komponentai ir trys $\boldsymbol{F_S}$ komponentai, todėl lygčių nepakanka judėjimui apibūdinti. Problemą galima išspręsti $\boldsymbol{F_S}$ pasirenkant taip, jog ji būtų statmena paviršiui, tokiu būdu eliminuojant lygiagrečias paviršiui jėgas. Jei paviršius yra nusakomas taškų (x, y, z) rinkiniu, tenkinančiu (2.35) lygtį, tai normalė taške (x, y, z) yra išreiškiama gradientu $\nabla h_n(\boldsymbol{r_o}, t)$. Tariama, jog $\nabla h_n \neq 0$, tai yra egzistuoja normalė paviršiui $h_n(\boldsymbol{r_o}, t) = 0$. Paviršiui statmena suvaržymų jėga $\boldsymbol{F_S}$ gali būti išreikšta (2.37) formule (José ir Saletan 1998).

$$\boldsymbol{F_S} = \lambda \cdot \nabla h_n(\boldsymbol{r_o}, t), \tag{2.37}$$

čia λ – tam tikra laiko t funkcija.

(2.37) lygtis panaikina matematinius sunkumus, kadangi dabar keturios lygtys įtraukia tik keturias nežinomas funkcijas: vieną $\lambda(t)$ ir tris $\boldsymbol{r_o}(t)$ komponentes. Priimama, kad išorinė jėga aprašoma potencialo funkcija, tai yra $\boldsymbol{F} = -\nabla V(\boldsymbol{r_o}, t)$. Įrašius (2.37) lygtį į (2.36) lygtį ir skaliariškai abi puses padauginus iš $\dot{\boldsymbol{r}}_o$ bei atlikus pertvarkymus, gaunama (2.38) lygtis (José ir Saletan 1998).

$$m \cdot \ddot{\boldsymbol{r}}_o \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_o \equiv \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2} m \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_o^2\right) = -\nabla V \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_o + \lambda \cdot \nabla h_n \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_o . \tag{2.38}$$

Tariama, kad $\boldsymbol{r_o}(t)$ yra (2.38) judėjimo lygties sprendinys. Kadangi dalelė išlieka ant paviršiaus $h_n(\boldsymbol{r_o}, t) = 0$, tad $dh_n / dt = 0$ (José ir Saletan 1998). Galimas ir toks atvejis, kai:

$$\frac{dh_n}{dt} = \nabla h_n \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_o + \frac{\partial h_n}{\partial t} \tag{2.39}$$

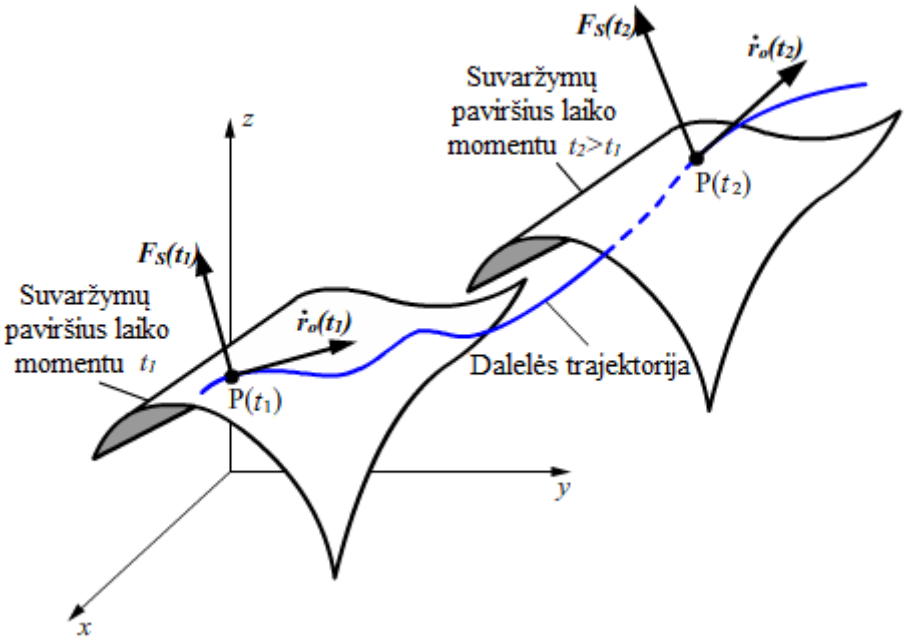
ir

$$\frac{dV}{dt} = \nabla V \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_o + \frac{\partial V}{\partial t}. \tag{2.40}$$

Pagal (2.39) ir (2.40) lygtis pertvarkius (2.38) lygtį, gaunama (2.41) išraiška (José ir Saletan 1998).

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}_o^2 + V\right] = \frac{\partial V}{\partial t} - \lambda\frac{\partial h_n}{\partial t}. \qquad (2.41)$$

(2.41) lygtis rodo (José ir Saletan 1998), jog dalelės suminė energija $\mathcal{H}$ keičiasi, jei keičiasi potencialo funkcija V arba paviršiaus funkcija h_n. Jei energija keičiasi, tai yra jei $d\mathcal{H} / dt \neq 0$, darbo-energijos teorema teigia, jog sistemoje yra atliekamas darbas. Jei priimama, kad $\partial V / \partial t = 0$, tai (2.41) lygtis rodo, jog darbą atlieka paviršius, nes šiuo atveju dalelės greitis nebūtinai turi būti nukreiptas liestine jam kaip parodyta 2.9 pav.



2.9 pav. Nuo laiko priklausantis suvaržymų paviršius (pagal José ir Saletan 1998)

Prielaida, kad $\boldsymbol{F}_S$ yra statmena paviršiui, reiškia, jog suvaržymų jėgos neatlieka darbo. Iš tikrųjų, dauguma paviršių sukelia jėgas, kurios turi tangentines komponentes, pavyzdžiui, trintis, todėl atlieka darbą. Egzistuoja ir kitos, nedisipatyvios suvaržymų jėgos, kurios turi suvaržymų paviršiui lygiagrečias komponentes, tačiau neatlieka darbo, pavyzdžiui, magnetinės jėgos į įkrautas daleles, veikiančios statmenai greičio vektoriui. Taigi, neįvertinant trinties ir magnetinių jėgų, paviršius yra pastovus (José ir Saletan 1998).

Pagal Niutono mechaniką, l laisvės laipsnių turinčios dinaminės sistemos judėjimas gali būti apibūdintas l antrosios eilės diferencialinių lygčių. Šios judėjimo lygtys turi sprendinius, kurie

yra tolydžios analitinės funkcijos, priklausančios nuo laiko ir pradinių sąlygų. Jei dinaminė sistema yra suvaržyta, reikia performuoti Niutono judėjimo lygtis, tačiau tam būtina žinoti dalelės aplinkos kitimo funkciją arba galima įtraukti stochastinį narį, gaunant Langevino lygtį (Al Hammal 2007; Cugliandolo 2011), naudojamą nepusiausviroje statistinėje mechanikoje fliuktuacijoms tirti. Efektyvesni sprendimo būdai yra Lagranžo (orig. *Lagrange*) arba Hamiltono energiniai metodai (Percival ir Richards 1982).

Vykdant DEM modeliavimą, atliekamas skaitinis Niutono judėjimo lygčių integravimas (Balevičius *et al*. 2006), tad jų performuoti nereikia ir modeliavimo rezultatai, priklausomai nuo pasirinkto laiko žingsnio, yra tinkami tirti kvazistatiniam būviui fliuktuojančioje aplinkoje, tačiau gautųjų rezultatų analizei yra patogiau pasinaudoti Hamiltono mechanikos principais.

Kituose poskyriuose supažindinama su pagrindiniais Hamiltono mechanikos principais ir chaoso teorija, neatsiejama nuo nepusiausvirų fliuktuacijų.

2.3. Hamiltono mechanika

2.3.1. Integruojama tiesinė Hamiltono sistema

Dinaminė sistema yra matematinė koncepcija, kai pastovi taisyklė apibūdina taško padėties kitimą laiko atžvilgiu tam tikroje geometrinėje erdvėje. Bet kuriuo nagrinėjamu laiko momentu dinaminė sistema turi būseną, apibūdinamą rinkiniu realiųjų skaičių, kurie gali būti pavaizduoti tašku fazinėje erdvėje (Percival ir Richards 1982). Fazinė erdvė – tai abstrakti daugiamatė erdvė, kurios koordinatės yra sistemos laisvės laipsniai, tai yra skaičius nepriklausomų kintamųjų, reikalingų sistemos dinaminei būsenai apibūdinti (Hilborn 2008; Zaslavsky 2008). Pagrindinis skirtumas tarp fazinės ir koordinačių erdvės yra tas, kad fazinė erdvė yra būsenos erdvė, tai reiškia, jog kiekvienas taškas joje atitinka unikalią sistemos būseną, o taškas koordinačių erdvėje nustato tik fizinę sistemos konfigūraciją. Rinkinys galimų mikrobūsenų gali būti išreikštas rinkiniu taškų fazinės erdvės trajektorijoje, kuri vaizduoja sistemos mikroskopinės būsenos kitimą laiko atžvilgiu. Taisyklė, apibūdinanti dinaminės sistemos plėtotę, yra deterministinė, tai yra duotajam laiko intervalui iš esamos padėties gaunama tik viena tolesnė būsena – sprendinys.

Hamiltono mechanika aprašo integruojamų sistemų judėjimą. l-matė sistema yra integruojama, jei Hamiltonianas – suminės energijos funkcija – yra padalinamas į l nepriklausomų judėjimo lygčių, tai yra laisvės laipsniai nesusiję. Šios (2.42) ir (2.43) lygtys tuomet gali būti tiesiogiai integruojamos, kad būtų galima gauti analitinį sprendinį sistemos judėjimui (Percival ir Richards 1982). Tam, kad Hamiltonianas būtų visiškai atskiriamas, turi egzistuoti l tvarumo dėsnių.

$$\dot{r}_{ok} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_{ok}}; \tag{2.42}$$

$$\dot{p}_{ok} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r_{ok}}; \ (k = 1,\ldots,l); \tag{2.43}$$

čia r_{ok} – k-ojo laisvės laipsnio apibendrintoji koordinatė; p_{ok} – k-ojo laisvės laipsnio apibendrintasis linijinis judesio kiekis, išreiškiamas masės ir greičio sandauga; $\mathcal{H}$ – funkcija, išreiškianti sistemos mechaninę energiją, tai yra kinetinės ir potencinės energijos sumą, laikant, jog sistemai nėra suteikiama papildomos energijos; $\mathcal{H}$ priklauso nuo visų r_{ok} ir p_{ok}; l – mechaninių laisvės laipsnių skaičius; $\dot{r}_{ok}$, $\dot{p}_{ok}$ reiškia dydžių r_{ok} ir p_{ok} išvestines laiko atžvilgiu. Taigi sistemos mikroskopinę būseną visiškai nusako $2l$ dydžių: l apibendrintųjų koordinačių r_{ok} ir l apibendrintųjų linijinių judesio kiekių p_{ok}, priklausančių nuo pradinių sąlygų ir laiko.

Hamiltonianas yra integruojamas, kai jis yra nepriklausomas nuo laiko, tai yra kai galioja (2.44) lygtis (Percival ir Richards 1982).

$$\frac{d\mathcal{H}(\boldsymbol{r}_o, \boldsymbol{p}_o)}{dt} = 0. \tag{2.44}$$

Išskleistoje formoje (2.44) lygtis užrašoma (Hilborn 2008) taip:

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{r}_o}\dot{\boldsymbol{r}}_o + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{p}_o}\dot{\boldsymbol{p}}_o = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{r}_o}\cdot\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{p}_o} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{p}_o}\cdot\left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{r}_o}\right) = 0. \tag{2.45}$$

(2.45) lygtyje Hamiltoniano gradientas išreiškiamas taip:

$$\nabla\mathcal{H}(\boldsymbol{r}_o, \boldsymbol{p}_o) = \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{r}_o}, \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{p}_o}\right). \tag{2.46}$$

Iš (2.45) lygties matoma, jog integruojamos sistemos fazinis greitis $\boldsymbol{v} = (\dot{\boldsymbol{r}}_o, \dot{\boldsymbol{p}}_o)$ yra vienodo dydžio ir statmenas Hamiltoniano gradiento (2.46) krypčiai.

Laisvą dalelės judėjimą išreiškianti Niutono (2.31) lygtis yra integruojama, nes jėga nepriklauso nuo laiko, o priklauso tik nuo padėties. Neintegruojamoje sistemoje jėga yra priklausoma ir nuo padėties, ir nuo laiko, tai reiškia, jog dalelės judėjimo greitis priklauso ne tik nuo padėties, bet ir nuo laiko (pvz., dalelės judėjimas fliuktuojančioje aplinkoje).

Niutono (2.31) lygtyje pagrindiniai nežinomieji yra greičiai ir pagreičiai, todėl ją galima perrašyti kaip dvi suporintas pirmosios eilės lygtis (Percival ir Richards 1982):

$$\dot{\boldsymbol{r}}_o = \boldsymbol{v}_o ; \tag{2.47}$$

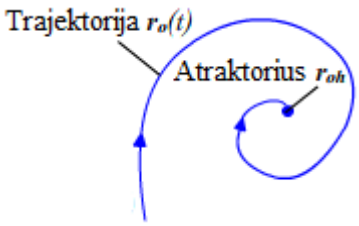
$$\dot{\boldsymbol{p}}_o = \frac{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}_o)}{m}. \tag{2.48}$$

(2.47) ir (2.48) lygtis galima išreikšti ir kaip vieną vektorinę (2.49) lygtį, kuri yra standartinė fazinio greičio forma (Percival ir Richards 1982).

$$\boldsymbol{\nu} = (\boldsymbol{v}_o, \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}_o)/m). \tag{2.49}$$

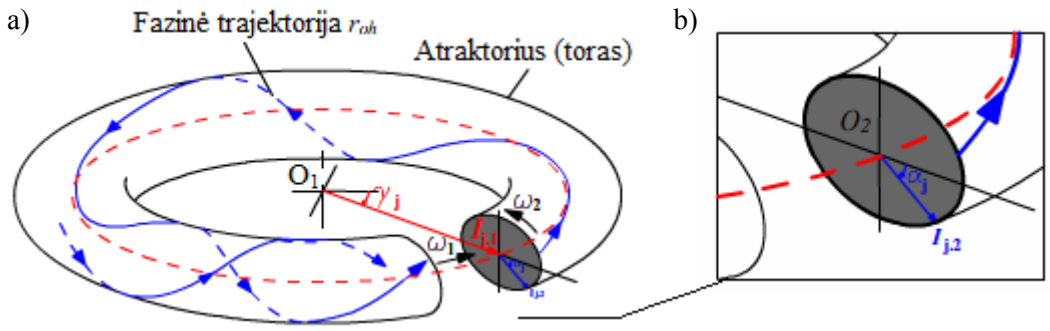
$$\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{r}_o(t) = \boldsymbol{r}_{oh}. \tag{2.50}$$

Taškas, kuriame fazinis greitis $\boldsymbol{\nu} = (\dot{\boldsymbol{r}}_o, \dot{\boldsymbol{p}}_o)$ yra nulinis, vadinamas fiksuotu tašku (2.10 pav.). Fiksuotas taškas $\boldsymbol{r}_{oh}$ yra laikomas atraktoriumi tam tikro judesio $\boldsymbol{r}_o(t)$, jei tenkinama (2.50) sąlyga.



2.10 pav. Trajektorijos $\boldsymbol{r}_o(t)$ atraktorius $\boldsymbol{r}_{oh}$ (pagal Percival ir Richards 1982)

Atraktorius yra aibė padėčių, kuriomis juda dinaminė sistema praėjus pakankamai daug laiko, tai yra taškai, atsidūrę arti atraktoriaus, ten ir išlieka, net jei jų judėjimas yra šiek tiek sutrikdomas (Hilborn 2008). Judėjimo diferencialinių (2.42) ir (2.43) lygčių geometrinė interpretacija pateikiama kaip trajektorijų rinkinys fazinėje erdvėje, dengiantis l-mačio toro (atraktoriaus) paviršių (Hilborn 2008). Sistemos integruojamumas reiškia egzistavimą invariantiškų daugdarų fazinėje erdvėje. Visos integruojamos Hamiltono sistemos turi vieną invariantą – suminę energiją, reprezentuojamą dvimačio toro (Ott 2002).

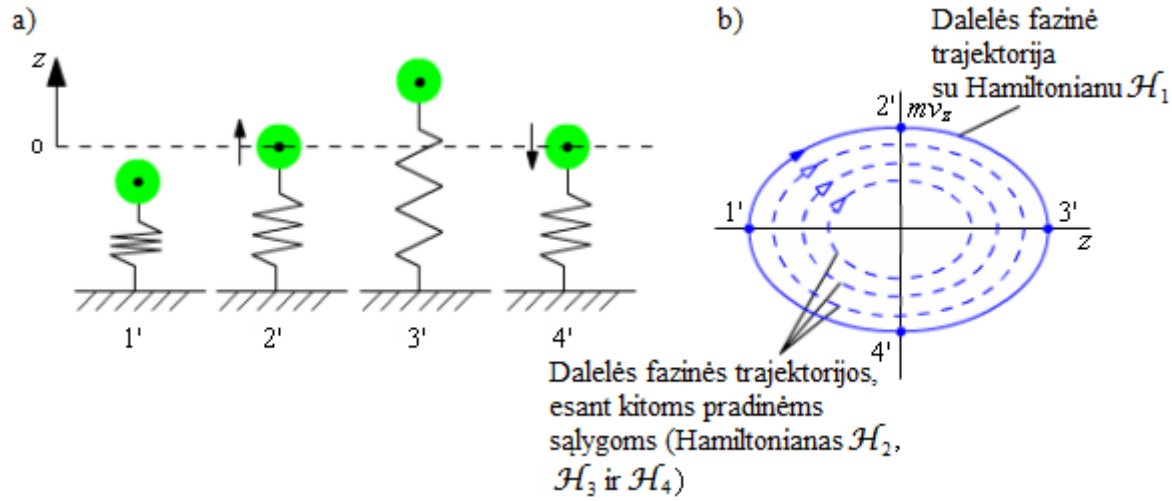


2.11 pav. Integruojamos Hamiltono sistemos dvimatis energijos paviršius (atraktorius) fazinėje erdvėje, išreikštas elgsenos kintamaisiais $\boldsymbol{I}_{j.1}$, $\boldsymbol{I}_{j.2}$, γ_j, α_j: a) fazinė trajektorija $\boldsymbol{r}_{oh}$ toro paviršiuje; b) toro skerspjūvis ir elgsenos kintamieji $\boldsymbol{I}_{j.2}$ ir α_j (pagal Ott 2002)

2.11 pav. pateikta integruojamos sistemos dvimačio toro, charakterizuojamo du nepriklausomus svyravimus nusakančiais kampiniais dažniais ω_1 ir ω_2, schema, kur paviršių dengiančios fazinės trajektorijos $\boldsymbol{r}_{oh}$ kiekvienas taškas atitinka vieną sistemos mikrobūseną, apibūdinamą fazinės trajektorijos kanoninėmis koordinatėmis, vadinamomis elgsenos kintamaisiais (Zaslavsky 2008).

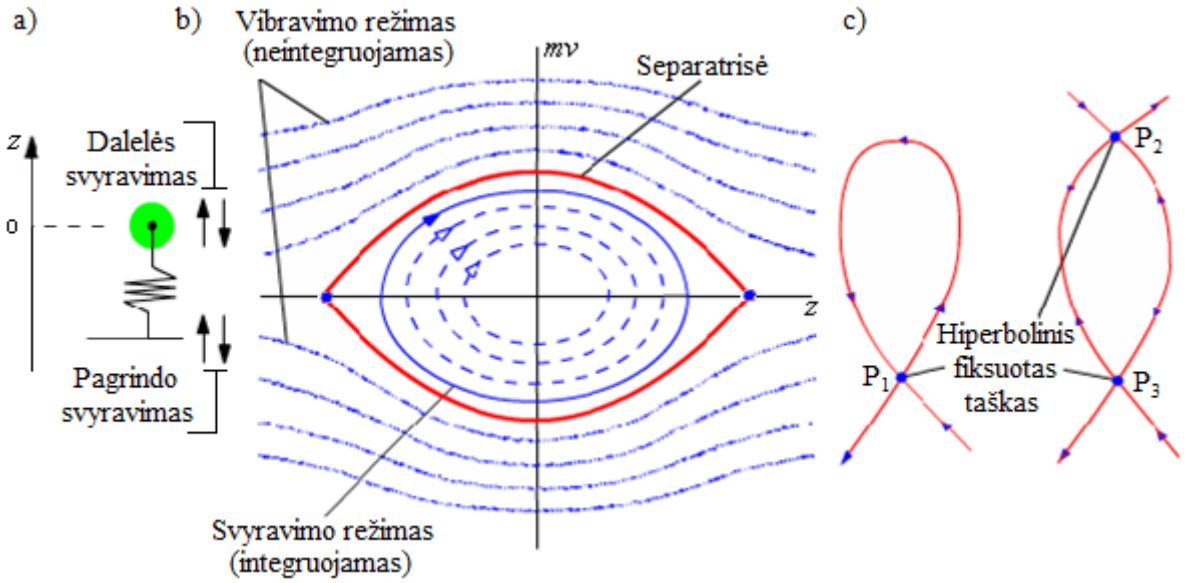
2.3.2. Integruojama netiesinė Hamiltono sistema

Skirtumai tarp tiesinės ir netiesinės integralių sistemų geriausiai atsiskleidžia nagrinėjant fazinės erdvės trajektorijas. 2.12 pav. parodyta vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės neslopinamo tiesinio judėjimo fazinė erdvė, charakterizuojama vertikalia z koordinate ir linijiniu judesio kiekiu mv_z.



2.12 pav. Vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės neslopinamas tiesinis judėjimas: a) dalelės padėties kitimo ciklas 1‘–4‘; b) dalelės fazinė erdvė, esant skirtingoms pradinėmis sąlygoms (Hamiltonianui) (pagal Strogatz 1994)

2.12 a pav. parodytas vertikalioje plokštumoje neslopinamai svyruojančios dalelės padėties kitimo ciklas. 1‘ žingsnyje dalelė užima žemiausią galimą vertikaliąją padėtį ir jos greitis yra lygus nuliui, todėl 2.12 b pav. parodytoje fazinėje erdvėje, išreiškiamoje mv_z ir z koordinatėmis, ši būsena atvaizduojama tašku 1‘. 2‘ žingsnyje dalelė pasiekia pusiausvyros padėtį. Čia jos greitis yra didžiausias, tačiau z koordinatė lygi nuliui, todėl šią būseną fazinėje erdvėje atitinka taškas 2‘ (2.12 b pav.). Toliau judėdama dalelė pasiekia didžiausią galimą vertikalią padėtį ir jos greitis tampa lygiu nuliui. Šią padėtį fazinėje erdvėje atitinka taškas 3‘ (2.12 b pav.). 4‘ žingsnyje dalelė, judėdama vertikaliai žemyn, vėl pasiekia pusiausvyros būseną, fazinėje erdvėje (2.12 b pav.) žymimą tašku 4‘. Tokiu būdu fazinėje erdvėje sužymėti būsenos taškai suformuoja elipses (elipsiniai fiksuoti taškai), iš kurių kiekvieną, priklausomai nuo pradinių sąlygų, charakterizuoja atitinkamas Hamiltonianas.

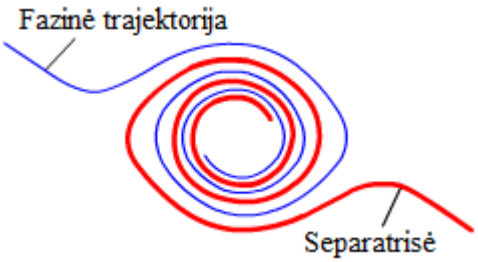


2.13 pav. Integruojama netiesinė Hamiltono sistema: a) netiesinis dalelės judėjimas; b) netiesinės sistemos fazinė erdvė; c) integruojamos hiperbolinės daugdaros (separatrisės) (pagal Moon 2004)

Jei į 2.12 pav. sistemą įvedamas tam tikras netiesiškumas, tai yra kartu su spyruoklės svyravimu pasireiškia ir pagrindo svyravimas, tuomet fazinės erdvės trajektorijos pasikeičia, susiformuojant nestabiliems hiperboliniams fiksuotiems taškams (2.13 pav.). Hiperboliniai fiksuoti taškai yra sujungiami daugdaromis – separatrisėmis (Zaslavsky 2008), dalijančiomis fazinę erdvę į plotus su skirtingomis judėjimo formomis. Separatrisės atsiradimas leidžia sistemą perkelti (sužadinti) į kokybiškai kitą būseną, įvykstant globaliajai fazinės trajektorijos bifurkacijai (Strogatz 1994; Ott 2002). Separatrisės gali įgyti kelias formas, tačiau visais integruojamais atvejais susijungimas tarp daugdarų yra tolygus. Tai reiškia, jog judesys yra reguliarus, nechaotinis.

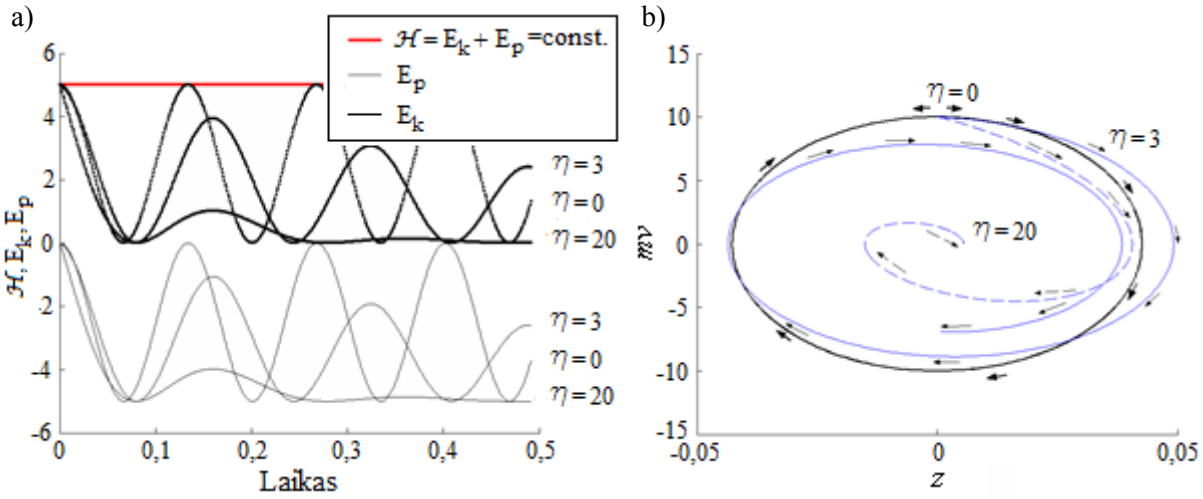
2.3.3. Disipatyvi Hamiltono sistema

Gamtoje beveik neegzistuoja nedisipatyvios sistemos. Disipatyvaus Hamiltoniano atveju elipsiniai fiksuoti taškai tampa atraktoriais, o hiperboliniai taškai išnyksta (2.14 pav.) (Ott 2002).



2.14 pav. Disipatyvios Hamiltono sistemos fazinė erdvė (pagal Ott 2002)

Disipacijos įtakai fazinės trajektorijos pavidalui įvertinti, 2.15 pav. pateiktos vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinės trajektorijos, esant įvairioms normalinio slopinimo parametro η reikšmėms.

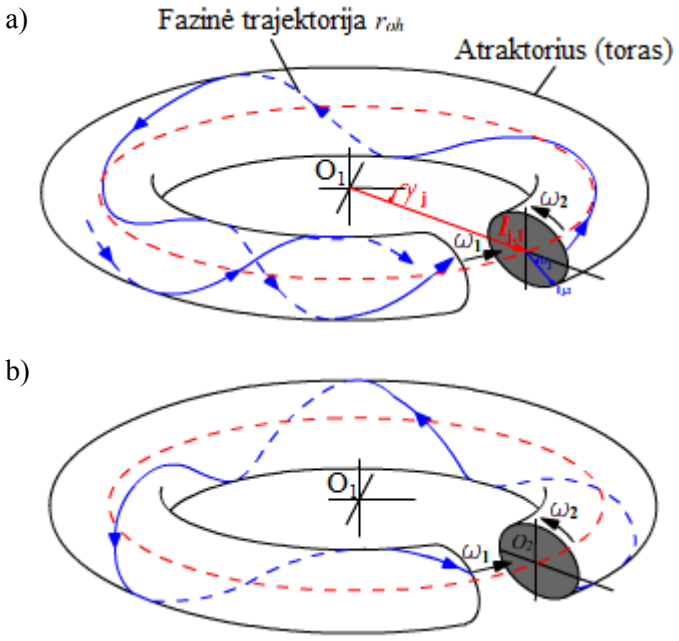


2.15 pav. Normalinio slopinimo parametro η įtaka vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinės trajektorijos pavidalui: a) dalelės fazinė trajektorija, kai $\eta = 0$, $\eta = 3$, $\eta = 20$; b) dalelės Hamiltonianas ir kinetinės bei potencinės energijos pokyčiai, esant įvairioms normalinio slopinimo parametro η reikšmėms

2.15 b pav. matoma, kai normalinio sopinimo parametras η lygus nuliui, fazinė trajektorija yra elipsės pavidalo. Didinant normalinio slopinimo parametrą, fazinė trajektorija įgauna spiralės formą. Kinetinės ir potencinės energijos pokyčiai, esant skirtingiems normalinio slopinimo parametrams, pateikti 2.15 a pav. Matoma, jog padidėjusios disipacijos poveikis pasireiškia kinetinės ir potencinės energijos kreivių slopimu laiko atžvilgiu.

2.3.4. Artima integruojamai Hamiltono sistema

Dviejų laisvės laipsnių integruojamos sistemos elgsenos kintamieji turi dvimačio toro topologiją. Sukimosi dažniai $\omega_1 = \omega_1(\boldsymbol{I}_1, \boldsymbol{I}_2)$ ir $\omega_2 = \omega_2(\boldsymbol{I}_1, \boldsymbol{I}_2)$ apskritimuose O_1 ir O_2 (2.16 pav.) gali kisti (Ott 2002). Jei sukimosi dažnių santykis yra racionalus, tai yra $\omega_1 / \omega_2 = n/m$, sistemos dinamika yra periodinė: fazinė trajektorija užsidaro po n apsisukimų apie O_1 ir m apsisukimų apie O_2 (2.16 b pav.). Tokia rezonansinė fazinės trajektorijos būsena yra nestabiliausia veikiant trikdžiams. Jei santykis yra irracionalus, tai yra $\omega_1 / \omega_2 \neq n/m$, fazinė trajektorija tankiai padengia toro paviršių ir sistemos judesys yra vadinamas kvaziperiodiniu (2.16 a pav.).



2.16 pav. Fazinės trajektorijos dvimačio energijos toro paviršiuje: a) irracionalus kampinių dažnių santykis; b) racionalus kampinių dažnių santykis (rezonansinis toras) (pagal Ott 2002)

Visiškai integruojamų sistemų gamtoje praktiškai nėra, todėl galima kalbėti tik apie artimas integruojamoms sistemas (Lacey 2003). Artima integruojamai laikoma sistema, kuri su integruojama $\mathcal{H}_0(\boldsymbol{I})$ sistema yra susijusi mažu Hamiltoniano trikdžiu, priklausančiu nuo nesutrikdytos sistemos elgsenos kintamųjų:

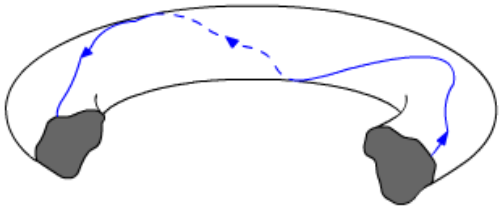
$$\mathcal{H}(\boldsymbol{I}, \boldsymbol{\theta}) = \mathcal{H}_0(\boldsymbol{I}) + \varepsilon \cdot \mathcal{H}_1(\boldsymbol{I}, \boldsymbol{\theta}), \tag{2.51}$$

čia parametras ε įvertina trikdžio stiprumą ir yra susijęs su restitucijos koeficientu; $\boldsymbol{I}$ ir $\boldsymbol{\theta}$ yra apibendrintieji elgsenos kintamieji.

Nagrinėjant artimas hamiltoninei sistemas, taikoma Kolmogorovo-Arnoldo-Moserio (KAM) teorija (Lhotka 2008). Ši teorija suformuluota priimant, kad Hamiltonianas yra analitinis fazinėje erdvėje ir kad nesutrikdyta dinamika yra neišsigimusi. Judesys yra išsigimęs, kada du skirtingų apibendrintųjų koordinačių dažniai yra identiški. Neišsigimimo sąlyga (Neishtadt 2007) gali būti užrašyta taip:

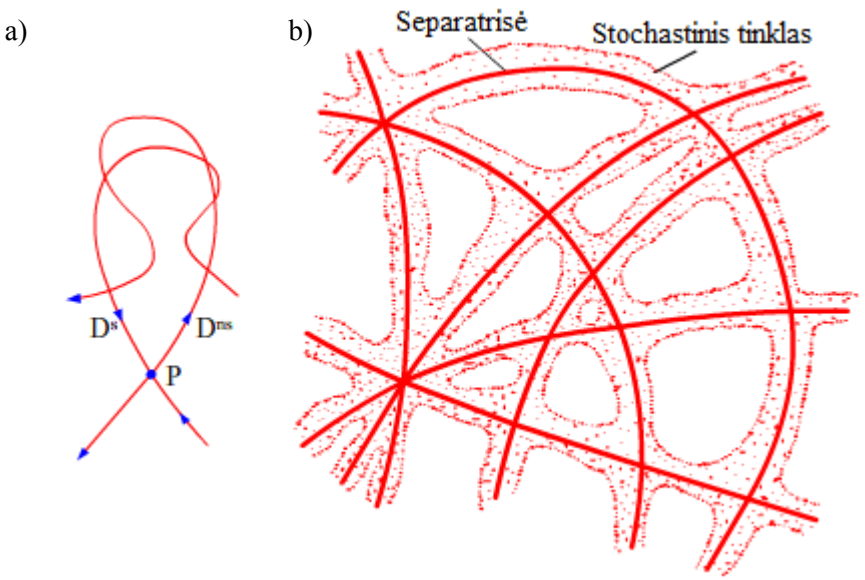
$$\det\left|\frac{\partial^2 \mathcal{H}_0}{\partial I_1 \partial I_2}\right| \neq 0 . \tag{2.52}$$

KAM teoremos neišsigimimo (2.52) sąlyga reiškia, jog nesutrikdytos sistemos dažniai yra nepriklausomi. Su šiomis prielaidomis KAM teorema gali būti suformuluota taip: jei nesutrikdyta sistema yra neišsigimusi, tuomet, esant pakankamai mažam integralaus Hamiltoniano sutrikdymui, dauguma nerezonansinio invariantinio toro neišnyksta, bet yra šiek tiek deformuojama (2.17 pav.) taip, kad sutrikdytos sistemos fazinėje erdvėje taip pat egzistuoja invariantinis toras, tankiai užpildytas fazinėmis kreivėmis (Lhotka 2008). KAM toras, kurio trikdis nesunaikina, tampa invariantiniu Cantoro rinkiniu, tai yra vienoje tiesės atkarpoje esančių taškų rinkiniu.



2.17 pav. Sutrikdytas dvimatis energijos toras

Maži trikdžiai sistemose su daugiau nei dviem laisvės laipsniais ne tik kokybiškai modifikuoja sistemos dinamiką, bet gali pakeisti ir fazinės trajektorijos topologiją (Lacey 2003). Trikdžiai netiesinėse sistemose sunaikina hiperbolinius fiksuotus taškus, todėl separatrisės suskyla, įvykstant taip vadinamam separatrisių pasidalijimui (Zaslavsky 2008). Pagal Poincaré-Birkhoffo fiksuoto taško teoremą (Lacey 2003), jei kampinių dažnių santykis yra racionalus (rezonansinė būsena), fazinėje erdvėje atsiranda tinklinę struktūrą sudarančių stabilių ir nestabilių fiksuotų taškų (2.18 b pav.). Pasireiškus trikdžiams, separatrisių šakos nebesudaro tolygių homoklinių ir heteroklinių sujungimų ir susikerta, suformuodamos stochastinį tinklą (2.18 a pav.).



2.18 pav. Deterministinio chaoso plėtotė: a) separatrisių sankirta, kur D^s yra stabili daugdara, o D^{ns} – nestabili; b) stochastinis tinklas (pagal Zaslavsky 2008)

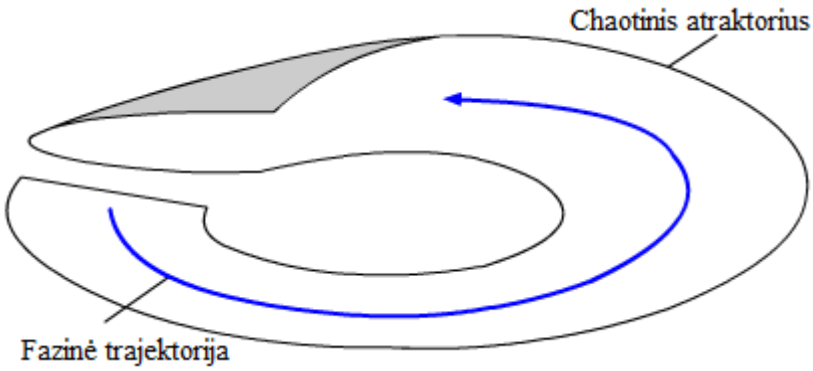
Didinant trikdžių parametrą ε (žr. (2.51) lygtį), sudėtinga separatrisių elgsena sukelia chaosą deterministinėje sistemoje. Rezonansams persiklojus prasideda globalusis chaosas, sistemoje įtvirtinantis ergodinę būseną (Greiner *et al*. 1995).

2.4. Chaoso teorija

Realiame pasaulyje visos sistemos yra išoriškai trikdomos, pavyzdžiui, keičiasi gravitacijos stiprumas (kosminių kūnų mechanika), padidinama sistemos energija. Kompiuterinėse simuliacijose mažas trikdis atsiranda dėl skaitinio apvalinimo. Iš pradžių laikyta kaip riba eksperimentinio preciziškumo galimybių, dabar tai yra fundamentalus gamtos ribotumas (Ott 2002).

Paprastos netiesinės dinaminės sistemos gali būti visiškai nenuspėjamos, nors iš prigimties yra deterministinės. Tokia nenuspėjama elgsena vadinama chaosu. Chaosas – periodinis ilgalaikis elgesys deterministinėje sistemoje, kuriai būdinga jautri pradinių sąlygų priklausomybė (Ott 2002). Šiuo atveju dėl neišvengiamų fliuktuacijų, pasireiškiančių mažu pradinių sąlygų sutrikdymu, pradinė sistemos būsena yra nusakoma tam tikru skirstiniu. Pagrindinė problema yra sistemos evoliucijos apibūdinimas pagal šį skirstinį. Jei sistema yra chaotinė, mažas trikdis eksponentiškai auga laiko atžvilgiu, drastiškai keisdamas sistemos elgseną. Ši chaotinės sistemos ypatybė apsunkina analizę, tačiau, jei sistema yra tokia jautri trikdžiams, tuomet juos galima panaudoti sistemai kontroliuoti (Schuster 1999). Viena fundamentaliųjų chaoso savybių yra vienalaikis egzistavimas daugybės skirtingų judesių su begaliniu nestabilių periodinių orbitų skaičiumi. Sistemos judėjimas išilgai chaotinės orbitos gali būti suprantamas kaip tolygus perėjimas tarp

artimų orbitų. Chaoso kontrolės metoduose pagrindinis principas yra nestabilių periodinių orbitų stabilizavimas, tačiau tam būtina žinoti chaotinio atraktoriaus (2.19 pav.) struktūrą fazinėje erdvėje.

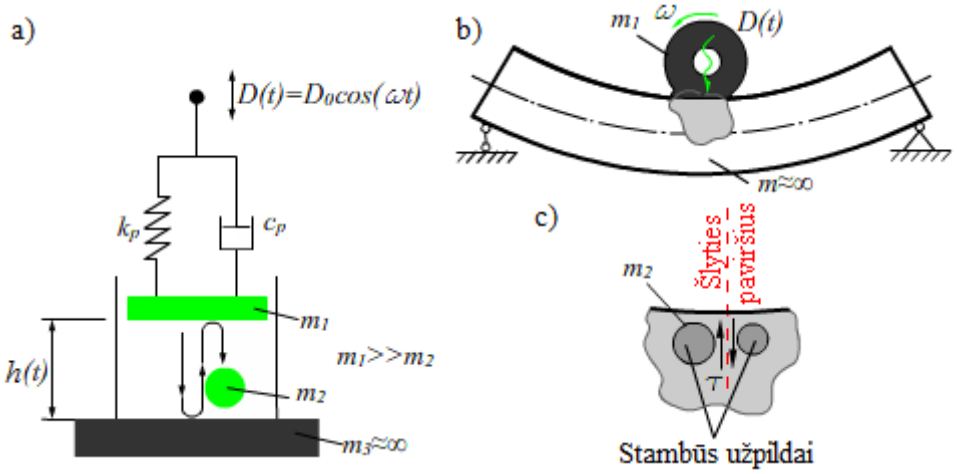


2.19 pav. Chaotinis atraktorius (pagal Strogatz 1994)

Chaotinę elgseną, reikia suprasti kaip paprastą lankstymosi operaciją fazinėje erdvėje, susijusią su rezonanso pasireiškimu sistemoje. Kadangi atraktorius yra baigtinio dydžio, tad dvi trajektorijos ant jo negali amžinai eksponentiškai diverguoti, todėl atraktorius turi lankstytis ir klotis ant savęs (Strogatz 1994). Nors trajektorijos diverguoja ir eina skirtingais takais, tačiau susiklojusios jos vėl atsiduria arti viena kitos. Toks chaotinio atraktoriaus lankstymasis sistemiškai pašalina pradinę informaciją ir pakeičia ją nauja, todėl nėra tikslaus sprendinio ir nuspėjamos ateities.

3. METODAS KVAZISTATINIO PUSIAUSVYROS BŪVIO DALELIŲ MIŠINIO MIKROBŪSENAI FLIUKTUOJANČIOJE APLINKOJE CHARAKTERIZUOTI

Atliekant DEM modeliavimą, pagrįstą molekuline dinamika, mikroskopinių simuliacijų pagrindu tiriamos sistemos makroskopinės savybės. Mikroskopinės simuliacijos ir makroskopinės savybės yra sujungiamos pasinaudojant statistine mechanika. Pusiausvira statistinė mechanika yra paremta aksioma, jog izoliuota stochastinė sistema savo stacionarioje būsenoje maksimizuoja entropiją. Tai reiškia, jog ji plėtojasi per galimas konfigūracijas su ta pačia tikimybe, sudarant mikrokanoninį ansamblį. Ansamblis – rinkinys galimų sistemų, kurios turi skirtingas mikroskopines būsenas, bet identišką makroskopinę ar termodinaminę būseną (Greiner *et al.* 1995). Dažniausiai stochastinė sistema nėra izoliuota, bet sujungta su išoriniu šilumos baseinu. Šilumos baseinas yra aplinka, sudaryta iš daugybės laisvės laipsnių, kuri keičiasi energija su nagrinėjama sistema. Priimant, jog kombinacija sistemos ir šilumos baseino entropiją padaro didžiausia, o energija yra konservatyvi, stacionarus tikimybinis pasiskirstymas nebėra tolygus, kadangi sistema nėra pusiausvira. Ieškant analogijos tarp modeliuojamo dalelių rinkinio, veikiamo kvazistatinių ciklinių fliuktuacijų, ir nepusiausviros sistemos, sujungtos su šilumos baseinu, puikiai tinka Fermi-Ulamo modelis (3.1 pav.). Šis modelis susideda iš vertikaliai judančios m_2 masės sferinės dalelės, tampriai sąveikaujančios su dviem masyviais kūnais, iš kurių vienas yra fiksuotas ir jo masė $m_3 \approx \infty$, o kitas kūnas sudaro klampiai svyruojantį m_1 masės osciliatorių, kurio judėjimas išreiškiamas lygtimi $D(t) = D_0 \cdot \cos(\omega \cdot t)$ (čia D_0 – didžiausia amplitudė; ω – kampinis dažnis; t – laikas). Atstumas tarp fiksuoto ir judančio kūno yra laiko funkcija $h(t)$ (Luo ir Guo 2009). Pažymėtina, jog trinties poveikis modelyje nėra vertinamas.



3.1 pav. Fermi-Ulamo modelis: a) principinė schema; b) kintamos apkrovos veikiama gelžbetoninė sija; c) šlyties paviršius (pagal Luo ir Guo 2009)

Sąveika tarp dalelės ir fiksuoto kūno yra charakterizuojama restitucijos koeficientu e_n, išreiškiamu (3.1) lygtimi.

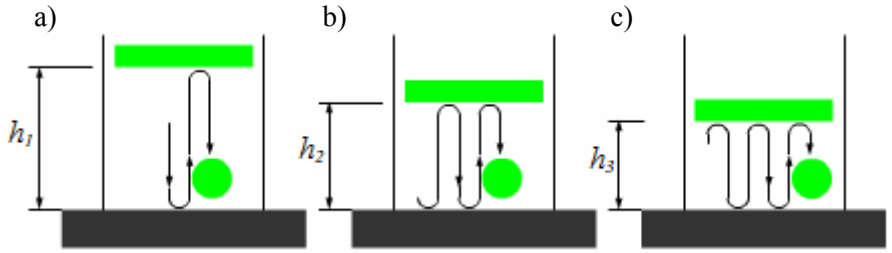
$$v_2^{po} = -e_n \cdot v_2^{pr}, \tag{3.1}$$

čia v_2^{pr} – m_2 masės dalelės normalinis greitis prieš smūgį; v_2^{po} – m_2 masės dalelės normalinis greitis po smūgio.

Įvertinant, jog dalelė gali būti sužadinta svyruojančio kūno, sistema tampa artima integruojamai Hamiltono sistemai (žr. 2.51 formulę) ir (3.1) ryšys užrašomas (Majumdar ir Kearney 2007) taip:

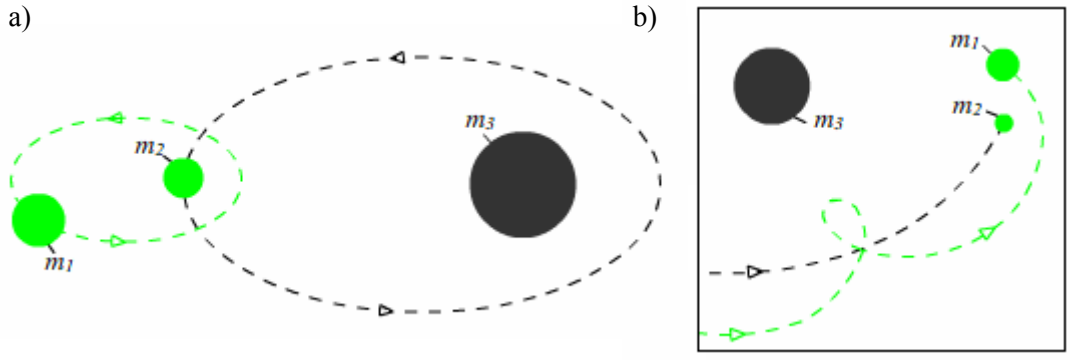
$$v_2^{po} = v_1^h + e_n \cdot \left(v_1^h - v_2^{pr}\right), \tag{3.2}$$

čia v_1^h – vertikalus svyruojančio kūno greitis susidūrimo su dalele metu, o narys skliaustuose apibūdina, kaip santykinis poveikio greitis veikia dalelės atšokimą. Pastarasis narys gali būti panaikintas, kai dalelė elgiasi absoliučiai netampriai ir restitucijos koeficientas lygus nuliui arba jei smūgio metu svyruojančio kūno suteiktas greitis kompensuoja dalelės energijos nuostolius ir santykinis greitis tarp svyruojančio kūno ir dalelės yra lygus nuliui. Taip pat galimas ir kitas atvejis, kai suvaržytoje dalelėje dėl virš esančio kūno smūgių kaupiasi plastinės deformacijos, užtikrinant sąlygą $v_2^{pr} = 0$. Su kiekvienu tokiu smūgiu, remiantis klasikine fizika (žr. (3.2) formulę), kūnas įgauna artimą arba tą patį greičio ir judesio kiekio prieaugį (3.2 pav.). Tiksliai parenkant atstumą h gali įvykti taip, jog susidūrimų skaičius bus labai didelis ir, jei medžiagos yra pakankamai stiprios ir atsparios suirimui, dalelę galima pagreitinti (Dorbolo *et al*. 2009) net iki šviesos greičio (Norton 2012).



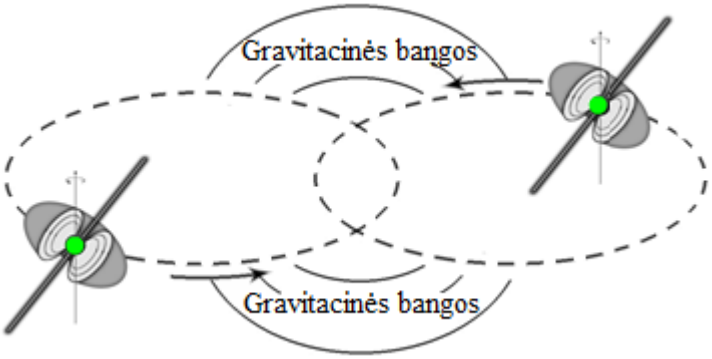
3.2 pav. Dalelės greitėjimas laiko atžvilgiu, kintant atstumui h: a) atstumas h_1; b) atstumas h_2; c) atstumas h_3 (pagal Norton 2012)

Aprašyto modelio artimu pavyzdžiu realybėje galima laikyti gelžbetoninę siją (3.1 b pav.), veikiamą kintančios vibracinės apkrovos. Šiuo konkrečiu atveju šokinėjančios dalelės analogu gali būti stambūs užpildai sijos gniuždomojoje zonoje.



3.3 pav. Trijų kūnų problema: a) trijų kūnų sąveika; b) trikdančio m_1 masės kūno judėjimo trajektorija (pagal Wudka 2012)

Fermi-Ulamo modelis reprezentuoja trijų kūnų problemą (3.3 pav.), tačiau pagrindą sudaro Keplerio problema (Reitz 2011). Keplerio problema yra specialus dviejų kūnų problemos atvejis, kai šie kūnai (nagrinėjamu atveju tai yra m_2 masės dalelė ir begalinės masės fiksuotas kūnas) sąveikauja centrine atvirkščio atstumo kvadrato jėga, kuri gali būti arba traukianti, arba stumianti. Šios problemos sprendinys yra kūnų greičio kitimas laiko atžvilgiu žinant mases, pradinius greičius ir padėtis. Trikdančio kūno atsiradimas (3.3 pav.) apsunkina problemos sprendimą, kadangi sukelia deterministinį chaosą.

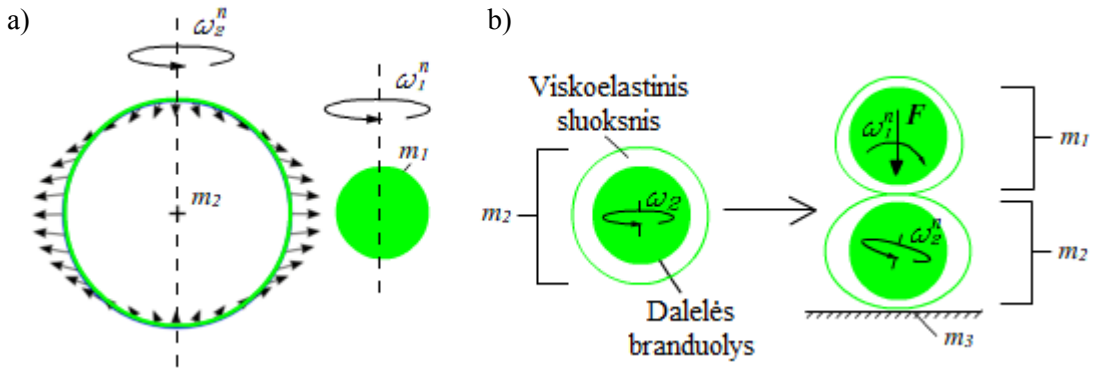


3.4 pav. Dviejų kūnų gravitacinė sąveika (pagal Norton 2012)

Pagal bendrąją reliatyvumo teoriją, du kūnai, judantys Keplerio orbitomis, veiks vienas kitą gravitacijos jėgomis (3.4 pav.), tai yra spinduliuos bangas (Wudka 2012). Einšteino specialioji reliatyvumo teorija teigia, jog informacija keliauja baigtiniu greičiu ir niekada neviršija šviesos greičio, todėl gravitacinės bangos prilyginamos šviesai ir perneša informaciją apie gravitacines

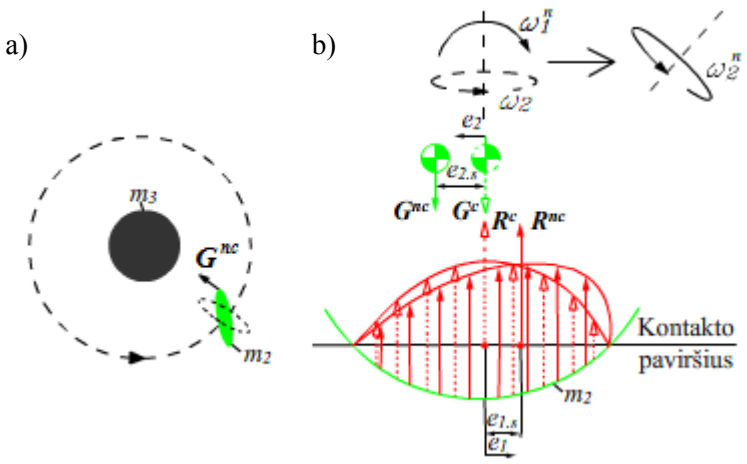
jėgas. Gravitacinės bangos yra labai silpni mažos amplitudės gravitacinio lauko trikdžiai, kuriuos sukelia didelės masės kūnų (m_2 masės dalelė Fermi-Ulamo modelyje) judėjimas su pagreičiu. Šie trikdžiai erdvėje sklinda šviesos greičiu ir, sutikę kliūtį, sukelia jos virpesius.

Dangaus kūnų mechanikoje žinoma situacija, kai vieną kūną veikia kito kūno gravitacija ir trikdymas dėl trečiojo kūno gravitacinio poveikio. Ši trikdanti jėga vadinama potvynio jėga (Wudka 2012). Potvynio jėgos gali deformuoti kūnus, juos iškreipdamos arba suardydamos. Tamprios dalelės atveju potvynio jėgos efektas pasireiškia šios dalelės formos pakitimu į elipsoidą (Poulsen 2009), nepasikeičiant tūriui (3.5 pav.). Deformacijos neatsiranda, jei gravitacinis laukas yra tolygus, kadangi tolygus laukas verčią visą kūną pagreitėti (Norton 2012).



3.5 pav. Potvynio jėgų deformuojamas m_2 masės kūnas: a) dangaus kūnų atvejis; b) potvynio jėgų sukeltos deformacijos analogas viskoelastinėje medžiagoje

3.6 a pav. parodytas dėl m_1 masės kūno gravitacinio poveikio deformuoto m_2 masės kūno judėjimas apie m_3 masės kūną. Į elipsoidą deformuotas kūnas turi dvi potvynio iškyšas, todėl m_3 masės kūno gravitacinis poveikis sukelia sukimo momentą į m_2 masės kūną ir stengiasi jo iškyšas pakreipti į save, tačiau patiria pasipriešinimą. Kūnui m_3 artimesnė iškyša jaučia didesnę gravitacinę jėgą, todėl, neįstengiant pasipriešinti, įvyksta susilygiavimas. Analogiškas procesas vyksta ir Fermi-Ulamo modelyje, kai dalelė, veikiama virš esančio m_1 masės kūno ir savojo svorio jėgos, precesuoja kampiniu greičiu ω_2^n ir kartu yra deformuojama (3.6 b pav.). Deformavimo reakcijos atstojamoji $\boldsymbol{R}^c$ slenka iš pusiausvyros deformacijų padėties į ribinę soties reikšmę $\boldsymbol{R}^{nc}$. Dalelei deformuojantis, jos masės centras, o kartu ir svorio jėga taip pat artėja prie soties padėties $\boldsymbol{G}^{nc}$. Jėgoms pasiekus soties reikšmę (padėtį), sukuriama priešingos krypties jėgų pora, nukraunanti ir pagreitinanti dalelę (Hagen *et al*. 2011). Šiuo atveju gravitacijos jėga trumpam tampa stumiančiąja jėga.



3.6 pav. m_2 masės kūno priešinimasis deformacijai: a) dangaus kūnų atvejis; b) jėgos ir reakcijos deformuojant viskoelastinę medžiagą

Sistemos m_2-m_3 kampinis judesio kiekis šiame procese yra konservatyvus, todėl m_2 masės kūnui lėtėjant ir prarandant kampinį judesio kiekį, jo orbitinis kampinis judesio kiekis yra padidinamas tuo pačiu dydžiu. Fizikoje kampinis judesio kiekis yra vektorinis dydis, kuris gali būti panaudotas fizinės sistemos visuminei būsenai apibūdinti. Kampinis judesio kiekis $\boldsymbol{L}$, atžvilgiu tam tikro taško, išreiškiamas (3.3) formule.

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \tag{3.3}$$

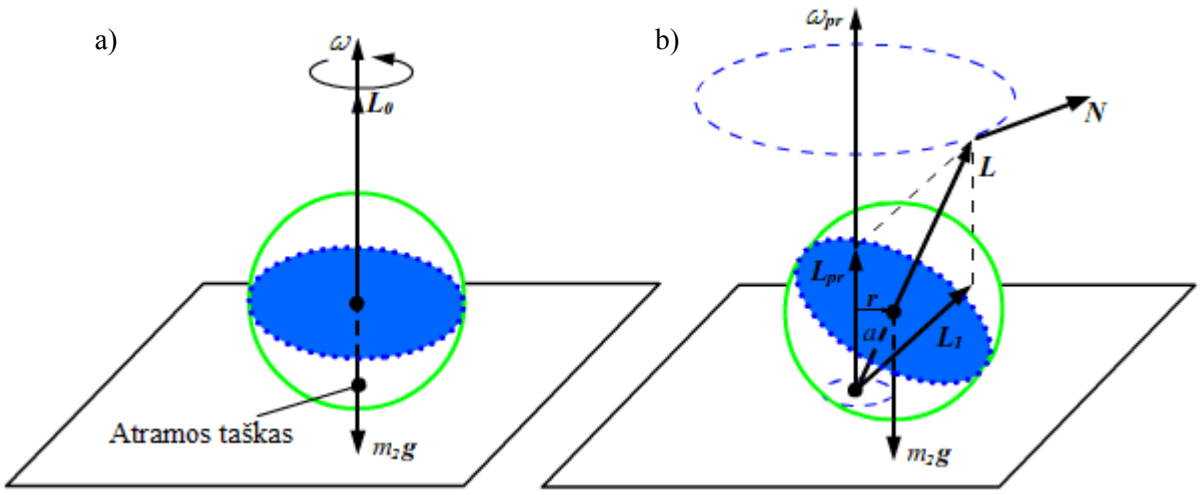
čia $\boldsymbol{r}$ – atstumo nuo besisukančios dalelės centro iki vertikalios sukimosi ašies vektorius; $\boldsymbol{p} = m \cdot \boldsymbol{v}$ – tiesinis judesio kiekis.

Pagal kietojo kūno dinamikos dėsnius (Butikov 2006), kampinio judesio kiekio $\boldsymbol{L}$ pokytis laiko atžvilgiu yra lygus suminiam išorinių jėgų sukeltam sukimo momentui $\boldsymbol{N} = \sum_i (\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i)$:

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \boldsymbol{N}. \tag{3.4}$$

Gravitacijos veikiamos tolygiai besisukančios dalelės suminio kampinio judesio kiekio vektorius $\boldsymbol{L}_0$ visada nukreiptas išilgai simetrijos ašies (3.7 a pav.). Jei dalelė staiga sutrikdoma poveikio iš aplinkos taip, jog atramos taškas nutolsta nuo dalelės masės centro (pavyzdžiui, dalelės deformavimo atveju), dėl pakrypimo vertikalės atžvilgiu (Butikov 2006) sunkio jėga $m_2 \cdot \boldsymbol{g}$, veikianti dalelės masės centre, apie atramos tašką sukuria sukimo momentą $\boldsymbol{N}$ (3.7 b pav.). Masės centro padėties vektorius atrėmimo taško atžvilgiu yra $\boldsymbol{r}_c = a \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_n$, kur a lygus atstumui tarp

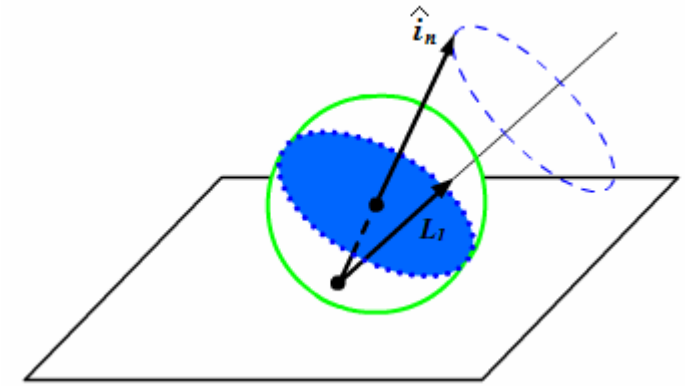
atrėmimo taško ir masės centro, o $\hat{\boldsymbol{i}}_n$ yra vienetinis vektorius, nukreiptas išilgai dalelės simetrijos ašies. Jei ašis nėra idealiai vertikali, sunkio jėgos sukeltas sukimo momentas $\boldsymbol{N} = \boldsymbol{r}_c \times \boldsymbol{G} = a \cdot \hat{\boldsymbol{i}}_n \times m_2 \cdot \boldsymbol{g}$ yra nukreiptas statmenai kampinio judesio kiekio vektoriui. Taigi, pagal (3.4) lygtį, vektoriaus $\boldsymbol{L}$ viršūnė juda vektoriaus $\boldsymbol{N}$, o ne jėgos $m_2 \cdot \boldsymbol{g}$ kryptimi. Per nykstamai mažą laiko intervalą dt vektorius $\boldsymbol{L}$ gauna elementarų prieaugį $d\boldsymbol{L} = \boldsymbol{N} \cdot dt$, nukreiptą išilgai $\boldsymbol{N}$, ir patiria pastovią precesiją.



3.7 pav. Dalelės sukimosi režimai: a) tolygus sukimasis; b) precesija (pagal Butikov 2006)

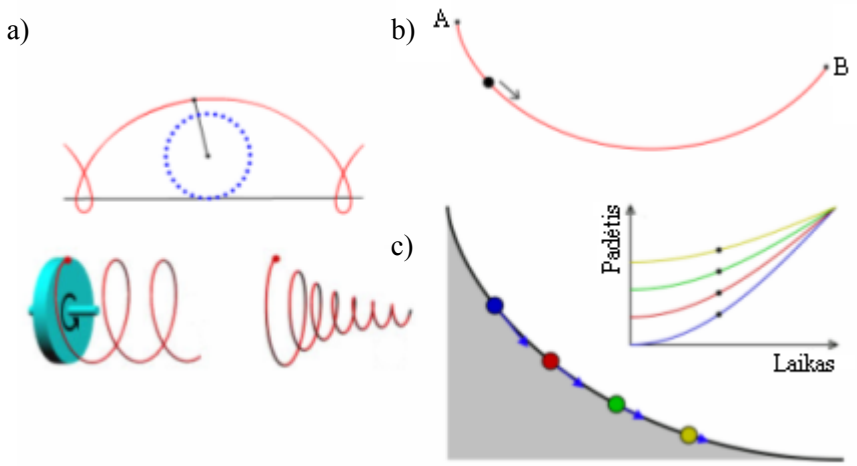
Suminis kampinis judesio kiekis $\boldsymbol{L}$ yra sudarytas iš kampinio judesio kiekio $\boldsymbol{L}_1$, atsiradusio dėl sukimosi apie simetrijos ašį, bei kampinio judesio kiekio $\boldsymbol{L}_{pr}$, atsiradusio dėl dalelės precesijos apie vertikalią liniją. Kai precesiją patirianti dalelė juda veikiama gravitacijos sukelto sukimo momento ir sunkio jėga $m_2\boldsymbol{g}$ staiga trumpam laikui išnyksta, pavyzdžiui, dalelės deformavimasis yra netoli soties reikšmės, tai yra dalelės greitis v_2^{pr} (3.2) formulėje tampa lygiu judančio (deformuojančio) kūno greičiui v_1^h, pasireiškia sukimo momento neveikiamos dalelės inercinis judėjimas (3.8 pav.). Šis judėjimas, vadinamas nutacija (arba inercine precesija), gali būti pavaizduotas sudėtimi dviejų sukimųsi: sukimosi apie simetrijos ašį žymintį vienetinį vektorių $\hat{\boldsymbol{i}}_n$ ir vibraciją sukuriančio tolygaus ašies sukimosi maža kūgine orbita apie kampinio judesio kiekio vektorių $\boldsymbol{L}_1$ (Butikov 2006). Nutacijos nebūna tik preciziškai parinkus pradines sąlygas, tačiau, pagal Heisenbergo atsitiktinumo principą kvantinėje mechanikoje (Rae 2005), neįmanoma preciziškai vienalaikiai žinoti tam tikros poros dalelės fizinių savybių, tokių kaip padėtis ir judesio kiekis.

Bendruoju atveju dalelės ašis patiria du vienalaikius judesius: sukimo momento sukeltą precesiją išilgai vertikalaus kūgio, atitinkančią deformacijos pradžią (3.7 b pav.), ir nutaciją apie kampinio judesio kiekio vektorių $\boldsymbol{L}_1$, atitinkančią artėjimą prie deformacijos soties būsenos (3.8 pav.) (Butikov 2006). Nutacijos sukeltos vibracijos iš dalies panaikina deformacijas ir sunkio jėga $m_2 \cdot \boldsymbol{g}$ pagreitina dalelę, tačiau, dėl kampinio judesio kiekio tvermės vėl pasireiškia precesinis judėjimas vertikaliu kūgiu. Šių judesių sumoje $\hat{\boldsymbol{i}}_n$ vektoriaus viršūnė erdvėje suformuoja cikloidinę trajektoriją (3.9 a pav.).



3.8 pav. Dalelės nutacija apie kampinio judesio kiekio vektorių $\boldsymbol{L}_1$ (pagal Butikov 2006)

Cikloidas yra brachistochrono (Cycloid... 2012) problemos (3.9 b pav.) sprendinys ir susijusios tautochrono problemos (3.9 c pav.) sprendinys. Brachistochrono kreivė yra kreivė, išreiškianti atstumą tarp dviejų taškų A ir B, kurį taškininė dalelė nueina greičiausiai, pradėjusi taške A su nuliniu greičiu ir veikiant pastoviai gravitacijai bei neįvertinant trinties. Ši kreivė nepriklauso nuo kūno masės. Tautochrono kreivė yra kreivė, kai laikas, reikalingas dalelei nukeliauti be trinties tolygioje gravitacijoje į žemiausiąją padėtį, yra nepriklausomas nuo pradinės padėties. Brachistochrono ir tautochrono problemos turi panašumų su Penrose-Hawkingo teoremoje minimais gravitacijos singuliarumais (Norton 2012), todėl, pagal Noether teoremą (José ir Saletan 1998), jei Fermi-Ulamo modelio svyruojančio kūno greičio kitimo dėsnis yra pakankamai diferencijuojamas, fazinėje erdvėje turi egzistuoti invariantinės kreivės, išreiškiančios dalelės greitėjimą apribojančius barjerus. Šios invariantinės kreivės gali būti puikia charakteristika, rodančia dalelės būseną, tačiau pagrindinė problema yra padėties ir laiko sąjungą išreiškiančios daugiamatės fazinės erdvės atvaizdavimas.

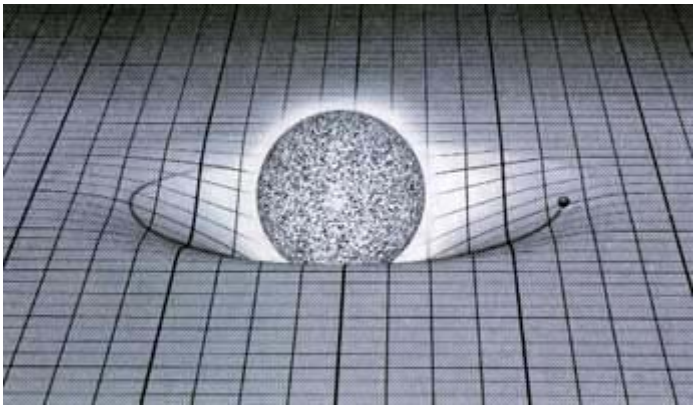


3.9 pav. Cikloidinės problemos: a) cikloido trajektorijos; b) brachistochrono problema; c) tautochrono problema su laiko-padėties grafiku (Cycloid... 2012)

Gravitacinės bangos teoriškai buvo pasiūlytos Einšteino bendrojoje reliatyvumo teorijoje, tačiau vis dar nėra tiesioginių eksperimentinių įrodymų, patvirtinančių jų egzistavimą. Šis efektas yra mažai tyrinėtas ir buvo tik netiesiogiai pastebėtas Nobelio premijos laureatų Russello Hulse ir Josepho Tayloro (1993). Jų gautas rezultatas parodė, jog du greitai vienas apie kitą judantys kūnai bus stabdomi dėl gravitacinių bangų pavidalo energinės emisijos. 2002 metų rugsėjį Sergejus Kopeikinas ir Edwardas Fomalontas paskelbė, jog jie atliko netiesioginį gravitacijos greičio matavimą. Gravitacijos greitis yra greitis, kuriuo sklinda gravitacinis laukas. Gravitacinės bangos greitis bendrojoje reliatyvumo teorijoje yra lygus šviesos greičiui vakuume (Carroll 2004). Specialiojoje reliatyvumo teorijoje šis greitis atsiejamas nuo šviesos greičio ir išreiškia galimą didžiausią bet kokios fizinės sąveikos greitį gamtoje (Norton 2012).

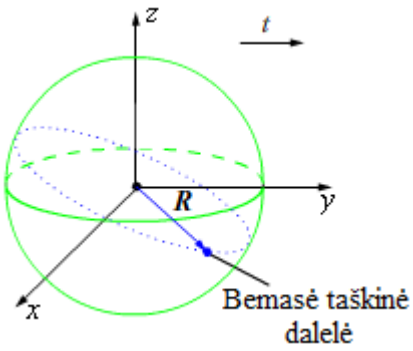
Einšteino bendroji reliatyvumo teorija apibūdina gravitacinę jėgą kaip pasekmę erdvėlaikio išlinkio, sukelto masyvių kūnų (3.10 pav.). Kuo kūnas masyvesnis, tuo gaunamas didesnis išlinkis ir tuo intensyvesnė yra gravitacija (Carroll 2004). Penrose-Hawkingo singuliarumo teorema teigia, jog gravitacija gali sudaryti singuliarumą. Erdvėlaikio singuliarumas pasireiškia tuomet, kai dydžiai, naudojami gravitaciniam laukui matuoti, tampa begaliniais ir nepriklausomais nuo koordinačių sistemos (Norton 2012). Šie dydžiai yra erdvėlaikio išlinkio skaliariniai invariantai, o pats erdvėlaikis su singuliarumu yra apibūdinamas kaip toks, kuris turi trumpiausią taką erdvėje tarp dviejų taškų.

Singuliarumas rodo bendrosios reliatyvumo teorijos ribas. Teorija teigia, kad singuliarumas atsiranda dviem atvejais (Wudka 2012): pirma, singuliarumas turi atsirasti dėl juodosios skylės susiformavimo, kai yranti žvaigždė (šiuo atveju deformuojama dalelė) išleidžia kampinio judesio kiekio perteklių gravitacinių bangų pavidalu; antra, besiplečianti Visata prasideda kaip singuliarumas.



3.10 pav. Masyvaus kūno išlenktas erdvėlaikis ir išlinkio veikiamo mažo kūno judėjimas (Norton 2012)

Mechaninė sistema su l laisvės laipsnių daugiausia gali turėti $2l-1$ judėjimo konstantų. Sistema su $2l-1$ konstantų yra vadinama maksimaliai superintegruojama (José ir Saletan 1998). Keplerio problema yra maksimaliai superintegruojama, kadangi ji turi tris laisvės laipsnius ($l=3$) ir penkias nepriklausomas judėjimo konstantas (Reitz 2011). Maksimaliai superintegruojama sistemos gali būti kvantuotos, todėl V. Fockas parodė, jog kvantinės mechanikos pagrindu Keplerio problema yra ekvivalentiška problemai laisvos dalelės ant trimatės vienetinės sferos paviršiaus keturmatėje erdvėje (3.11 pav.) (Reitz 2011). Trimačio paviršiaus suvaržytas taškinės dalelės judėjimas turi du laisvės laipsnius (José ir Saletan 1998). Taškinė dalelė yra idealizuotas modelis objekto, kurio fizikinės savybės (masė arba dydis) nevertinami, išskyrus tam tikra nagrinėjama savybė (šiuo atveju, perduodamas kampinis judesio kiekis).

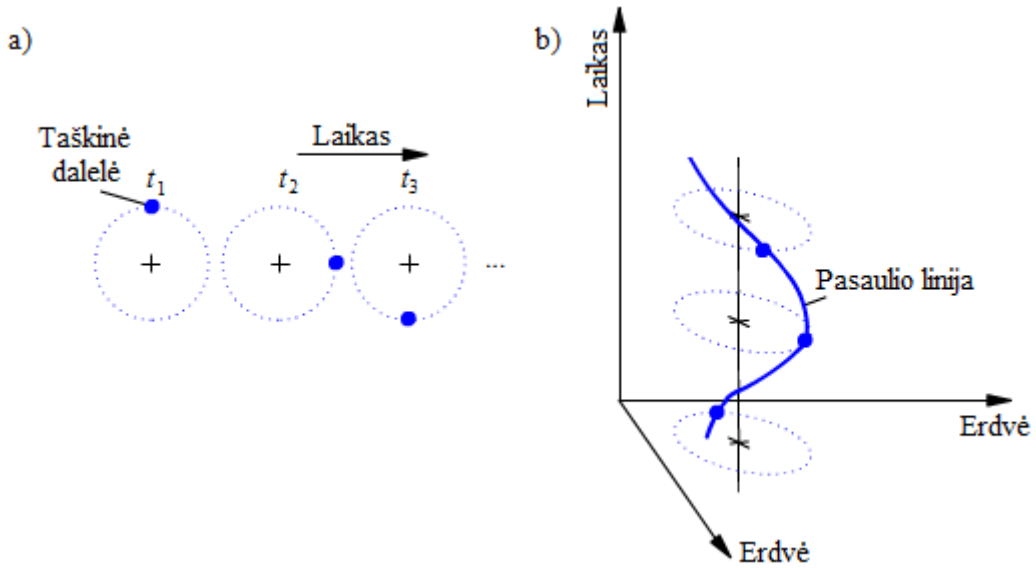


3.11 pav. Sferinio paviršiaus suvaržyta taškinė dalelė keturmatėje erdvėje

Tiriant sistemos makroskopines savybes kvazistatiniame pusiausvyros būvyje, euklidinės erdvės naudojimas yra tinkamas, kadangi nereliatyvistinėje klasikinėje mechanikoje (Niutono mechanikoje) laikas laikomas universaliu ir pastoviu, nepriklausančiu nuo stebėtojo judėjimo būsenos. Reliatyvistiniame atvejyje, gerai reprezentuojamame Hamiltono mechanikos principais,

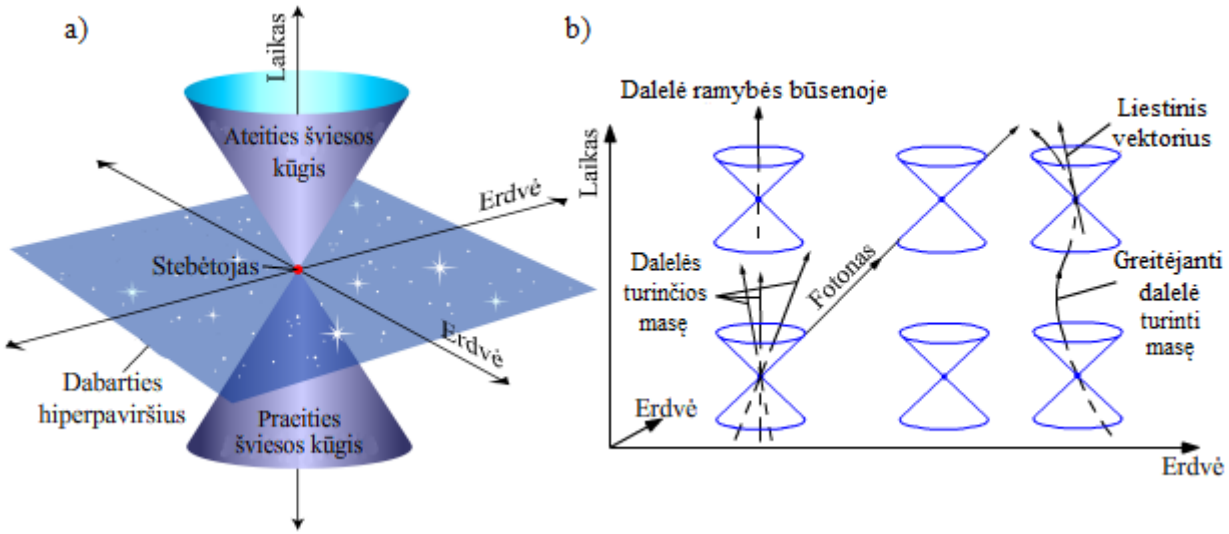
laikas negali būti atskirtas nuo trimatės erdvės, kadangi pastebėtas greitis šiuo atveju priklauso nuo objekto greičio atžvilgiu stebėtojo ir taip pat nuo gravitacinio lauko stiprumo, kuris, pagal specialiąją reliatyvumo teoriją, gali sulėtinti laiką (Carroll 2004).

Reliatyvumo teorijoje svarbi sąvoka yra erdvėlaikis. Fizikoje erdvėlaikis yra matematinis modelis, kuris kombinuoja erdvę ir laiką viename kontinuume. Erdvėlaikis dažnai yra interpretuojamas kaip trimatė erdvė su laiko vaidmenį atliekančia ketvirtąja dimensija. Matematiškai erdvėlaikis yra rinkinys taškų, vadinamų įvykiais, kartu su tolygia ir tęstine koordinačių sistema, identifikuojančia tuos įvykius. Kiekvienas įvykis yra aprašomas keturiomis koordinatėmis, suformuojančiomis pasaulio liniją (3.12 pav.), rodančią unikalų keturmačiame erdvėlaikyje judančio objekto taką (Norton 2012). Pasaulio linija (arba fazinė trajektorija Hamiltono mechanikoje) yra pasekmė erdvėlaikio įvykių, todėl kiekvienas taškas pasaulio linijoje yra įvykis, atitinkantis tam tikrą laiką ir erdvinę padėtį tuo laiku.



3.12 pav. Taškinės dalelės erdvėlaikis: a) dalelės būsenos; b) dalelės pasaulio linija (pagal Norton 2012)

Niutono mechanikoje visos inercinės atskaitos sistemos viena kitos atžvilgiu yra pastovaus tiesiaeigio judėjimo būsenoje, o pagal bendrąją reliatyvumo teoriją, masyvaus kūno (m_2 masės dalelė) aplinkoje esantis mažas kūnas (bemasė taškinė dalelė) gali patirti pagreitėjimą (Rindler 1991), todėl erdvėlaikio geometrija turi nepriklausyti nuo koordinačių sistemos. Šviesos greitis vakuume (3.13 b pav.) kiekvienam stebėtojui visomis kryptimis yra vienodas ir gali būti idealus rodiklis erdvėlaikio reprezentavimui, tačiau būtina įvertinti, jog gravitacinis laukas išlenkia šviesą (3.14 pav.).



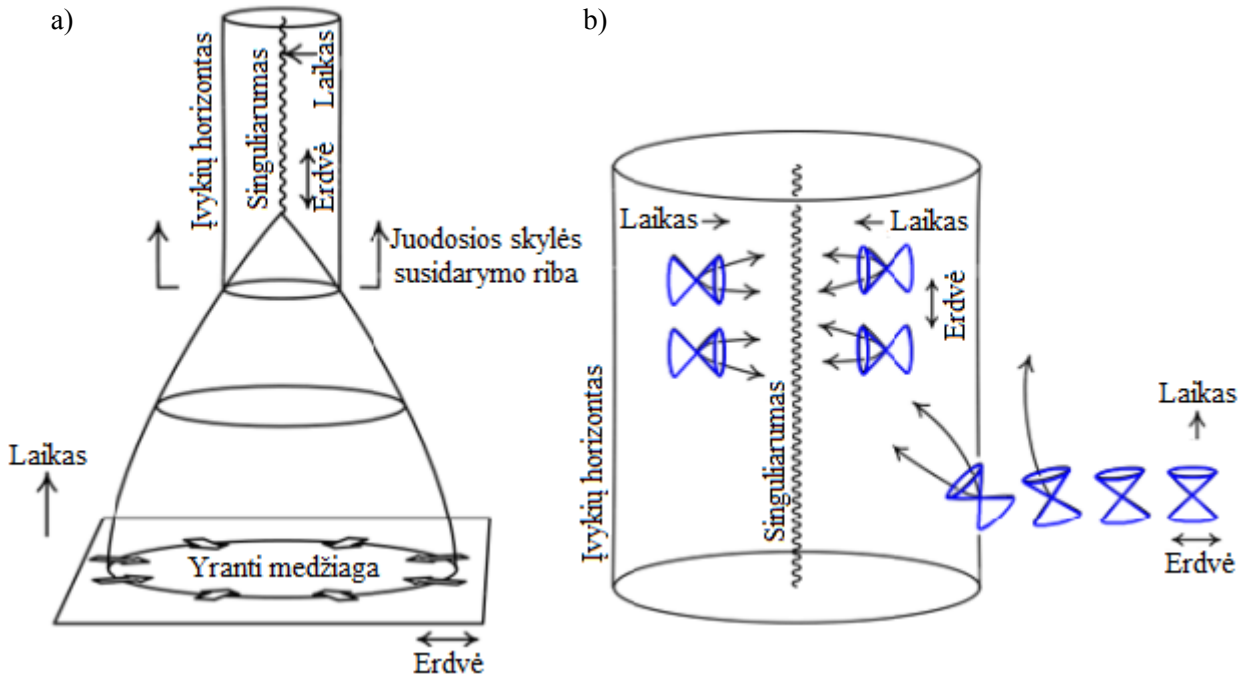
3.13 pav. Minkowskio erdvėlaikis: a) šviesos kūgis; b) pasaulio linijų padėtys šviesos kūgyje (pagal: Norton 2012; World... 2012)

Šviesos greičio pastovumas specialiojoje reliatyvumo teorijoje geometriškai yra atvaizduojamas Minkowskio plokščiojo erdvėlaikio šviesos kūgiu (3.13 a pav.). Siekiant gauti Minkowskio kūgį, nėra būtinas judėjimas šviesos greičiu, kadangi jis rodo trajektorijas, kuriomis eitų šviesa, jei ji būtų (Carroll 2004). Kadangi gravitacinės bangos yra prilyginamos šviesai, tad, dėl gravitacinių bangų 45^0 kampo poliarizacijos, šviesos tipo pasaulio linijos kūgyje taip pat sudarys 45^0 kampo posvyrį vertikalės atžvilgiu.

Priežastingumo principas teigia, jog įvykio priežastis visada bus tame pačiame šviesos kūgyje kaip ir pats įvykis (Carroll 2004). Šviesos kūgis yra matematinis modelis, kuris labai tvarkingai užkoduoja šią Einšteino erdvėlaikio priežastinę struktūrą. Kiekvienas įvykis erdvėlaikyje turi dvigubą kūgį, sujungtą su juo, o viršūnė atitinka patį įvykį. Kūgio ribos (3.13 a pav.) yra apibūdinamos šviesos pliūpsnio plėtote, einančia iš praeities (apatinis kūgis) į ateitį (viršutinis kūgis) pro dabartį (centras). Kadangi šviesos judėjimas laikomas greičiausiu galimu judėjimu, tad visa fizinė realybė yra sukaupta šio kūgio viduje, o išorinė erdvė yra neprieinama.

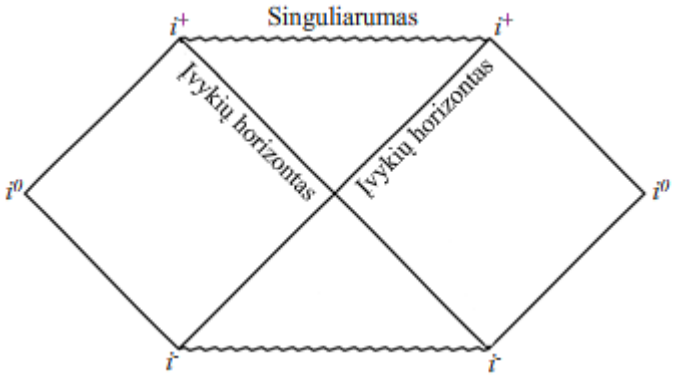
Visata natūraliai stengiasi tankėti ir šis procesas vadinamas gravitaciniu suirimu (Norton 2012). Kuo tankesnė tampa medžiaga, tuo labiau padidėja jėgos, sukeliančios tankėjimą, pavyzdžiui, tankėjant granuliuotai medžiagai, padidėja kontaktinės jėgos. Gravitacinis suirimas yra siejamas su juodosiomis skylėmis. Juodoji skylė – kosminis darinys, kurio paviršiuje traukos jėga stipresnė už kritinę reikšmę, kuriai esant šviesa dar gali palikti objekto paviršių (Carroll 2004). Tai yra erdvės ir laiko patologija, kurios prigimtis yra artimai susijusi su klasikine Niutono fizika, teigiančia, jog masės traukia viena kitą ir ši sąveika yra tuo stipresnė, kuo arčiau yra tos masės (Norton 2012). Dangaus kūnų mechanikoje juodųjų skylių susiformavimas apibūdinamas įvykiu,

kada materija dėl gravitacijos suyra į save (analogas yra Fermi-Ulamo modelio m_2 masės dalelės deformavimasis iki ribinės (soties) reikšmės 3.6 pav.), pavyzdžiui, kai sudega masyvios žvaigždės, įvedant singuliarumus erdvėlaikio struktūroje – taškus, kur Einšteino teorija žlunga, kadangi erdvėlaikio kreivis tampa begalinis. Objektui įkritus į juodąją skylę, Minkowskio kūgio laikas yra nukreipiamas į singuliarumą (3.14 pav.), kadangi tai yra visa ko ateitis, o emituojami energijos pliūpsniai uždengia visą vaizdą (Norton 2012). Juodųjų skylių charakterizavimui svarbi sąvoka yra įvykių horizontas. Įvykių horizontas – tai matematinė koncepcija, išreiškianti vienpusio laidumo erdvėlaikio ribą, supančią juodąją skylę ir žyminčią zoną, iš kurios negali pabėgti šviesa (Carroll 2004).



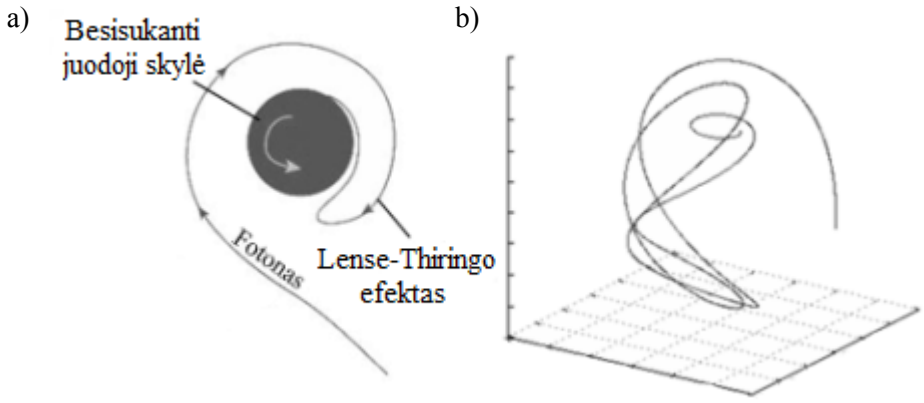
3.14 pav. Juodosios skylės koncepcija: a) medžiagos gravitacinis suirimas; b) įvykių horizontas (pagal Norton 2012)

Juodųjų skylių erdvėlaikio aplinkai atvaizduoti dažnai yra naudojamos Penrose diagramos (3.15 pav.). Penrose diagrama yra Minkowskio diagramos išplėtimas (Susskind ir Lindesay 2005), atrodantis kaip rombų rinkinys su kraštinėmis, žyminčiomis įvykių horizontą.

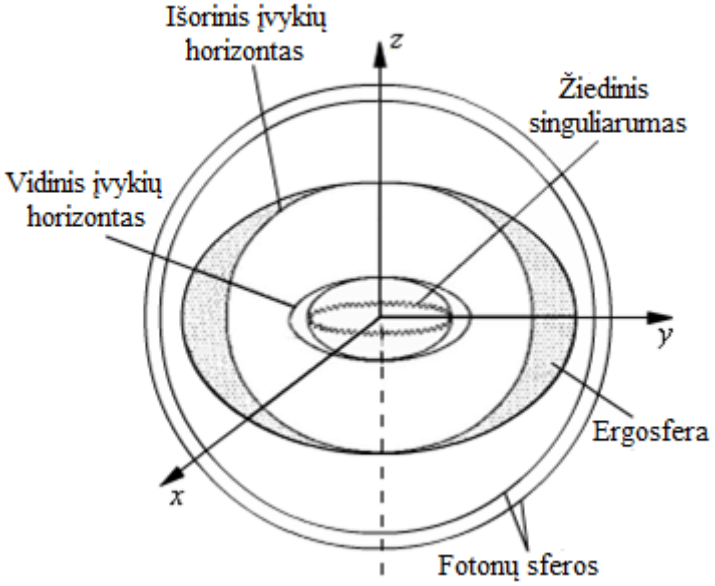


3.15 pav. Penrose diagrama (pagal Susskind ir Lindesay 2005)

Išskiriamos dviejų tipų juodosios skylės: statinės ir besisukančios (Wijk 2007). Dėl trinties nevertinimo, nagrinėjamam Fermi-Ulamo modeliui (3.1 pav.) artimesnės yra besisukančios juodosios skylės, charakterizuojamos mase ir sukiniu. Besisukančios juodosios skylės geometrija yra apibūdinama Kerro metrika (3.16 pav.), tai yra tam tikra funkcija, kuri nusako atstumą tarp elementų rinkinyje (Wijk 2007). Kerro juodoji skylė (3.17 pav.) susideda iš centre besisukančios masės, apsuptos dviejų įvykių horizontų. Išorinis ir vidinis horizontai sudaro suderintus elipsoidus su žiediniu singuliarumu židiniuose. Išorinis įvykių horizontas žymi kraštinę, kurią kirtus, stebėtojas nebegali pasipriešinti juodosios skylės vilkimo poveikiui (3.16 a pav.). Vidinis įvykių horizontas žymi zoną, iš kurios stebėtojas negali pabėgti. Tūris tarp įvykių horizontų yra vadinamas ergosfera (Susskind ir Lindesay 2005). Ergosferoje erdvė yra velkama ratu taip greitai, kad niekas negali išlikti ramybėje. Vilkimas yra Lense-Thiringo efektas (Norton 2012), kai masyvių kūnų sukimasis paveikia artimų kūnų sukimąsi, priversdamas juos precesuoti dėl iškreipto erdvėlaikio. Šis efektas gali būti prilygintas elektromagnetinės indukcijos gravitaciniam analogui (3.18 pav.).

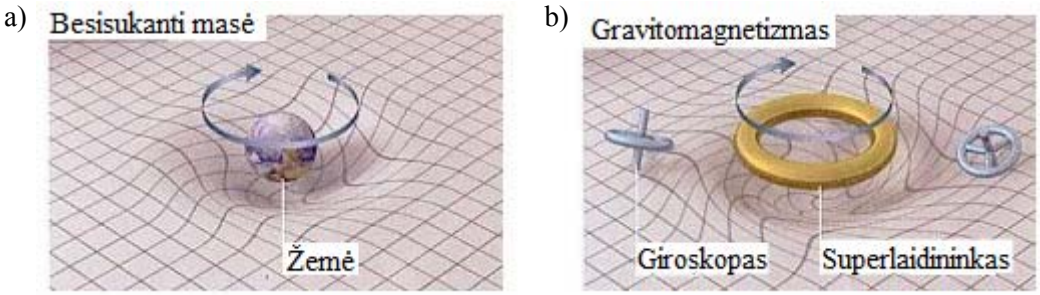


3.16 pav. Kerro metrika: a) Lense-Thiringo efektas; b) Kerro pasaulio linija (pagal: Wijk 2007; Muller ir Grave 2009)



3.17 pav. Kerro juodoji skylė (pagal Wijk 2007)

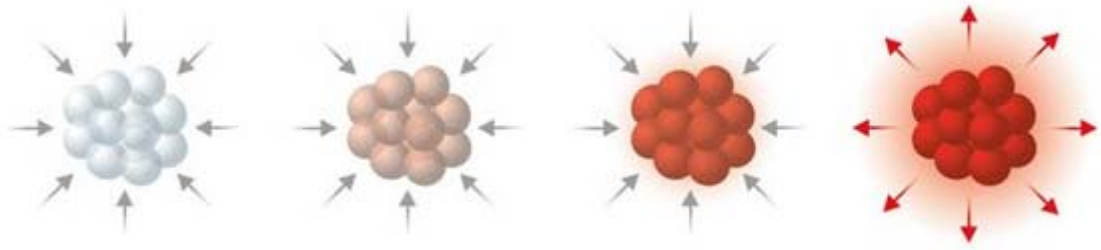
Priešingai nei statinės juodosios skylės, besisukančios juodosios skylės turi dvi fotonų sferas. Fotonų sferos spindulys yra žemiausioji stabilios orbitos riba. Kadangi fotonų sfera yra įvykių horizonto išorėje, šviesos dalelėms įmanoma išsilaisvinti iš juodosios skylės kartu su sukaupta energija (Norton 2012).



3.18 pav. Elektromagnetinės indukcijos gravitacinis analogas: a) gravitacija; b) gravitomagnetizmas (pagal Norton 2012)

Einšteino bendroji reliatyvumo teorija teigia, kad Visata prasidėjo nuo Didžiojo Sprogimo singuliarumo – akimirkos, kai visa dabar stebima medžiaga buvo sutelkta viename begalinio tankio taške – singuliarume, tačiau teorija neatsižvelgia į erdvėlaikio kvantinės prigimties sandarą, ribojančią didžiausias galimas medžiagos tankio ir gravitacijos jėgos vertes (Bojowald 2008). Paprastai gravitacija laikoma traukos jėga, todėl materijos rutulys (arba mišinio dalelė) stengiasi susispausti veikiamas savojo svorio ir, jei masė (dalelių mišinio kontaktinių jėgų pasekmė) yra pakankamai didelė, gravitacija viršija visas kitas jėgas, suspausdama rutulį į singuliarumą, susiformuojant juodajai skylei. Kvantinės gravitacijos teorijos teigia, jog atomistinė erdvėlaikio

struktūra esant labai aukštiems energijos tankiams pakeičia gravitacijos prigimtį, paversdama ją atstumiančia. Analogiška situacija galima 3.6 pav. dėl gravitacijos sukelto sukimo momento. Bendroji reliatyvumo teorija šio reiškinio nenumato, nes čia erdvė yra vientisa, todėl gali išlaikyti neribotą energijos kiekį. Egzistuojant tokiam kvantinės gravitacijos jėgų balanso mechanizmui, joks singuliarumas – begalinio tankio būsena – negali atsirasti, tai yra egzistuoja deformacijos soties riba, todėl manoma, jog pradinė didelio, tačiau riboto tankio Visata susidarė, kai iki tol egzistavusi Visata susitraukė dėl gravitacinės traukos jėgos. Pasiekus ribinę tankio reikšmę, gravitacijos jėga virto stumiančiąja jėga ir Visata vėl inertiškai pradėjo plėstis (3.19 pav.). Kosmologai šį procesą vadina Didžiuoju Atšokimu (Bojowald 2008).



3.19 pav. Didžiojo Atšokimo efektas (Bojowald 2008)

Kvantinės gravitacijos teorijose erdvė nagrinėjama kaip tankus ir nuolat judantis atomų tinklas. Įprastinėmis sąlygomis šis erdvėlaikio atomų egzistavimas negali būti pastebimas, nes jų sudaromas tinklas yra itin tankus ir primena tolydžią terpę, tačiau, kai erdvėlaikis atšokimo metu yra užpildomas energija ir suspaudžiamas, jo struktūra pasireiškia diskrečia koherentine forma (Didysis sprogimas... 2012). Taigi jei erdvėlaikis yra iš atskirų elementų sudaryta holograma, tuomet Visatą galima laikyti sfera, kurios išorinis paviršius yra padengtas rombų pavidalo tekstūra.

Viena iš kvantinės gravitacijos teorijų yra stygų teorija. Ji sukurta mėginant sujungti makro- ir mikroerdvių fiziką, kurioms atitinkamai atstovauja bendroji reliatyvumo teorija ir kvantinė mechanika. Stygų teorija yra pagrindinė kandidatė tapti Visko Teorija – teorija, kuri tvarkinga matematine sistema aprašytų visas sąveikas ir materiją (Aspden 1929), todėl yra pagrįsta V. Focko taškinės dalelės judėjimą trimatės sferos paviršiuje charakterizuoti koncentruojantis į šios teorijos teiginius.

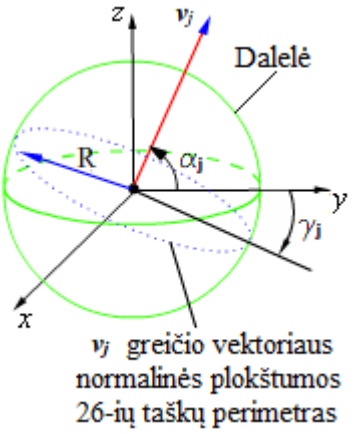
Erdvėlaikio supratimas stygų teorijoje nėra fiksuotas tam tikra sąvoka: erdvėlaikis geriausiai suprantamas kaip esantis skirtingas skirtingose sąlygose (Smolin 2006). Holografinis principas yra kvantinės gravitacijos ir stygų teorijos principas, teigiantis, kad norint išnagrinėti bet kokius uždarame tūryje (šiuo atveju Fermi-Ulamo modelio m_2 masės dalelėje) vykstančius procesus pakanka stebėti tik tą tūrį ribojantį paviršių (Susskind ir Lindesay 2005). Platesne prasme, šis principas teigia, kad visa trimatė Visata gali būti traktuojama kaip dvimatė informacinė struktūra,

atvaizduota ant stebimojo kosmologinio horizonto. Šios horizonto linijos fliuktuacijos aprašo visą materiją, todėl tie patys fizikiniai objektai ir sąveikos gali būti nusakomi taškiniais horizontais. Taigi kada dimensijos yra suprantamos kaip tinklelio sistemos komponentai, o ne fiziniai erdvės atributai, yra lengviau suprasti kintamos dimensijos vaizdus.

Bet kokios situacijos matematinis apibūdinimas fizikoje dažniausiai turi laisvės laipsnių perteklių, tai yra ta pati fizikinė situacija yra vienodai gerai apibūdinama daugybe ekvivalentinių matematinių konfigūracijų, todėl klausimas, kiek reikia dimensijų norint apibūdinti Visatą, vis dar yra atviras (Susskind ir Lindesay 2005). Įžvelgiant panašumų tarp nagrinėtos dalelės precesijos (3.7 pav.; 3.8 pav.) ir kvantinei mechanikai būdingo sukinio, taškinę dalelę sferos paviršiuje (3.11 pav.) galima laikyti elementariųjų dalelių fizikos standartinio modelio bozonu. Bozonu vadinama dalelė, turinti sveiką sukinį. Standartiniame modelyje paminėtini tokie bozonai (Bozonas... 2012):

- Fotonai – elektromagnetinio lauko kvantai.
- Gravitonai – hipotetinės gravitacinės sąveikos dalelės.

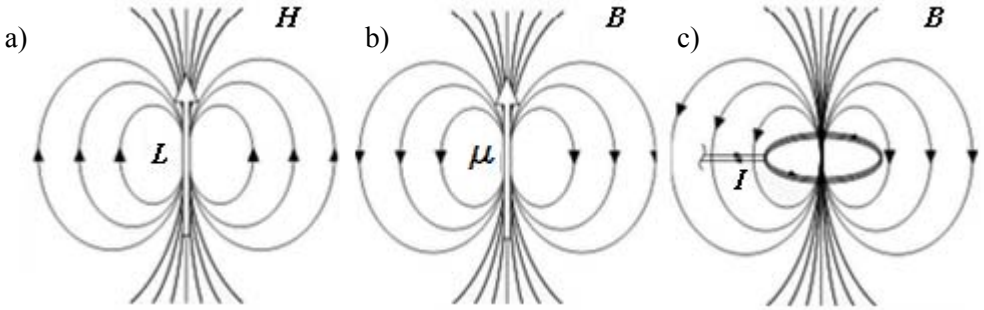
Stygų teorijoje teigiama, jog bozoninės stygos gali svyruoti plokščiame, bet nestabiliame 26-ių dimensijų erdvėlaikyje (Susskind ir Lindesay 2005). Kadangi domina Fermi-Ulamo modelio (3.1 a pav.) dalelės mikrobūsenų tyrimas, tokia aukšta dimensija yra tinkama mikrocharakteristikoms identifikuoti. Šis 26-ių dimensijų erdvėlaikis, remiantis holografiniu principu ir Hamiltono mechanika, atvaizduojamas kaip 26-ių taškų perimetro normalinė plokštuma j-ajam nagrinėjamos dalelės linijinio greičio vektoriui (3.20 pav.). Kvazistatiniame pusiausvyros būvyje Fermi-Ulamo modelio dalelei sąveikaujant su fiksuotu ir judančiu kūnais, kis greičio vektoriaus kryptis ir susietoji taškinė normalinė plokštuma dalelės paviršiuje formuos bozono pasaulio linijos judėjimą erdvėlaikyje.



3.20 pav. Fermi-Ulamo modelio m_2 masės dalelės linijinio greičio vektoriaus $\boldsymbol{v}_j$ normalinė plokštuma (taškinis horizontas)

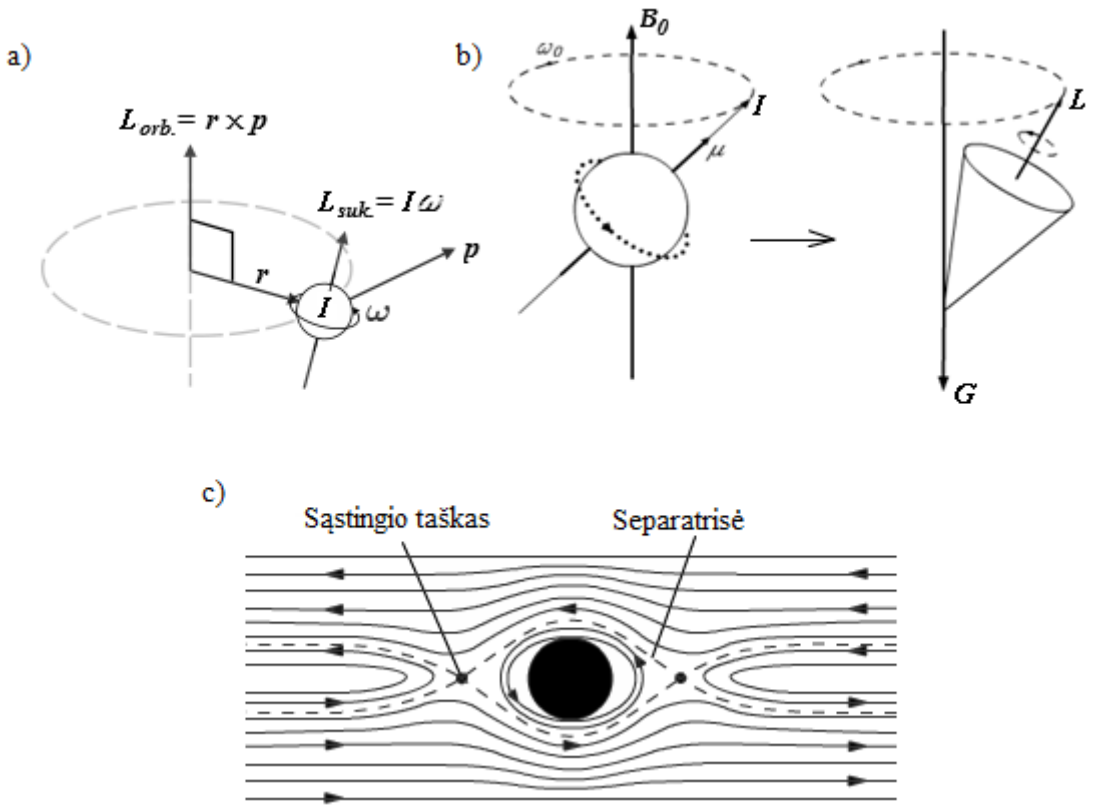
Pasaulio linijų vaizdo erdvėlaikyje suformavimas atitinka mikrobūsenų charakterizavimo problemos sprendinį – objektą, kuriame sukaupta ir užkoduota visa informacija apie dalelės būsenas, tačiau, siekiant suvokti atskirus erdvėlaikio taškus, reikalinga įvykių eigą aprašanti teorija.

Pagal bendrąją reliatyvumo teoriją, besisukančio objekto sukurtas gravitacinis laukas ribiniu atveju gali būti išreikštas lygtimis, kurios turi tokią pačią formą kaip ir magnetinis laukas klasikiniame elektromagnetizme (3.21 pav.) (Aspden 1929). Analogijoje elektromagnetizmui, bendrojoje reliatyvumo teorijoje naudojama gravitomagnetinė jėga, atsirandanti tokiu pačiu būdu, kaip judančio elektrinio krūvio sukeltas magnetinis laukas. Pagrindinė šios jėgos pasekmė yra pagreitėjimas arba taip vadinamas gravitomagnetinis efektas. Antrojoje XX a. pusėje, pasinaudojus bendrąja reliatyvumo teorija, buvo prieita išvada, kad su pagreičiu judantis elektronas spinduliuoja elektromagnetines bangas. Tuomet daroma prielaida, kad greitėjančiai judantis kūnas turi spinduliuoti gravitacines bangas, kurios laikomos daugelio gravitonų koherentine būsena (Norton 2012).



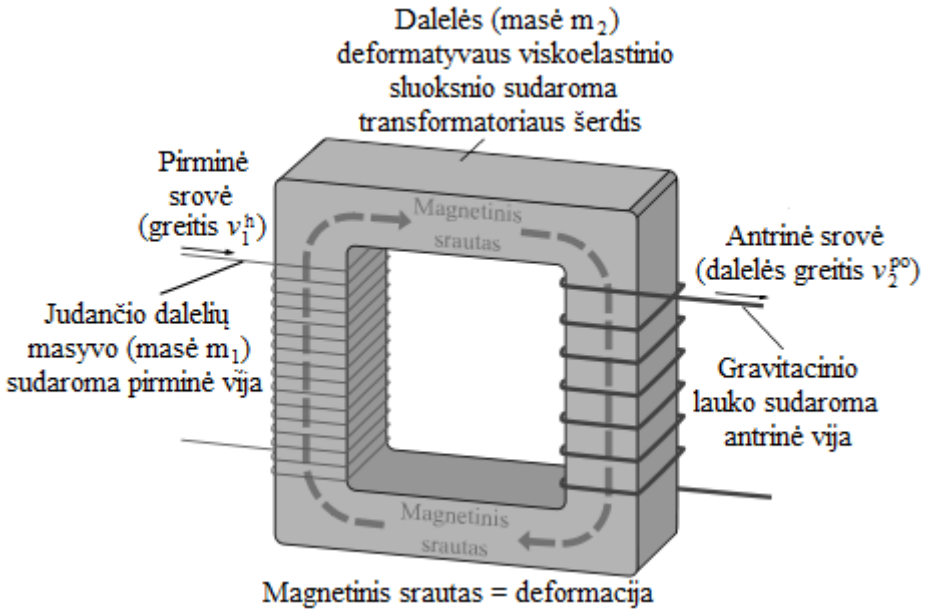
3.21 pav. Laukų fiziniai analogai: a) gravitomagnetizmas – kampinio judesio kiekio sudaromas gravitomagnetinis laukas ($\boldsymbol{L}$ – kampinis judesio kiekis ir $\boldsymbol{H}$ – gravitomagnetinio lauko stipris); b) elektromagnetizmas – dipolio momento $\boldsymbol{\mu}$ sudaromas magnetinis laukas; c) srovės sudaromas magnetinis laukas ($\boldsymbol{B}$ – magnetinės indukcijos laukas, $\boldsymbol{I}$ – srovė) (Gravitomagnetism... 2012)

Pagrindinė besisukančio kūno charakteristika yra kampinis judesio kiekis. Dalelė gali turėti dviejų rūšių kampinį judesio kiekį (Levitt 2008): tradicinį kampinį judesio kiekį, kylantį iš sukimosi, ir vidinį arba sukinio kampinį judesio kiekį (3.22 a pav.), kuris yra pastovi dalelės savybė ir apibūdina sukimąsi apie savo ašį, todėl tik sukinys, remiantis elementaria simetrijos teorema, gali duoti ryšį tarp gravitacijos ir magnetizmo. 3.22 pav. vaizduojami sukinio fiziniai analogai.



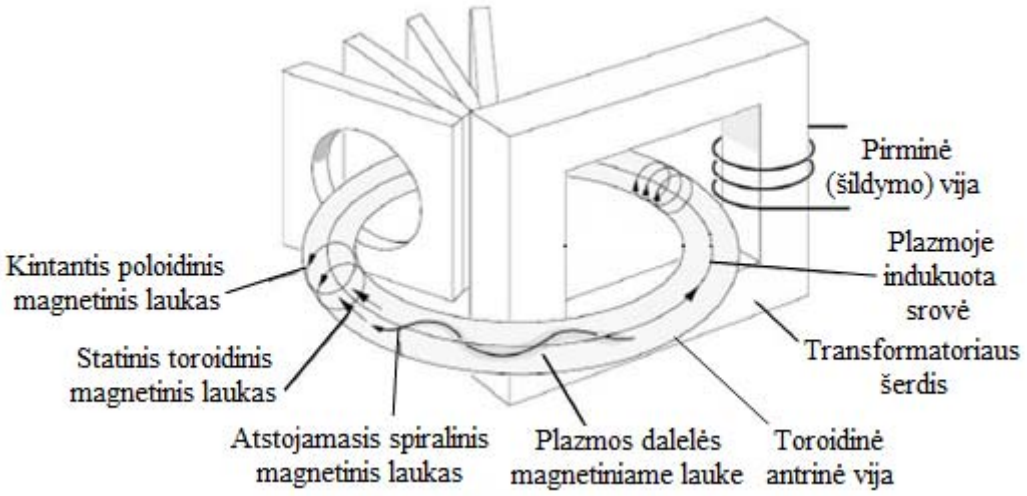
3.22 pav. Sukinio fiziniai analogai: a) orbitinis kampinis judesio kiekis $\boldsymbol{L}_{orb.}$ ir sukinio kampinis judesio kiekis $\boldsymbol{L}_{suk.}$; b) vilkelio precesija gravitaciniame lauke ir magnetinio momento $\boldsymbol{\mu}$ precesija statiniame magnetiniame lauke; c) kietas kūnas neniutoninio skysčio (pvz., betono mišinys) tėkmėje – analogiškas sukimasis kaip magnetizme ir sąveika artima Lense-Thiringo efektui gravitomagnetizme (pagal: Levit 2008; Gravitomagnetism... 2012; Egbers ir Pfister 1999; Basics of... 2012)

Specialioji reliatyvumo teorija aprašo judančių kūnų elektrodinamiką, minėdama hipotetinį sąryšį tarp magnetizmo ir gravitacijos. Fermi pagreitėjimas gali būti nagrinėjamas kaip įkrautos dalelės judėjimas magnetiniame lauke. Magnetinis laukas kaip ir gravitacinis laukas sudaro Hamiltono sistemą (De Lazzari 2011), todėl, magnetizmo teorijos požiūriu, trijų kūnų problema (3.3 pav.) gali būti pavaizduota kaip transformatorius (Swain 2010) – įrenginys, kuris perduoda elektros energiją iš vienos grandinės į kitą per feromagnetinę šerdį (3.23 pav.). Kintanti srovė, kurios atitikmuo gali būti kintantis Fermi-Ulamo modelio judančio kūno greitis v_1^h, pirmojoje vijoje sukuria kintantį magnetinį srautą transformatoriaus šerdyje – m_2 masės dalelė yra deformuojama, kuris indukuoja elektrovaros jėgą antrojoje vijoje ir m_2 masės dalelė įgauna greitį v_2^{po} (žr. (3.2) formulę).



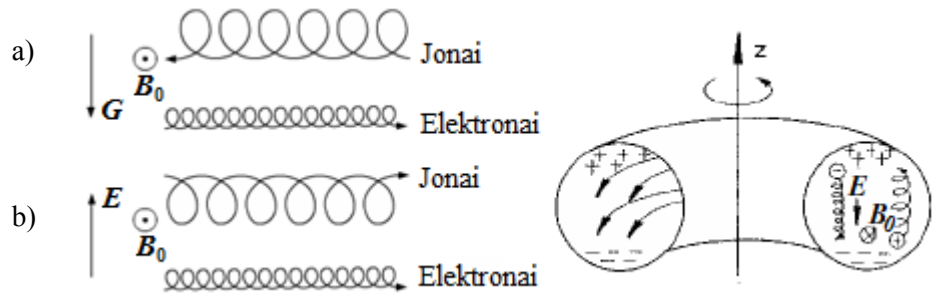
3.23 pav. Trijų kūnų problemos ir transformatoriaus sąryšis

Siejant su Hamiltono mechanikos koncepcija, viena vija gali būti laikoma šilumos baseinu (pirminė vija) – judantis m_1 masės kūnas Fermi-Ulamo modelyje (3.1 pav.), o antroji – dvimačiu atraktoriumi (toru), reprezentuojančiu deformuojamos m_2 masės dalelės energijos paviršių fazinėje erdvėje. Kai nėra judančio m_1 masės kūno, dalelės fazinės erdvės atraktorius yra nedeformuotas, kadangi gravitacinis laukas nėra trikdomas. Trečiojo kūno atsiradimas sutrikdo energijos paviršių. Galiausiai, dėl rastos analogijos su transformatoriaus elgsena, Fermi-Ulamo modelis (3.1 a pav.) gali būti atvaizduotas plazmos greitintuvu „Tokamak“ (3.24 pav.) (Jones 2003).



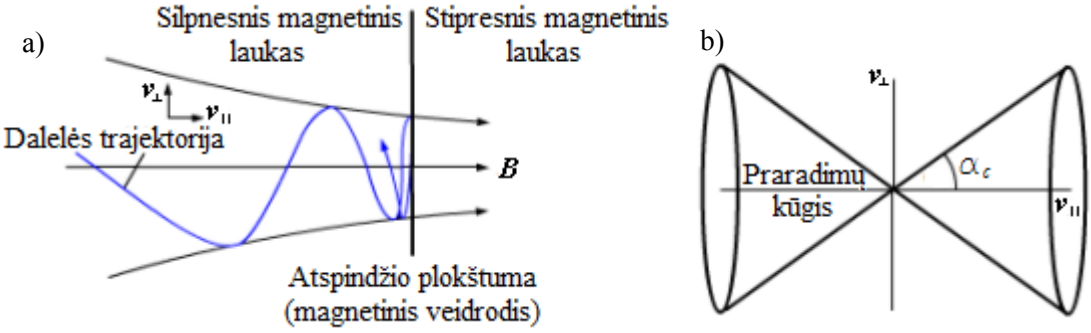
3.24 pav. Plazmos greitintuvas „Tokamak“ (pagal Jones 2003)

Plazma yra diamagnetikas – elektriškai neutrali sistema. Jonizuota plazma gaunama arba pašildoma statiniu magnetiniu lauku, papildytu su rezonansinio dažnio elektromagnetiniu lauku. Plazmos magnetinių sukinių sukurti magnetiniai laukai mažina išorinį magnetinį lauką (S. Eliezer ir I. Eliezer 2001). Kai nėra elektrinio lauko ir magnetinis laukas yra tolygus, tai yra magnetinis momentas nekinta laiko atžvilgiu, plazmos dalelės kinetinė energija išlieka pastovi (3.7 a pav.), kadangi Lorenco (orig. *Lorentz*) jėga yra visada statmena greičiui ir negali keisti dydžio (Single particle... 2012). Magnetinis momentas nėra invariantiškas atsiradus šilumos baseinui (pirminė transformatoriaus vija), kadangi indukuotas elektrinis laukas sukasi fazėje su plazmos dalelėmis (t.y. panaikinama m_2 masės dalelės deformacija) ir jas tolygiai pagreitina, iškreipdamas erdvėlaikį. Srovė, priverčianti plazmą judėti išilgai toro, yra gaunama indukcijos būdu, kadangi plazma veikia kaip antroji vija transformatoriuje. Srovė plazmoje yra pulsacinė (Jones 2003), todėl ji sukuria kintamą poloidinį magnetinį lauką $\boldsymbol{B_1}$, galimai susijusį su nariu $v_1^h - v_2^{pr}$ (3.2) formulėje ir besisukantį apie toroidinį statinį magnetinį lauką $\boldsymbol{B_0}$, galimai susijusį su nariu v_1^h (3.2) formulėje. Ši toroidinio ir poloidinio laukų kombinacija suformuoja spiralines magnetinio lauko linijas. Įkrauta plazmos dalelė su statmenu laukui greičio komponentu suksis apie lauko liniją apskritimu ar spirale, todėl užims tam tikras lauko linijas, kurios konverguoja, kad sudaryti lauko gradientą. Plazmos dalelė yra veikiama magnetiniam laukui statmenos gravitacinės jėgos (Hutchinson 2001). Jei jėga $\boldsymbol{G} = m_2 \cdot \boldsymbol{g}$ yra statmena $\boldsymbol{B_0}$, gaunamas greitis $\boldsymbol{v_g}$, kuris sukelia lėtą krūvių atskyrimą, kadangi slydimo kryptis elektronams ir jonams yra priešingo ženklo (3.25 pav.). Krūvių atskyrimas sukuria elektrinius laukus ir slydimus dėl elektrinio lauko (Jones 2003). Šie slydimo efektai vadinami magnetiniu veidrodžiu (3.26 pav.) ir yra susiję su magnetinio momento adiabatinu invariantiškumu. Magnetinio veidrodžio efektas pasižymi tendencija atmušti įkrautas daleles atgal iš aukšto magnetinio lauko (Hutchinson 2001), poloidiniame pjūvyje suformuojant slydimo kontūrą (3.26 a pav.).



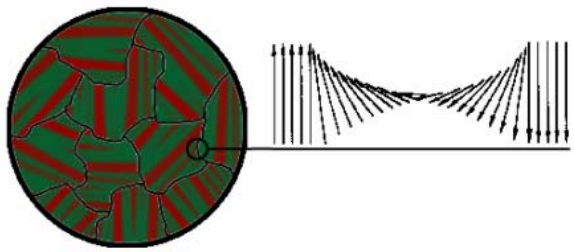
3.25 pav. Krūvių atskyrimas gravitaciniame ir elektriniame laukuose: a) jonų ir elektronų judėjimo kryptys gravitaciniame lauke; b) jonų ir elektronų judėjimo kryptys elektriniame lauke; c) krūvių slydimas toroidinaime lauke (pagal: Hutchinson 2001; Jones 2003)

Magnetinio veidrodžio pralaidumas išreiškiamas praradimų kūgiu (3.26 b pav.): dalelės su didesniu nei kritinė reikšmė kampu tarp jų greičio vektoriaus ir magnetinio lauko bus atspindėtos, o su mažesniu – praeis (Hutchinson 2001).



3.26 pav. Magnetinis veidrodis: a) dalelės slydimas magnetiniame veidrodyje; b) praradimų kūgis (pagal: Single particle... 2012; Hutchinson 2001)

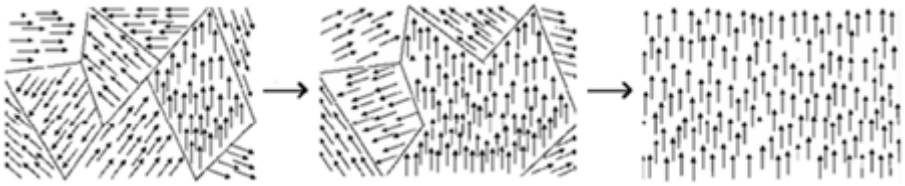
„Tokamak“ energijos toras ir šildymo vija yra dvi atskiros tiesiogiai nesąveikaujančios sistemos. Ryšį tarp jų kuria ir sąveiką užtikrina feromagnetinė šerdis. Neįmagnetėjusios feromagnetinės medžiagos turi struktūrą (Buschow ir De Boer 2004), sudalintą tolygios sukinių magnetinės poliarizacijos (magnetizacijos) domenais – Weisso domenais (3.27 pav.). Sukinio poliarizacija klasikiniame elektromagnetizme yra laipsnis, kuriuo sukinys – įgimtas elementariosios dalelės kampinis judesio kiekis, yra sulygiuotas su pasirinktąja kryptimi. Tai yra vektorių laukas, kuris išreiškia ilgalaikių ar indukuotų magnetinių dipolinių momentų tankį magnetinėje medžiagoje.



3.27 pav. Weisso domenai feromagnetike, atskirti koherentinėmis magnetizacijos vektorių sienomis (pagal Ferromagnetism... 2012)

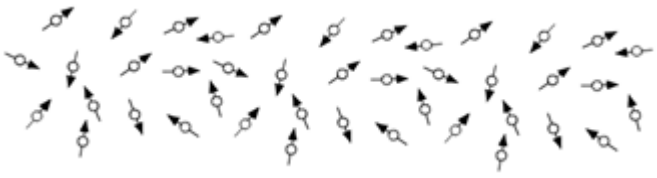
Kiekviename domene sukiniai yra susilygiavę, tačiau, jei visa medžiaga yra žemos energijos konfigūracijoje, atskirų domenų sukiniai yra nukreipti priešingomis kryptimis ir jų magnetiniai laukai kompensuojasi, todėl magnetinių domenų egzistavimas yra energijos minimizacijos rezultatas (Bran 2010). Ribos skiriančios magnetinius domenus yra vadinamos domenų sienomis (3.27 pav.) arba dvimačiais singuliarumais stygų teorijoje. Šiose sienose magnetizacija koherentiškai keičia kryptį tarp dviejų skiriamųjų domenų (Charles 2012). Veikiant magnetiniam laukui, tai yra „šildant“ feromagnetinę šerdį, jos magnetiniai domenai susitraukia arba išsiplečia dėl

sienų judėjimo. Išorinis magnetinis laukas $\boldsymbol{B_1}$ orientuoja domenus taip, kad jų magnetiniai momentai būtų nukreipti lauko kryptimi, todėl žymiai sustiprėja. Kai visi domenai yra orientuoti, pasiekiamas įmagnetėjimo sotis (3.28 pav.).



3.28 pav. Weisso domenų nykimas veikiant išoriniam magnetiniam laukui (pagal Magnetic... 2012)

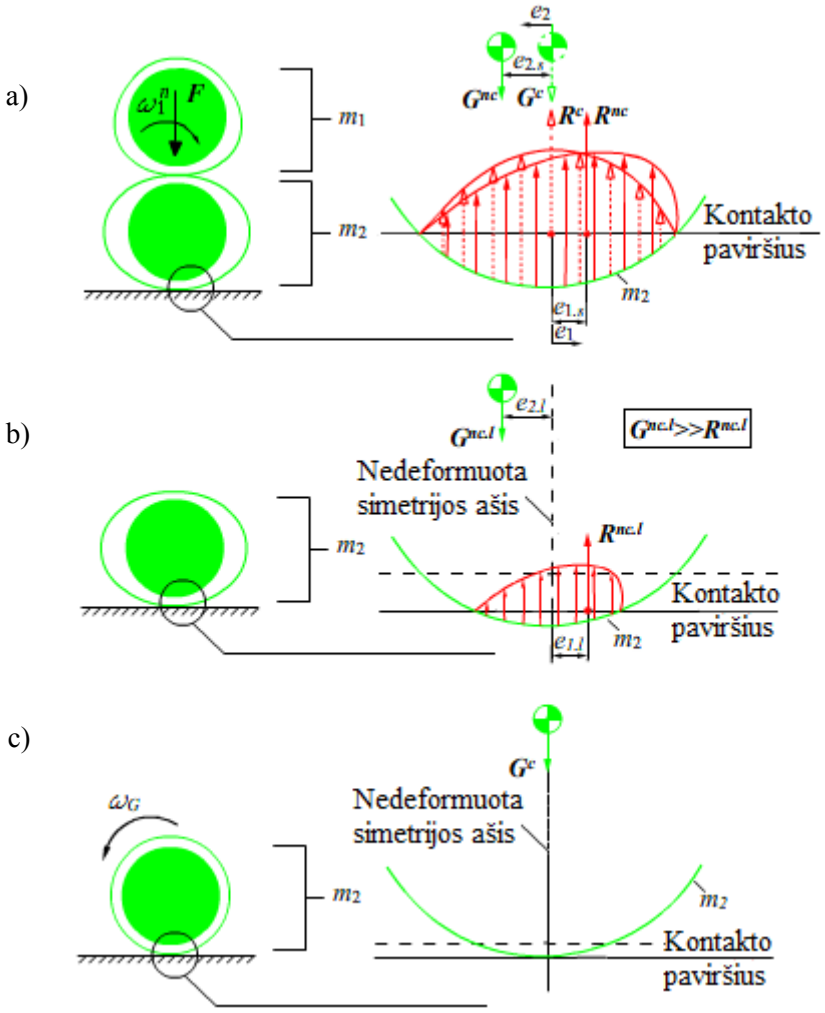
Silpstant išoriniam magnetiniam laukui $\boldsymbol{B_1}$, tai yra greičiui v_2^{pr} (3.2) formulėje artėjant link v_1^h, mažėja domenų orientacijos laipsnis, tačiau visai neišnyksta (nes (3.2) formulėje išnykus $v_1^h - v_2^{pr}$ nariui, lieka pirmasis v_1^h narys), tai yra domenai negrįžta į mažiausios energijos būseną (Charles 2012). Nemagnetiniai intarpai, arba dislokacijos, feromagnetinėje medžiagoje gali sukelti domenų sienų įtvirtinimą. Toks įtvirtinimas priverčia sieną išlikti lokaliame energijos minimume, sukurdamas liekamąją tinklinę magnetizaciją. Domenų sienoms pereinant minėtuosius defektus energija yra disipuojama šilumos pavidalu ir pasireiškia Barkhauseno triukšmas, kuris atsakingas už magnetinės histerezės atsiradimą (Buschow ir De Boer 2004). Pažymėtina, jog histerezė rodo metastabilią būseną ir yra būdinga ne tik feromagnetikams, tačiau ir tam tikrų medžiagų (pvz., betonas) deformacijai veikiant ciklinei apkrovai. Tinklinė magnetizacija gali būti sunaikinta šildymu ir staigiu šaldymu (Buschow ir De Boer 2004), tačiau šiuo atveju jau be išorinio magnetinio lauko $\boldsymbol{B_1}$, tai yra be $v_1^h - v_2^{pr}$ nario (3.2) formulėje. „Šildymą“, nesant išorinio magnetinio lauko, atlieka m_2 masės dalelės savasis svoris, tai yra gravitacijos jėga $\boldsymbol{G} = m_2 \cdot \boldsymbol{g}$, pakelianti temperatūrą iki Kiuri (orig. *Curie*) temperatūros ir tokiu būdu suardydama magnetinius domenus (3.29 pav.). Gravitacinio lauko veikiamas feromagnetikas, patiria antrosios eilės fazinį perėjimą tapdamas paramagnetiku ir yra staigiai „atšaldomas“ magnetinio veidrodžio efekto.



3.29 pav. Magnetiniai momentai feromagnetike, pašildytame virš Kiuri temperatūros (pagal Levitt 2008)

3.30 pav. parodyta feromagnetiko šildymo ir šaldymo analogija viskoelastinėje deformuojamoje medžiagoje. Iš 3.30 a pav. matoma, jog m_2 masės dalelės viskoelastinis

(deformatyvus) sluoksnis yra veikiamas m_1 masės kūno arba, analogijoje su magnetizmu, galima tarti, jog m_1 masės kūnas sudaro išorinį magnetinį lauką $\boldsymbol{B}_1$. Deformacijos tęsiasi iki soties reikšmės ir m_1 masės kūnas atsitraukia, kartu išnykstant ir išoriniam magnetiniam laukui. m_2 masės dalelės viskoelastinis sluoksnis visiškai neatsistato į nedeformuotą būseną, todėl lieka tam tikra reakcija $\boldsymbol{R}^{nc.l}$. Dėl šio nevisiško atsistatymo, dalelės savojo svorio jėga $\boldsymbol{G}^{nc.l}$ išlaiko ekscentricitetą (3.30 b pav.). Be to, $\boldsymbol{G}^{nc.l} >> \boldsymbol{R}^{nc.l}$, todėl gaunamas sukimo momentas, panaikinantis liekamąją deformaciją bei pagreitinantis dalelę – „pašildymas“ be išorinio magnetinio lauko (3.30 c pav.). Šis suteiktas greitis yra per didelis nuostoviai precesijai vykti, todėl yra staigiai suvaržomas kampinio judesio kiekio invariantiškumo – magnetinio veidrodžio efekto.



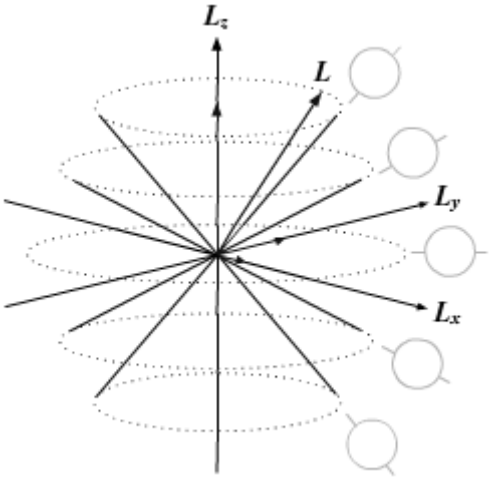
3.30 pav. m_2 masės dalelės viskoelastinio sluoksnio deformacija analogijoje su magnetizmu: a) diamagnetinė būsena – dalelė priešinasi savojo svorio jėgos $\boldsymbol{G}^{nc}$ bandymui pasukti; b) feromagnetinė būsena – liekamoji deformacija (arba magnetizacija); c) paramagnetinė būsena – dalelė yra pagreitinama savojo svorio jėgos $\boldsymbol{G}^{nc.l}$ sukelto sukimo momento

Bohro van Leeuwenno teorema sako, jog magnetizmas negali atsirasti klasikiniuose kietuosiuose kūnuose. Be kvantinės mechanikos nebus diamagnetizmo, paramagnetizmo ar feromagnetizmo. Feromagnetizmas yra dėl dviejų kvantinės mechanikos efektų: sukinio ir Paulio draudimo principo. Dėl Paulio draudimo principo magnetizmas kietuosiuose kūnuose tampa kvantinės mechanikos efektu, kurio klasikinė fizika negali paaiškinti (Rae 2005).

Pagrindinis vyksmas feromagnetike yra Weisso domenų sienų susiformavimas ir išnykimas, todėl galima nagrinėti tik jas, tiksliau, reikia nagrinėti magnetizacijos vektorių, (3.5) formule išreiškiamą kaip tinklinį magnetinį momentą $\sum \boldsymbol{\mu}$ medžiagos tūrio vienete V' (Levitt 2008).

$$\boldsymbol{M} = \frac{\sum \boldsymbol{\mu}}{V'}. \tag{3.5}$$

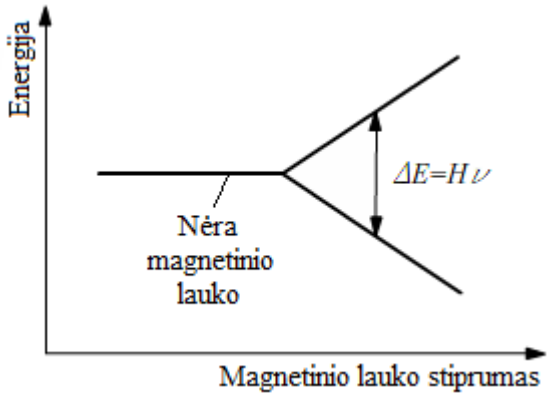
Magnetiniame lauke magnetiniai momentai užima vieną iš kvantinių būsenų, tai yra orientacijų magnetinio lauko $\boldsymbol{B_0}$ ašies atžvilgiu. Kvantinė mechanika teigia, jog priešingai nei klasikinėje mechanikoje, energija negali kisti tolydžiai, o tik tam tikrais baigtiniais dydžiais – kvantais ir leistinosios energijos vertės vadinamos energijos lygmenimis. Teorija teigia, jog norint charakterizuoti kvantinę būseną, pakanka žinoti energiją, sukinio kampinį judesio kiekį ir jo projekciją į z ašį (3.31 pav.).



3.31 pav. Orbitinio kampinio judesio kiekio vektorinis modelis (pagal Rae 2005)

Kvantinės sistemos perėjimas iš vieno energijos lygmens į kitą vadinamas kvantiniu šuoliu. Kvantiniai šuoliai būna savaiminiai ir priverstiniai. Savaiminis šuolis vyksta be jokio išorinio poveikio (savaime) ir tik į žemesnį energijos lygmenį, o priverstinis šuolis vyksta dėl išorinio poveikio (Poškus 2009) ir į žemesnį arba į aukštesnį energijos lygmenį. Vykstant kvantiniam

šuoliui iš aukštesnio energijos lygmens E_2 į žemesnį energijos lygmenį E_1, emituojamas energijos kiekis, kuris yra lygus tų lygmenų skirtumui (3.32 pav.). Priešingas šuolis gali įvykti tik iš išorės gavus energiją $E_2 - E_1$, sukeliančią rezonansą (Karlsson 1999).



3.32 pav. Zeemano efektas (pagal Levitt 2008)

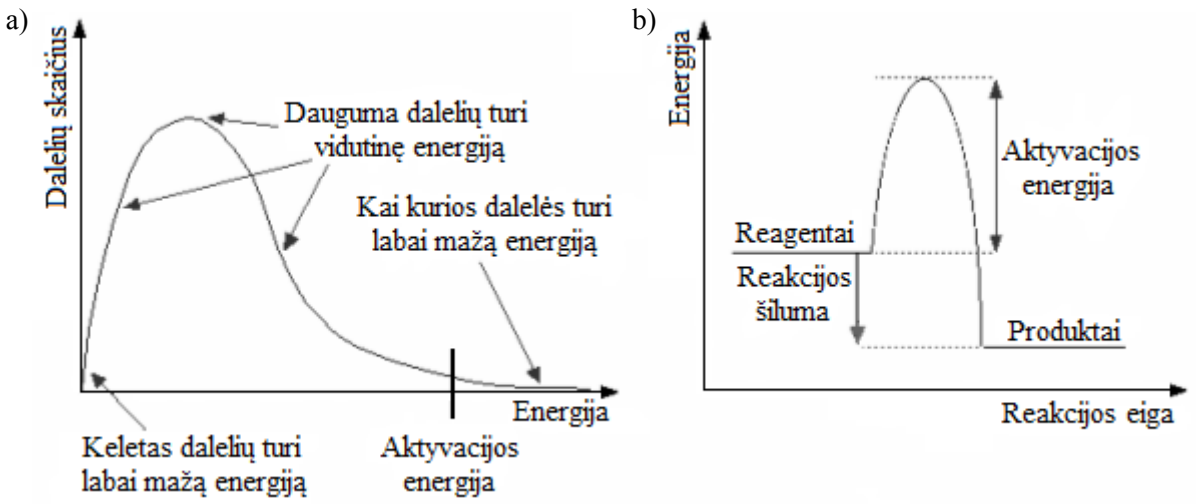
Terminės pusiausvyros sąlygomis dipolių magnetinių momentų pasiskirstymas tarp žemos energijos būsenos ir aukštesnės energijos būsenos yra apibūdinamas (3.6) formule (Poškus 2009) analogiška (1.8) formulei ir išreiškia Maxwello-Bolcmano skirstinį.

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}, \tag{3.6}$$

čia ΔE – energijos lygmenų skirtumas ($\Delta E = E_2 - E_1$, kur laikoma, kad $E_2 > E_1$); N_1 yra E_1 lygmens užpilda, N_2 yra E_2 lygmens užpilda; k – Bolcmano konstanta; T –absoliučioji temperatūra.

Iš (3.6) lygties gaunama, jog žemesniojo lygmens užpilda terminėje pusiausvyroje visada yra didesnė už aukštesniojo lygmens užpildą, todėl šio sukinių perviršio magnetinis momentas sudaro tinklinę magnetizaciją (arba liekamąją deformaciją).

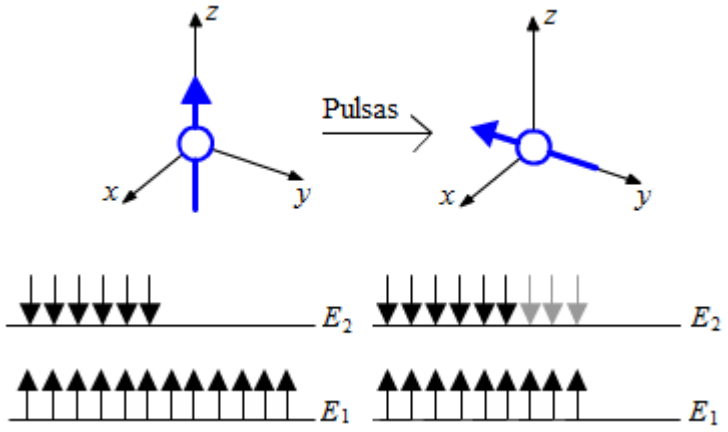
Molekulinėje kinetinėje dujų teorijoje Maxwello-Bolcmano skirstinys (3.33 a pav.) nusako, kiek dalelių turi pakankamai energijos reaguoti (t.y. deformuotis, pagreitėti) joms susiduriant. Reakcija nevyks, jei dalelės susidurs neturėdamos būtinos minimalios energijos, vadinamos reakcijos aktyvacijos energija (Salomon ir Zhai 2006). Aktyvacijos energiją galima įsivaizduoti kaip reakcijos barjerą (3.33 b pav.). Jei dalelės susiduria, turėdamos mažesnę energiją nei aktyvacijos energija, neįvyksta nieko ypatingo, nes jos paprasčiausiai atšoka viena nuo kitos, nesuardydamos esamų ryšių ir nesukurdamos naujų.



3.33 pav. Reakcijos aktyvacijos energija: a) Maxwello-Bolcmano skirstinys; b) energijos barjeras (pagal Activation... 2012)

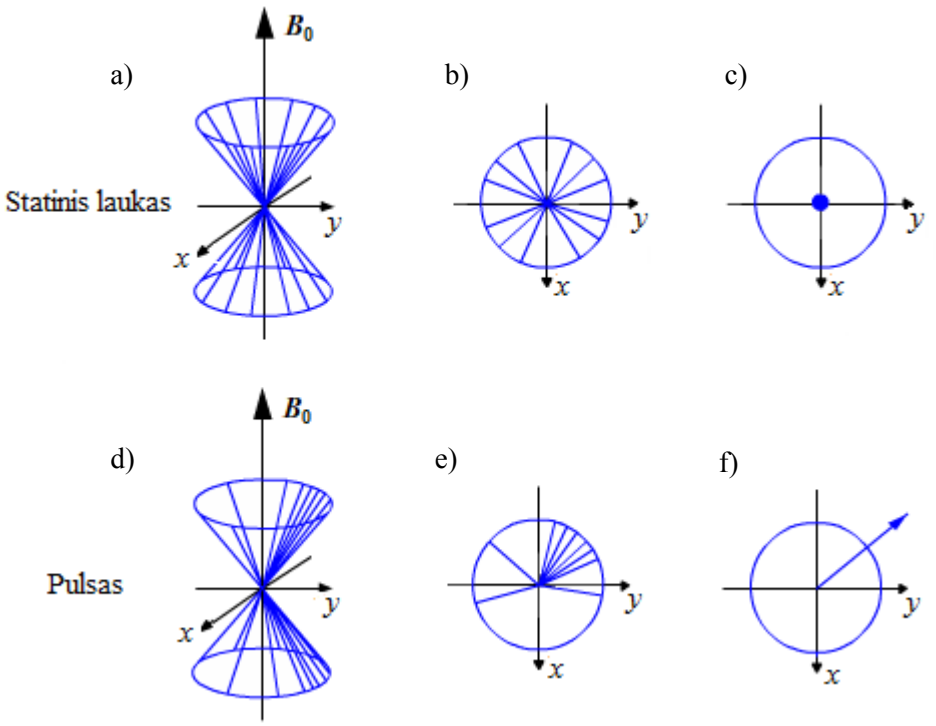
3.33 a pav. matoma, jog dauguma dalelių susidurdamos neturi pakankamai energijos reaguoti. Siekiant priversti jas reaguoti, reikia pakeisti grafiko formą keičiant temperatūrą, susijusią su išoriniu poveikiu.

Jei terminėje pusiausvyroje esančio kiekvieno sukinio poliarizacija tam tikro $\boldsymbol{B}_1$ pulso yra staigiai pasukama 90° kampu apie x ašį (3.34 pav.), sistema yra sužadinama į nestabilią aukštos energijos būseną (Faulkner 1996).



3.34 pav. Sukinio poliarizacijos pasukimas apie x ašį (pagal Levitt 2008)

Kadangi pulsas pasuka kiekvieno atskiro sukinio poliarizaciją tuo pačiu kampu, jis taip pat pasuka ir visą magnetizacijos pasiskirstymą, pasiekiant soties būseną (3.35 pav.).

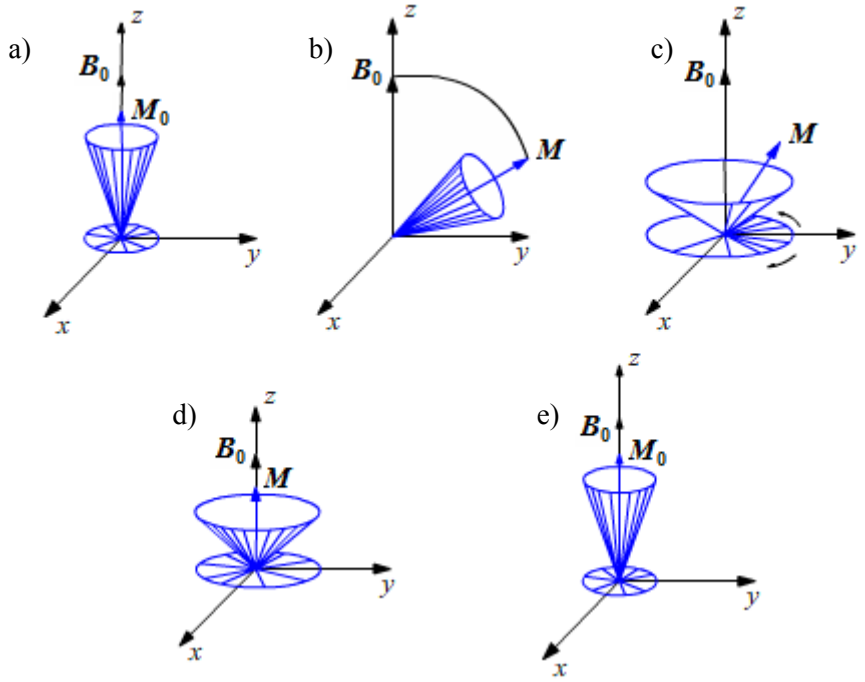


3.35 pav. Magnetizacijos būsenos: a) magnetizacija terminėje pusiausvyroje; b) magnetinių momentų pasiskirstymas terminėje pusiausvyroje; c) magnetizacijos vektorius terminėje pusiausvyroje; d) magnetizacijos koherencija (soties būsena), sukelta pulso poveikio; e) magnetinių momentų pasiskirstymas soties būsenoje; f) magnetizacijos vektorius soties būsenoje (pagal Faulkner 1996)

Soties būsena yra nestabili būsena, todėl galima relaksacija į žemos energijos lygmenį. Relaksacija – tai sistemos energijos praradimas laiko atžvilgiu, pakeliantis sistemos temperatūrą (Levitt 2008). Relaksaciją pirmiausiai nagrinėjo F. Blochas (Levitt 2008), kuris nustatė, jog sukinių sistemai yra būdinga dviejų rūšių relaksacija:

- išilginė relaksacija (T_1), apibūdinanti išilginės magnetizacijos z komponentės grįžimą į pusiausvyros reikšmę;
- skersinė relaksacija (T_2), apibūdinanti skersinės magnetizacijos nykimą.

Nors yra tam tikras ryšys tarp T_1 ir T_2 relaksacijų, tačiau joms būdingas skirtingas veikimo mechanizmas. Visas relaksacijos mechanizmas yra pavaizduotas 3.36 pav.



3.36 pav. Magnetizacijos ($\boldsymbol{M}$) relaksacija: a) magnetizacijos ($\boldsymbol{M}$) būsena pusiausvyros sąlygomis; b) magnetizacijos ($\boldsymbol{M}$) pokrypis nuo z ašies dėl $\boldsymbol{B_1}$ lauko pulso poveikio; c) išilginės ir skersinės relaksacijos pasireiškimas; d) skersinės relaksacijos pabaiga ir išilginės relaksacijos tąsa; e) išilginės relaksacijos pabaiga, magnetizacijai ($\boldsymbol{M}$) grįžtant į pusiausvyros padėtį (pagal Norman 2010)

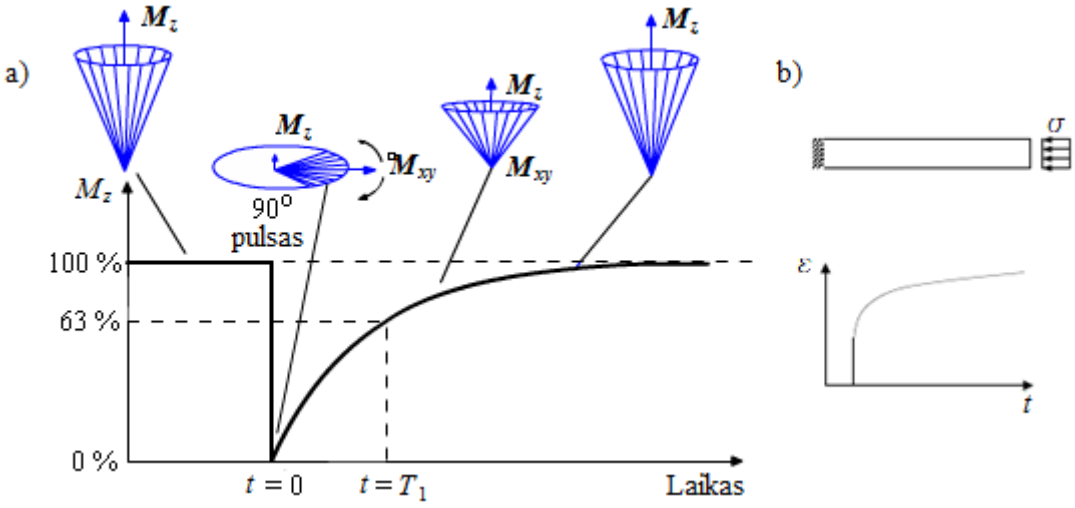
Išilginė relaksacija

Išilginė relaksacija yra magnetizacijos vektoriaus $\boldsymbol{M}$ susilygiavimas su z ašimi, susijęs su populiacijų skirtumu tarp dviejų energijos lygių ir energijos išleidimu į aplinką, pakeičiančiu aplinkos energiją. Taigi T_1 relaksacija yra entalpinis procesas. Entalpija yra termodinaminės sistemos suminės energijos matas. Ji apima vidinę energiją, reikalingą sistemai sukurti, ir energijos kiekį, reikalingą sistemos erdvei padidinti, pastumiant aplinką ir įtvirtinant tūrį bei slėgį. Išilginė relaksacija gali būti apibūdinta kaip eksponentinis nykimas link pusiausvyros magnetizacijos su charakteringąja nykimo konstanta R_1, kuri vadinama išilginės relaksacijos greičiu (Levitt 2008). Atvirkščias dydis vadinamas išilginės relaksacijos laiku. Priimant homogeninį magnetinį lauką z kryptimi, T_1 relaksaciją charakterizuoja (3.7) lygtis (Levitt 2008).

$$M_z(t) = M_0 \cdot \left(1 - e^{-t/T_1}\right) + M_z(t_0) \cdot e^{-t/T_1}, \tag{3.7}$$

čia $M_z(t_0)$ – išilginė magnetizacija iš karto po sužadinimo pulso $\boldsymbol{B_1}$; M_0 – pusiausvyros magnetizacija išilgai statinio magnetinio lauko $\boldsymbol{B_0}$; T_1 – laikas, per kurį atkuriama 63 % pusiausvyros magnetizacijos (3.37 a pav.).

Atkreipiamas dėmesys, jog (3.7) formulė yra panaši į literatūros apžvalgoje pateiktą (1.18) formulę, išreiškiančią betono valkšnumo deformacijos plėtojimąsi laiko atžvilgiu. Analogija leidžia teigti, kad magnetizacijos vektorius magnetizmo teorijoje gali būti tapatus deformacijoms gelžbetonio mechanikoje. Nuo laiko priklausančios deformacijos viskoelastinėje medžiagoje dažnai, įvertinant kraštines sąlygas, yra padalijamos į valkšnumo ir relaksacijos. Jeigu veikia pastovūs įtempiai (3.37 b pav.), konstrukcijos deformacijos didės laiko atžvilgiu, tačiau jei konstrukcijai suteikiama pastovi deformacija (3.38 b pav.), įtempiai mažės laiko atžvilgiu. Valkšnumui nesenėjančioje medžiagoje modeliuoti dažnai taikomas viskoelastinę medžiagą reprezentuojantis reologinis Kelvino-Voigto modelis, susidedantis iš spyruoklės ir slopintuvo, išdėstytų lygiagrečiai. Bendrai priimta, jog vidutiniškai apkrautas betonas, senesnis nei pora dienų, apytiksliai elgiasi kaip viskoelastinė medžiaga (Nielsen 1996).



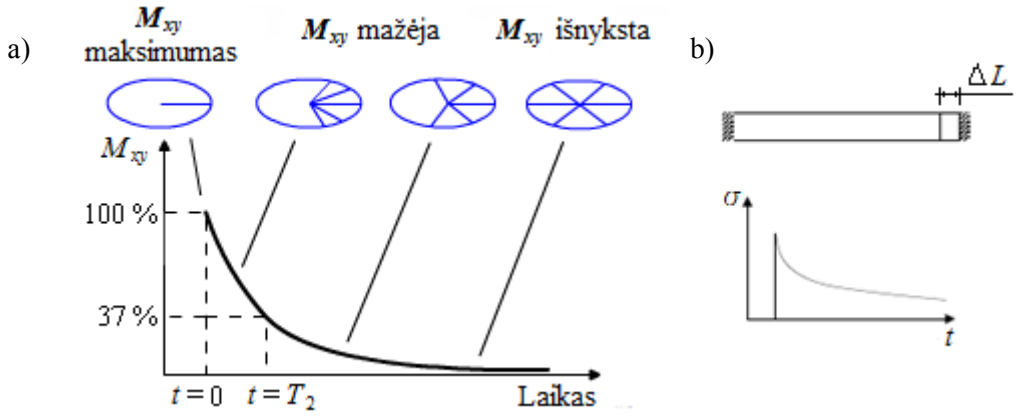
3.37 pav. Išilginė relaksacija: a) išilginė magnetizacija (M_z) po 90° pulso yra perverčiama iš didžiausios reikšmės į nulį ir į pusiausvyrą grįžta eksponentiškai su charakteringąja laiko konstanta T_1; b) pastovių įtempių veikiamos viskoelastinės medžiagos valkšnumas (pagal Norman 2010)

Skersinė relaksacija

Skersinė relaksacija yra sukinių fazių koherencijos praradimas. Kadangi fazių praradimas sukiniuose nesukelia populiacijų pokyčio, skersinė relaksacija nekeičia sistemos energijos ir yra tik entropinis procesas. Skersinė relaksacija gali būti charakterizuojama kaip eksponentinis nykimas su charakteringąja nykimo konstanta R_2 (Levitt 2008), kuri vadinama skersinės relaksacijos greičiu. Atvirkščias dydis vadinamas skersinės relaksacijos laiku. Skersinę relaksaciją charakterizuoja (3.8) lygtis (Levitt 2008).

$$M_{xy}(t) = M_{xy}(t_0) \cdot e^{-t/T_2}, \tag{3.8}$$

čia $M_{xy}(t_0)$ – išilginė magnetizacija iš karto po sužadinimo pulso $\boldsymbol{B_1}$; T_2 – laikas, per kurį išnyksta 37 % pusiausvyros magnetizacijos (3.38 a pav.).



3.38 pav. Skersinė relaksacija: a) skersinė magnetizacija ($\boldsymbol{M_{xy}}$) po 90° pulso į pusiausvyrą grįžta eksponentiškai su charakteringąja laiko konstanta T_2; b) patovios deformacijos veikiamos viskoelastinės medžiagos relaksacija (pagal Norman 2010)

F. Blocho (3.9) lygtys apibūdina magnetizacijos elgseną laiko atžvilgiu, veikiant tik statiniam magnetiniam laukui $\boldsymbol{B_0}$ (Levitt 2008).

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t} M_x(t) = \gamma \cdot M_y \cdot B_0 - \dfrac{M_x}{T_2}; \\ \dfrac{\partial}{\partial t} M_y(t) = -\gamma \cdot M_x \cdot B_0 - \dfrac{M_y}{T_2}; \\ \dfrac{\partial}{\partial t} M_z(t) = -\dfrac{M_z - M_0}{T_1}. \end{cases} \tag{3.9}$$

(3.9) lygčių sprendinys išreiškiamas (3.10) lygtimis.

$$\begin{cases} M_x(t) = \left[M_x(t_0) \cdot \cos(\omega \cdot t) - M_y(t_0) \cdot \sin(\omega \cdot t)\right] \cdot e^{-t/T_2}; \\ M_y(t) = \left[M_x(t_0) \cdot \sin(\omega \cdot t) + M_y(t_0) \cdot \cos(\omega \cdot t)\right] \cdot e^{-t/T_2}; \\ M_z(t) = M_0 + \left[M_z(t_0) - M_0\right] \cdot e^{-t/T_1}. \end{cases} \tag{3.10}$$

Veikiant $\boldsymbol{B_1}$ laukui, (3.9) lygtys įgauna (3.11) pavidalą (Tal 2011).

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} M_x(t) = \gamma \cdot \left(M_y \cdot B_0 + M_z \cdot B_1 \cdot \sin(\omega_0 \cdot t)\right) - \frac{M_x}{T_2}; \\ \frac{\partial}{\partial t} M_y(t) = -\gamma \cdot \left(M_x \cdot B_0 + M_z \cdot B_1 \cdot \cos(\omega_0 \cdot t)\right) - \frac{M_y}{T_2}; \\ \frac{\partial}{\partial t} M_z(t) = -\gamma \cdot \left(M_x \cdot B_1 \cdot \sin(\omega_0 \cdot t) + M_y \cdot B_1 \cdot \cos(\omega_0 \cdot t)\right) - \frac{M_z - M_0}{T_1}; \end{cases} \quad (3.11)$$

čia M_x, M_y ir M_z – magnetizacijos atitinkamomis kryptimis; ω_0 – $\boldsymbol{B_1}$ lauko rezonansinis kampinis dažnis; γ – gravitomagnetinis santykis.

Sprendžiant F. Blocho (3.11) lygtis, jos yra transformuojamos į koordinačių sistemą, kuri sukasi apie z ašį dažniu ω_0. Transformacija atliekama į (3.11) lygtis įvedant (3.12) pažymėjimus.

$$\begin{cases} M'_x = M_x \cdot \cos(\omega_0 \cdot t) - M_y \cdot \sin(\omega_0 \cdot t); \\ M'_y = M_x \cdot \sin(\omega_0 \cdot t) + M_y \cdot \cos(\omega_0 \cdot t). \end{cases} \quad (3.12)$$

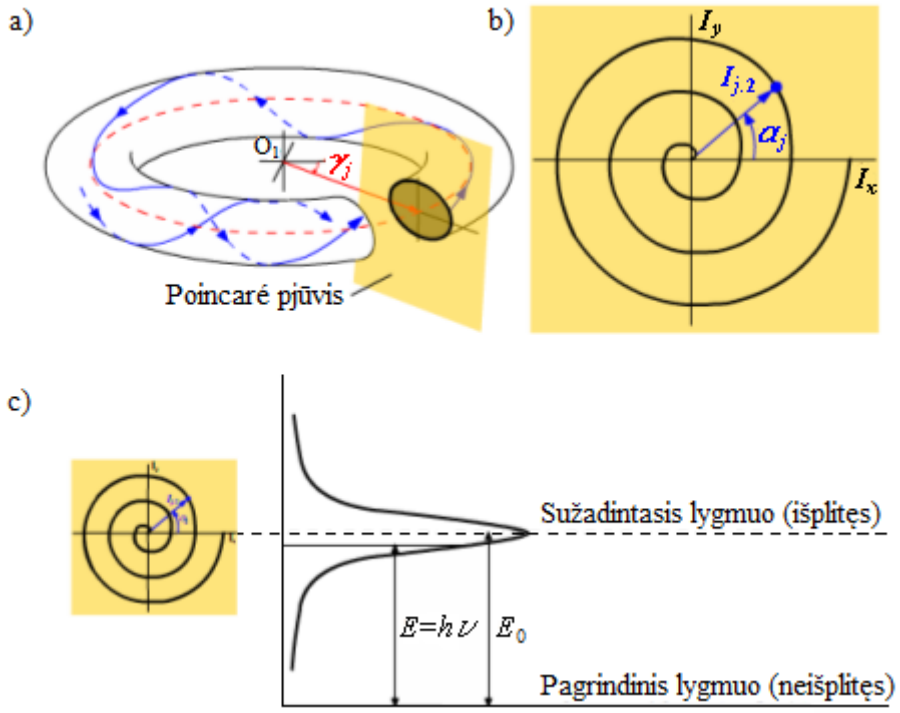
Besisukančioje koordinačių sistemoje (3.11) lygtys išreiškiamos (3.13) pavidalu.

$$\begin{cases} \frac{\partial M'_x}{\partial t} = (\omega_0 - \omega) \cdot M'_y - \frac{M'_x}{T_2}; \\ \frac{\partial M'_y}{\partial t} = -(\omega_0 - \omega) \cdot M'_x + \gamma \cdot B_1 \cdot M_z - \frac{M'_y}{T_2}; \\ \frac{\partial M'_z}{\partial t} = -\gamma \cdot B_1 \cdot M'_y - \frac{M_z - M_0}{T_1}. \end{cases} \quad (3.13)$$

Hamiltono mechanikos požiūriu, magnetizacijos dinamikos (3.9) lygtys yra sudėtingos pasireiškus pulsui $\boldsymbol{B_1}$, susijusiam su rezonansinio poveikio gravitacine banga, kadangi Hamiltonianas šiuo atveju yra priklausomas nuo laiko (neintegruojamas). Siekiant išspręsti (3.9) lygtis, problemą reikia nagrinėti apie z ašį rezonansiniu dažniu besisukančioje koordinačių sistemoje, kurioje Hamiltonianas atrodys nepriklausomas nuo laiko. Rezonansas įvyksta esant priverstiniam kvantiniam šuoliui, sukeltam gravitacinės bangos. Jeigu orbitinis kampinis judesio kiekis (3.22 a pav.) lygus nuliui, tada suminis kampinis judesio kiekis lygus sukinio kampiniam judesio kiekiui ir paramagnetinis rezonansas vadinamas sukinio rezonansu (Poškus 2009). Nors sukinio rezonanso sąlyga (3.32 pav.) tiksliai apibrėžia rezonansinę magnetinę indukciją $\boldsymbol{B_1}$, tačiau

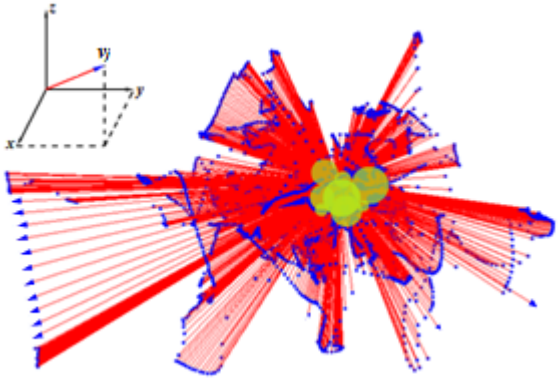
rezonanso požymiai yra pastebimi ir nežymiai nukrypus nuo rezonanso sąlygos, tai yra kryptingai keičiant $\boldsymbol{B_0}$, signalas padidėja ne akimirksniu, o laipsniškai (Poškus 2009). Perėjus rezonanso sąlygą, signalas taip pat laipsniškai sumažėja iki nulio. Taip yra todėl, kad sužadintieji energijos lygmenys nėra absoliučiai tiksliai apibrėžti. Šis energijos neapibrėžtumas yra susijęs su baigtine vidutine lygmens gyvavimo trukme. Apibrėžtos kvantinės būsenos sistemos energijos skirstinys, kurį sąlygoja energijos lygmens baigtinė gyvavimo trukmė, yra Lorenco skirstinys (Poškus 2009; Levitt 2008). Kadangi sistemos energijos lygmenų vertės nėra tiksliai apibrėžtos, bozonų (fotonų arba gravitonų), kurie gali būti sugeriami arba spinduliuojami dėl kvantinių šuolių tarp dviejų lygmenų, energijos taip pat nėra tiksliai apibrėžtos ir jų energijos skirstinys yra Lorenco skirstinio pavidalo. Pagrindinis (mažiausios energijos) lygmuo E_1 nėra išplitęs. Kai vienas iš dviejų lygmenų, tarp kurių vyksta kvantiniai šuoliai, yra pagrindinis ($E_1 = 0$), o kitas yra sužadintasis ($E_2 = E_0$), tada tų šuolių metu sugeriamų pastovaus dažnio ν bozonų skaičiaus per laiko vienetą priklausomybė nuo lygmenų skirtumo $E_2 - E_1 = E_0$ yra tokio paties pločio ir formos, kaip sužadintojo lygmens energijos skirstinys. Vadinasi, jeigu matavimų metu galima parinkti kvantinius šuolius sužadinančių bozonų energijos ($h\nu = E$) nuokrypį nuo energijos lygmenų skirtumo E_0, tada, esant pastovaus dažnio bozonų srautui ir matuojant sugeriamų per laiko vienetą ν dažnio bozonų skaičiaus priklausomybę nuo to nuokrypio, tai yra $E - E_0$, gaunama Lorenco kreivės pavidalo funkcija (3.39 c pav.), kurios plotis nusako sužadintojo lygmens išplitimą (Poškus 2009). Kadangi gravitacinė banga negali sklisti didesniu nei šviesos greičiu, tad sužadintojo energijos lygmens išplitimas negali viršyti 45° kampo Minkowskio erdvėlaikyje.

Sužadintojo lygmens išplitimą charakterizuoja KAM teorema, leidžianti Hamiltono mechanikos principus pritaikyti suvaržytiems dalelių mišiniams. Rezonansas yra ribinis fazinių trajektorijų atvejis, kai judėjimas vyksta separatrisėmis. Disipatyvios dinaminės sistemos energijos trajektorijos konverguoja separatrisėmis, sudarydamos spiralinį kontūrą, išreiškiantį energijos toro (atraktoriaus) skerspjūvį. Kadangi, pagal KAM teoremą, nedidelio trikdžio paveiktas energijos toras stipriai nesideformuoja, tai yra separatrisės neišnyksta, tad slerspjūvį patogu pateikti Poincaré pjūviu, sumažinančiu fazinę erdvę į dvimatę, tačiau energijos torą būtina išreikšti elgsenos kintamaisiais (3.39 a, b pav.).



3.39 pav. Fermi-Ulamo modelio dalelės energijos toro skerspjūvio vizualizacija: a) Poincaré pjūvis; b) elgsenos kintamaisiais $\boldsymbol{I}_{j.2}$ ir α_j išreikštas energijos toro skerspjūvis; c) sužadintojo energijos lygmens išplitimą reprezentuojanti schema

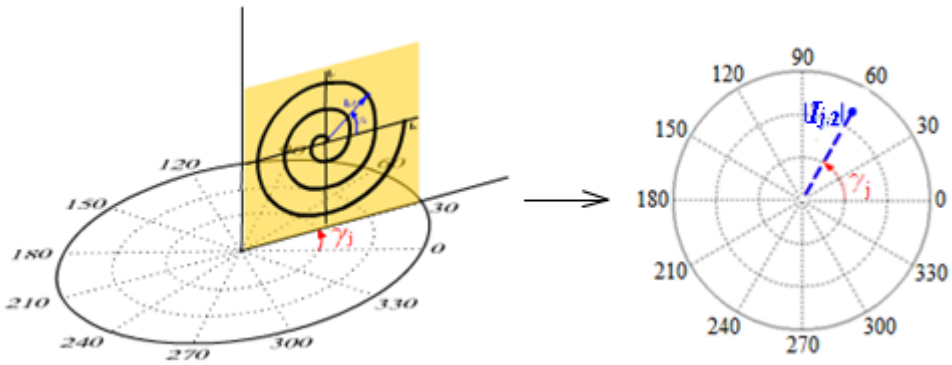
Fermi-Ulamo modelis yra kvazistatinės pusiausvyros būvį imituojanti sistema. Kadangi šioje būsenoje m_2 masės dalelės centro koordinatės kinta tik mikrolygiu, tad galima teigti, jog dalelės mikroskopinę būseną visiškai nusako trys judesio kiekiai: $p_{x.j}$, $p_{y.j}$ ir $p_{z.j}$, išreiškiami atitinkamomis greičio vektorių komponentėmis: $v_{x.j}$, $v_{y.j}$ ir $v_{z.j}$. Erdvėje atidėjus visus dalelės greičio vektorius kvazistatinio pusiausvyros būvio metu, gaunamas vektorių laukas (3.40 pav.), tam tikru būdu atspindintį dalelės fazinę erdvę.



3.40 pav. Fermi-Ulamo modelio dalelės (žalia) greičio vektoriaus kryptys erdvėje kvazistatiniame pusiausvyros būvyje

3.40 pav. pavaizduoti dalelės greičio vektoriai teikia mažai naudos, kadangi visi jie yra euklidinėje $\mathbb{R}^3$ erdvėje. Šiuos greičio vektorius išreiškus fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais, esančiais polinėje koordinačių sistemoje (3.41 pav.), būtų galima nustatyti dalelės fazinės trajektorijos Poincaré pjūvių gaubtinę, rodančią globaliąją bifurkaciją ir sužadintojo energijos lygmens išplitimą.

Geometrinės charakteristikos, naudotinos dalelės greičio vektoriams atvaizduoti polinėje koordinačių sistemoje (3.41 pav.), yra dalelės *j*-ojo greičio vektoriaus kampas su horizontu α_j (poloidinis kampas) ir jo taškinio perimetro normalinės plokštumos posūkio horizonto atžvilgiu kampas γ_j (3.22 pav.). Fazinė trajektorija elgsenos kintamaisiais išreiškima atlikus kanoninę transformaciją, laiko erdvę pakeičiant dažnių ω_1 ir ω_2 (2.16 pav.) erdve, kuri, dėl ryšio su energijos lygmens gyvavimo trukme, apibūdinama Lorenco pavidalo grafiku. Šiam tikslui būtina prisiminti, jog po gravitacinio pulso dėl relaksacijos grįžtama į žemos energijos būseną emituojant elektromagnetinės skalės bangą, kurios signalas fiksuojamas kaip funkcija laiko atžvilgiu, tačiau, pasinaudojant Furjė (orig. *Fourier*) transformacija (žr. (3.14) formulė), galima gauti dažnių funkciją (Levitt 2008). Furjė transformacija yra naudojama diferencialinėms lygtims spręsti, tolydžią funkciją pakeičiant trigonometrine eilute. Fizine prasme Furjė transformacija išskiria vaizdų (bangų) kontrastą ir parodo, kaip amplitudė keičiasi dažnių atžvilgiu (Fourier... 2012).



3.41 pav. Elgsenos kintamieji polinėje koordinačių sistemoje

$$v(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} v(t) \cdot e^{i\alpha_j} dt\,, \tag{3.14}$$

čia $v(t)$ – normalizuota linijinio greičio vektoriaus orientacijos funkcija, priklausanti nuo laiko; $v(\omega)$ – normalizuota linijinio greičio vektoriaus orientacijos funkcija, priklausanti nuo dažnio; $\alpha_j = \omega_j \cdot t$ – fazė; ω – kampinis dažnis; t – laikas; $e^{i\alpha_j}$ – Oilerio formulė (žr. (3.15) formulę); $i = \sqrt{-1}$.

$$e^{i\alpha_j} = \cos(\alpha_j) + i\sin(\alpha_j). \tag{3.15}$$

Oilerio (3.15) formulė transformuoja Dekarto koordinačių sistemą į polinę. (3.14) formulėje $v(\omega)$ funkcija išreiškia dažnius, prie kurių signalas yra nenulinis ir $v(t)$ funkcija išreiškia laikus, kada signalas yra nenulinis. Atliekant transformaciją, $v(t)$ funkcija kiekvienu laiko momentu yra dauginama iš (3.15) lygties, todėl dažnių funkcija Furjė transformacijoje yra kompleksinė funkcija.

Pagrindinis rodiklis, apibūdinantis fazinės erdvės trajektoriją, yra vijų skaičius, išreiškiamas dažnių ω_1 ir ω_2 (2.16 pav.) santykiu (Ott 2002). Kompleksinėje analizėje uždaros kreivės vijų skaičius gali būti išreikštas kompleksine koordinate $z = x + iy$ (Complex... 2012), o polinėje koordinačių sistemoje jis gali būti išreikštas fazoriaus (3.16) forma.

$$z = |z| \cdot (\cos(\alpha_j) + i\sin(\alpha_j)) = |z| \cdot e^{i\alpha_j}, \tag{3.16}$$

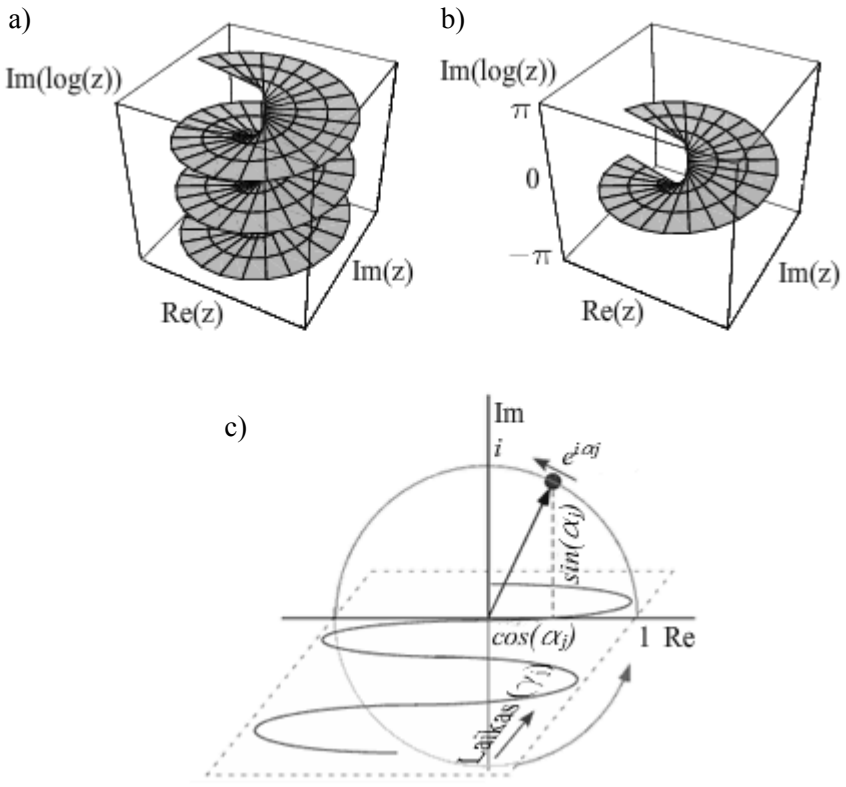
čia $|z|$ – kompleksinis modulis. Pažymima $r = |z|$.

Fazės α_j ribos yra $(-\pi;\pi]$. Išsigimusiu atveju, tai yra kai $x = 0$, fazės α_j ribos aprašomos (3.17) sąlygomis (Complex... 2012).

$$\alpha_j = \begin{cases} -\dfrac{\pi}{2}, & kai\ y < 0, \\ -, & kai\ y = 0, \\ \dfrac{\pi}{2}, & kai\ y > 0. \end{cases} \tag{3.17}$$

Taigi turima kompleksinė eksponentinė (3.16) funkcija, tačiau analitinei tąsai atlikti reikalinga kompleksinė logaritminė funkcija (Principal... 2012). Kadangi nenulinis kompleksinis skaičius gali turėti daug logaritmų (3.42 a pav.), tad yra reikalinga logaritmo pagrindinė reikšmė (3.42 b pav.). Kiekvienam nenuliniam kompleksiniam skaičiui z pagrindinė reikšmė $\log z$ yra logaritmas, kurio menamoji dalis patenka į intervalą $(-\pi;\pi]$. $\log(z)$ išraiška gaunama pasinaudojant z fazoriaus (3.16) forma. Reikalaujama, jog α_j būtų intervale $(-\pi;\pi]$, tuomet šis α_j yra vadinamas pagrindine argumento reikšme. $\log(z)$ yra kompleksinis skaičius $I_{j.2}$, tenkinantis sąlygą $e^{I_{j.2}} = z$. Jei z išreiškiama (3.16) sąlyga su $r > 0$ (kompleksinės plokštumos matmuo), tuomet $I_{j.2} = \ln(r) + i\alpha_j$ yra vienas z logaritmas. Sumuojant visus sveikuosius $2\pi i$ kartotinius,

gaunami visi kiti logaritmai, sudarantys Riemanno paviršių (Principal... 2012). Kompleksinė logaritminė funkcija išreiškiama (3.18) formule.



3.42 pav. Argando kompleksinių skaičių plokštuma: a) plokštumos šakos; b) viena plokštumos šaka; c) plokštumos formavimas (pagal: Principal... 2012; Phasor... 2012)

$$\log(z) = I_{j.2} = \ln(r) + i\alpha_j . \tag{3.18}$$

Kadangi kompleksiniai skaičiai yra skaičiai turintys du statmenus komponentus, tad i narys (3.18) lygtyje išreiškia pasukimo 90° kampu efektą. Dalelės greičio vektoriai išlieka statmeni taškinio perimetro normalinei plokštumai, charakterizuojamai kampu γ_j, todėl, jei suminis $\ln(r)$ pokytis yra nulinis, tai yra $r = 1$ (vienetinė V. Focko sfera), dėl judėjimo separatrisėmis (3.42 c pav.) $\log(z)$ išreiškiamas (3.19) formule.

$$\log(z) = I_{j.2} = i\alpha_j = \alpha_j \angle \gamma_j . \tag{3.19}$$

Diskrečiųjų elementų metodu gaunami eksperimentiniai duomenys, apibūdinantys normalizuotą greičio funkciją $v(t)$, nėra tolydūs, todėl taikoma diskrečioji Furjė transformacija, paremta Nyquisto-Shannono atrankos teorema (Nyquist-Shannon... 2012): jei $v(t)$ funkcija neturi

dažnių, didesnių nei $\boldsymbol{\omega_0}$, ji yra visiškai nusakoma ordinates aprašant taškų seka, tarp kurių atstumas yra $1/(2\cdot\boldsymbol{\omega_0})$. Gravitacinės bangos gali būti atvaizduotos apskritimu poliarizuotu magnetiniu lauku $\boldsymbol{B_1}$, kartu su koordinačių sistema besisukančiu tuo pačiu kampiniu dažniu ir reprezentuojamu γ_j duomenimis, kadangi kampo kitimo ribos yra $[-\pi/2;\pi/2]$. $\boldsymbol{B_1}$ lauko sukimasis pasiekiamas sukuriant tiesiškai svyruojantį $2\cdot\boldsymbol{B_1}$ dydžio magnetinį lauką, reprezentuojamą α_j duomenimis, kadangi kampo kitimo ribos yra $(-\pi;\pi]$.

Magnetizacija $\boldsymbol{M}$ yra veikiama statinio magnetinio lauko $\boldsymbol{B_0}$ išilgai z ašies (3.36 pav.) ir pulsacinio magnetinio lauko $\boldsymbol{B_1}$ išilgai x ašies. Kadangi koordinačių sistema sukasi, narys $\boldsymbol{B_v}$, vadinamas virtualiuoju lauku, turi būti pridedamas prie $\boldsymbol{B_0}$ ir $\boldsymbol{B_1}$, gaunant (3.20) lygtį. $\boldsymbol{B_v}$ turi priešingą kryptį nei $\boldsymbol{B_0}$ ir jo dydis yra išreiškiamas (3.21) lygtimi (Tal 2011).

$$\boldsymbol{B_{ef}} = \boldsymbol{B_0} + \boldsymbol{B_v} + \boldsymbol{B_1}, \tag{3.20}$$

čia $\boldsymbol{B_v}$ yra virtualusis magnetinis laukas:

$$\boldsymbol{B_v} = \frac{\boldsymbol{\omega}}{\gamma}, \tag{3.21}$$

čia $\boldsymbol{\omega}$ – besisukančios koordinačių plokštumos kampinio dažnio vektorius.

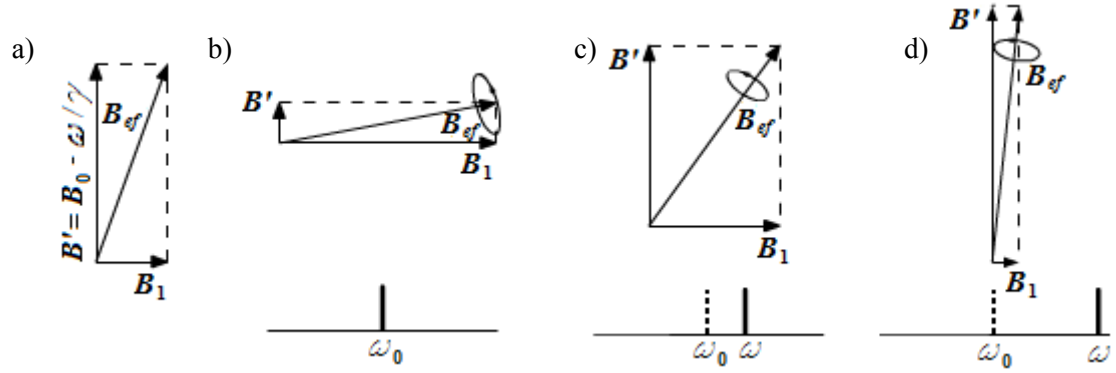
Rezonanso atveju kampinis dažnis išreiškiamas (3.22) formule (Tal 2011).

$$\boldsymbol{\omega_0} = \gamma\cdot\boldsymbol{B_0}. \tag{3.22}$$

Iš (3.22) lygties išreiškus $\boldsymbol{B_0}$ ir įstačius į (3.20) lygtį, gaunama (3.23) išraiška (Tal 2011).

$$\boldsymbol{B_{ef}} = \frac{\boldsymbol{\omega_0} - \boldsymbol{\omega}}{\gamma} + \boldsymbol{B_1}. \tag{3.23}$$

3.43 pav. pateikiama (3.23) lygties grafinė reprezentacija, vaizduojanti efektyviojo magnetinio lauko kitimą besisukančioje koordinačių sistemoje, priklausomai nuo pulso $\boldsymbol{B_1}$ lauko intensyvumo.



3.43 pav. Efektyvusis magnetinis laukas besisukančioje koordinačių sistemoje: a) $\boldsymbol{B_0}$ ir $\boldsymbol{B_1}$ vektorinė suma; b) efektyviojo lauko kryptis rezonanso metu; c) efektyviojo lauko kryptis arti rezonanso; d) efektyviojo lauko kryptis toli nuo rezonanso (pagal: Lecture notes... 2004; Tal 2011)

Kada $\boldsymbol{\omega = \omega_0}$, iš (3.23) lygties gaunama, jog $\boldsymbol{B_{ef} = B_1}$, tai yra magnetizacija M_z rezonanso atveju yra veikiama $\boldsymbol{B_1}$ lauko (3.43 b pav.). Jei $\boldsymbol{\omega \neq \omega_0}$, magnetizacija M_z yra veikiama $\boldsymbol{B_{ef}}$ lauko (3.43 c pav.). Kadangi šiuo atveju egzistuoja skersinė magnetizacijos komponentė M_{xy}, tad 3.41 pav. poliniame grafike gaunama koherentinė trajektorija. Kada $\boldsymbol{\omega_0 - \omega > B_1}$, M_z magnetizacija yra pusiausvyros padėtyje, o skersinės komponentės nėra (3.43 d pav.).

4. DALELIŲ MIŠINIŲ SKAITINIS MODELIAVIMAS IR MAKRO- BEI MIKROBŪSENŲ ANALIZĖ

4.1. Modeliavimo rezultatų kontrolė

Dalelių mišinio laisvojo kritimo dinaminis modeliavimas pradedamas tam tikru dalelių išdėstymu trimatėje skaičiuojamojoje erdvėje (4.1 pav.), suteikiant atsitiktinai parinktą pradinio greičio reikšmę. Tiriamas mišinys – tai sferinių dalelių rinkinys, su pasirinktomis fizikinėmis-mechaninėmis charakteristikomis. Šios charakteristikos yra artimos betono užpildų medžiagai ir pateiktos 4.1 lentelėje.

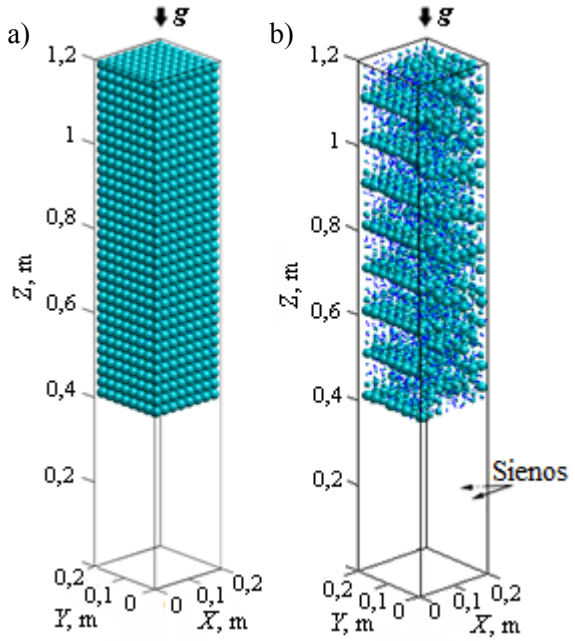
4.1 lentelė. Dalelių modeliavimo charakteristikos

Parametras	Viendispersis mišinys be trinties	Daugiadispersis mišinys be trinties	Daugiadispersis mišinys su trintimi
Dalelių skaičius	2048		
Dalelių skersmuo*	0,025 m	0,003–0,025 m	0,003–0,025 m
Tankis	2500 kg/m^3		
Tamprumo modulis	10 GPa		
Puasono koeficientas	0,2		
Trinties koeficientas	–	–	0,6
Riedėjimo trinties koeficientas	–	–	0,005
Energijos disipacijos koeficientas normalinei komponentei**	15400 1/s	85000 1/s	85000 1/s
Energijos disipacijos koeficientas tangentinei komponentei	1540 1/s	8500 1/s	8500 1/s
Laiko žingsnis	$2{,}5\cdot10^{-7}$ s	$1{,}3\cdot10^{-8}$ s	$1{,}3\cdot10^{-8}$ s
Vidutinė pradinio greičio reikšmė	1,0 m/s		
Kontakto modelis	Herco		

* Daugiadispersio dalelių mišinio granuliometrinė sudėtis parinkta pagal Deltuvą (1998) ir pateikta 4.2 lentelėje.
** Disipacijos koeficientas parinktas pagal literatūroje rastą andezito, naudojamo kaip betono užpildas, restitucijos koeficientą, atskirai sprendžiant dviejų dalelių kontakto uždavinį pagal Herco modelį. Restitucijos koeficientas andezitui lygus 0,4 (Iverson *et al*.).

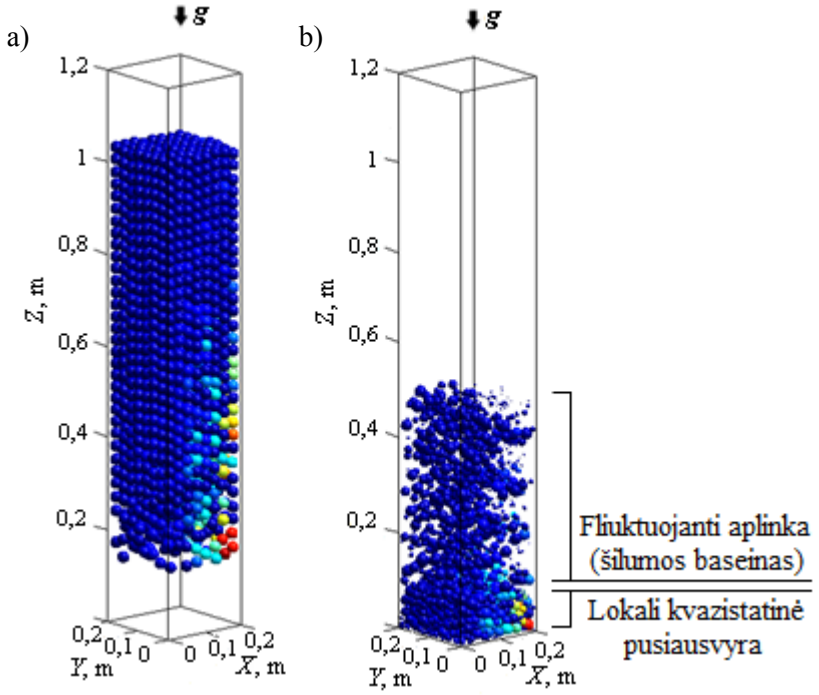
4.2 lentelė. Daugiadispersio mišinio granuliometrinė sudėtis

Dalelių skersmuo	Dalelių skaičius
> 16 mm	655
> 8 mm	573
> 4 mm	492
> 2 mm	328



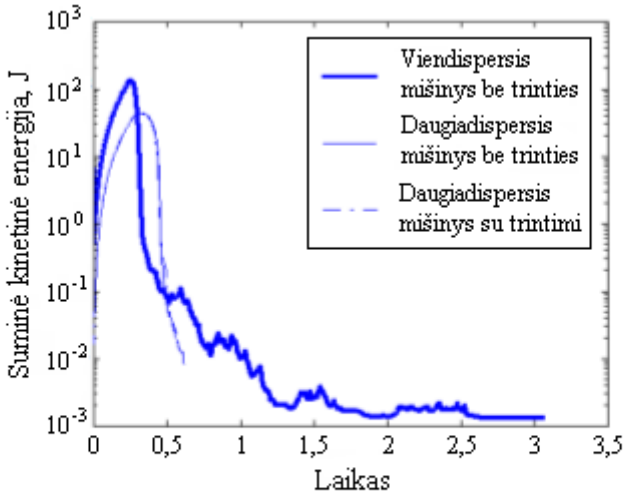
4.1 pav. Modeliavimo pradinės sąlygos: a) viendispersis dalelių mišinys; b) daugiadispersis dalelių mišinys

Veikiamos sunkio jėgos, dalelės pradeda kristi ir, dėl suteikto pradinio greičio, prasideda mišinio maišymasis. Pirmosios skaičiuojamosios erdvės dugną pasiekusios dalelės viršutinių dalelių yra suvaržomos tam tikroje dugno zonoje ir patiria lokalią kvazistatinę pusiausvyros būseną (4.2 pav.), o virš esančios dalelės atlieka šilumos baseino funkciją, sudarydamos fliuktuojančią aplinką.



4.2 pav. Laisvasis dalelių kritimas: a) viendispersis dalelių mišinys; b) lokalios kvazistatinės pusiausvyros būsenos susidarymas daugiadispersiame dalelių mišinyje

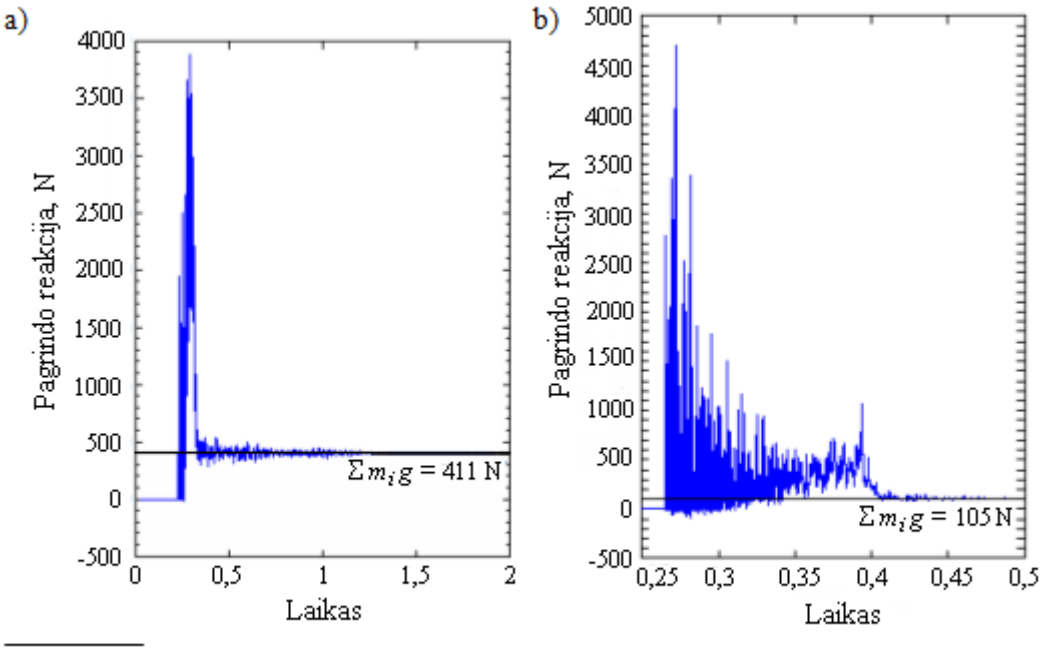
Kvazistatinė pusiausvyra yra sąlyginė pusiausvyra, kadangi ji reiškia makroskopinės būsenos stabilizavimąsi, kai dalelė yra suvaržoma apie ją susiformavusios tam tikros mišinio struktūros, tačiau mikrolygyje judėjimas vis dar yra įmanomas ir pasireiškia mikrobūsenų kitimu. Mikrobūsenų tyrimas diskrečiųjų elementų metodu yra labai sudėtingas ir daug laiko reikalaujantis procesas, kadangi judėjimo lygčių integravimo rezultatų stabilumui užtikrinti būtinas labai mažas laiko žingsnis bei nuolatinis sistemos dinaminės būsenos stebėjimas ir kontrolė. Kontroliuojamaisiais parametrais pasirinkti: sistemos kinetinė energija bei jėgų balansas tarp mišinio svorio jėgos ir pagrindo reakcijos. Dalelių mišinio kinetinės energijos sumažėjimas iki sąlyginio nulio reikšmės (4.3 pav.) (sąlyginio nulio reikšmė šiuo atveju imama dalelių mišinio kinetinei energijai nuslopus iki 10^{-3} J), leidžia nutraukti skaičiavimą laikant, kad įsivyravo globali kvazistatinė mišinio būsena.



PASTABA. Daugiadispersių dalelių mišinių grafikai dengia vienas kitą.

4.3 pav. Dalelių mišinių suminės kinetinės energijos kitimas laiko atžvilgiu

Jėgų pusiausvyra tarp mišinio svorio jėgos ir pagrindo reakcijos – tai kitas parametras, kuris rodo dinaminės analizės korektiškumą. 4.4 a pav. parodyta viendispersio mišinio dalelių reakcijos į dugną ir mišinio svorio jėgos balanso kaita laiko atžvilgiu. Matoma, jog pradiniame etape dėl dinaminės dalelių elgsenos balanso nėra. Skaičiavimo pabaigoje dinaminis poveikis gęsta ir įsivyrauja pusiausvyra. Lokalios atskirų dalelių jėgos, greičiai ir kiti parametrai vidutiniškai suvienodėja lemdami visos medžiagos kvazistatinę makrobūseną.



PASTABA. Pateiktų grafikų dalelių mišiniuose trintis nevertinama.

4.4 pav. Skaičiuojamosios erdvės pagrindo reakcijos ir suminio dalelių svorio balansas: a) viendispersis dalelių mišinys; b) daugiadispersis dalelių mišinys

4.4 b pav. parodyta jėgų balanso elgsena daugiadispersiuose dalelių mišiniuose. Čia pastebimas didesnis pagrindo reakcijos svyravimas prieš globalųjį kvazistatinį būvį.

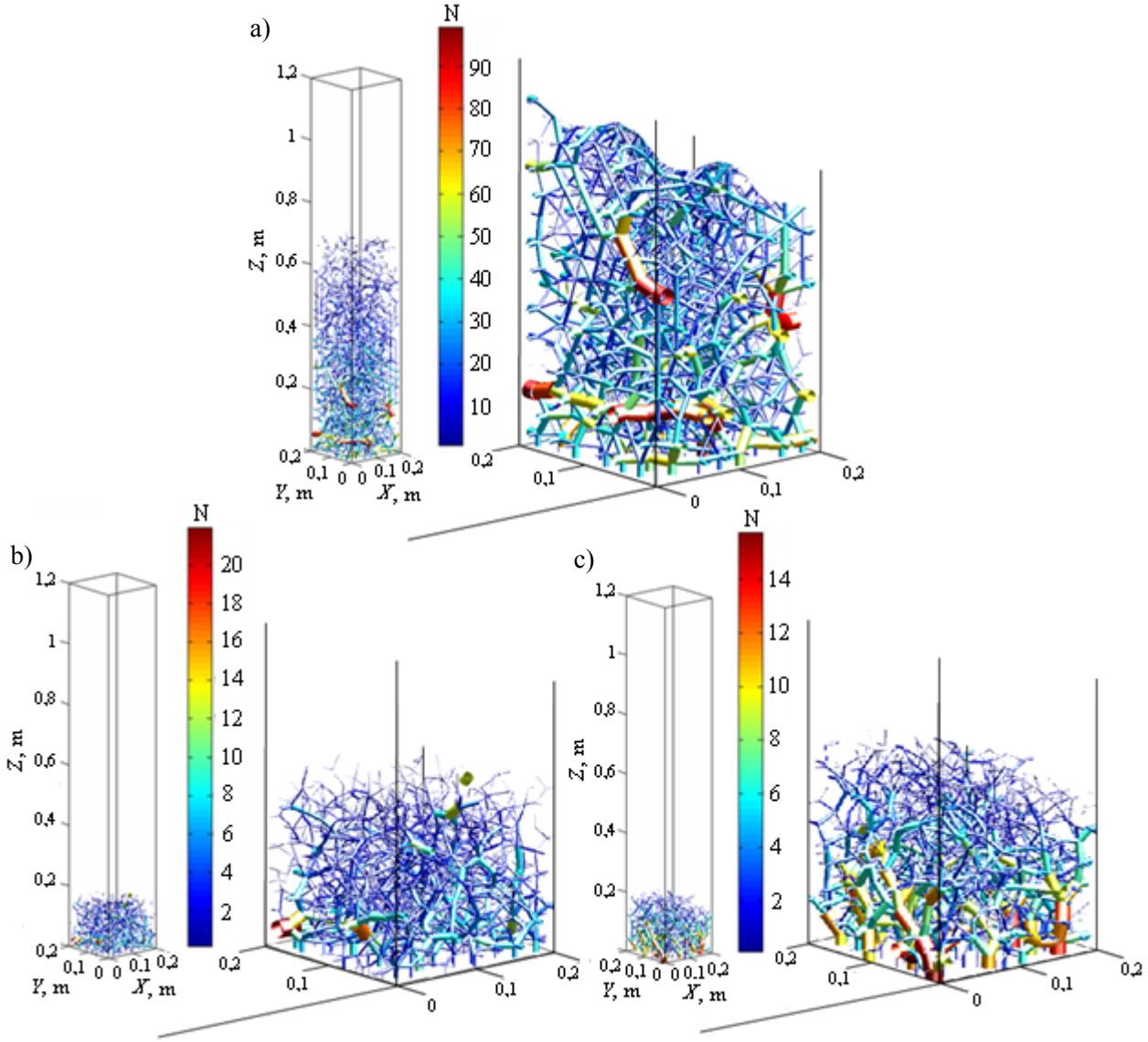
Kontroliuojamųjų parametrų analizė parodė, jog mišinio dalelių elgsenos modeliavimas yra išspręstas korektiškai, esant pasirinktam laiko žingsniui (4.1 lentelė). Pažymėtina, kad andezitui būdinga didelė tamprumo modulio reikšmė lemia labai mažą integravimo žingsnį, todėl skaičiavimas išnaudojo daug kompiuterinio laiko.

4.2. Makrobūsenų analizė

Dažniausiai literatūroje minimi dalelių mišinio struktūros charakterizavimo makrolygmeniu rodikliai yra: dalelių kontaktinės jėgos, struktūros užimama tūrio dalis (tankumas) ir koordinacijos skaičius. Pastarasis parametras rodo kontaktuojančių dalelių skaičių, vidutiniškai tenkantį vienai dalelei mišinyje.

4.5 pav. pateiktas nagrinėtų mišinių kontaktinių jėgų pasiskirstymas mišiniuose globalios kvazistatinės pusiausvyros būvyje. Spalvos rodo kontaktinių jėgų atstojamosios vektoriaus modulio reikšmę. Iš 4.5 pav. matoma, jog dalelių jėgų pasiskirstymas yra skirtingas, priklausantis nuo mišinio kompaktiškumo ir dalelių laisvės laipsnio mišinyje. Kontaktinių jėgų pasiskirstymas yra chaotiškas, tačiau akivaizdžiai įžvelgiama tendencija, kad kontaktinės jėgos yra didesnės arčiau dugno esančiose dalelėse. Tai lemia mišinio svorio jėga, kuri pasiskirsto tarp atskirų dalelių. 4.5

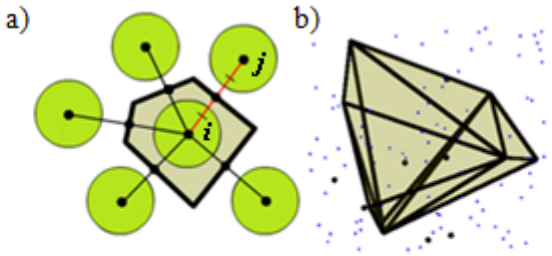
pav. matomas tam tikras kiekis neaktyvių dalelių, kurios, būdamos sistemos dalimi, perima tik savojo svorio sukeltą apkrovą ir turi daugiau laisvės judėti erdvėje nei kitos, todėl vien tik kontaktinės jėgos kaip makrorodiklis struktūrai charakterizuoti nėra išsamus.



4.5 pav. Dalelių kontaktinių jėgų grandinės: a) viendispersis dalelių mišinys be trinties; b) daugiadispersis dalelių mišinys be trinties; c) daugiadispersis dalelių mišinys su trintimi

Likusiems dviems struktūros charakterizavimo makrorodikliams įvertinti, pasinaudota dalelių padėties koordinačių kitimo viso modeliavimo metu rezultatais. Pagal šiuos duomenis, kiekviename laiko žingsnyje buvo skaičiuotas vidutinis koordinacijos skaičius mišinyje bei formuota kiekvienos dalelės Voronoi diagrama (Abellanas *et al*. 1995). Voronoi diagrama yra iškilasis briaunainis, sudarytas iš plokštumų, išvestų statmenai nagrinėjamos *i*-osios dalelės ir artimiausių jai dalelių svorio centrus jungiančios atkarpos centre (4.6 pav.). Daugiadispersiuose dalelių mišiniuose naudojant standartinę Voronoi diagramą gaunamos paklaidos dėl nevisiško dalelės patekimo į diagramos vidų, todėl atlikta Lechenaulto *et al*. (2006) modifikacija.

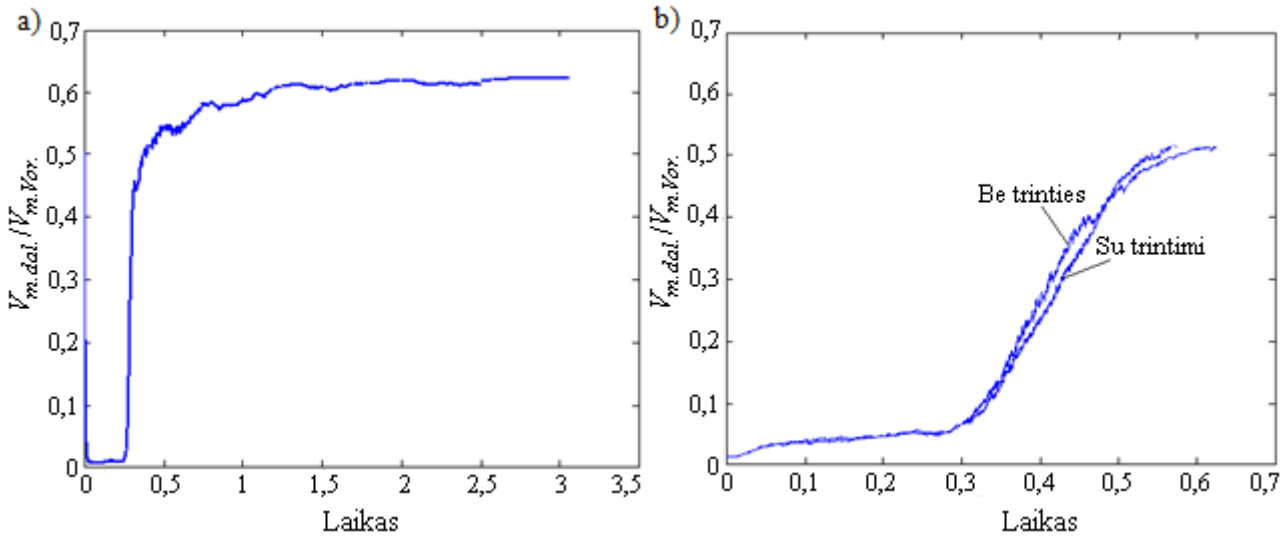
Modifikuotoji diagrama kuriama įtraukiant į jos viršūnių taškų gaubtinę papildomus gretimų dalelių kontakto taškus ir taip užtikrinant, kad diagramos plokštumos nekirstų dalelės.



PASTABA. Juodi taškai vaizduoja arčiausiai nagrinėjamos *i*-osios dalelės esančias kitas daleles, pagal kurias sudaroma Voronoi diagrama, o mėlyni taškai vaizduoja tolimesnes daleles.

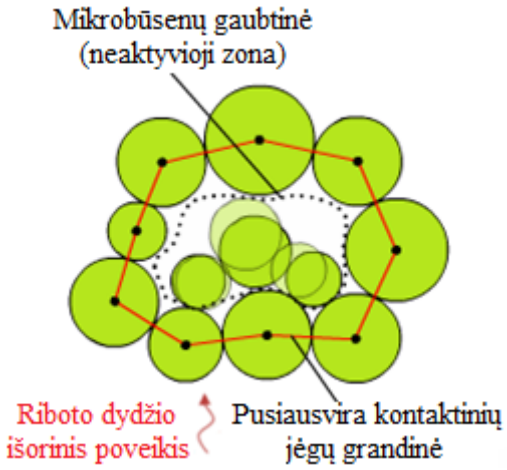
4.6 pav. Voronoi diagramos sudarymas *i*-ajai dalelei: a) diagramos dvimatė principinė schema; b) *i*-osios dalelės Voronoi diagrama mišinyje

Visų mišinio dalelių vidutinio tūrio ir jų Voronoi diagramų vidutinio tūrio santykis ($V_{m.dal.}/V_{m.Vor.}$), apskaičiuotas kiekvienu laiko momentu, leido nustatyti mišinio dalelių užimamą tūrio dalį (tankumą) skaičiuojamojoje erdvėje (4.7 pav.).



4.7 pav. Dalelių užimamos tūrio dalies (tankumo) kitimas laiko atžvilgiu: a) viendispersis dalelių mišinys; b) daugiadispersiai dalelių mišiniai

Suprantama, jog norint gauti tankų dalelių mišinį, nepakanka tik efektyvaus granuliometrinės sudėties parinkimo, kadangi didelę reikšmę turi tankinimo sąlygos. 4.7 pav. pastebima, jog dalelių mišinio užimama tūrio dalis (tankumas) lėčiau auga daugiadispersiuose mišiniuose. Tai susiję su daugiadispersių mišinių neaktyvių dalelių zonų (4.8 pav.) susiformavimu. Šie dariniai, nesant papildomo išorinio poveikio (pvz., mišinio vibravimas), sustabdo mišinio tankėjimą.

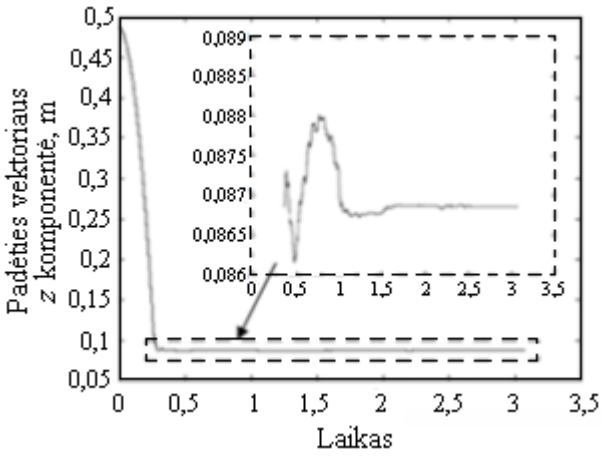


4.8 pav. Neaktyvioji zona kvazistatinio pusiausvyros būvio dalelių mišinyje

Analizuojant gautus tyrimo rezultatus, matyti, jog šie duomenys perteikia nepakankamą informaciją apie struktūros vidines ypatybes. Minėtieji rodikliai apibūdina tam tikrą sistemos makrobūseną, kurios egzistavimą gali atitikti keletas ar keliolika mikrobūsenų, todėl būtina papildoma mikrolygmens analizė. Mikrobūsenų tyrimas globaliosios kvazistatinės pusiausvyros būvio metu (mišinio kinetinei energijai sumažėjus iki sąlyginio nulio reikšmės) yra bereikšmis, kadangi kiekviena dalelė nusėda į tam tikrą savo būseną ir yra suvaržoma, todėl kur kas svarbesnis yra nepusiausviros sistemos nagrinėjimas, kai ji yra sujungta su šilumos baseinu, tai yra kvazistatinis būvis yra lokalus (4.2 b pav.). Nepusiausvirą sistemą galima sukurti dviem būdais: laisvojo dalelių kritimo metu ir nevertinant trinties arba veikiant bandinį tinkamai parinktu aukštu dažniu su maža amplitude, kad išvengti globalaus sistemos suardymo (išretėjimo). Dėl dažnio parinkimo sudėtingumo, pasirinktas pirmasis – laisvojo dalelių kritimo būdas.

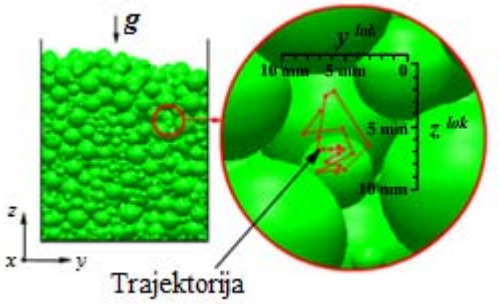
4.3. Mikrobūsenų analizė

Esant tam tikroms pastovioms kraštinėms sąlygoms, bet kitoms pradinėmis dalelių konfigūracijoms, galutinė pusiausviro mišinio struktūra gali būti kitokia. Tai galima paaiškinti antruoju termodinamikos dėsniu, kuris teigia, kad izoliuotoje pusiausviroje sistemoje entropija yra didžiausia (Edwards ir Oakeshott 1989). Šiuo atveju entropija gali būti informacijos apie sistemą stokos matas. Jei tik žinoma, kad taškas, reprezentuojantis sistemą fazinėje erdvėje, yra viduje tam tikro tūrio, kuris gali būti vadinamas reprezentatyviuoju tūriniu elementu, bet nežinoma tiksli jo padėtis šiame tūryje, tuomet taškas gali būti bet kuris vienas iš daugybės taškų, kurie yra nagrinėjamame tūryje.



4.9 pav. Dalelių mišinio *i*-osios dalelės padėties vektoriaus z komponentės kitimas laiko atžvilgiu

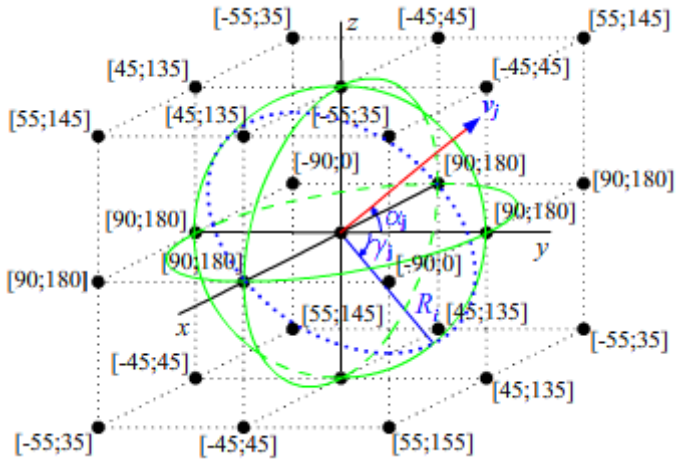
Kvazistatinė pusiausvyra yra sąlyginė pusiausvyra, kadangi ji reiškia tik dalelių makroskopinės būsenos stabilizavimąsi. Tai matyti iš dalelių mišinio tam tikros *i*-osios dalelės padėties vektoriaus z komponentės kitimo laiko atžvilgiu grafiko (4.9 pav.). Matoma, jog dalelių mišiniui pasiekus lokalios kvazistatinės pusiausvyros būvį, atskira dalelė yra suvaržoma susiformavusioje padidėjusių kontaktinių jėgų zonoje (4.10 a pav.) ir prasideda jos mikrobūsenų kitimas (4.10 b pav.).



4.10 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio struktūra kvazistatiniame pusiausvyros būvyje: a) neaktyvioji zona mišinyje; b) *i*-osios dalelės masės centro padėties kitimo laiko atžvilgiu trajektorija, pavaizduota lokalioje koordinačių sistemoje

Siekiant ištirti dalelės mikrobūsenas fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis, sukurtas kompiuterinis algoritmas (žr. A priedą), paremtas Hamiltono mechanikos, bendrosios reliatyvumo teorijos ir kvantinės gravitacijos teorijų principais. Šiame algoritme pasirenkama viena konkreti mišinio dalelė ir, pasinaudojant diskrečiųjų elementų metodu gautais rezultatais, erdvėje atidedamos visos jos linijinio greičio vektorių normalinės plokštumos (3.20 pav.), gaunant šių plokštumų gaubtinę, vaizduojančią dalelės trajektorijos kitimą mišinyje viso modeliavimo metu. Kompiuteriniu algoritmu gautų kampų α_j ir γ_j kitimo ribos parodytos

4.11 pav. Pažymėtina, jog dėl pasirinkto mikrobūsenų tyrimo būdo bei įvertinus, jog tyrimo rezultatams yra tik nedidelė įtaka (4.3 pav.), į trintį modeliavime neatsižvelgta.



PASTABA. Laužtiniuose skliaustuose pažymėti kampai yra [γ_j ; α_j].

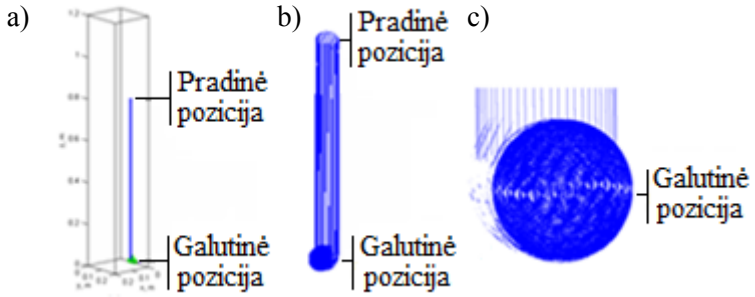
4.11 pav. Kampai α_j ir γ_j linijinio greičio vektoriaus $\boldsymbol{v}_j$ viršūnei esant konkrečiame taške

Krisdama *i*-oji dalelė, kol jos trajektorija yra nedaug trikdoma, turi žemyn nukreiptą greitį, todėl greičio vektorių taškinio perimetro normalinės plokštumos suformuoja cilindrą (4.12 pav.). Cilindro spindulys apytiksliai lygus dalelės spinduliui.



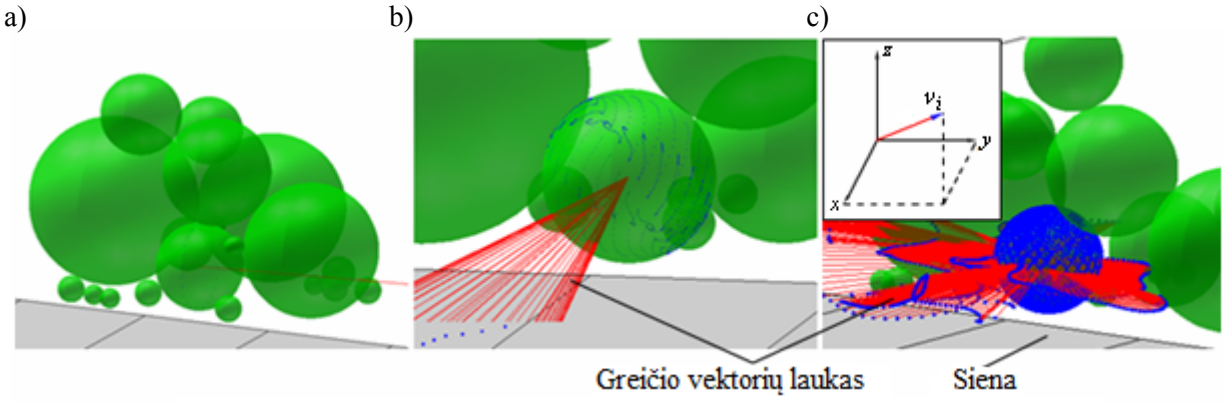
4.12 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinė

Kadangi dalelių mikrobūsenos tiriamos mišinio lokalaus kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis, tad vertinamas tik 4.13 c pav. parodytas evoliucijos etapas.



4.13 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinės evoliucija: a) gaubtinės padėtis skaičiuojamojoje erdvėje; b) visa gaubtinė; c) gaubtinė mišinio kvazistatinės pusiausvyros būvio sąlygomis

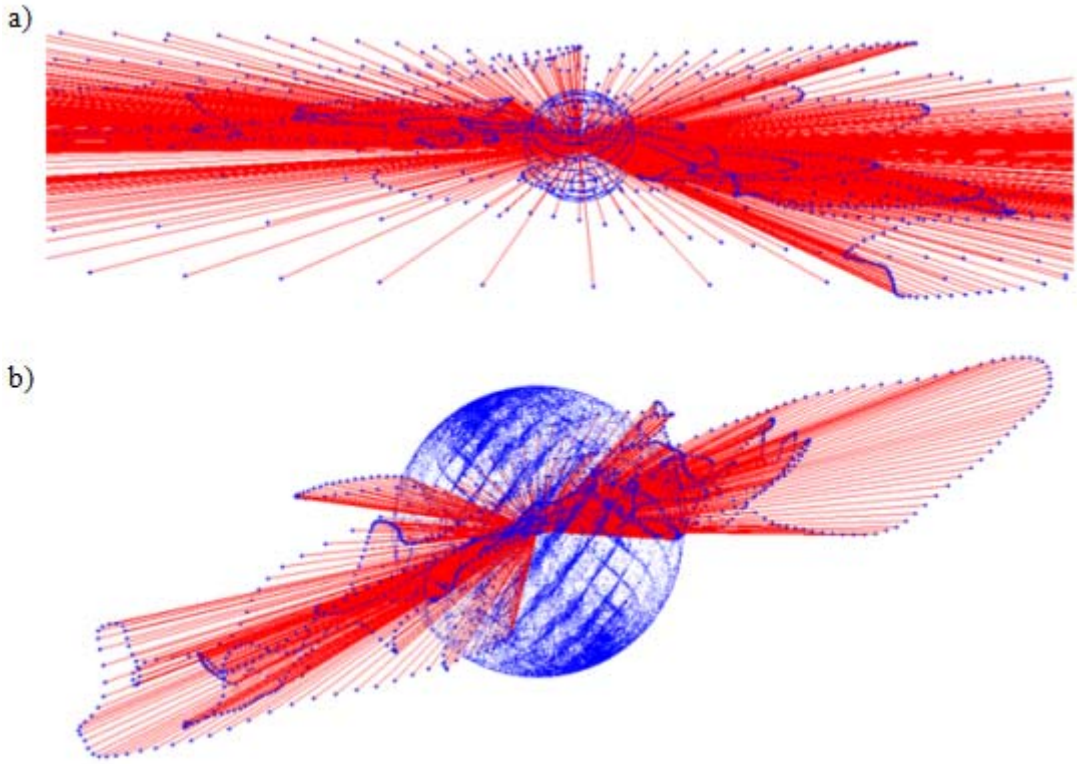
4.14 pav. parodyta detali 4.13 c pav. susidarymo eiga, kartu su normalinėmis plokštumomis pavaizduojant ir linijinio greičio vektorius. 4.14 pav. vaizduojama galutinėje pozicijoje (4.13 a pav.) esanti atsitiktinai pasirinkta daugiadispersio mišinio dalelė, kartu su artimiausiomis jos judėjimą varžančiomis dalelėmis.



4.14 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių lauko evoliucija varžančioje aplinkoje: a) pirmasis greičio vektorius (raudonas) ir jo normalinė plokštuma (mėlynas taškinio perimetro apskritimas); b) dalinė vektorių lauko vizualizacija; c) visas vektorių laukas ir normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje sudaryta tekstūra

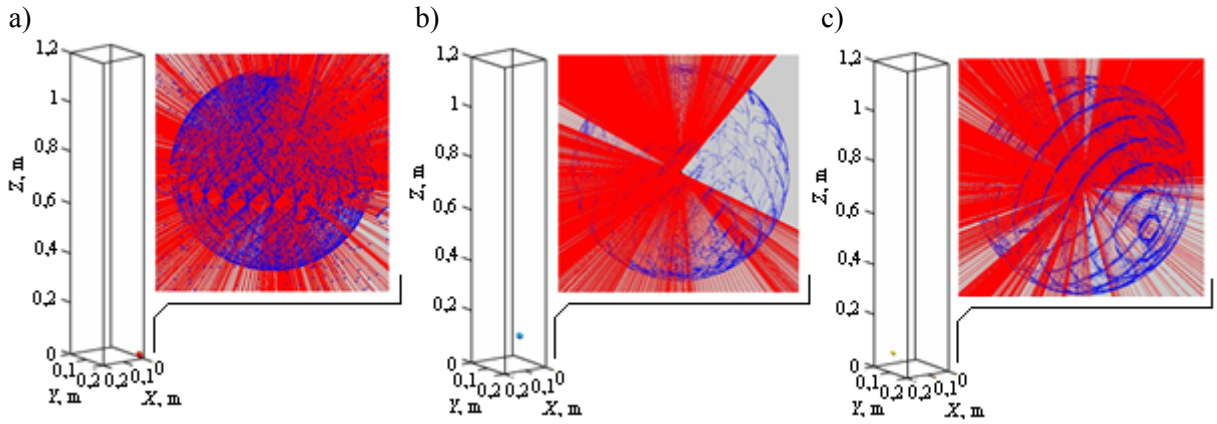
Kvazistatiniame būvyje dalelė turi tik mikrolygio poslinkius, todėl varžančioje aplinkoje prasideda galimai chaotiškas dalelės linijinio greičio vektoriaus krypties kitimas, suformuojantis visą vektorių lauką su atitinkamomis jų normalinėmis plokštumomis. Šiuo atveju greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinė pavirsta į sferinį $\boldsymbol{R}_i$ spindulio paviršių su tam tikra tekstūra (4.14 c pav.).

Analogiškus greičio vektorių ir jų normalinių plokštumų laukus sudarius kiekvienai viendispersio ir daugiadispersio mišinių dalelei bei palyginus rezultatus, vektorių laukuose (4.15 pav.) akivaizdžių dėsningumų įžvelgti nepavyko, tačiau greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelių paviršiuje suformuota tekstūra (žr. B priedo B.1 lentelė) rodė tam tikrus invariantiškus bruožus, siejamus su dangaus kūnų mechanikoje minimų juodųjų skylių aplinką charakterizuojančia Penrose diagrama (3.15 pav.).



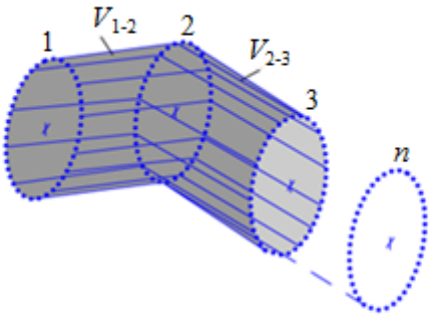
4.15 pav. *i*-osios dalelės linijinio greičio vektorių ir taškinio perimetro normalinių plokštumų laukai: a) pirmojo ribinio pavidalo tekstūra; b) antrojo ribinio pavidalo tekstūra

Nustatyta, jog dalelių paviršiuje susiformavusios tekstūros pavidalas (žr. B priedo B.1 lentelė) yra tiesiogiai susijęs su dalelės mechaniniu laisvės laipsniu mišinyje ir kontaktinių jėgų intensyvumu (4.5 pav.). Tekstūros skiriasi priklausomai nuo to, kaip arti skaičiuojamosios erdvės dugno yra dalelė. Kai dalelė yra pačiame skaičiuojamosios erdvės dugne, gaunamas 4.16 a pav. vaizdas. 4.16 a pav. matoma, jog išorinių trikdžių sukurtas stochastinis tinklas (2.18 pav.) persidengia, pasireiškiant deterministiniam chaosui. Jei dalelė yra šiek tiek aukščiau, skaičiuojamosios erdvės centre, gaunamas 4.16 b pav. vaizdas. 4.16 b pav. matoma, jog dalelė patiria silpną rezonansinį trikdį, todėl pradeda formuotis stochastinis tinklas. Jei dalelė yra arčiau skaičiuojamosios erdvės sienos, gaunamas 4.16 c pav. vaizdas.



4.16 pav. Daugiadispersio mišinio dalelės padėtis skaičiuojamojoje erdvėje ir linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų taškinio perimetro suformuota tekstūra: a) dalelė skaičiuojamosios erdvės dugne; b) dalelė skaičiuojamosios erdvės centre; c) dalelė prie skaičiuojamosios erdvės sienos

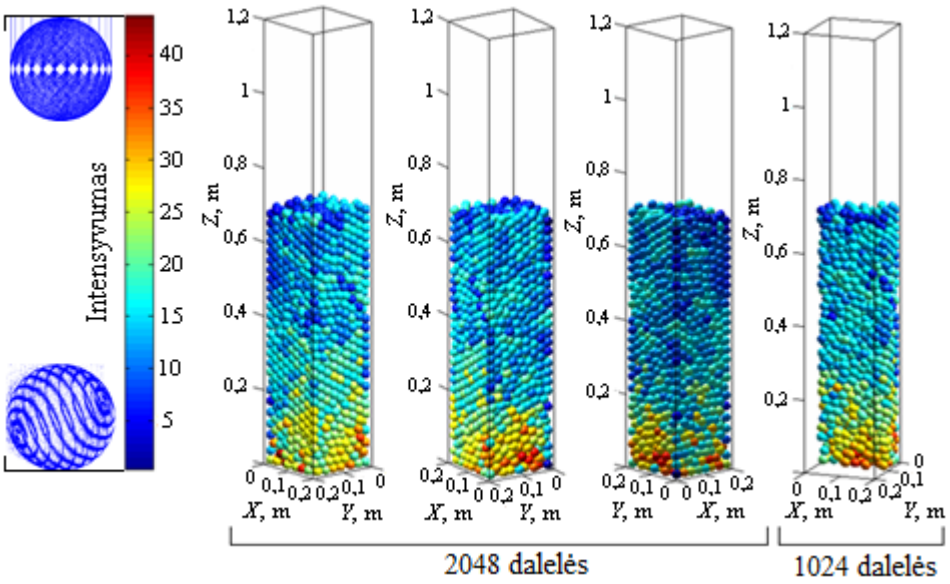
Kiekybiniam tekstūrų (žr. B priedo B.1 lentelė) pasireiškimui įvertinti buvo skaičiuotas greičio vektorių normalinių plokštumų sudaromas tūris (4.17 pav.) kvazistatinio būvio sąlygomis (žr. A priedą). 4.18 pav. ir 4.19 pav. pateiktos greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinių tūrio, normalizuoto su dalelių tūriu, pasiskirstymo spalvinės diagramos viendispersiam ir daugiadispersiam dalelių mišiniams. Mažiausia skalės vertė atitinka koncentrinių apskritimų tekstūrą (4.16 c pav.), o didžiausia – rombų (Penrose diagrama) pavidalo tekstūrą (4.16 a pav.). 4.20 pav. pateiktas procentinis dalelių normalizuoto gaubtinių tūrio pasiskirstymas.



PASTABOS. V_{1-2} ir V_{2-3} yra atskirų ruožų tūriai, greičio vektoriaus normalinės plokštumos orientacijai keičiantis iš būsenos 1 į būseną *n*. Suvaržytos dalelės plokštumų centro padėtis erdvėje nekinta, tačiau dėl aiškumo plokštumos atitrauktos viena nuo kitos.

4.17 pav. Greičio vektorių normalinių plokštumų tūrinės gaubtinės sudarymo principas

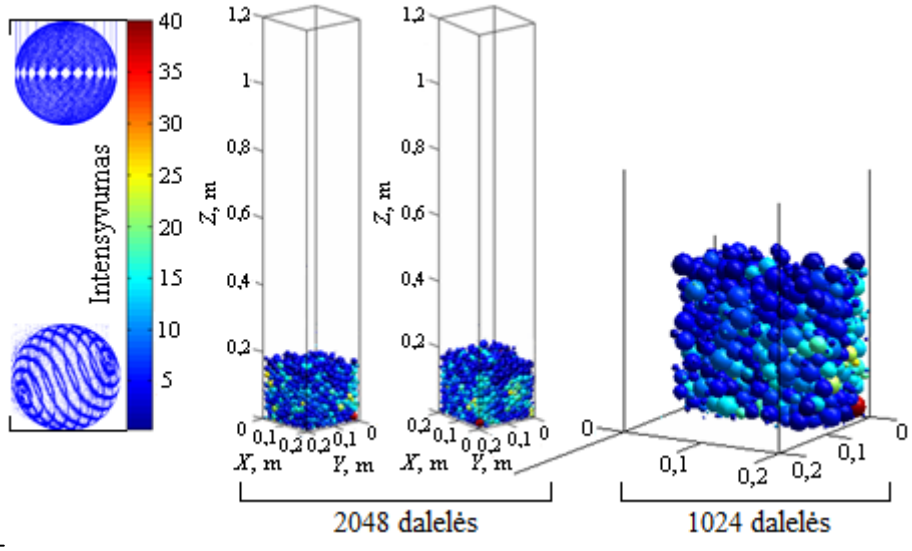
4.18 pav. pateiktas viendispersio mišinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas. Matoma, jog viendispersiame dalelių mišinyje Penrose diagramos pavidalo tekstūra (4.16 a pav.) susiformuoja arčiau skaičiuojamosios erdvės dugno, todėl patvirtina metodo kūrime taikyto Fermi-Ulamo modelio (3.1 a pav.) hipotezę.



PASTABOS. Pateiktas 2048-ių dalelių vaizdas iš kelių skaičiuojamosios erdvės pusių bei 1024-ių dalelių vaizdas. Mažiausia skalės vertė atitinka koncentrinių apskritimų tekstūrą, o didžiausia – Penrose diagramos pavidalo tekstūrą.

4.18 pav. Viendispersio dalelių mišinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas

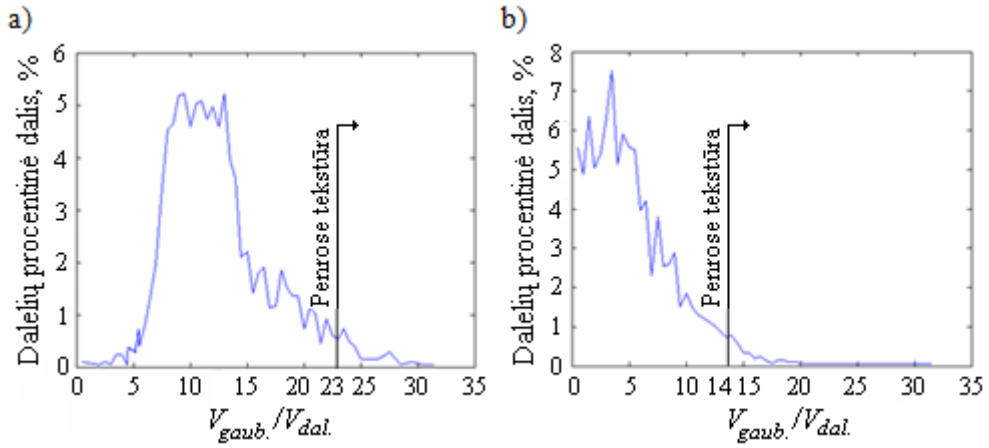
4.19 pav. matoma, jog daugiadispersiame dalelių mišinyje artima Penrose diagramos pavidalui tekstūra (4.16 a pav.) taip pat intensyviau pasireiškia arti dugno esančiose dalelėse, tačiau jų procentinis kiekis mišinyje yra mažesnis dėl mažesnio, lyginant su viendispersiu dalelių mišiniu, virš esančių dalelių svorio.



PASTABOS. Pateiktas 2048-ių dalelių vaizdas iš kelių skaičiuojamosios erdvės pusių bei 1024-ių dalelių vaizdas. Mažiausia skalės vertė atitinka koncentrinių apskritimų tekstūrą, o didžiausia – Penrose diagramos pavidalo tekstūrą

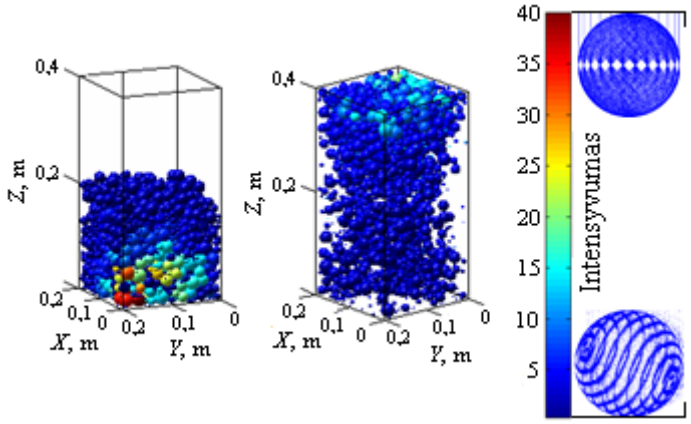
4.19 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas

Tekstūrų procentinis pasiskirstymas viendispersiame ir daugiadispersiame dalelių mišiniuose (4.20 pav.) panašus į Maxwello-Bolcmano skirstinį, išreiškiantį būsenų pasiskirstymą terminėje pusiausvyroje. Tik mažam dalelių kiekiui mišiniuose yra suteikiamas tam tikras reikiamas energijos kiekis – aktyvacijos energija prasidėti reakcijai, kurios metu dalelė deformuojama iki ribinės (soties) reikšmės, tai yra dalelė tampa degeneravusia medžiaga. Normalizuotą gaubtinės tūrį (4.17 pav.) prilyginant dalelės energijai, iš 4.20 pav. matoma, jog tiek viendispersiame, tiek daugiadispersiame mišiniuose vyrauja dalelės su vidutiniu energijos kiekiu. Be to, viendispersiame mišinyje yra dalelių su labai mažu energijos kiekiu. Reikiamą aktyvacijos energijos kiekį, būtiną Penrose diagramos pavidalo tekstūrai susiformuoti, viendispersiame mišinyje turi šiek tiek daugiau dalelių nei daugiadispersiame mišinyje.



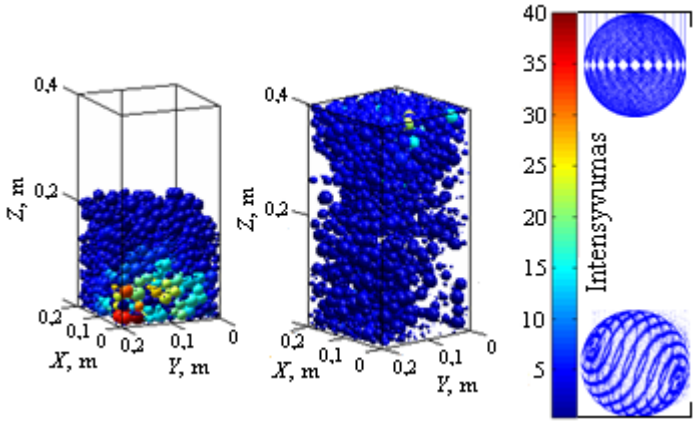
4.20 pav. Dalelių linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių procentinis pasiskirstymas mišiniuose: a) viendispersis mišinys; b) daugiadispersis mišinys

Siekiant įvertinti gravitacijos įtaką tekstūrų formavimuisi, bandinys buvo paveiktas smūgiu į šonus (4.21 pav.) ir į dugną (4.22 pav.), sukeliant vertikalų dalelių judėjimą į viršų.



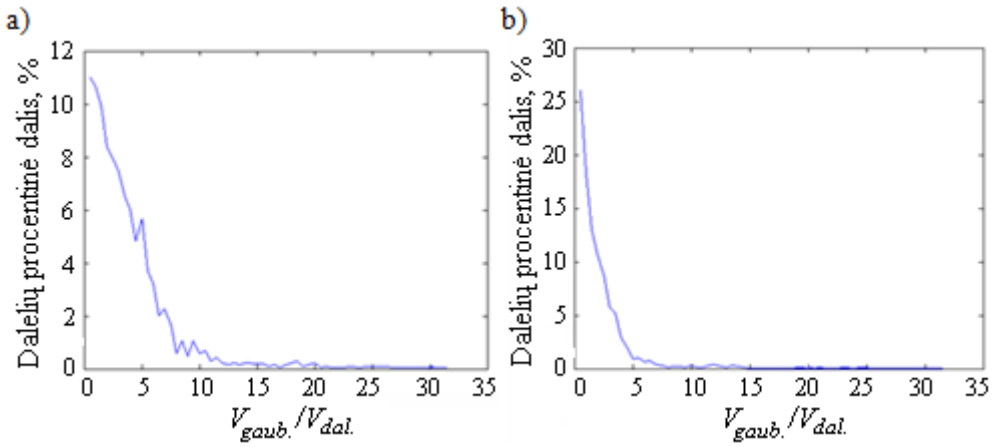
4.21 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas, paveikus bandinį smūgiu į šonus: a) pasiskirstymas pradinėje mišinio būsenoje; b) pasiskirstymas galutinėje mišinio būsenoje

4.21 pav. matoma, jog, lyginant su laisvuoju kritimu, kontrastingų Penrose diagramos pavidalo tekstūrų nepasireiškia, o artimų joms kiekis yra itin mažas. Analogiška situacija gauta ir bandinį paveikus smūgiu į dugną (4.22 pav.).



4.22 pav. Daugiadispersio dalelių mišinio linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių pasiskirstymas, paveikus bandinį smūgiu į dugną: a) pasiskirstymas pradinėje mišinio būsenoje; b) pasiskirstymas galutinėje mišinio būsenoje

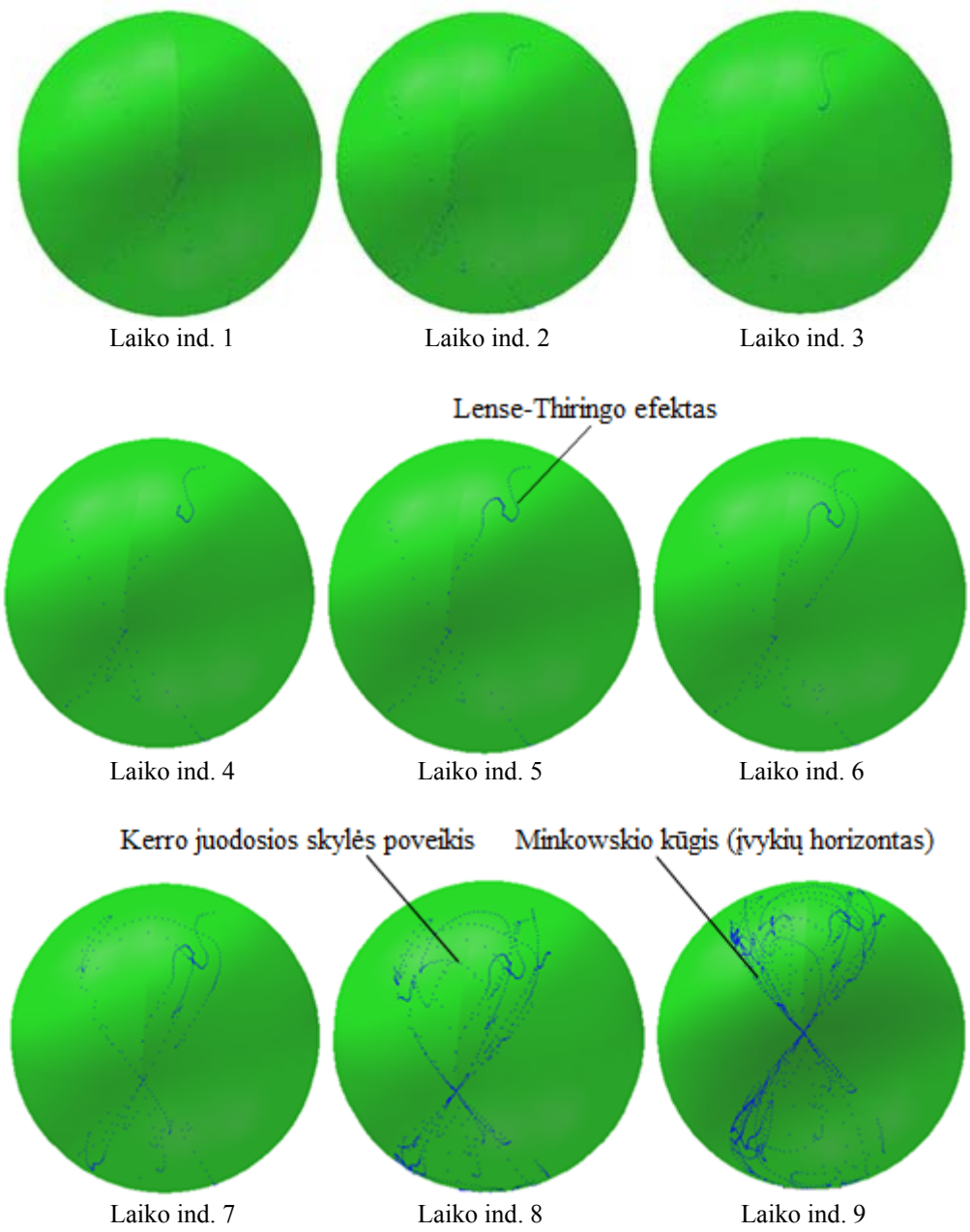
4.23 pav. pateiktas procentinis dalelių normalizuoto gaubtinių tūrio pasiskirstymas smūgių paveiktuose mišiniuose. Matoma, jog pasiskirstymas nebėra panašus į Maxwello-Bolcmano skirstinį (žr. 3.33 a pav.).



4.23 pav. Dalelių linijinio greičio vektorių normalinių plokštumų normalizuotų tūrinių gaubtinių procentinis pasiskirstymas smūgiais paveiktuose mišiniuose: a) daugiadispersis dalelių mišinys paveiktas smūgiu į šonus; b) daugiadispersis dalelių mišinys paveiktas smūgiu į dugną

Dėl pastebėtų Penrose diagramos bruožų ir reikšmingos gravitacijos įtakos galima taikyti kosminių kūnų mechanikos principus, pagal kuriuos dalelių mišinys gali būti laikomas tapačiu dvinarei sistemai. Sistemos stochastizacija yra sukeliama besisukančios juodosios skylės, galimai susijusios su bozonine žvaigžde, susiformavimo dėl gravitacinio suirimo, kai daugumos mišinio

dalelių, sudarančių dvinarės sistemos raudonąją milžinę, kontaktinės jėgos (silpnoji sąveika) sutelkiamos (akrecijos procesas) į vieną dalelę (dalelė su Penrose diagramos pavidalo tekstūra), esančią arti skaičiuojamosios erdvės dugno. Jei vėl remiamasi bemasio bozono analogija, galima tarti, jog jis atitinka vieną tašką mišinio dalelės paviršiuje. Bozonui patekus į juodąją skylę, yra emituojama energija, kuri uždengia visą vaizdą (4.16 a pav.). Proceso detaliam atvaizdavimui, iš 4.16 a pav. išskiriama greičio vektoriaus normalinės plokštumos taškinio perimetro vieno taško judėjimo trajektorija mišinio dalelės paviršiuje (4.24 pav.).

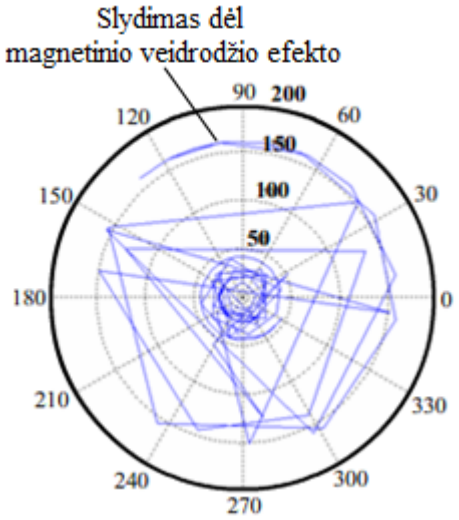


4.24 pav. Greičio vektorių normalinių plokštumų vieno taško (bozono) pasaulio linija mišinio dalelės paviršiuje skirtingais laiko momentais

4.24 pav. parodytoje vieno taško (bozono) pasaulio linijos plėtotėje matoma, jog suformuojami Minkowskio kūgio kontūrai – įvykių horizontas, tačiau dėl Kerro juodosios skylės poveikio – mišinio dalelės deformacijos – trajektorija nukrypsta nuo 45° kampo.

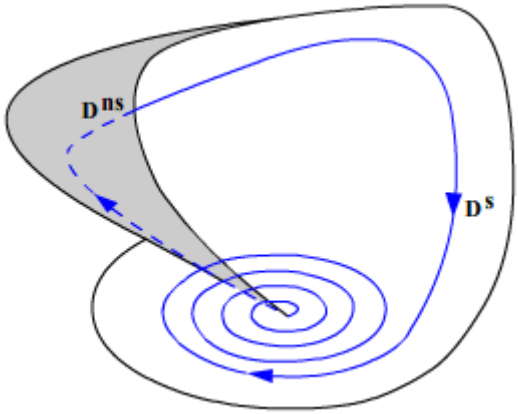
Tekstūra dalelių paviršiuje išreiškia visuminę būsenų informaciją. Siekiant charakterizuoti dinaminės sistemos mikrobūseną konkrečiu laiko momentu, būtina nustatyti jos fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos, išreiškiančios kokybinius evoliucionuojančios dinaminės sistemos elgsenos pokyčius, pavidalą (Lichtenberg ir Lieberman 1992). Šiam tikslui pasinaudojama anksčiau pateiktu teiginiu, jog dalelės greičio vektoriaus krypties kitimą vaizduojanti polinė diagrama (3.41 pav.) išreiškia dalelės, kaip dinaminės sistemos, fazinių trajektorijų, esančių energijos toro (atraktoriaus) paviršiuje, sankirtos taškų su diagramos plokštuma gaubtinę. B priedo B.2 lentelėje pateiktos skirtingas tekstūras atitinkančios polinės diagramos, o B.3 lentelėje pateikta greičio vektorių normalinių plokštumų tinklo susidarymo eiga daugiadispersio mišinio *i*-osios dalelės paviršiuje, kartu su greičio vektoriaus krypties kitimą vaizduojančiais poliniais grafikais.

Charakteringieji elementai B.2 lentelėje rodo Penrose diagramos pavidalo tekstūroms būdingą spiralinį kontūrą polinių diagramų centre bei staigų šuolį į diagramos kraštą iš jos centro. Toks elgesys yra suderinamas su magnetizacijos vektoriaus judėjimo Blocho sferoje ir patvirtina hipotezę, jog ši polinė diagrama vaizduoja dalelės fazinės trajektorijos elgseną kintant efektyviajam magnetiniam (arba gravitaciniam) laukui $\boldsymbol{B}_{ef}$ (3.43 pav.). Spiralinis kontūras, prasidedantis nuo 45^{0} polinės atžymos rodo rezonansinę elgseną, pasibaigiančią slydimu, panašiu į plazmos greitintuvams „Tokamak“ būdingą slydimą dėl magnetinio veidrodžio efekto (4.25 pav.).



4.25 pav. Magnetinio veidrodžio efekto sukeltas slydimas

Išanalizavus B priedo B.3 lentelėje pateiktų dalelės greičio vektoriaus krypties kitimo eigą vaizduojančių diagramų dėsningumus, 4.26 pav. atvaizduojama galima aksonometrinė fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos interpretacija dalelei su charakteringąja Penrose diagramos pavidalo tekstūra.



PASTABOS. Mėlyna linija rodo tipinės fazinės trajektorijos pavidalą. Čia D^s yra stabili fazinės erdvės daugdara, o D^{ns} – nestabili.

4.26 pav. Fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos diagramos aksonometrinė interpretacija dalelei su charakeringąja Penrose diagramos pavidalo tekstūra

4.26 pav. parodyta globaliosios bifurkacijos aksonometrinė interpretacija, charakterizuojama homoklinine orbita į fiksuotą tašką, sudaryta iš stabilios daugdaros D^s ir nestabilios daugdaros D^{ns}. Viena iš dviejų D^s atšakų fazinėje erdvėje visada konverguoja link spiralinio kontūro, o atšaka D^{ns} yra trumpa ir atlieka fazinės tajektorijos atkūrimo funkciją. Daugdarai D^s artėjant prie spiralės centro, pasireiškia sąveika su D^{ns} (De Feo 2004), kurios metu fazinėje erdvėje sukuriamas begalinis skaičius judėjimo trajektorijų su visais galimais periodais. Literatūroje (De Feo 2004) randama, jog minėtosios fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos elgsena yra artima Shilnikovo globaliajai bifurkacijai. Šio pavidalo fazinės trajektorijos bifurkacijos charakteristikos yra suderinamos su dalelių mikrobūsenų tyrimo metode iškeltomis hipotezėmis, todėl galima teigti, jog sukurtas unikalus metodas yra pagrįstas.

IŠVADOS

1. Dalelių mišinių kinetinės energijos sumažėjimas iki sąlyginio nulio reikšmės bei jėgų pusiausvyra tarp mišinių svorio jėgos ir pagrindo atstojamosios reakcijos parodė, jog dalelių elgsenos modeliavimas diskrečiųjų elementų metodu (DEM) yra išspręstas korektiškai, esant pasirinktam laiko žingsniui. Kontroliuojamieji parametrai parodė, jog DEM yra tinkamas realiomis fizinėmis-mechaninėmis savybėmis pasižyminčių dalelių mišinių struktūrai fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinėmis pusiausvyros sąlygomis tirti. Pažymėtina, kad andezitui būdinga didelė tamprumo modulio reikšmė lėmė labai mažą integravimo žingsnį, todėl skaičiavimas išnaudojo daug kompiuterinio laiko.
2. Tiriant dalelių mišinių makrostruktūrą nustatyta, kad kontaktinių jėgų pasiskirstymas yra skirtingas ir priklauso nuo mišinio kompaktiškumo bei dalelių laisvės laipsnio mišinyje. Rastas tam tikras kiekis daugiadispersiame mišinyje dominuojančių neaktyvių dalelių, kurios, būdamos sistemos dalimi, perima tik savojo svorio sukeltą apkrovą, todėl turi daugiau laisvės judėti erdvėje nei kitos mišinio dalelės.
3. Dalelių mišinio užimama tūrio dalis (tankumas) lėčiau auga daugiadispersiame mišinyje. Tai taip pat susiję su daugiadispersio mišinio neaktyvių dalelių zonų susiformavimu. Šie dariniai trukdo mišiniui tankėti be papildomo išorinio poveikio.
4. Analizuojant gautus mišinių makrostruktūros tyrimo rezultatus, nustatyta, kad kontaktinės jėgos ir struktūros užimama tūrio dalis (tankumas) perteikia nepakankamą informaciją apie struktūros vidines ypatybes. Minėtieji rodikliai apibūdina tam tikrą sistemos makrobūseną, kurios egzistavimą gali atitikti keletas ar keliolika mikrobūsenų, todėl būtina papildoma mikrolygmens analizė.
5. Siekiant ištirti dalelės mikrobūsenas fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis, sukurtas unikalus metodas ir kompiuterinis algoritmas metodui realizuoti, paremtas Hamiltono mechanikos, bendrosios reliatyvumo teorijos bei kvantinės gravitacijos teorijų principais. Šiame algoritme pasirenkama viena konkreti mišinio dalelė ir, pasinaudojant diskrečiųjų elementų metodu gautais rezultatais, erdvėje atidedamos visos jos greičio vektorių normalinės taškinio perimetro plokštumos. Tokiu būdu dalelės paviršiuje gaunama unikali tekstūra, sauganti savyje informaciją apie dalelės trajektorijos kitimą mišinyje kvazistatinės pusiausvyros sąlygomis.
6. Nustatyta, jog dalelių paviršiuje susiformavusios tekstūros pavidalas yra tiesiogiai susijęs su dalelės mechaniniu laisvės laipsniu mišinyje ir kontaktinių jėgų intensyvumu. Tekstūros skiriasi priklausomai nuo to, kaip arti skaičiuojamosios erdvės dugno yra dalelė. Gautieji rezultatai yra suderinami su Fermi-Ulamo modeliu.

7. Greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelių paviršiuje suformuota tekstūra parodė tam tikrus invariantiškus bruožus, panašius į kosmologijoje minimų juodųjų skylių aplinką charakterizuojančią Penrose diagramą.
8. Pastebėti Penrose diagramos bruožai, leidžia dalelių mišinius fliuktuojančioje aplinkoje kvazistatinės pusiausvyros sąlygomis nagrinėti kosminių kūnų mechanikos principais, pagal kuriuos mišinys gali būti laikomas tapačiu dvinarei sistemai. Sistemos stochastizacija yra sukeliama besisukančios Kerro juodosios skylės susiformavimo dėl gravitacinio suirimo, galimai tapataus dalelės viskoelastinio sluoksnio mechaninei deformacijai iki ribinės reikšmės.
9. Kiekybiniam tekstūrų pasireiškimui įvertinti buvo skaičiuota greičio vektorių normalinių taškinių plokštumų sudaroma tūrinė gaubtinė kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis. Nustatyta, jog tekstūrų procentinis pasiskirstymas viendispersiame ir daugiadispersiame dalelių mišiniuose yra panašus į Maxwello-Bolcmano skirstinį, išreiškiantį būsenų pasiskirstymą terminėje pusiausvyroje. Tokio pavidalo skirstinys rodo, jog tik mažam dalelių kiekiui mišiniuose yra suteikiama aktyvacijos energija, atsakinga už viskoelastinio sluoksnio deformaciją iki ribinės (soties) reikšmės. Normalizuotą gaubtinės tūrį laikant dalelės energijos rodikliu, gauta, jog tiek viendispersiame, tiek daugiadispersiame mišinyje vyrauja dalelės su vidutiniu energijos kiekiu. Be to, viendispersiame mišinyje yra dalelių su labai mažu energijos kiekiu. Reikiamą aktyvacijos energijos kiekį viendispersiame mišinyje turi šiek tiek daugiau dalelių nei daugiadispersiame mišinyje.
10. Siekiant įvertinti gravitacijos įtaką tekstūrų susiformavimui, daugiadispersis mišinys buvo paveiktas smūgiais į šonus ir į dugną, sukeliant vertikalų dalelių judėjimą į viršų. Šiuo atveju procentinis dalelių normalizuoto gaubtinių tūrio pasiskirstymas nebebuvo panašus į Maxwello-Bolcmano skirstinį.
11. Pasinaudojus Furjė transformacija, suformuotos dalelių fazinių trajektorijų polinės gaubtinės. Charakteringieji elementai parodė Penrose diagramų pavidalo tekstūra pasižyminčioms dalelėms būdingą spiralinį kontūrą polinių diagramų centre bei staigų šuolį į diagramos kraštą iš jos centro. Nustatytasis dėsningumas yra artimas Shilnikovo globaliajai bifurkacijai. Gautasis chaotinio atraktoriaus vaizdas patvirtina hipotezę, jog minėtoji polinė diagrama vaizduoja dalelės fazinės trajektorijos elgseną kintant magnetiniam (arba gravitaciniam) laukui ir reprezentuoja plazmos greitintuvams „Tokamak“ būdingą rezonansinę būseną.
12. Betoną laikant viskoelastine medžiaga, rasta dalelių elgsenos sąsaja su plazmos greitintuvu „Tokamak“ leidžia betono valkšnumo deformacijos mechanizmą laikyti panašiu į magnetizacijos vektoriaus relaksaciją magnetizmo teorijoje.

LITERATŪROS SĄRAŠAS

Aspden, H. *Physics unified* [interaktyvus]. 1929. *Practical guide to free-energy devices* [žiūrėta 2012-01-03]. Prieiga per internetą: www.free-energy-info.co.uk/P24.pdf

Alexander, M.; Mindess, S. 2005. *Aggregates in concrete*. New York: Taylor & Francis. 448 p.

Alkhaldi, H. 2007. *PhD: Contact investigations of granular mechanical media in a tumbling sorting machine.* Stuttgart: Institut fur Technische und Numerische Mechanik Universitat. 131 p.

Al Hammal, O. 2007. *PhD: Langevin equations for nonequilibrium phase transitions.* Granada: Instituto Carlos I de F´ısica Te´orica y Computacional y Depto. 197 p.

Amenabar, F. I. M. 2009. *PhD: Exploring analogines between granular materials and fluids.* Pittsburgh: Swanson School of Engineering. 148 p.

Arecchi, F. T. 2003. Chaotic neuron dynamics, synchronization, and feature binding: quantum aspects*, Mind and Matter* 1(1): 15–43.

Aste, T.; Weaire, D. 2000. *The pursuit of perfect packing*. London: IOP Publishing. 200 p.

Abellanas, M.; Hernandez, G.; Klein, R.; Neumann-Lara, V.; Urrutia, J. 1995. Voronoi diagrams and containment of families of convex sets on the plane, *In Proc. 11th Annu ACM Sympos. Comput. Geom.*: 71–78

Activation energies [interaktyvus]. *W. W. Norton & Company* [žiūrėta 2012-01-07]. Prieiga per internetą: http://www.wwnorton.com/chemistry/tutorials/ch14.htm

Bakunin, G. O. 2011. *Chaotic flows. Correlation effects, transport, and structures*. Berlin: Springer-Verlag. 351 p.

Balevičius, R.; Džiugys, A.; Kačianauskas, R. 2004. Discrete element method and its application to the analysis of penetration into granular media*, Journal of Civil Engineering and Management* 10(1): 3 p.

Balevičius, R.; Kačianauskas, R.; Džiugys, A.; Maknickas, A.; Vislavičius, K. 2006. Investigation of performance of programming approaches and languages used for numerical simulation of granular material by the discrete element method*, Computer Physics Communications* 175(6): 404–415.

Balevičius, R.; Kačianauskas, R.; Mroz, Z.; Sielamowicz, I. 2011. Analysis and DEM simulation of granular material flow patterns in hopper models of different shapes, *Advanced powder technology: Special issue of the 6th World Congress on Particle Technology Amsterdam: Elsevier Science* 22(2): 226–235.

Basics of magnetic resonance imaging and magnetic resonance spectroscopy [interaktyvus]. University of Turku [žiūrėta 2011-11-20]. Prieiga per internetą: http://www.physics.utu.fi/projects/kurssit/UFYS3093/MagneticResonanceTomographyBasics.pdf

Beato, V. 2006. *PhD: Noise-induced pattern formation in excitable media*. Berlin: Technischen Universitat. 123 p.

Belmonte, L.; Andrew, O. Q.; Flesselles, J. M. 1997. Experimental survey of spiral dynamics in the Belousov-Zhabotinsky reaction, *J. Phys. II France* 7: 1425–1468.

Bernal, J.D.; Mason, J. 1960. Packing of spheres: co-ordination of randomly packed spheres, *Nature* 188: 910–911.

Bojowald, M. Didžiojo Visatos Atšokimo pėdsakais [interaktyvus]. 2008. *Mokslo ir technologijų pasaulis* [žiūrėta 2012-01-04]. Prieiga per internetą: http://www.technologijos.lt/n/spauda/sciam/straipsnis?name=straipsnis-5771

Boutin, C.; Auriault, J. L. 1993. Rayleigh scattering in elastic composite materials, *Int. J. Engng. Sci*. 31(12): 1669–1689.

Bozonas [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-01-04]. Prieiga per internetą: http://lt.wikipedia.org/wiki/Bozonas

Brandt, M. A. 2009. *Cement-based composites. Second edition. Materials, mechanical properties and performance*. Abingdon: Taylor & Francis. 526 p.

Bran, C. 2010. *PhD: Domain structure and magnetization processes of complex magnetic multilayers*. Dresden: Technical University. 92 p.

Buschow, K. H. J.; De Boer, F. R. 2004. *Physics of magnetism and magnetic materials.* New York: Kluwer Academic Publishers. 191 p.

Butikov, E. 2006. Precession and nutation of a gyroscope, *Eur. J. Phys*. 27: 1071–1081.

Carroll, S. M. 2004. *Spacetime and geometry. An introduction to general relativity.* San Francisco: Addison Wesley. 513 p.

Chamberlain, J.A.; Sader, J.E.; Landman, K.A.; White, L.R. 2001. Incipient plane-strain failure of a rectangular block under gravity*, International Journal of Mechanical Sciences* 43: 793–815.

Chamberlain, J.A.; Sader, J.E.; Landman, K.A.; Horrobin, D.J.; White, L.R. 2002. Incipient failure of a circular cylinder under gravity, *International Journal of Mechanical Sciences* 44: 1779–1800.

Chang, C. S.; Gao, J. 1995. Second-gradient constitutive theory for granular materials with random packing structure, *Int. J. Solids Struct.* 32: 2279–2293.

Charles, W. *Magnetic hysteresis loops* [interaktyvus]. *Lecture Notes* [žiūrėta 2012-01-02]. Prieiga per internetą: http://www.engr.sjsu.edu/~sgleixner/PRIME/Memory/Lecture%20Notes/Class%207_hysteresis%20loop.pdf

Chisolm, T. Blender 3D - concrete slump test [interaktyvus]. 2010. *Youtube* [žiūrėta 2011-10-12]. Prieiga per internetą: http://www.youtube.com/watch?v=1PxGPR3_7ws

Complex logarithm [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-01-04]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Complex_logarithm

Coniglio, A.; Fierro, A.; Herrmann, H.J.; Nicodemi, M. 2004. *Unifying concepts in granular media and glasses*. Amsterdam: Elsevier. 223 p.

Cottrell, A. H. 2004. A microscopic theory of Andrade creep, *Philosophical Magazine Letters* 84(11): 685–689.

Cugliandolo, F. L. 2011. *PhD: Dynamics of complex systems*. Paris: Universit´e Pierre et Marie Curie - VI Laboratoire de Physique Theorique et Hautes Energies. 97 p.

Cundall, P.A.; Strack, O.D.L. 1979. A Discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* 29(1): 47–65.

Cycloid [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2011-11-25]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Cycloid

D'Appolonia, D.; D'Appolonia, E. 1967. Determination of the maximum density of cohesionless soils, *Proc. 3rd Asian Conf. Soil Mech. Found. Eng*. 1: 266–268.

De Feo, O. 2004. Qualitative resonance of Shilnikov-like strange attractors, Part I: Experimental Evidence, *International Journal of Bifurcation and Chaos* 14(3): 873–891.

De Larrard, F. 1999. *Concrete Mixture-Proportioning - A Scientific Approach*. London: E & FN Spon. 421 p.

Deltuva, J. 1998. *Heterogeninių statybinių mišinių sandara ir savybės*. Kaunas: Technologija. 264 p.

De Lazzari, D. 2011. *PhD: Stabilization of magnetic islands in tokamaks by localized heating and current drive*. Treviso: Technische Universiteit. 145 p.

Diamond, S. 2007. Particle arrangements in freshly-mixed mortars: basis for modelling, *Journal of Advanced Concrete Technology* 5(3): 277–283.

Didysis sprogimas ar Didysis atšokimas [interaktyvus]. *San-taka station* [žiūrėta 2012-01-05]. Prieiga per internetą: http://www.nso.lt/science/bounce.htm

Dorbolo, S.; Ludewig, F.; Vandewalle, N. 2009. Bouncing trimer: a random self-propelled particle, chaos and periodical motions, *New Journal of Physics* 11: 22 p.

Дворкин, Л. И.; Дворкин, О.Л. 2006. *Основы бетоноведения* [Dvorkin, L. I.; Dvorkin, O. L. Betono ruošimo pagrindai]. Санкт-Петербург, Россия, изд. Строй-Бетон. 692 с.

Дворкин, Л. И. 1981. *Оптимальное проектирование составов бетона* [Dvorkin, L. I. Optimalios betono mišinio sudėties projektavimas]. Львов : Вища школа. Изд-во при Львов, ун-те. 160 с.

Džiugys, A.; Peters, B. J. 2001. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers*, Granular Material* 3(4): 231–266.

Dintwa, E. 2006. *PhD: Development of accurate contact force models for use with Discrete Element Method (DEM) modelling of bulk fruit handling processes*. Katholieke Universiteit Leuven. 206 p.

Dobry, R.; Whitman, R. V. 1973. Compaction of sand on a vertically vibrated table: evaluation of relative density and its role in geo-technical projects involving cohesionless soils, *ASTM STP* 523: 156–170.

Nowak, E. R.; Knight, J. B.; Ben-Naim, E; Jaeger, H. M.; Nagel, S. R. 1998. Density fluctuations in vibrated granular material, Physical Review E 57(2): 1971–1982.

Edwards, S. F.; Oakeshott, R. B. S. 1989. Theory of powders*, Physica* 157: 1080–1090 p.

Egbers, C.; Pfister, G. 1999. *Physics of rotating fluids, selected topics of the 11th international Couette–Taylor workshop held at Bremen, Germany*. 439 p.

Eliezer, S.; Eliezer, Y. 2001. *The fourth state of matter. An introduction to plasma science*. *Second edition.* London: IOP Publishing. 235 p.

Enns, H. R. 2011. *It's a nonlinear world.* New York: Springer Science+Business Media. 396 p.

Evans, P. E.; Millman, R. S. 1964. The Vibratory packing of powders, *Powder Met.* 7: 50–63.

Faulkner, W. *Basic principles of MRI* [interaktyvus]. 1996. OutSource, Inc. [žiūrėta 2012-02-12]. Prieiga per internetą: http://www.e-radiography.net/mrict/Basic_MR.pdf

Ferromagnetism [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-01-15]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Ferromagnetism

Fourier transform [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-02-12]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_transform

Gram, A. 2009. *PhD: Numerical modelling of self-compacting concrete flow-discrete and continuous approach.* Sweden: Royal Institute of Technology. 72 p.

Gravitomagnetism [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-01-04]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Gravitomagnetism

Greiner, W.; Neise, L.; Stocker, H. 1995. *Thermodynamics and statistical mechanics.* New York: Springer-Verlag. 476 p.

Grigas, J. Laiko strėlė [interaktyvus]. 2009. *Literatūra ir menas* [žiūrėta 2012-02-03]. Prieiga per internetą: http://www.culture.lt/satenai/?leid_id=948&kas=straipsnis&st_id=16908

Guo, Z. Q.; Yuan, Q.; Stroeven, P.; Fraaij, A.L.A. *Discrete element method simulating workability of fresh concrete* [interaktyvus]. 2010. *The SAO/NASA Astrophysics Data System* [žiūrėta 2011-10-09]. Prieiga per internetą: http://adsabs.harvard.edu/abs/2010AIPC.1233..430G

Hagen, B.; Wittkowski, R.; Lowen, H. 2011. Brownian dynamics of a self-propelled particle in shear flow, *Physical Review E* 84(3): 6 p.

Hendrickx, R. 2009 *PhD: The adequate measurement of the workability of masonry mortar.* Leuven: Katholieke Universiteit. 242 p.

Hilborn, C. R. 2008. *Chaos and nonlinear dynamics. An introduction for scientists and engineers. Second Edition*. Oxford University Press. 654 p.

Hills, W. 1990. *National solid waste management association. Waste Product Profile: Tires*. Washington, D.C.

Hutchinson, I.H. *Introduction to plasma physics* [interaktyvus]. 2001. [žiūrėta 2012-02-15]. Prieiga per internetą: http://silas.psfc.mit.edu/introplasma/index.html

Iverson, S.; Jung, S. J.; Biswas, K.Comparison of ore pass computer simulations for designs against dynamic load [interaktyvus]. *Centers for desease control and prevention* [žiūrėta 2010-11-10]. Prieiga per internetą: www.cdc.gov/niosh/mining/pubs/pdfs/coopc.pdf

Izhikevich, E. M.; FitzHugh, R. FitzHugh-Nagumo model [interaktyvus]. 2006. *Scholarpedia* [žiūrėta 2011-10-14]. Prieiga per internetą: http://www.scholarpedia.org/article/FitzHugh-Nagumo_model

Yohannes, B.; Hill, K.; Khazanovich, L. Mechanistic modeling of unbound granular materials [interaktyvus]. 2009. *Minnesota Department of Transportation* [žiūrėta 2011-06-15]. Prieiga per internetą: http://www.lrrb.org/pdf/200921.pdf

Yu, A.B.; Zou, R. P. 1998. Prediction of the porosity of particle mixtures: A Review, *KONA Powder Part.* 16: 68–81.

Jaeger, H. M.; Nagel, S. R.; Behringer, R. P. 1996. Granular solids, liquids, and gases, *Reviews of Modern Physics* 68(4): 1259–1273.

Jones, P. 2003. *PhD: An experimental investigation into tokamak edge MHD behaviour.* London: Imperial College of Science, Technology and Medicine. 173 p.

José, V. J.; Saletan, J. E. 1998. *Classical dynamics - a contemporary approach*. Cambridge University Press. 696 p.

Kačianauskas, R.; Maknickas, A.; Kačeniauskas, A.; Markauskas, D.; Balevičius, R. 2010. Parallel discrete element simulation of poly-dispersed granular material, *Advances in Engineering Software* 41: 52–63.

Kaloush, K. E. 2001. *PhD: Simple performance test for permanent deformation of asphalt mixtures.* Arizona State University.

Kamrin, K. N. 2008. *PhD: Stochastic and deterministic models for dense granular flow.* Massachusetts Institute of technology. 254 p.

Kanit, T.; Forest, S.; Galliet, I.; Mounoury, V.; Jeulin, D. 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach, *Int. J. Solids Struct*. 40: 3647–3679.

Karato, S. 2008. *Deformation of earth materials. An introduction to the rheology of solid earth.* Cambridge University Press. 463 p.

Karlsson, T. 1999. *PhD: Rotational resonance in the nuclear magnetic resonance of solids*. Stockholm university. 251 p.

Kennedy, C. T. 1940. The design of concrete mixes, *American Concrete Institute* Journal 36: 373–400.

Koehler, E.P. 2007. *PhD*: *Aggregates in self - consolidating concrete.* University of Texas. 362 p.

Kruyt, N. P.; Rothenburg, L. 2004. Kinematic and static assumptions for homogenization in micromechanics of granular materials, *Mechanics of Material*s 36: 1157–1173.

Lacey, S. M. 2003. *PhD*: *Ray and Wave Dynamics in three dimensional asymmetric optical resonator*s. University of Oregon. 201 p.

Lagree, P. Y.; Staron, L.; Popinet, S. 2011. The granular column collapse as a continuum: validity of a two–dimensional Navier–Stokes model with a μ(I)-rheology, *Journal of Fluid Mechanics* 686: 378–408.

Latzel, M. 2003. *PhD: From microscopic simulations towards a macroscopic description of granular media*. Institut fur Computeranwendungen 1 der Universitat Stuttgart. 172 p.

Lechenault, F.; da Cruz, F.; Dauchot, O.; Bertin, E. 2006. Free volume distributions and compactivity measurement in a bidimensional granular packing, *J. Stat. Mech*.: 17 p.

Lecture notes: physics 8.421 [interaktyvus]. 2004. Massachusetts Institute of Technology [žiūrėta 2011-07-20]. Prieiga per internetą: http://web.mit.edu/pcappell/www/22.51/Resonance.pdf

Levitt, M. H. 2008. *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance. 2nd ed.* John Wiley & Sons. 752 p.

Lhotka, C. 2008. *PhD: Nekhoroshev stability in the elliptic restricted three body problem. The 1:1 resonance in the Sun-Jupiter system*. Universitat Wien. 150 p.

Lichtenberg, A. J.; Lieberman, M. A. 1992. *Regular and chaotic dynamics. Second edition*. New York: Springer-Verlag. 716 p.

Luo, A. C. J.; Guo, Y. 2009. Motion switching and chaos of a particle in a generalized Fermi-acceleration oscillator*, Math. Probl. Eng*.: 40 p.

Magnetic domain [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2011-12-05]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Magnetic_domain

Majumdar, S. N.; Kearney, M. J. 2007. Inelastic collapse of a ball bouncing on a randomly vibrating platform, *Physical Review E* 76(3): 31 p.

Makse, H. A.; Brujic, J.; Edwards, F. S. 2004. Statistical mechanics of jammed matter, *In The Physics of Granular Media*: 45–86.

Mason, G. 1968. Radial distribution functions from small packings of spheres, *Nature* 217: 733–734.

Mefisto. Materializmas, empiriokriticizmas, loginis pozityvizmas, kritinis racionalizmas ir šiuolaikinio marksizmo problematika [interaktyvus]. 2010. *Marksistai* [žiūrėta 2012-02-03]. Prieiga per internetą: http://marksistai.lt/skaityti/mefisto-materializmas-empiriokriticizmas-loginis-pozityvizmas-kritinis-racionalizmas-ir-siuolaikinio-marksizmo-problematika

Messerschmidt, U. 2010. *Dislocation dynamics during plastic deformation*. Berlin: Springer-Verlag. 503 p.

Mindlin, R.D.; Deresiewicz, H. 1953. Elastic spheres in contact under varying oblique forces, *Journal of Applied Mechanics* 20: 327–344.

Mokslo ribotumas: Dievas, Giodelis ir gravitacija [interaktyvus]. *Vartiklis* [žiūrėta 2012-01-03]. Prieiga per internetą: http://www.spauda.lt/science/godel.htm

Moon, F. C. 2004. *Chaotic vibrations, an introduction for applied scientists and engineers*. New York: John Wiley & Sons. 318 p.

Muller, T.; Grave, F. *Motion4D - A library for lightrays and timelike worldlines in the theory of relativity* [interaktyvus]. Institut fur Visualisierung und Interaktive Systeme [žiūrėta 2011-12-10]. Prieiga per internetą: http://www.vis.uni-stuttgart.de/~muelleta/Motion4D/

Munjiza, A. 2004. *The combined finite-discrete element method*. Chichester: John Wiley & Sons. 350 p.

Munuzuri, A. P.; Dolnik. M.; Zhabotinsky, A. M.; Epstein, I. R. 1999. Control of the chlorine dioxide-iodine-malonic acid oscillating reaction by illumination, *J. Am. Chem. Soc*. 121: 8065–8069.

Neishtadt, A. *Lectures for mathematics access grid instruction and collaboration* [interaktyvus]. 2007. *Lectures on Dynamical Sytems* [žiūrėta 2012-02-06]. Prieiga perinternetą: www.iki.rssi.ru/seminar/virtual/an_part2.pdf

Nielsen, L. F. 1996. *Composite analysis of concrete. Creep, relaxation, and eigenstrain/stress.* Department of structural engineering and materials. Technical University of Denmark. Series R. No. 13. 49 p.

Nijboer, L. W. 1948. *Plasticity as a factor in the system of dense bituminous road carpet*. Elsevier Publishing Company.

Nyquist-Shannon sampling theorem [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-01-04]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Nyquist%E2%80%93Shannon_sampling_theorem

Norman, E. B. *Introduction to imaging* [interaktyvus]. 2010. Department of Nuclear Engineering, University of California [žiūrėta 2012-01-12]. Prieiga per internetą: http://inst.nuc.berkeley.edu/NE107/Lectures/MRI_II_NMR_NE107_Fall10.pdf

Norton, J. D. *Einstein for everyone* [interaktyvus]. 2012. [žiūrėta 2011-11-15]. Prieiga per internetą: http://www.pitt.edu/~jdnorton/teaching/HPS_0410/index.html

Oda, M.; Iwashita, K. 1999. Mechanics of granular materials: an introduction, *A. A. Balkema*: 265–270.

Ott, E. 2002. *Chaos in dynamical systems*, *2nd ed.* Cambridge University Press. 392 p.

Penny, R. K.; Marriot, D. L. 1995. *Design for creep*, *2nd ed.* London: Chapman & Hall. 437 p.

Percival, I.; Richards, D. 1982. *Introduction to dynamics.* Cambridge University Press. 237 p.

Phasor [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2012-01-07]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/Phasor

Philippe, P.; Bideau, D. 2003. Granular medium under vertical tapping: Change of compaction and convection dynamics around the liftoff threshold. *Phys. Rev. Lett*. 91(10).

Pikovsky, A.; Zaikin, A. 2002. System size stochastic and coherence resonance. *CP665, Unsolved problems of noise and fluctuations. Third International conference*. 8 p.

Poškus, A. *Elektronų sukininio rezonanso tyrimas. Laboratorinis darbas Nr. 3* [interaktyvus]. 2009. Vilniaus universitetas [žiūrėta 2012-01-04]. Prieiga per internetą: http://www.kkek.ff.vu.lt/uploads/atomo_ir_branduolio_fizikos_laboratoriniai/nr03.pdf

Poulsen, S. K. 2009. *M.Sc: Tidal deformation of the solid earth - a finite difference discretization*. Copenhagen: Niels Bohr Institute. 116 p.

Плугин, А. А.; Плугин, А. Н.; Калинин, О. А.; Романенко, А. В.; Забияка, А. А. 2009. *Бетоны и растворы для восстановления эксплуатационных свойств транспортных сооружений* [Plugin, A. A. *et al*. Betonai ir skiediniai transporto statinių eksploatacinių savybių atstatymui]. Украинская государственная академия железнодорожного транспорта г. Харьков, Украина. УДК 691.32.

Principal value [interaktyvus]. *Wolfram MathWorld* [žiūrėta 2012-01-06]. Prieiga per internetą: http://mathworld.wolfram.com/PrincipalValue.html

Rae, A. I. M. 2005. *Quantum physics. A beginner's guide*. Oneworld Publications. 235 p.

Reitz, M. 2011. *BSc.: The symmetries of the Kepler problem*. University of Amsterdam. 24 p.

Rindler, W. 1991. *Introduction to special relativity*. Oxford University Press. 192 p.

Ropolas, A. Nimish Biloria - Informacija svarbu [interaktyvus]. 2012. Archata [žiūrėta 2012-02-25]. Prieiga per internetą: http://archata.lt/?p=5073

Roussel, N.; Stefani, C; Leroy, R. 2005. From mini-cone test to Abrams cone test: measurement of cement-based materials yield stress using slump flow, *Cement and Concrete Research* 35: 817–822.

Roussel, N. 2006. A theoretical frame to study stability of fresh concrete*, Mater. Struct.* 39(1): 81–91.

Roussel, N.; Geiker, M. R.; Dufour, F.; Thrane, L. N.; Szabo, P. 2007. Computational modeling of concrete flow: General reviw. *Cem. Concr. Res*. 37: 1298–1307.

Rowe, P. W. 1962. The stress-dilatancy relation for static equilibrium of an assembly of particles in contact, *Proc. Roy. Soc. A*. 269: 500–527.

Rudžionis, Ž.; Ivanauskas, E.; Navickas, A. A. Application of new investigation methods for rheological and technological properties of self compacting concrete prognosis [interaktyvus]. 2007. *Technika* [žiūrėta 2010-12-03]. Prieiga per internetą: http://leidykla.vgtu.lt/conferences/MBM_2007/1pdf/Rudzionis.pdf

Salomon, D.; Zhai, H. *Asphalt binder flow activation energy and its significance for compaction effort* [interaktyvus]. 2006. *Pavement Preservation Systems* [žiūrėta 2011-07-03]. Prieiga per internetą: http://www.technopave.com/publications/Flow-Activation-Energy-and-Compaction-Eurobitumen-2004.pdf

Sailer, F. X. H. 2006. *PhD: Controlling excitable media with noise*. Berlin: Humboldt-Universitat. 148 p.

Sengupta, A. 2010. Strain localization in geomaterials in nature. Laboratory Tests and Numerical Analyses. *Current Science* 98(9): 1195–1201.

Schlesner, J.; Zykov, V. S.; Brandtstadter, H.; Gerdes, I.; Engel, H. 2008. Efficient control of spiral wave location in an excitable medium with localized heterogeneities, *New Journal of Physics* 10: 17 p.

Schuster, H. G.; Just, W. 2005. *Deterministic chaos. An introduction. Fourth, revised and enlarged edition.* Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 300 p.

Schuster, H. G. *Handbook of chaos control*. 1999. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 691 p.

Scott, G. D. 1962. Packing of spheres: packing of equal spheres. *Nature* 188: 908–909.

Shokef, Y. 2006. *PhD: Thermodynamic analogines in granular materials.* Israel: Institute of Technology. 84 p.

Single particle dynamics [interaktyvus]. *Magnetospheric theory and simulation* [žiūrėta 2012-01-12]. Prieiga per internetą: http://how.gi.alaska.edu/ao/basic_plasma/script/chapter02.pdf

Smolin, L. 2006. *The trouble with physics. The rise of string theory, the fall of a science, an what comes next.* Boston: Houghton Mifflin company. 414 p.

Sobolev, K.; Amirjanov, A.; Hermossilo, R.; Lozano, F. C. *The modeling of dense packing of aggregates as an approach to optimizing the proportioning of concrete mixtures* [interaktyvus]. 2004. *National Stone, Sand & Gravel Association* [žiūrėta 2010-10-07]. Prieiga per internetą: http://aftre.nssga.org/Symposium/2004-10.pdf

Stygų lauko teorija [interaktyvus]. 2007. *Respublikinė jogos mokykla* [žiūrėta 2012-01-05]. Prieiga per internetą: http://www.lev.lt/lt/painimas/mokslo-pasaulyje/910-fizika/62-styg-lauko-teorija.html

Stygų pasaulio paslaptys [interaktyvus]. 2006. *Zondas* [žiūrėta 2012-01-05]. Prieiga per internetą: http://www.astronomija.info/astropas/stygos.php

Strogatz, S. H. 1994. *Nonlinear dynamics and chaos*. *With application to physics, biology, chemistry and ngineering.* Perseus Books Publishing. 516 p.

Susskind, L.; Lindesay, J. 2005. *An introduction to black holes, information and the string. Theory of revolution. The holographic universe.* World Scientific Publishing Co. 199 p.

Swain, J. Gravitatomagnetic analogs of electric transformers [interaktyvus]. 2010. Cornell University Library [žiūrėta 2012-01-10]. Prieiga per internetą: http://arxiv.org/pdf/1006.5754v1.pdf

Tal, A. *Spins and their dynamics* [interaktyvus]. 2011. Assaf‘s Magnetic Resonance Pages [žiūrėta 2012-01-12]. Prieiga per internetą: www.assaftal.com/lecturenotes/lecture2.pdf

Tattersall, G. H. 1991. *Workability and quality control of concrete*. London: E & FN Spon. 268 p.

Tegzes, P. 2002. *PhD: Stability, avalanches, and flow in dry and wet granular materials*. Budapest: Eotvos University. 131 p.

Time dependent behaviour: creep [interaktyvus]. University of Washington [žiūrėta 2011-07-14]. Prieiga per internetą: *courses.washington.edu/me354a/chap8.pdf*

Tsuji, Y.; Tanaka, T.; Ishida, T. 1991. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, *Powder Technology* 71: 239–250.

Utsi, S. 2008. *PhD: Performance based concrete mix-design. Aggregate and micro mortar optimization applied on self-compacting concrete containing fly ash.* Sweden: Lulea University of Technology. 214 p.

Vineyard, G. H. 1957. Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes, *J. Phys. Chem. Solids* 3: 121–127.

Volkov, E. I.; Ullner, E. I.; Zaikin, A. A.; Kurths, J. 2003. Oscillatory amplification of stochastic resonance in excitable systems, *Physical review E* 68(2): 7 p.

Walton, K. 1987. The effective elastic moduli of a random packing of spheres, *J. Mech. Phys. Solids* 35: 213–226.

Wang, L. 2011. *Mechanics of asphalt microstructure and micromechanics*. New York: McGraw-Hill. 481 p.

Wang, D. 2007. *MSc.: Binder film thickness effect on aggregate contact behavior.* Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute and State University. 66 p.

Wijk, P. C. 2007. *B.Sc.: The Kerr-metric: describing rotating black holes and geodesics. Rijks universiteit* Groningen. 60 p.

World line [interaktyvus]. 2012. *Wikipedia* [žiūrėta 2011-12-20]. Prieiga per internetą: http://en.wikipedia.org/wiki/World_line

Wu, W. 2008. *PhD: Multiscale modeling and simulation of concrete and its constituent materials: from nano to continuum.* The University of Mississippi. 213 p.

Wudka, J. *Relativity, space-time and cosmology* [interaktyvus]. Virtual FCPN [žiūrėta 2011-10-15]. Prieiga per internetą: http://200.105.152.242/olimpiada/file.php/1/LIBROS_OLIMPIADAS/Textos%20de%20Astronomia%20y%20Astrofisica/Cosmology/Relativity,%20Space-Time%20And%20Cosmology%20-%20Wudka.pdf

Zaslavsky, G. M. 2008. *Hamiltonian chaos and fractional dynamics*. Oxford University Press. 436 p.

Zhang, N.; Rosato, A. D. 2006. Experiments and simulations on vibration induced densification of bulk solids, *KONA Powder and Particle Journal* 24: 93–103.

Zhong, X.; Chang, C. S. 1997. Modeling mechanical behavior of cemented granular materials, *Proc., 9th Int. Conf. of the Int. Assoc. for Comp. Methods and Advance in Geomechanics*: 975–980.

Zhou, J. 2004. *MSc.: Reduced model for particle laden flow.* Massachusetts Institute of Technology. 138 p.

PRIEDAI

A Priedas

Mišinio dalelių paviršiaus tekstūrų ir tūrinių gaubtinių sudarymo programos tekstas (MATLAB aplinka)

```
%*****************************************************************
%ERDVĖLAIKIS
%*****************************************************************

clc;

%----------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Dalelių padėties koordinačių failo įkėlimas
%----------------------------------------------------------------

%Įkeliamas galutinis dalelių padėčių failas
p_data_file_name = ['particles_position_18'];
p_data = load(p_data_file_name);

%Sukuriamos reikiamų matmenų matricos koordinačių saugojimui
[t,d] = size(p_data);
p_x = zeros(2048,t);
p_y = zeros(2048,t);
p_z = zeros(2048,t);
format long;

%Į atitinkamas matricas surašomos dalelių koordinatės
for time = 1 : t
    i = 0;
    for k_d = 3 : 3 : d
        i = i + 1;
        p_x(i,time) = p_data(time,k_d);
        p_y(i,time) = p_data(time,k_d + 1);
        p_z(i,time) = p_data(time,k_d + 2);
    end
end

%----------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Dalelių padėties koordinačių failo įkėlimas
%----------------------------------------------------------------
%----------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Laiko indeksas kaimyninėms dalelėms vaizduoti
%----------------------------------------------------------------

nghbr_time = 400;

%----------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Laiko indeksas kaimyninėms dalelėms vaizduoti
%----------------------------------------------------------------
```

```
%-----------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Skaičiuojamosios erdvės formavimas
%-----------------------------------------------------------------

plot_view = figure('Position',[30 30 300 600]);
plot_axes = axes(...
            'CameraPosition',[3.914 4.659 2.235],...
            'CameraTarget',[1 1 1],...
            'CameraUpVector',[-0.1749 -0.2085 0.9623],...
            'CameraViewAngle',7.496,...
            'DataAspectRatio',[1 1 1],...
            'PlotBoxAspectRatio',[1 1 6],...
            'Position',[-0.1 0.12 1.1 0.815],...
            'Parent',plot_view);
axis(plot_axes,[0 0.2 0 0.2 0 1.2]);
title(plot_axes,'Skaičiuojamoji erdvė');
xlabel('x, m');
ylabel('y, m');
zlabel('z, m');
view(plot_axes,[1 1.2 0.4]);
box(plot_axes,'on');
hold(plot_axes,'all');
camlight right;
plot_light = light(...
             'Position',[0.08465 0.3062 1.366],...
             'Style','local',...
             'Parent',plot_axes);

%-----------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Skaičiuojamosios erdvės formavimas
%-----------------------------------------------------------------
%-----------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Dalelių padėties koordinačių matricos formavimas
%         pasirinktu laiku
%-----------------------------------------------------------------

p_coord_n_t = [];
p_coord_n_t(:,1) = p_x(:,nghbr_time);
p_coord_n_t(:,2) = p_y(:,nghbr_time);
p_coord_n_t(:,3) = p_z(:,nghbr_time);

%-----------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Dalelių padėties koordinačių matricos formavimas
%         pasirinktu laiku
%-----------------------------------------------------------------
%-----------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Nagrinėjamos dalelės numeris
%-----------------------------------------------------------------

c_p = 130;
```

```
%-------------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Nagrinėjamos dalelės numeris
%-------------------------------------------------------------------
%-------------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Dalelių spindulių r failo įkėlimas
%-------------------------------------------------------------------

run('radiii');

%Nagrinėjamos dalelės spindulys
c_p_r = r(c_p);

%-------------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Dalelių spindulių r failo įkėlimas
%-------------------------------------------------------------------
%-------------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Kaimyninių dalelių vaizdavimas
%-------------------------------------------------------------------

[X1,Y1,Z1] = sphere(25);

%Matrica kaimyninių dalelių koordinatėms
p_coord_nghbr = [];

%Kaimyninių dalelių padėties ribos
p_coord_tol = 0.026;

%Kaimyninių dalelių vaizdavimas pagal pasirinktas ribas
i_nghbr = 0;
for i = 1 : 2048
    if(sqrt((p_coord_n_t(i,1) - p_coord_n_t(c_p,1))^2 + ...
       (p_coord_n_t(i,2) - ...
       p_coord_n_t(c_p,2))^2 + (p_coord_n_t(i,3) - ...
       p_coord_n_t(c_p,3))^2) <= p_coord_tol)
       surf(p_coord_n_t(i,1) + r(i) * X1, p_coord_n_t(i,2) + ...
       r(i) * Y1, p_coord_n_t(i,3) + r(i) * Z1,...
                            'EdgeColor','none',...
                            'FaceColor',[0 1 0],...
                            'FaceLighting','phong',...
                            'AmbientStrength',0.4,...
                            'SpecularStrength',0.4,...
                            'SpecularExponent',15,...
                            'SpecularColorReflectance',0.9,...
                            'FaceAlpha',0.6,...
                            'parent',plot_axes);
       hold on;
       i_nghbr = i_nghbr + 1;
       p_coord_nghbr(i_nghbr,1) = p_coord_n_t(i,1);
       p_coord_nghbr(i_nghbr,2) = p_coord_n_t(i,2);
       p_coord_nghbr(i_nghbr,3) = p_coord_n_t(i,3);
```

```
    end
end

%-------------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Kaimyninių dalelių vaizdavimas
%-------------------------------------------------------------------
%-------------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Dalelės padėties koordinačių ir greičio vektoriaus
%          kitimas laiko atžvilgiu
%-------------------------------------------------------------------

%Naudojamų duomenų failų skaičius
for data = 1 : 18
    %for i_env = 1 : 2048  %Naudojama tūrinės gaubtinės
                           %skaičiavimui

          %Dalelių padėčių matricų formavimas
          p_data = [];
          p_x = [];
          p_y = [];
          p_z = [];
          p_coord_c_t = [];

          %Įkeliami dalelių padėčių failai
          p_data_file_name = ['particles_position_' num2str(data)];
          p_data = load(p_data_file_name);

          %Sukuriamos reikiamų matmenų matricos koordinačių
          %saugojimui
          [p_t,p_d] = size(p_data);
          p_x = zeros(2048,p_t);
          p_y = zeros(2048,p_t);
          p_z = zeros(2048,p_t);
          format long;

          %Į atitinkamas matricas surašomos dalelių koordinatės
          for time = 1 : p_t
              i = 0;
              for k_d = 3 : 3 : p_d
                  i = i + 1;
                  p_x(i,time) = p_data(time,k_d);
                  p_y(i,time) = p_data(time,k_d + 1);
                  p_z(i,time) = p_data(time,k_d + 2);
              end
          end

          %Nagrinėjamos dalelės koordinatės laiko atžvilgiu
          p_coord_c_t = zeros(p_t,3);
          for j = 1 : p_t
              p_coord_c_t(j,1) = p_x(c_p,j);
              p_coord_c_t(j,2) = p_y(c_p,j);
```

```
    p_coord_c_t(j,3) = p_z(c_p,j);
end

%Dalelių greičio vektorių matricų formavimas
v_data = [];
v_x = [];
v_y = [];
v_z = [];
v_coord_c_t = [];

%Įkeliami dalelių greičio vektorių failai
v_data_file_name = ['particles_velocity_' num2str(data)];
v_data = load(v_data_file_name);

%Sukuriamos reikiamų matmenų matricos greičio vektorių
%saugojimui
[v_t,v_d] = size(v_data);
v_x = zeros(2048,v_t);
v_y = zeros(2048,v_t);
v_z = zeros(2048,v_t);
format long;

%Į atitinkamas matricas surašomi dalelių greičio
%vektoriai
for time = 1 : v_t
    i = 0;
    for k_d = 3 : 3 : v_d
        i = i + 1;
        v_x(i,time) = v_data(time,k_d);
        v_y(i,time) = v_data(time,k_d + 1);
        v_z(i,time) = v_data(time,k_d + 2);
    end
end

%Nagrinėjamos dalelės greičio vektoriai
v_coord_c_t = zeros(v_t,3);
for j = 1 : v_t
    v_coord_c_t (j,1) = v_x(c_p,j);
    v_coord_c_t (j,2) = v_y(c_p,j);
    v_coord_c_t (j,3) = v_z(c_p,j);
end

%Koordinačių sistemos centras
cs_c = plot3(0,0,0,'ko','markerfacecolor','k');
hold on

%Greičio vektorių normalinių plokštumų perimetro taškų
%koordiančių matricų formavimas
m_dot_prtr_x = zeros(3,26);
m_dot_prtr_y = zeros(3,26);
m_dot_prtr_z = zeros(3,26);
```

```
%Greičio vektorių mastelis
vect_scale = 1500;

%Greičio vektoriai ir jų normalinės plokštumos
for j = 1 : v_t

    %Greičio vektorių vaizdavimas
    v_node = plot3(vect_scale * v_coord_c_t(j,1),...
                   vect_scale * v_coord_c_t(j,2),...
                   vect_scale * v_coord_c_t(j,3),...
                   '.','markerfacecolor','r');
    v_body = line([0 vect_scale * v_coord_c_t(j,1)],...
                  [0 vect_scale * v_coord_c_t(j,2)],...
                  [0 vect_scale * v_coord_c_t(j,3)],...
                  'color','r');
    hold on

    %Greičio vektorių pozicionavimas erdvėje
    set(v_node,'XData',get(v_node,'XData') + ...
        p_coord_c_t(j,1))
    set(v_node,'YData',get(v_node,'YData') + ...
        p_coord_c_t(j,2))
    set(v_node,'ZData',get(v_node,'ZData') + ...
        p_coord_c_t(j,3))

    set(v_body,'XData',get(v_body,'XData') + ...
        p_coord_c_t(j,1))
    set(v_body,'YData',get(v_body,'YData') + ...
        p_coord_c_t(j,2))
    set(v_body,'ZData',get(v_body,'ZData') + ...
        p_coord_c_t(j,3))

    %Taškinio perimetro formavimas
    [X1 Y1 Z1] = sphere(26);
    dot_prtr = zeros(27,3);
    dot_prtr(:,1) = c_p_r * X1(14,:);
    dot_prtr(:,2) = c_p_r * Y1(14,:);
    dot_prtr(:,3) = c_p_r * Z1(14,:);
    dot_prtr_pic = plot3(dot_prtr(:,1),...
                   dot_prtr(:,2),dot_prtr(:,3),...
                   '.','markerfacecolor','none',...
                   'markersize',0.1);

    %Greičio vektorių projekcijų ilgiai
    ln_1 = sqrt(v_coord_c_t(j,1)^2 + v_coord_c_t(j,3)^2);
    ln_2 = sqrt(v_coord_c_t(j,2)^2 + v_coord_c_t(j,3)^2);
    ln_3 = sqrt(v_coord_c_t(j,1)^2 + v_coord_c_t(j,2)^2);

    %Greičio vektorių komponenčių ilgiai
    ln_x = sqrt(v_coord_c_t(j,1)^2);
```

```
ln_y = sqrt(v_coord_c_t(j,2)^2);
ln_z = sqrt(v_coord_c_t(j,3)^2);

%Apatinės greičio vektoriaus projekcijos kampas su
%x asimi
if(ln_3 == v_coord_c_t(j,1)) | ...
  (-ln_3 == v_coord_c_t(j,1))
      alfa_x_1 = 0;
elseif(ln_3 == v_coord_c_t(j,2)) | ...
      (-ln_3 == v_coord_c_t(j,2))
      alfa_x_1 = 90;
elseif ln_3 == 0
      alfa_x_1 = 0;
else
      alfa_x_1 = atand((v_coord_c_t(j,2) * ln_y / ...
                        abs(v_coord_c_t(j,2))) / ...
                        (v_coord_c_t(j,1) * ln_x / ...
                        abs(v_coord_c_t(j,1))));
end

%x komponentės kampas su normalinės plokštumos
%sukimo ašimi
if alfa_x_1 == 0
      alfa_x = 90;
elseif alfa_x_1 == 90
      alfa_x = 90;
else
      alfa_x = 90 - ((v_coord_c_t(j,1) * ...
               v_coord_c_t(j,2) * alfa_x_1) /...
               abs(v_coord_c_t(j,1) * ...
               v_coord_c_t(j,2)));
end

%Normalinės plokštumos sukimo ašis
rot_axis = zeros(1,3);
if ln_3 == 0
      rot_axis(1,1) = 0;
      rot_axis(1,2) = 0;
      rot_axis(1,3) = 1;
elseif(ln_3 == v_coord_c_t(j,1)) | ...
      (-ln_3 == v_coord_c_t(j,1)) & ...
      (v_coord_c_t(j,3) == 0)
      rot_axis(1,1) = 0;
      rot_axis(1,2) = 1;
      rot_axis(1,3) = 0;
elseif(ln_3 == v_coord_c_t(j,2)) | ...
      (-ln_3 == v_coord_c_t(j,2)) & ...
      (v_coord_c_t(j,3) == 0)
      rot_axis(1,1) = 1;
      rot_axis(1,2) = 0;
      rot_axis(1,3) = 0;
```

```
elseif((v_coord_c_t(j,1) == 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,2) ~= 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,3) ~= 0))
      rot_axis(1,1) = 1;
      rot_axis(1,2) = 0;
      rot_axis(1,3) = 0;
elseif((v_coord_c_t(j,2) == 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,1) ~= 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,3) ~= 0))
      rot_axis(1,1) = 0;
      rot_axis(1,2) = 1;
      rot_axis(1,3) = 0;
else
      rot_axis(1,1) = v_coord_c_t(j,1);
      rot_axis(1,2) = - v_coord_c_t(j,2) * ...
                ln_x / abs(v_coord_c_t(j,2)) * ...
                tand(alfa_x);
end

%Normalinės plokštumos posūkio kampas
if ln_3 == 0
      gama = 0;
elseif(((ln_3 == v_coord_c_t(j,1)) | ...
        (-ln_3 == v_coord_c_t(j,1))) & ...
        (v_coord_c_t(j,3) == 0))
      gama = 90;
elseif(((ln_3 == v_coord_c_t(j,2)) | ...
        (-ln_3 == v_coord_c_t(j,2))) & ...
        (v_coord_c_t(j,3) == 0))
      gama = 90;
elseif((v_coord_c_t(j,1) == 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,2) ~= 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,3) ~= 0))
      gama = -(v_coord_c_t(j,2) * ...
               v_coord_c_t(j,3)) * (90 - ...
               atand(ln_z / ln_3)) / abs(...
               v_coord_c_t(j,2) * v_coord_c_t(j,3));
elseif((v_coord_c_t(j,2) == 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,1) ~= 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,3) ~= 0))
      gama = ((v_coord_c_t(j,1) * ...
               v_coord_c_t(j,3)) * ...
               (90 - atand(ln_z / ln_3)) / ...
               abs(v_coord_c_t(j,1) * ...
               tim_vcoord(j,3));
elseif((v_coord_c_t(j,3) == 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,1) ~= 0) & ...
       (v_coord_c_t(j,2) ~= 0))
      gama = -(v_coord_c_t(j,1) * ...
               v_coord_c_t(j,2)) * ...
               (90 - atand(ln_z / ln_3)) / ...
```

```
                        abs(v_coord_c_t(j,1) * ...
                        v_coord_c_t(j,2));
            else
                  gama = -(v_coord_c_t(j,1) * ...
                        v_coord_c_t(j,2) * ...
                        v_coord_c_t(j,3)) * ...
                        (90 - atand(ln_z / ln_3)) / ...
                        abs(v_coord_c_t(j,1) * ...
                        v_coord_c_t(j,2) * ...
                        v_coord_c_t(j,3));
            end

            %Matrica fazinės erdvės polinei diagramai formuoti
            f_e = zeros(v_t,2);
            f_e(j,1) = j;
            f_e(j,2) = gama;

            %Fazinės erdvės polinis grafikas
            %f_e_pol = polar(f_e(:,2),f_e(:,2)+90);
            %hold on;

            %Greičio vektoriaus normalinės plokštumos pasukimas
            rotation_axis = [rot_axis(1,1),...
                             rot_axis(1,2),rot_axis(1,3)];
            rotate(dot_prtr_pic,rotation_axis,gama,[0 0 0]);

            %Normalinės plokštumos pozicionavimas
            set(dot_prtr_pic,'XData',...
                get(dot_prtr_pic,'XData') + p_coord_c_t(j,1))
            set(dot_prtr_pic,'YData',...
                get(dot_prtr_pic,'YData') + p_coord_c_t(j,2))
            set(dot_prtr_pic,'ZData',...
                get(dot_prtr_pic,'ZData') + p_coord_c_t(j,3))

            %Normalinių plokštumų taškinių perimetrų
            %transformuotos(pasuktos) koordinatės
            m_x = get(dot_prtr_pic,'XData');
            m_y = get(dot_prtr_pic,'YData');
            m_z = get(dot_prtr_pic,'ZData');

            m_dot_prtr_x(j,:) = m_x(1,1:26);
            m_dot_prtr_y(j,:) = m_y(1,1:26);
            m_dot_prtr_z(j,:) = m_z(1,1:26);
        end

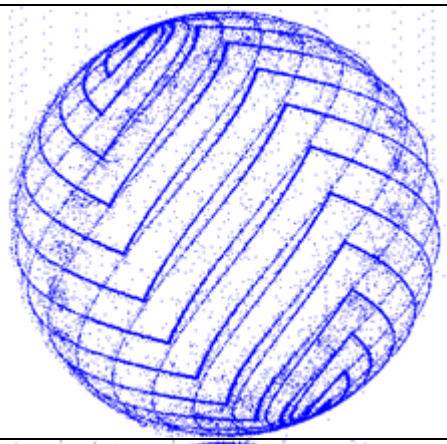
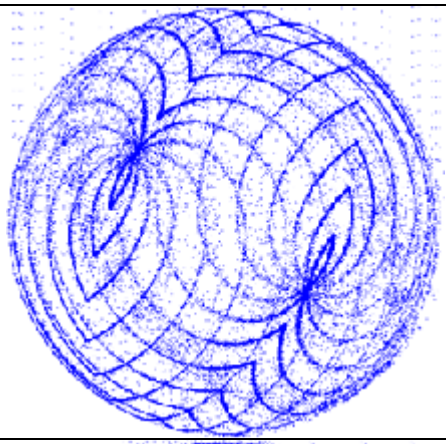
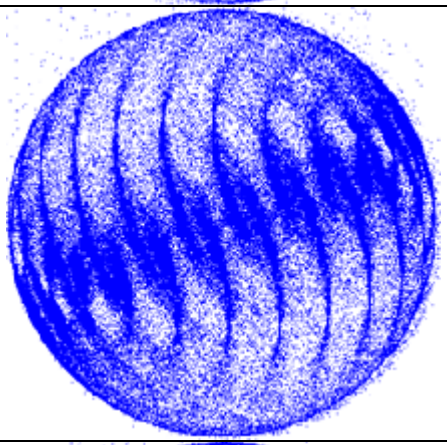
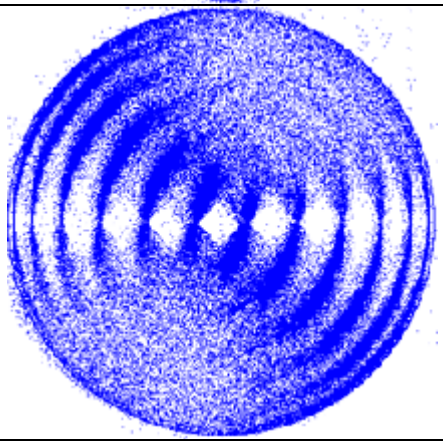
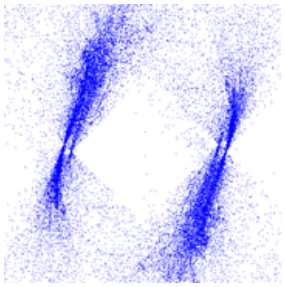
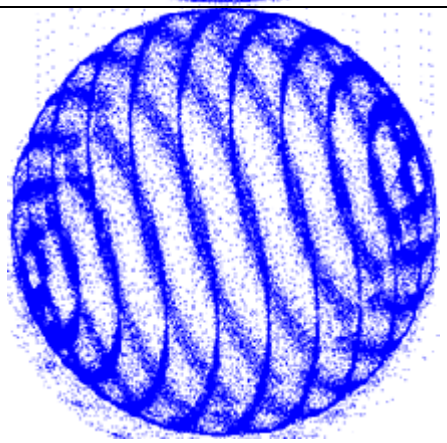
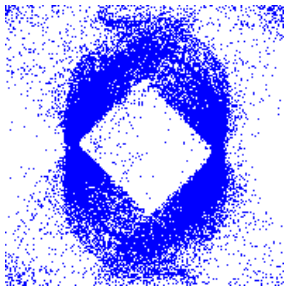
%-------------------------------------------------------------------
%[PRADŽIA] Greičio vektorių normalinių plokštumų tūrinė gaubtinė
%-------------------------------------------------------------------
%
%       sum_V = 0;
%       for j_env = 1 : (v_t - 1)
```

```
%
%            %Normalinių plokštumų perimetro taškų koordinačių
%            %matricos formavimas
%            env_cooord = zeros(52,3);
%
%            %Pirmoji normalinė plokštuma
%            env_coord(1:26,1) = m_dot_prtr_x(j_env,:);
%            env_coord(1:26,2) = m_dot_prtr_y(j_env,:);
%            env_coord(1:26,3) = m_dot_prtr_z(j_env,:);
%
%            %Antroji normalinė plokštuma
%            env_coord(27:52,1) = m_dot_prtr_x(j_env + 1,:);
%            env_coord(27:52,2) = m_dot_prtr_y(j_env + 1,:);
%            env_coord(27:52,3) = m_dot_prtr_z(j_env + 1,:);
%
%            %Gaubtinės koordinatės ir tūris
%            [Tri,dV] = convhulln(env_coord);
%            sum_V = sum_V + dV;
%
%            %Tūrinės gaubtinės vaizdavimas
%            for k_env = 1 : size(Tri,1)
%                point_count = Tri(k_env,[1 2 3 1]);
%                env_pic = patch(env_coord(point_count,1),...
%                                env_coord(point_count,2),...
%                                env_coord(point_count,3),...
%                                 [0 0 1],'LineStyle','none',...
%                                'FaceAlpha',0.6);
%            end
%            hold on
%        end
%
%        %Normalizuotų tūrių masyvas
%        M(i_env) = (sum_V / (4 / 3 * pi * r(i_env)^3));
% end
end

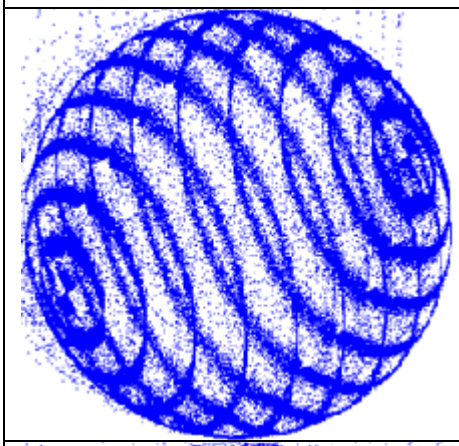
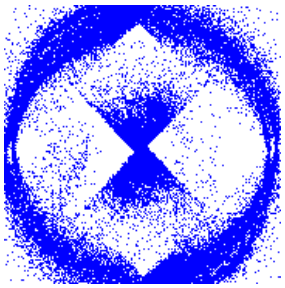
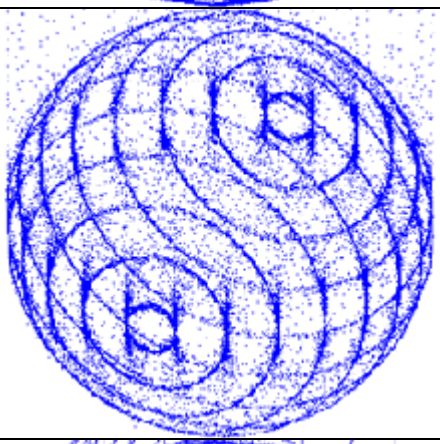
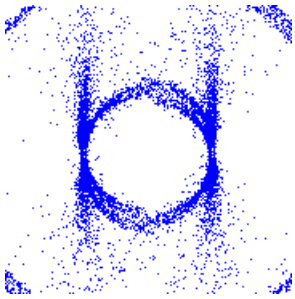
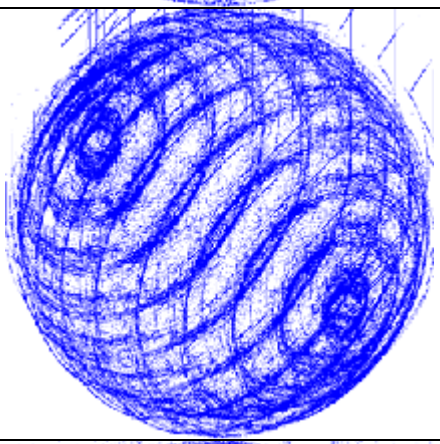
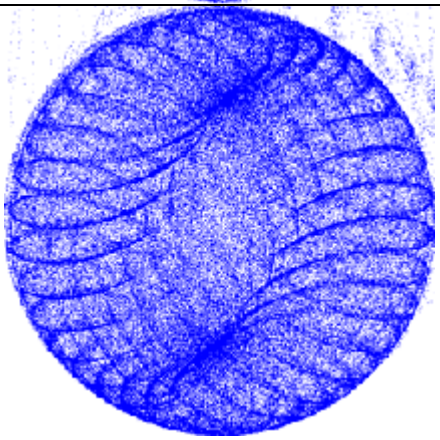
%-------------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Greičio vektorių normalinių plokštumų tūrinė gaubtinė
%-------------------------------------------------------------------
%-------------------------------------------------------------------
%[PABAIGA] Dalelės padėties koordinačių ir greičio vektoriaus
%          kitimas laiko atžvilgiu
%-------------------------------------------------------------------
```

B Priedas
Mišinių dalelių paviršiaus tekstūros

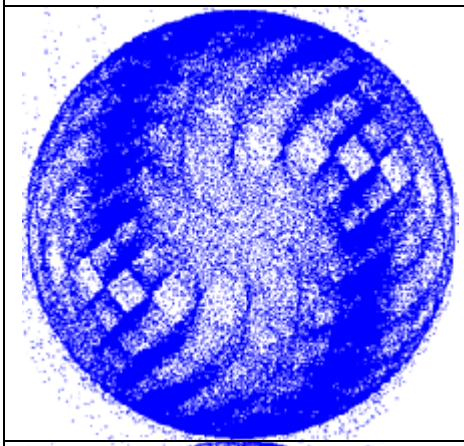
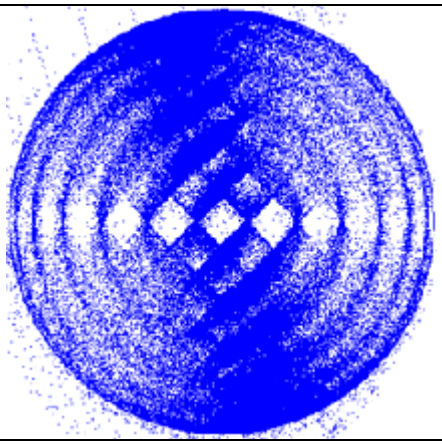
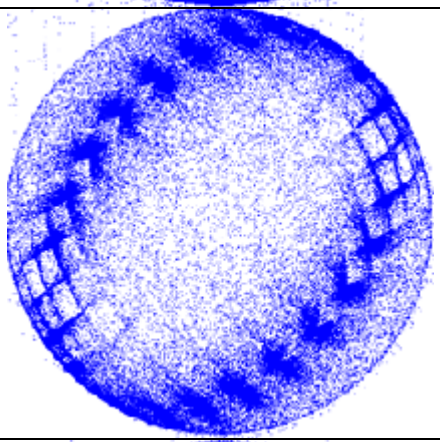
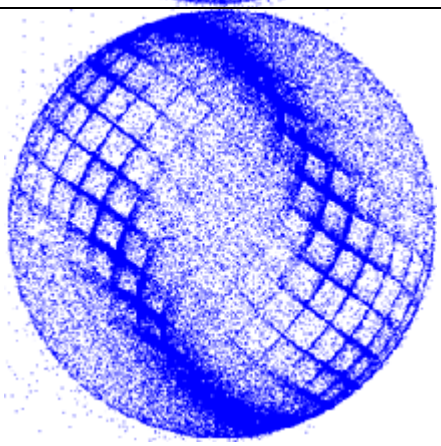
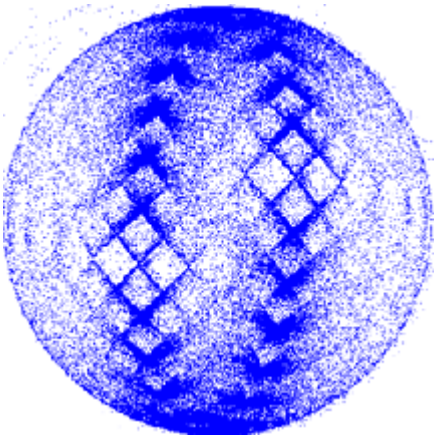
B.1 lentelė. Greičio vektorių normalinių plokštumų dalelių paviršiuose suformuotų tekstūrų pavyzdžiai

Pirmasis vaizdas	Antrasis vaizdas	Charakteringieji elementai
		–
		
	–	

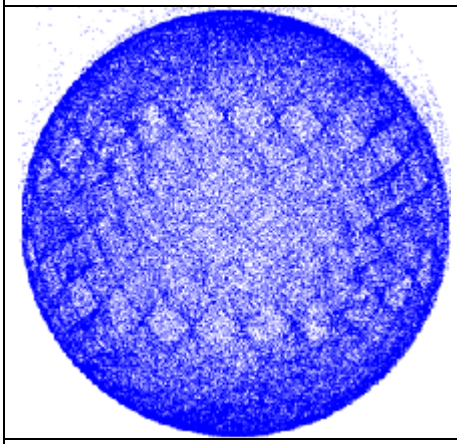
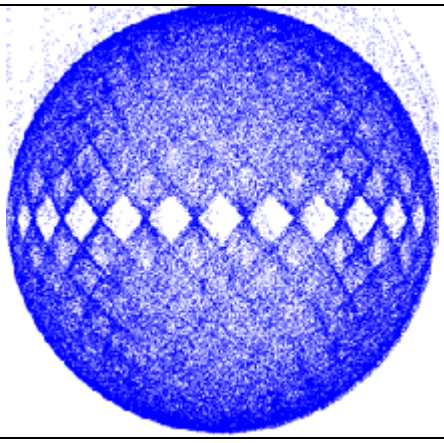
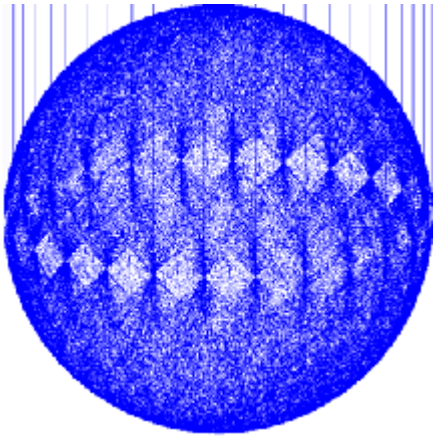
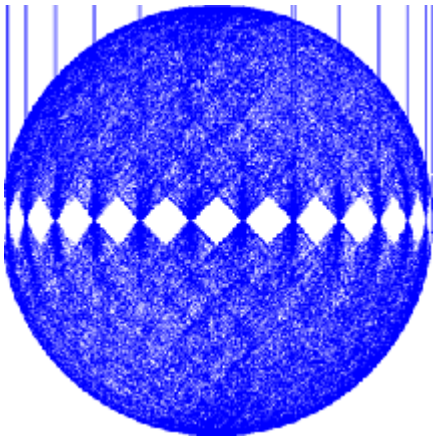
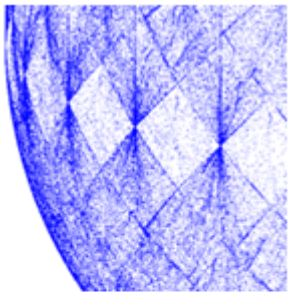
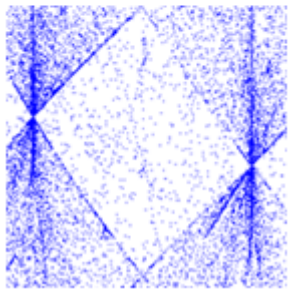
B.1 lentelės tęsinys

Pirmasis vaizdas	Antrasis vaizdas	Charakteringieji elementai
	–	
	–	
	–	–
	–	–

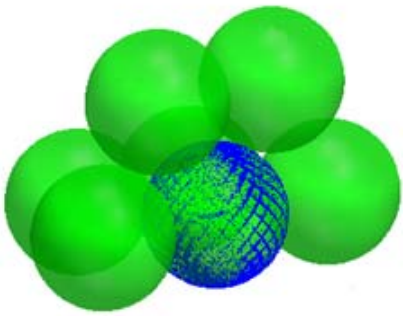
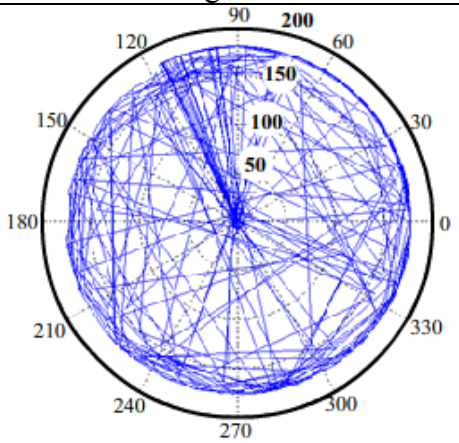
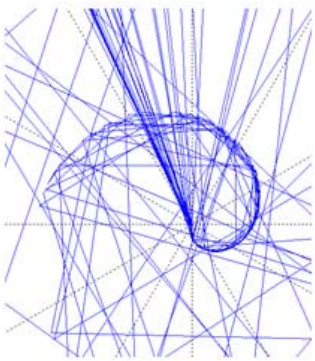
B.1 lentelės tęsinys

Pirmasis vaizdas	Antrasis vaizdas	Charakteringieji elementai
		–
	–	–
		–

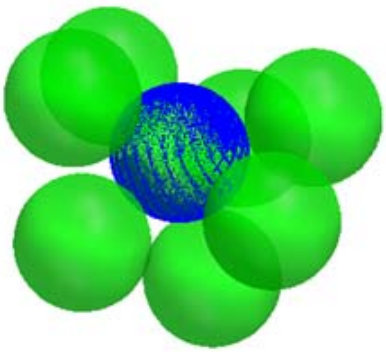
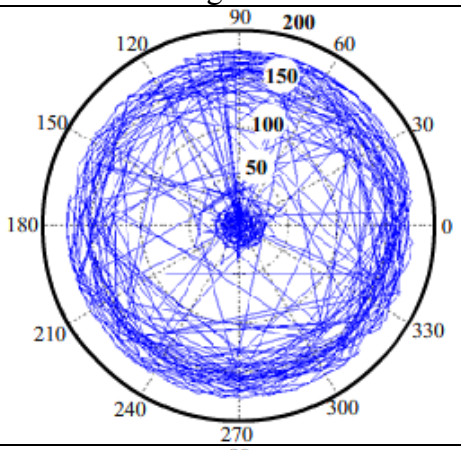
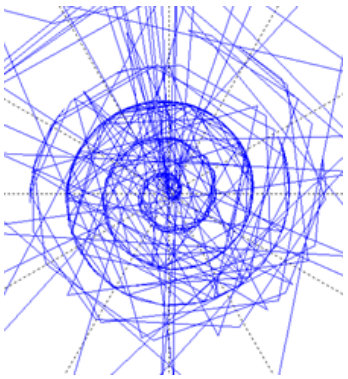
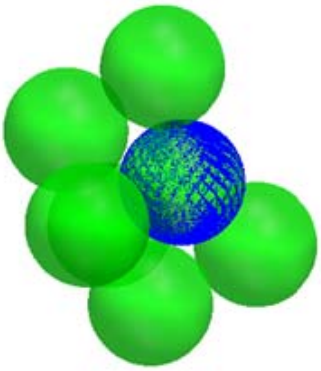
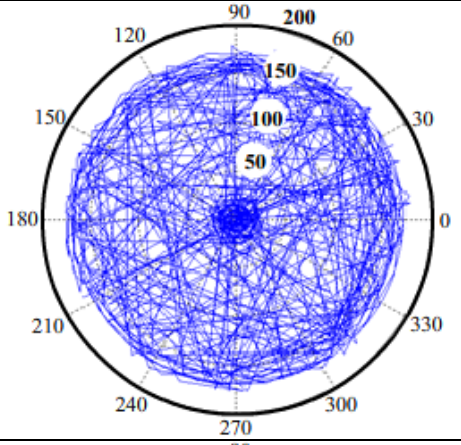
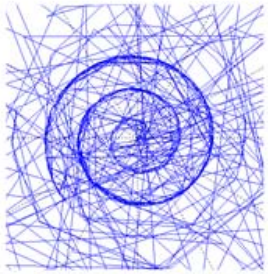
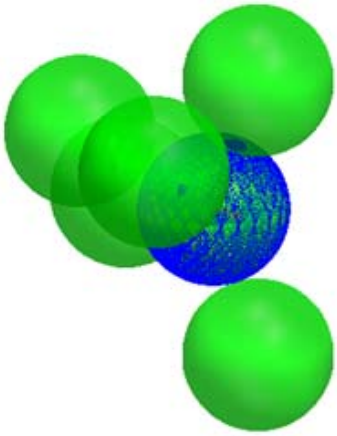
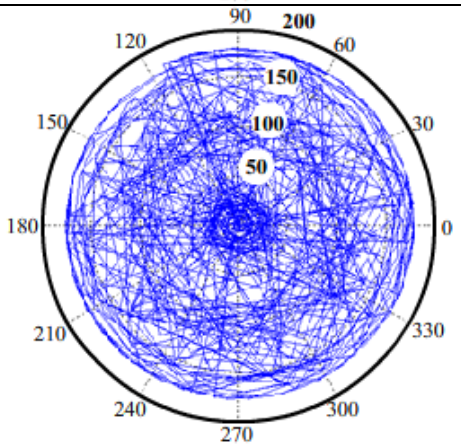
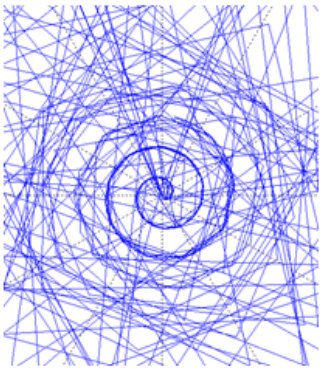
B.1 lentelės pabaiga

Pirmasis vaizdas	Antrasis vaizdas	Charakteringieji elementai
		–
		 

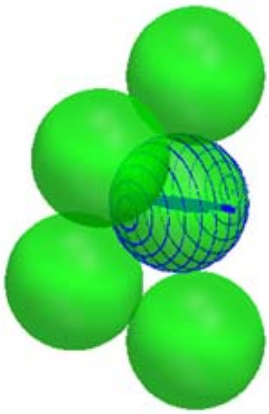
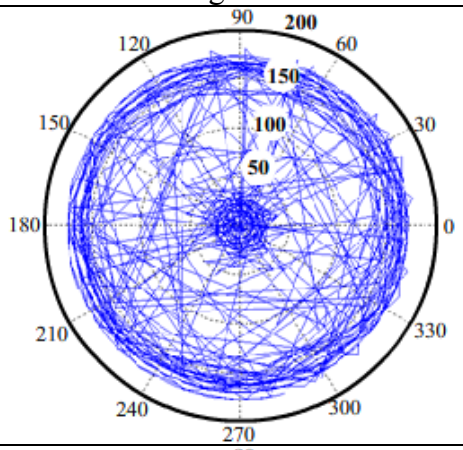
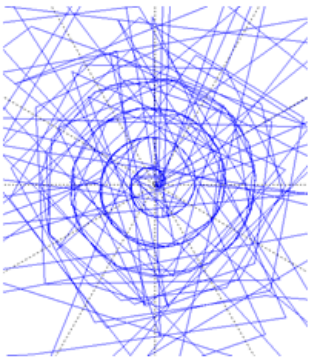
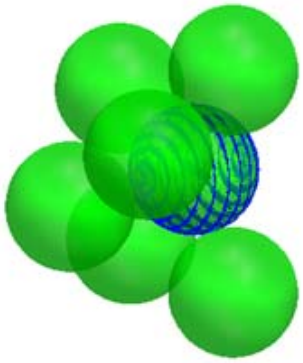
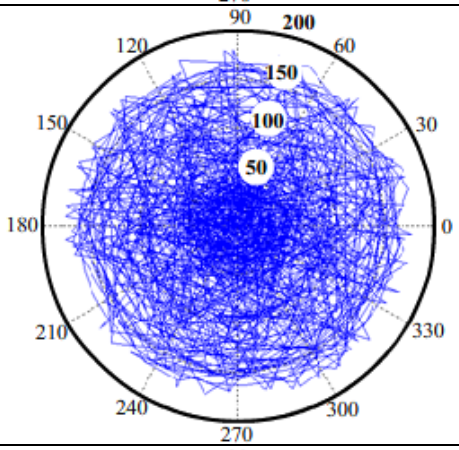
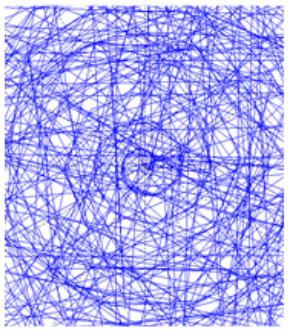
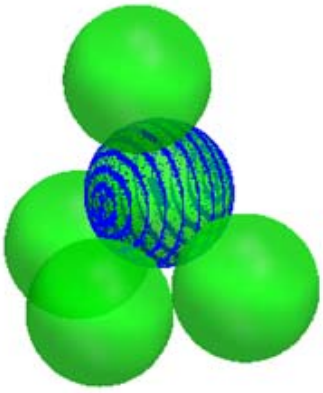
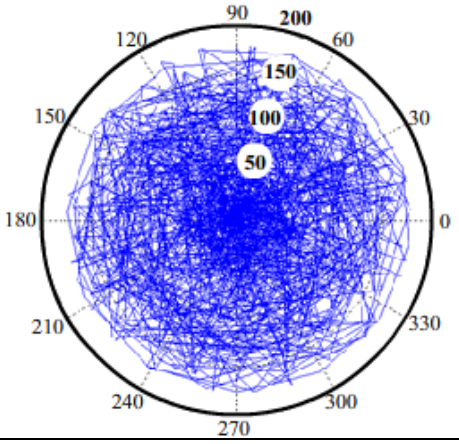
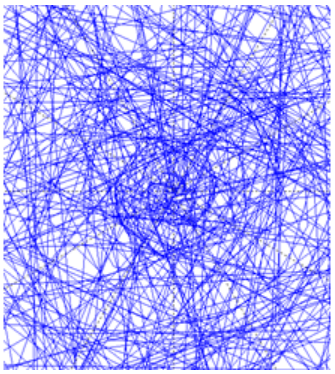
B.2 lentelė. Dalelių paviršiaus tekstūras atitinkančios fazinių trajektorijų polinės diagramos

Tekstūra	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
		

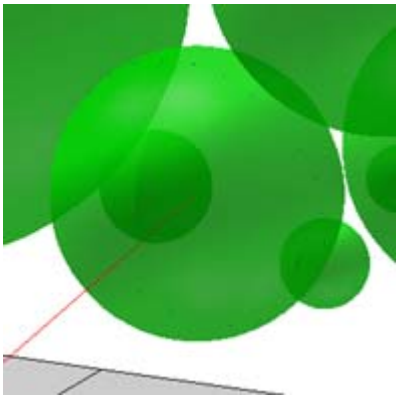
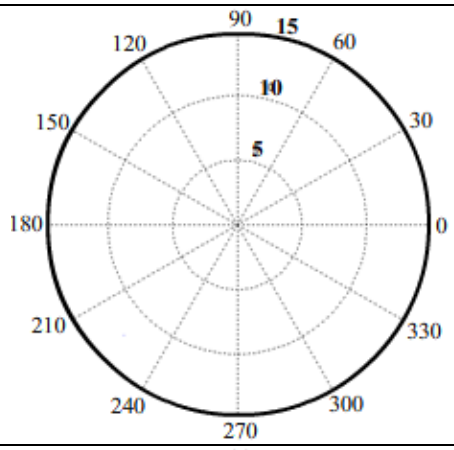
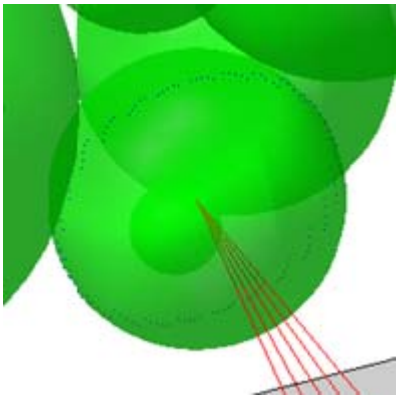
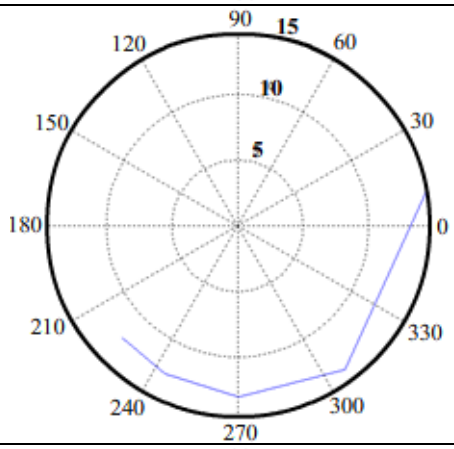
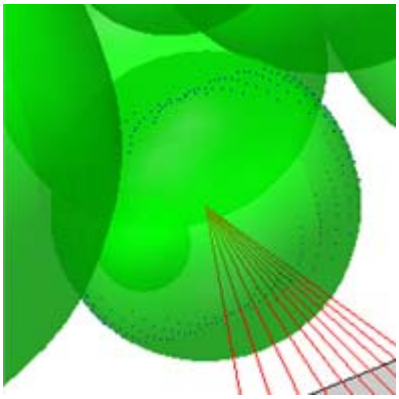
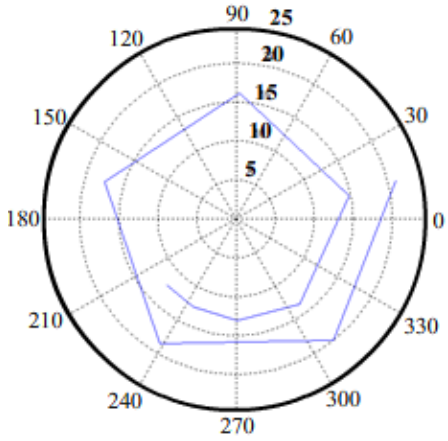
B.2 lentelės tęsinys

Tekstūra	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
		
		
		

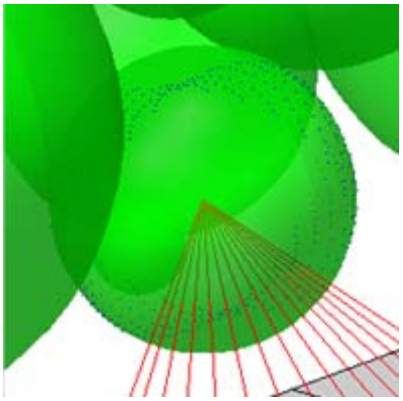
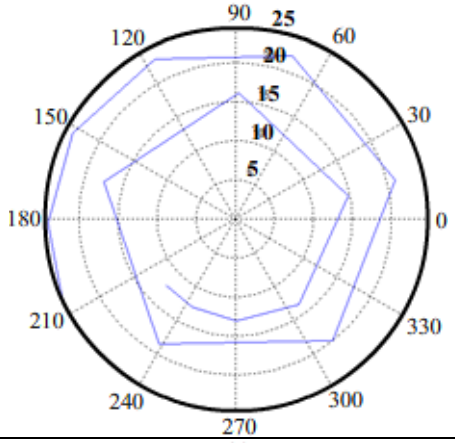
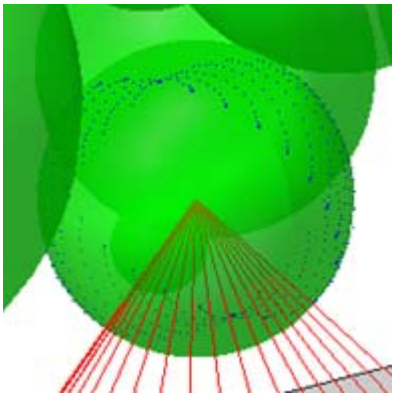
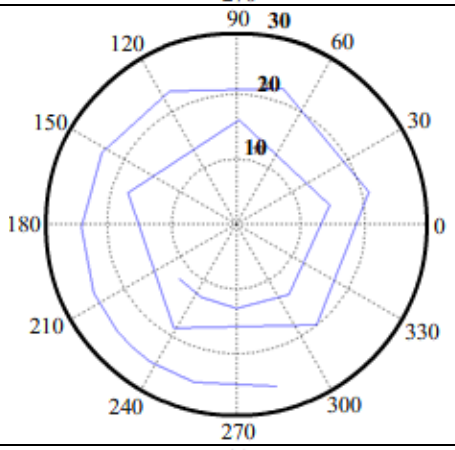
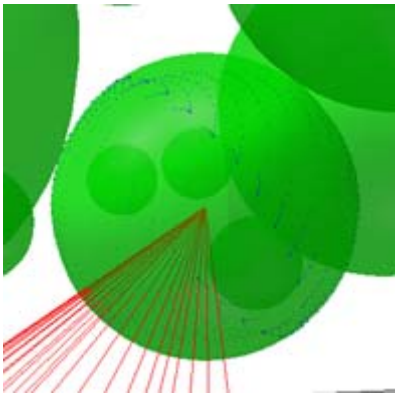
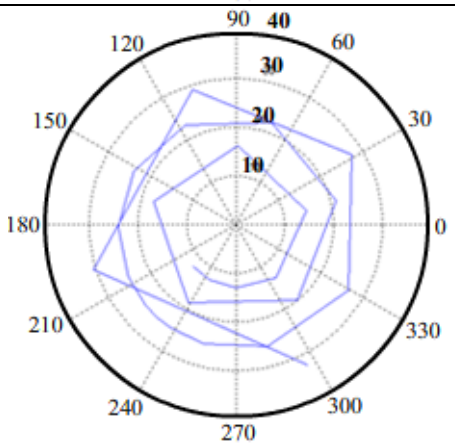
B.2 lentelės pabaiga

Tekstūra	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
		
		
		

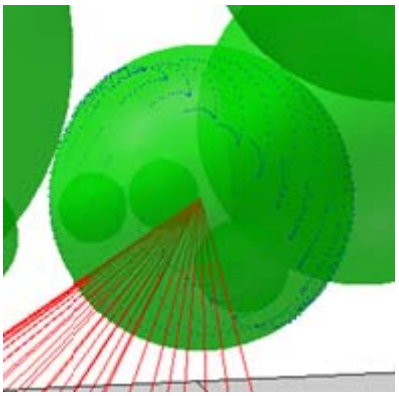
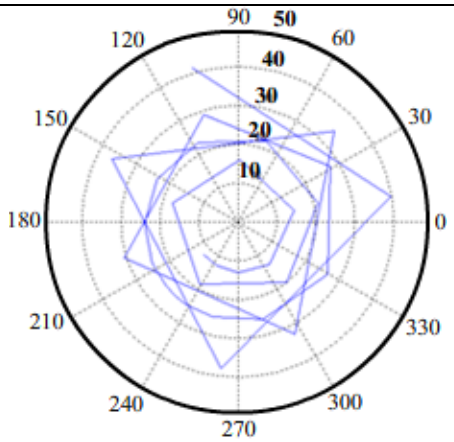
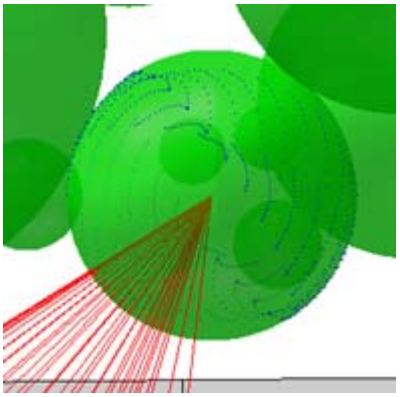
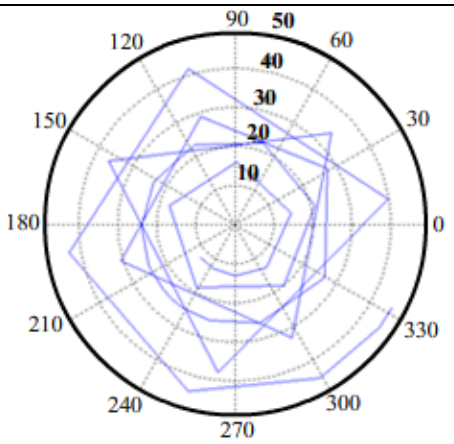
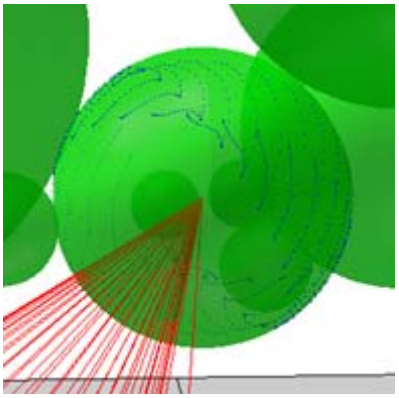
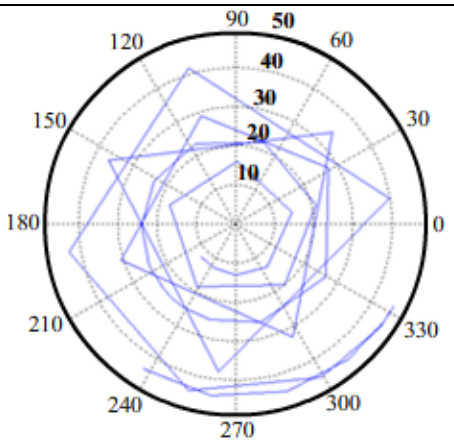
B.3 lentelė. Tekstūros formavimasis *i*-osios dalelės paviršiuje ir fazinės trajektorijos plėtotė

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
1			–
2			–
3			–

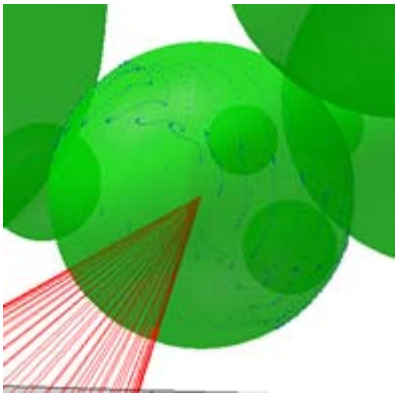
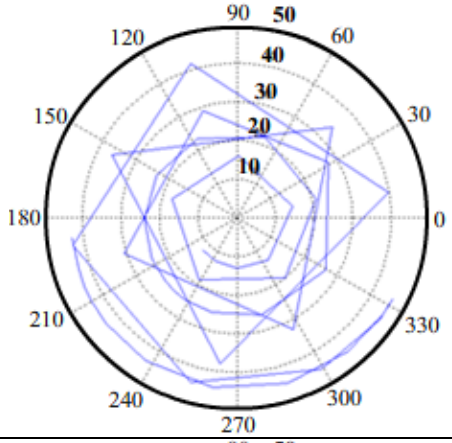
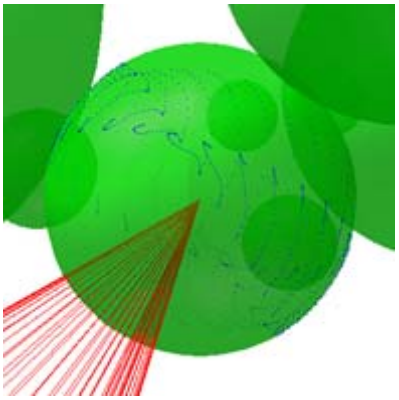
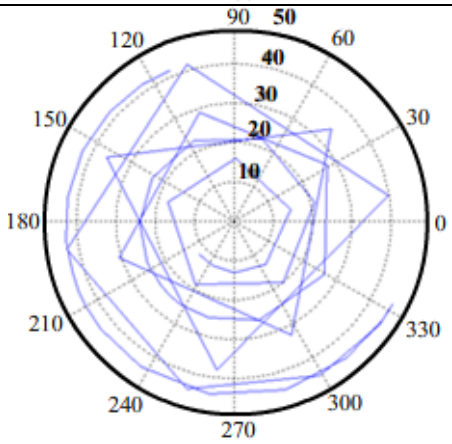
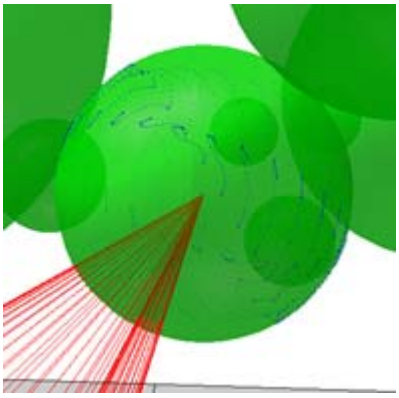
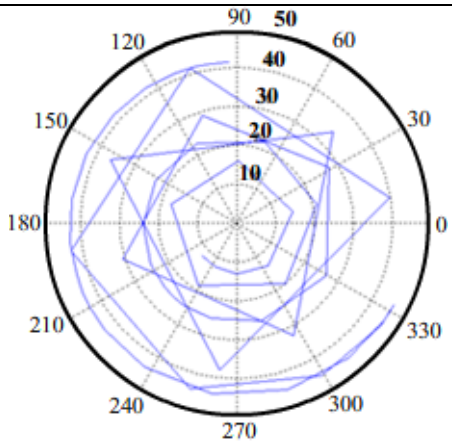
B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
4			–
5			–
6			–

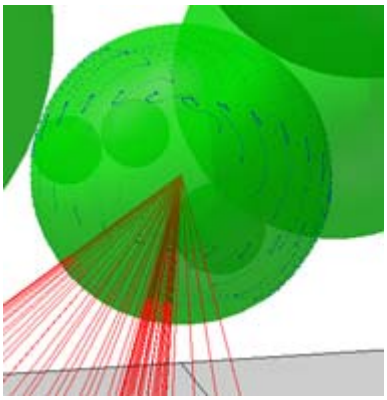
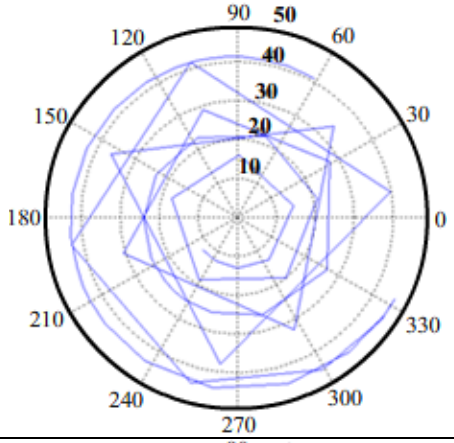
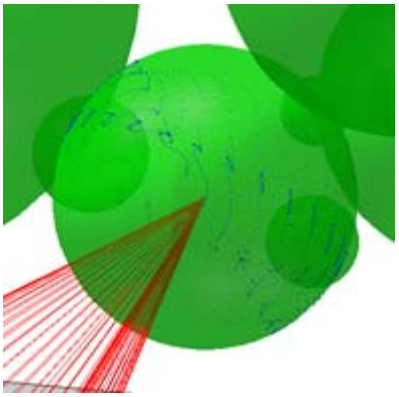
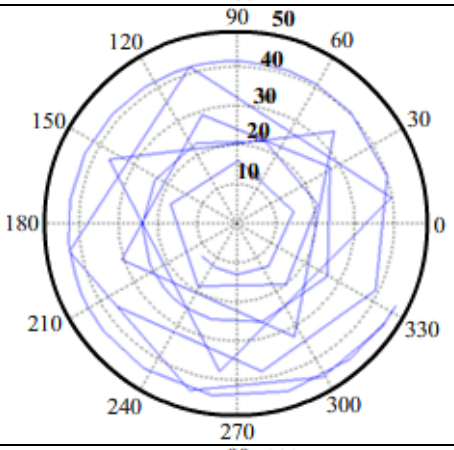
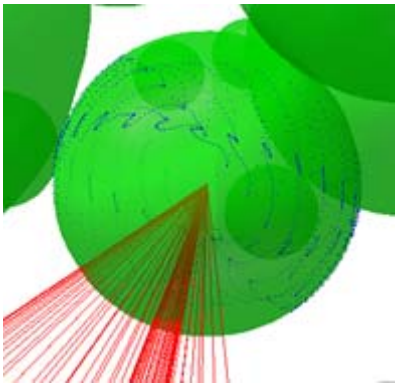
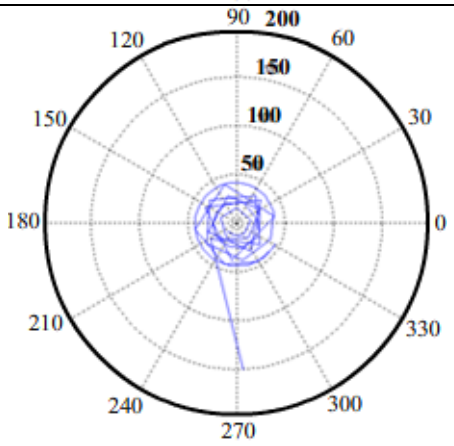
B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
7			–
8			–
9			–

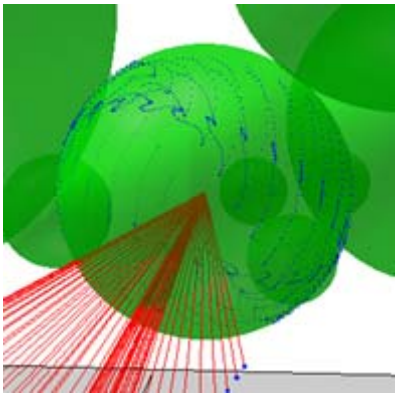
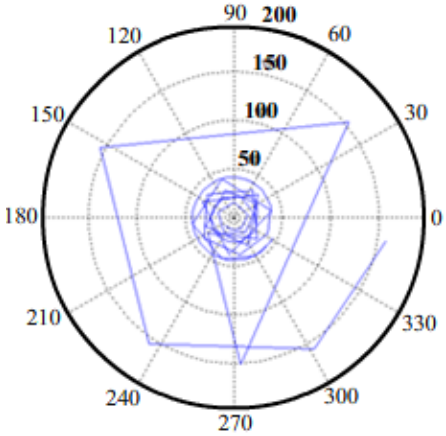
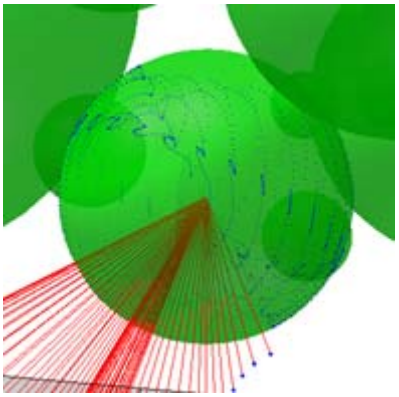
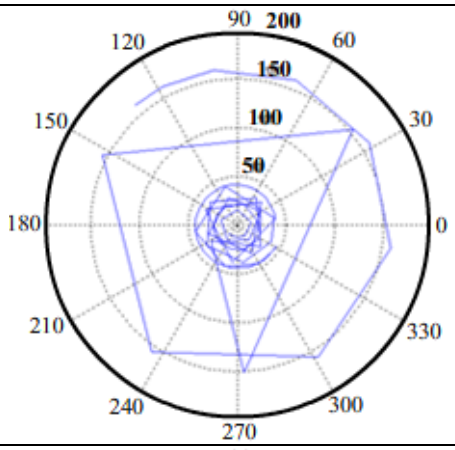
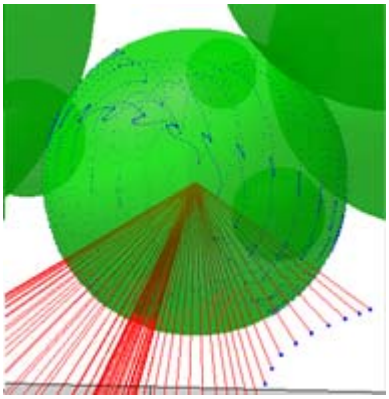
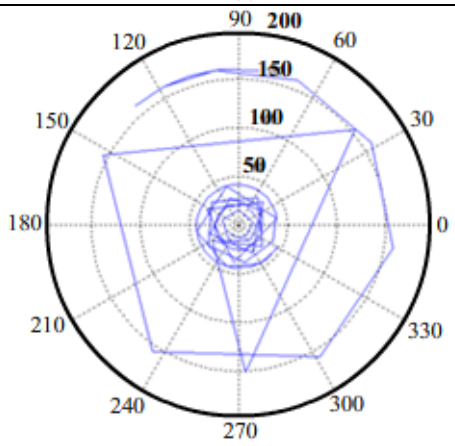
B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
10			–
11			–
12			–

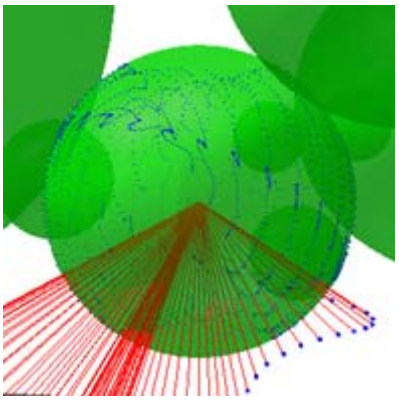
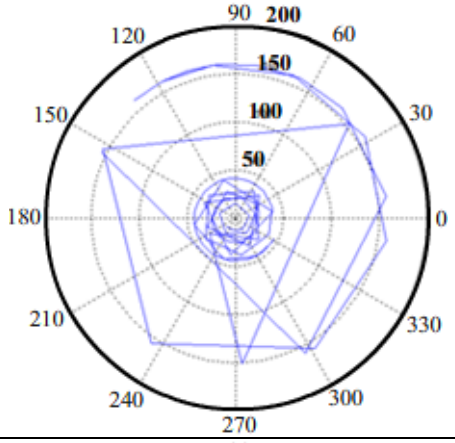
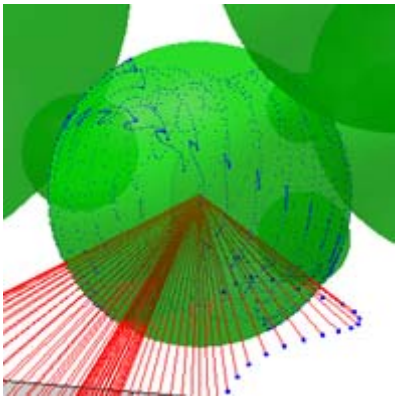
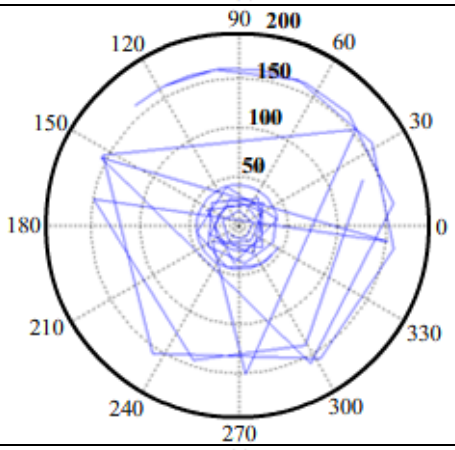
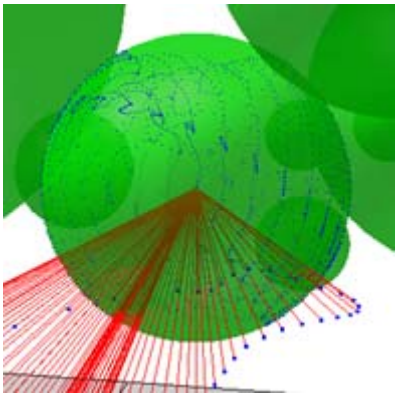
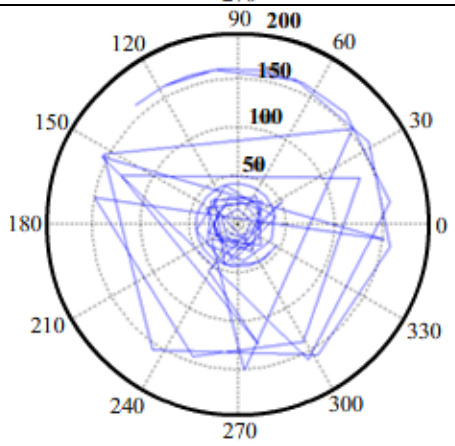
B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
13			–
14			–
15			–

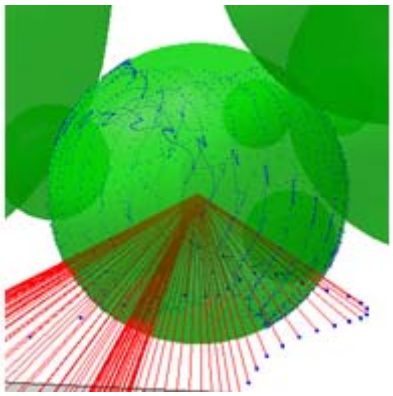
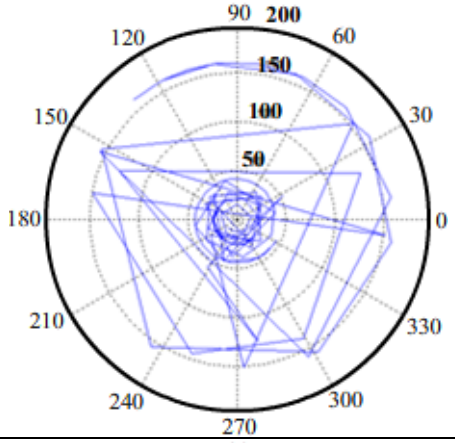
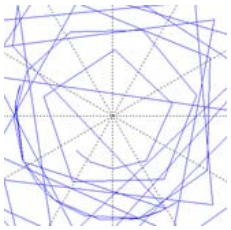
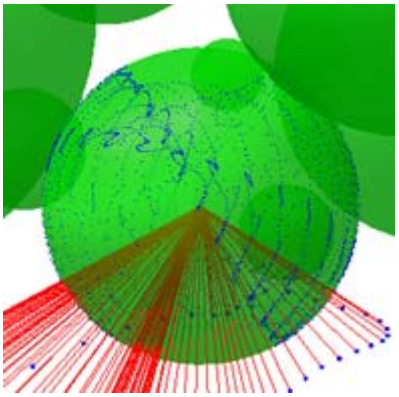
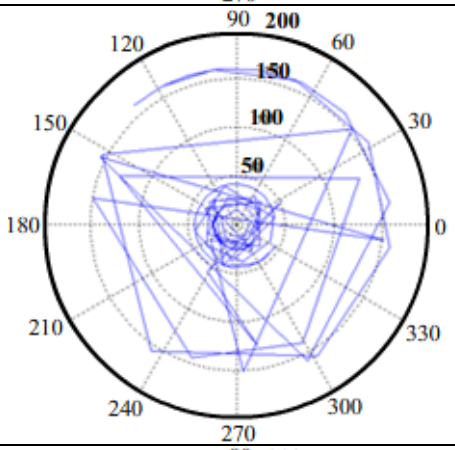
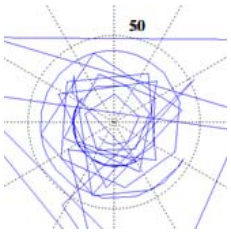
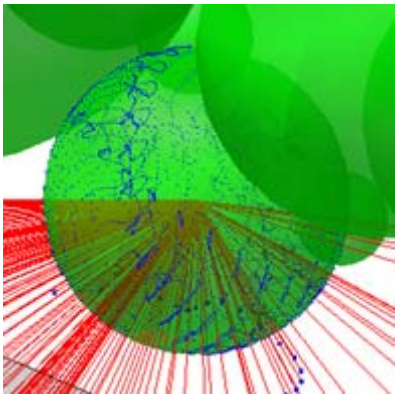
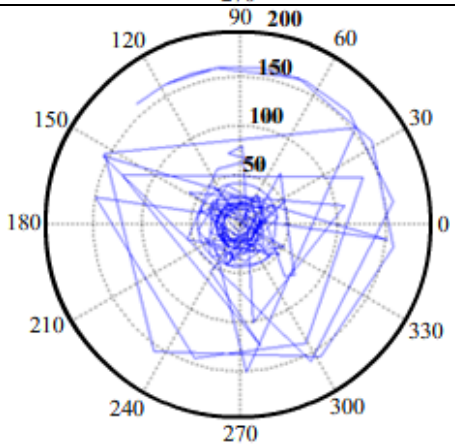
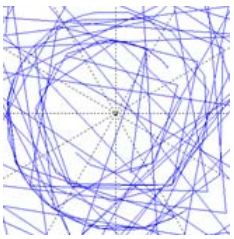
B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
16			–
17			–
18			–

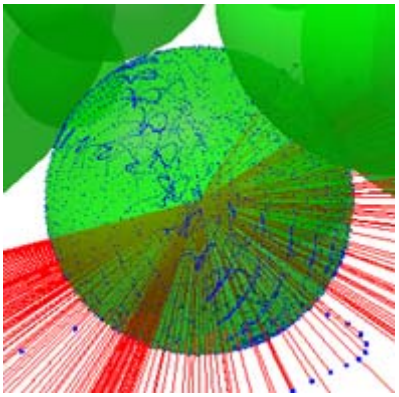
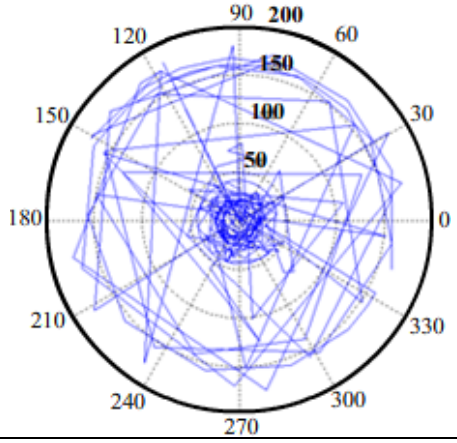
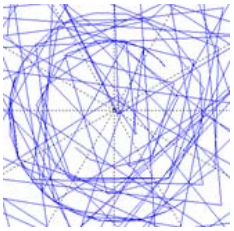
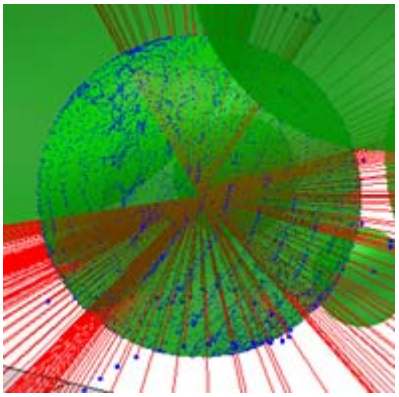
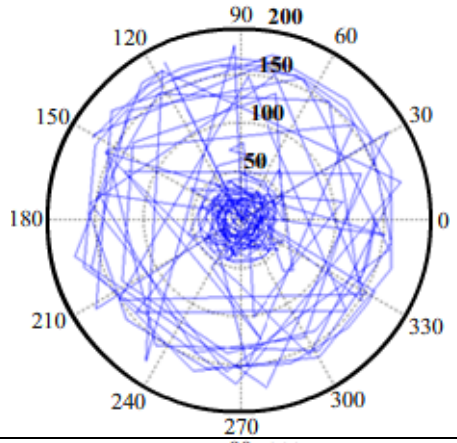
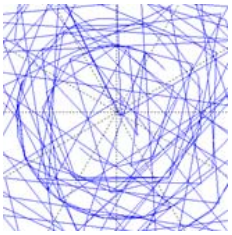
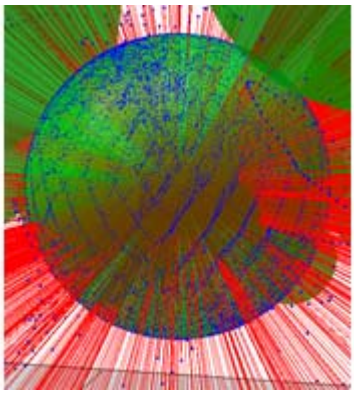
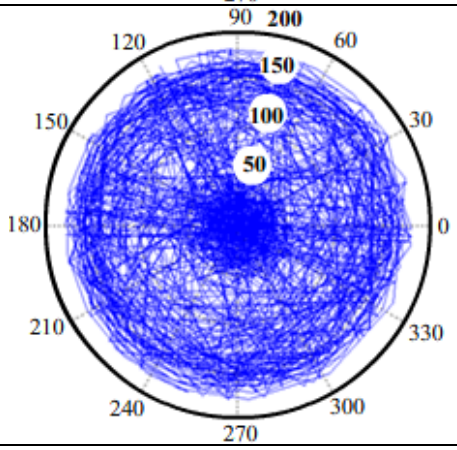
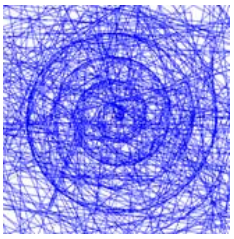
B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
19			–
20			–
21			–

B.3 lentelės tęsinys

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
22			
23			
24			

B.3 lentelės pabaiga

Laiko ind.	Tekstūros formavimasis	Fazinės trajektorijos polinė diagrama	Polinės diagramos centras
25			
26			
27			

C Priedas
Straipsnių kopijos

C.1. Daugiadispersio ir viendispersio dalelių mišinio elgsenos tyrimas. I dalis: struktūros charakterizavimas

Taylor & Francis
Taylor & Francis Group

ENGINEERING STRUCTURES AND TECHNOLOGIES
ISSN 2029-882X print / ISSN 2029-8838 online
2012 4(1): 16–28
doi:10.3846/2029882X.2012.677407

DAUGIADISPERSIO IR VIENDISPERSIO DALELIŲ MIŠINIO ELGSENOS TYRIMAS. I DALIS: STRUKTŪROS CHARAKTERIZAVIMAS

Gvidas Pocius[1], Robertas Balevičius[2]

Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lietuva
El. paštas: [1]gpocius@gmail.com (corresponding author); [2]robertas.balevicius@vgtu.lt

Įteikta 2011 11 22; priimta 2012 02 22

Santrauka. Diskrečiųjų elementų metodu modeliuota viendispersio ir daugiadispersio sferinių dalelių mišinio elgsena. Dėmesys skirtas mišinio mikro- ir makrostruktūros charakterizavimui, pasitelkiant dalelių dinaminio modeliavimo rodiklius. Pirmojoje straipsnio dalyje aptarta modeliavimo metodika ir grindžiamas gautųjų rezultatų korektiškumas, remiantis kontroliuojamaisiais mechaniniais būvio parametrais. Dalelių mišinio struktūrai charakterizuoti makrolygmeniu naudoti šie rodikliai: struktūros užimama tūrio dalis (tankumas), koordinacijos skaičius, dalelių kontaktinės jėgos. Aprašomas dalelių būsenų charakterizavimas taikant Hamiltono mechanikos principus.

Reikšminiai žodžiai: diskrečiųjų elementų metodas, daugiadispersis, viendispersis sferinių dalelių mišiniai, makrostruktūra, mikrostruktūra, kvazistatinis dalelių pusiausvyros būvis, Hamiltono mechanika, fazinė erdvė.

1. Įvadas

Daugiadispersių, viendispersių dalelių mišinių pagrindu pagamintų medžiagų įvairovė yra labai plati. Tai įvairios keramikos, betonai, gelžbetonio gaminiai, nanostruktūros ir kt.

Betonas – viena pagrindinių šiuolaikinės statybų industrijos medžiaga. Vienas pagrindinių jo komponentų yra cementas, kurio gamyba reikalauja ypač didelių energijos sąnaudų. Tarptautinių aplinkosaugos organizacijų tyrimų duomenimis, vienai tonai cemento pagaminti į atmosferą gali būti išmetama apie 900 kg anglies dioksido ir kitų medžiagų, prisidedančių prie vadinamojo „šiltnamio" efekto didinimo. Todėl yra ypač aktualu kuo efektyviau ir taupiau naudoti cemento kiekį betono gamybai. Paprasčiau kalbant, cemento tešla negali būti naudojama betono poroms, tuštumoms tarp užpildų užpildyti. Veiksmingas cemento tešlos kiekis turėtų būti naudojamas tik mišiniui surišti. Riebieji betonai, turintys cemento tešlos perteklių, pasižymi ilgainiui didėjančiomis betono susitraukimo ir valkšnumo deformacijomis.

Mišinio dalelių struktūros tankumo tyrimai, technologinių veiksnių paieška tankumui didinti – tai vieni pagrindinių veiksnių efektyviam sudėtinių betono dalių, lemiančių cemento taupymą, parinkimui.

Pradiniame gamybos etape dalelių mišinys gali būti nagrinėjamas kaip tam tikra diskrečiųjų komponentų (dalelių) visuma, tačiau klasikinė kontinuumo teorija yra pritaikyta makrolygmens uždaviniams analizuoti ir menka dalimi aprašo efektus, atsirandančius atskirų mišinio dalelių lygmeniu.

Alternatyva kontinuumo teorijos modeliams gali būti diskrečiųjų elementų metodas (DEM) (Cundall, Strack 1979). Metodas grindžiamas Lagranžo mechanikos požiūriu ir leidžia medžiagą laikyti atskirų dalelių, sąveikaujančių pagal tam tikrus kontakto mechanikos modelius, sistema, kurios elgsenai aprašyti taikomi Niutono dėsniai.

Literatūroje yra nemažai darbų, skirtų dalelių sistemų tyrimams. Paminėtini vieni pirmųjų Bernal, Mason (1960), Mason (1968) ir Scott (1962) darbai, kurie rentgeno spinduliais bandė pažvelgti į trimatę dalelių

Copyright © 2012 Vilnius Gediminas Technical University (VGTU) Press Technika

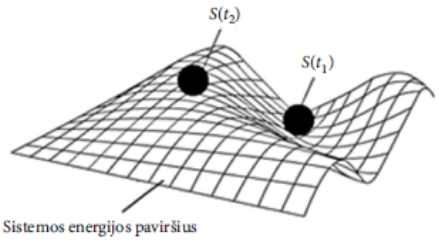
suformuotą struktūrą. Aste, Weaire (2000) šiuolaikiniais kompiuterinės tomografijos metodais analizavo mišinių struktūrą, siekdami įvertinti dalelių organizuotumo laipsnį. Yu ir Zou (1998), Džiugys ir Peters (2001) bei kitų autorių darbuose daug dėmesio skirta dalelių sąveikos modeliams ir jų taikymui įvairiems uždaviniams spręsti.

Nepaisant gausių tyrimų šiandien dar nėra aiški dalelių mišinio struktūros klasifikacija. Tai dažniausiai lemia ir chaotiška medžiagos prigimtis. Kartais sistemos pavienio elemento pokytis gali sukelti ekstremalų jautrumą sistemos pradinės būsenos atžvilgiu. Tuomet kyla klausimas, kaip sistemos būsena $S(t_1)$ laiko momentu t_1 transformuojasi į būseną $S(t_2)$, laiko momentu t_2. Problemą galima iliustruoti tarsi energijos paviršių fazinėje erdvėje, kuriuo judėdama, sistema pereina iš vienos būsenos (energijos lygmens) į kitą (1 pav.).

Siekiant visiškai suvokti dalelių mišinio būsenas, būtinas nuodugnus kiekvienos dalelės tikrosios padėties ir ją lėmusių veiksnių tyrimas, apimantis didžiulį kiekį informacijos. Didelė dalis šios informacijos yra perteklinė, nes keletas atskirų skirtingos mikroskopinės realizacijos būsenų dažnai gali turėti tas pačias eksperimente stebimas makrosavybes. Šiuo atveju dalelių mišinio elgsenai tirti gana veiksmingai gali būti taikomas diskrečiųjų elementų metodas (DEM).

Straipsnyje diskrečiųjų elementų metodu modeliuojama viendispersio ir daugiadispersio sferinių dalelių mišinio elgsena, akcentuojant kvazistatinio pusiausvyros būvio ypatumus.

Šioje straipsnio dalyje aptariama modeliavimo metodika ir pagrindžiamas gautųjų rezultatų korektiškumas, remiantis kontroliuojamaisiais mechaniniais būvio parametrais. Dalelių mišinio struktūrai charakterizuoti makrolygmeniu naudojami pagrindiniai



1 pav. Sistemos būsenos stabilumas: $S(t_1)$ – stabili būsena; $S(t_2)$ – nestabili būsena

Fig. 1. Stability of the system state: $S(t_1)$ – stable state; $S(t_2)$ – unstable state

rodikliai yra: kontaktinės dalelių jėgos, struktūros užimama tūrio dalis (tankumas), koordinacijos skaičius. Supažindinama su analitinės Hamiltono mechanikos ypatumais, tiriant mikrolygmens struktūrą.

2. Tyrimo metodika ir pradiniai duomenys

Tiriamas mišinys – tai sferinių dalelių rinkinys su pasirinktomis fizikinėmis ir mechaninėmis charakteristikomis. Šios charakteristikos artimos betono užpildų medžiagai (taikytos andezito charakteristikos). Pagrindinės charakteristikos pateiktos 1 lentelėje. DEM nežinomieji – tai dalelių padėtys, greičiai ir pagreičiai, kurie nustatomi sprendžiant antrojo Niutono dėsnio lygtį slenkamajam ir sukamajam judėjimui, žinant daleles veikiančias jėgas.

Taigi i-tosios dalelės judėjimui aprašyti galima taikyti literatūroje žinomas lygtis:

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum\nolimits_{j=1, j\neq i}^{N} \boldsymbol{F}_{ij} + m_i \boldsymbol{g}, \qquad (1)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum\nolimits_{j=1, j\neq i}^{N} \boldsymbol{d}_{cij} \times \boldsymbol{F}_{ij} + M_{ij,roll}, \qquad (2)$$

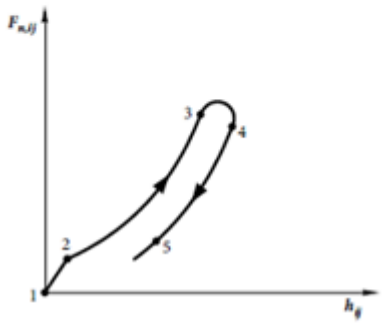
čia $\boldsymbol{F}_{ij} = \boldsymbol{F}_{n,ij} + \boldsymbol{F}_{t,ij}$, $\boldsymbol{x}_i$, $\boldsymbol{\omega}_i$ – dalelės masės centro padėties ir dalelės kampinio greičio vektoriai; m_i – i-tosios dalelės masė ($i = 1, ..., n$); I_i – i-tosios dalelės inercijos momentas; t – nagrinėjamas laikas; $\boldsymbol{g}$ – laisvojo kritimo pagreičio vektorius; $\boldsymbol{d}_{cij}$ – vektorius, nusakantis kontaktinio taško padėtį kontaktuojančių dalelių centrų atžvilgiu; $\boldsymbol{F}_{n,ij}$ ir $\boldsymbol{F}_{t,ij}$ – Hertz kontakto modelio koncepciją atitinkanti kontakto jėgos normalinė komponentė (statmena kontakto paviršiui) ir tangentinė dedamoji, nukreipta liestine kontakto paviršiui; $M_{ij,roll}$ – sukimo momentas, kurį lemia riedėjimo trintis.

Darbuose (Džiugys, Peters 2001; Balevičius *et al.* 2004, 2011; Popov 2010 ir kt.) galima rasti į lygtis (1) ir (2) įeinančių dydžių matematinius aprašymus. Toliau glaustai aptarsime kontakto jėgų modelio elgseną.

Kontakto jėgų – poslinkio, kuris lygus kontaktuojančių dalelių persiklojimui, galima grafinė interpretacija parodyta 2 pav.

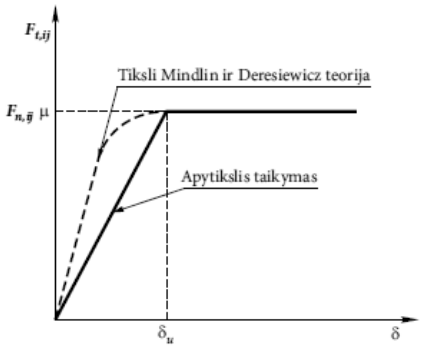
Tangentinės kontakto jėgos modelis (3 pav.) apima Mindlin ir Deresiewicz teorijos taikymą (Džiugys, Peters 2001; Balevičius *et al.* 2004). Modelis pagrįstas apytiksliu kontaktuojančių dalelių mikropraslydimo tangentine linkme vertinimu, kai daleles spaudžia normalinė kontakto jėga, o tangentinė kontakto jėga gali kisti. Modeliuojant laikoma, kad iki tol, kol bus įveikta statinė trinties jėga (t. y. kai kontaktinio dalelių sukibi-

mo paviršiaus spindulys sumažės iki nykstamai mažo dydžio) ir viena dalelė ims slysti kitos atžvilgiu, apytiksliai galioja tiesinė priklausomybė tarp tangentinės jėgos ir poslinkio (3 pav.). Ribinis mikropraslydimo poslinkis δ_u, kurį viršijus dalelė pradeda slysti, priešinantis mažesnei dinamiškos trinties jėgai, nustatomas pagal Mindlin ir Deresiewicz (1953) teoriją (3 pav.).



2 pav. Klampiosios ir Hertz kontakto jėgos – persiklojimo modelis deformavimo kelyje 1–5: 1–2 – lemiantis poveikis priklauso klampaus kontakto traukos jėgai; 2–3 – lemiantis poveikis priklauso Hertz kontakto traukos jėgai; 3–4 – lemiantį poveikį daro klampaus kontakto stūmos jėga; 4–5 – lemiantį poveikį daro Hertz kontakto stūmos jėga (vėliau dalelė gali prarasti kontaktą, veikiant stūmos jėgai)

Fig. 2. Viscous force and Hertz contact stress – an overlap model for a deformation path 1–5: 1–2 – decisive effect depends on the tractive force of a viscous contact; 2–3 – decisive effect depends on Hertz contact stress; 3–4 – decisive effect depends on the repulsion force of a viscous contact; 4–5 – decisive effect depends on the repulsive force of Hertz contact (at a later stage, the particle can lose a contact due to repulsive force)



3 pav. Tangentinės kontakto jėgos modelis (be klampiosios dedamosios), čia δ_u – ribinis mikropraslydimo poslinkis

Fig. 3. Model for the tangent force of a contact (with no viscous component) where δ_u is limit displacement of a microslip

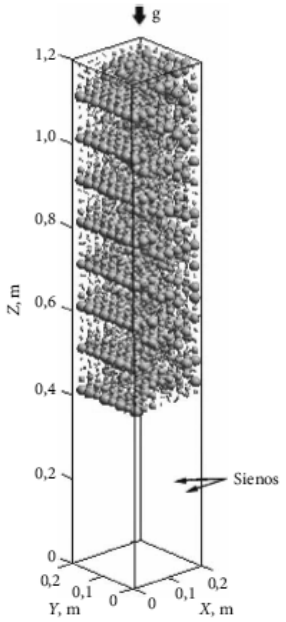
Modeliuojant taip pat atsižvelgta į galimą mišinio dalelių riedėjimo trinties poveikį dėl sukimo momentų. Taikytas modelis aprašytas darbe (Balevičius *et al.* 2011).

Netiesinių diferencialinių judėjimo lygčių skaitinis integravimas kiekvienai dalelei t-tuoju laiko momentu $t + \Delta t$ (čia Δt yra laiko žingsnis) atliekamas pagal penktosios eilės *Gear predictor-corrector* schemą ir kaupiant duomenis apie dalelių padėtis bei greičio vektorius kiekvienu laiko momentu (Balevičius *et al.* 2006).

3. Modeliavimo kontroliuojamieji duomenys

Dinaminis dalelių mišinio modeliavimas pradedamas tam tikru dalelių išdėstymu trimatėje skaičiuojamojoje erdvėje (4 pav.), suteikiant atsitiktinai parinktą pradinio greičio reikšmę (1 lentelė). Veikiamos sunkio jėgos, dalelės pradeda kristi ir dėl suteikto pradinio greičio prasideda mišinio maišymosi procesas.

Kadangi siekiama tirti dalelių kvazistatinę būseną, t. y. būseną, kai dalelių padėties ir greičio kitimas yra nykstamai mažas, atsiranda būtinybė pasirinkti parametrus, kuriais būtų galima kontroliuoti dinaminę sistemos elgseną. Sistemos kontroliuojamaisiais parametrais pasirinkti: sistemos kinetinė energija bei jėgų pusiausvyra tarp mišinio svorio jėgos ir pagrindo reakcijos.



4 pav. Laisvasis daugiadispersio dalelių mišinio kritimas

Fig. 4. Free fall of the polydispersed particle mixture

1 lentelė. Dalelių modeliavimo charakteristikos

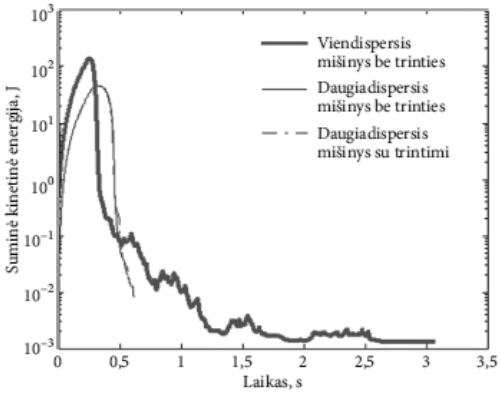
Table 1. Characteristics of modelling particles

Parametras	Viendispersis mišinys be trinties	Daugiadispersis mišinys be trinties	Daugiadispersis mišinys su trintimi
Dalelių skaičius	2048		
Dalelių skersmuo	0,025 m	0,003–0,025 m	0,003–0,025 m
Tankis	2500 kg/m^3		
Tamprumo modulis	10 GPa		
Puasono koeficientas	0,2		
Trinties koeficientas	–	–	0,6
Riedėjimo trinties koeficientas	–	–	0,005
Energijos disipacijos koeficientas normalinei dedamajai*	15400 1/s	85000 1/s	85000 1/s
Energijos disipacijos koeficientas tangentinei dedamajai	1540 1/s	8500 1/s	8500 1/s
Laiko žingsnis	$2{,}5\cdot10^{-7}$ s	$1{,}3\cdot10^{-8}$ s	$1{,}3\cdot10^{-8}$ s
Vidutinė pradinio greičio reikšmė	1,0 m/s		
Kontakto modelis	Hertz		

Pastaba: *Disipacijos koeficientas parinktas pagal literatūroje rastą andezito, naudojamo betono užpildu, restitucijos koeficientą, atskirai sprendžiant dviejų dalelių kontakto uždavinį pagal Hertz modelį

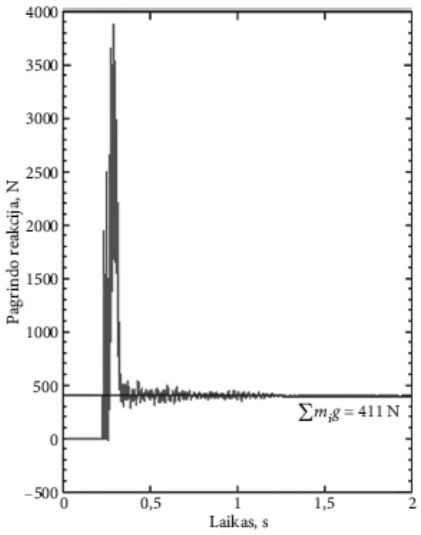
Dalelių mišinio kinetinės energijos mažėjimas iki sąlyginio nulio reikšmės (5 pav.) (sąlyginio nulio reikšmė šiuo atveju imama dalelių mišinio kinetinei energijai nuslopus iki 10^{-3} J) leidžia nutraukti skaičiavimą, laikant, kad įsivyravo kvazistatinė mišinio būsena.

Jėgų pusiausvyra tarp mišinio svorio ir pagrindo reakcijos – tai kitas parametras, rodantis dinaminės analizės korektiškumą. 6 pav. parodyta viendispersio mišinio dalelių reakcija į dugną ir mišinio svorio jėgų balanso kaita laike. Matyti, kad pradiniame etape dėl dinaminės dalelių elgsenos balanso nėra. Skaičiavimo pabaigoje dinaminis poveikis gęsta ir įsivyrauja pusiausvyra. Lokalios atskirų dalelių jėgos, greičiai ir kiti parametrai vidutiniškai suvienodėja lemdami visos medžiagos kvazistatinę makrobūseną.



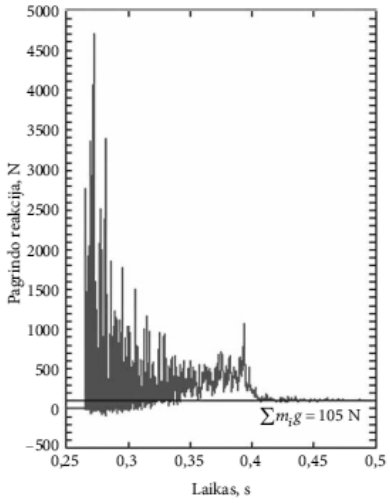
5 pav. Dalelių mišinių suminės kinetinės energijos kitimas laike (daugiadispersių mišinių kreivės persikloja)

Fig. 5. Changes in the total kinetic energy of particle mixtures considering time (curves of the polydispersed mixtures overlap)



6 pav. Viendispersio mišinio skaičiuojamosios erdvės pagrindo reakcijos balansas su suminiu dalelių svoriu

Fig. 6. Reaction balance between the basis of the computational space of the monodispersed mixture and the total weight of particles



7 pav. Daugiadispersių mišinių skaičiuojamosios erdvės pagrindo reakcijos balansas su suminiu dalelių svoriu

Fig. 7. Reaction balance between between the basis of the computational space of polydspersed mixtures and the total weight of particles

7 pav. parodyta daugiadispersio mišinio jėgų balanso elgsena. Čia pastebimas didesnis pagrindo reakcijos svyravimas prieš kvazistatinį būvį.

Taigi kontroliuojamųjų parametrų analizė parodė, jog mišinio dalelių elgsenos modeliavimas išspręstas korektiškai, esant pasirinktam laiko žingsniui (1 lentelė). Pažymėtina, kad didelė tamprumo modulio reikšmė, būdinga andezitui, lemia labai mažą integravimo žingsnį (1 lentelė), todėl skaičiavimo procesas išnaudojo daug kompiuterinio laiko.

4. Modeliavimo rezultatai

4.1. Struktūros charakterizavimas makrolygmeniu

Dažniausiai literatūroje minimi dalelių mišinio struktūros charakterizavimo makrolygmeniu rodikliai yra: dalelių kontaktinės jėgos, struktūros užimama tūrio dalis (tankumas) ir koordinacijos skaičius. Šis parametras rodo kontaktuojančių dalelių skaičių, vidutiniškai tenkantį vienai dalelei mišinyje. 8 pav. pateiktas nagrinėtų mišinių kontaktinių jėgų pasiskirstymas pagal daleles, esant sistemos kvazistatinės pusiausvyros būviui. Dalelių spalvos rodo kontaktinės jėgos atstojamosios vektoriaus modulio reikšmę.

8 pav. rezultatai rodo, kad dalelių jėgų pasiskirstymas yra skirtingas, priklausantis nuo mišinio kompaktiškumo, dalelių laisvės laipsnio mišinyje. Iš esmės kontaktinių jėgų pasiskirstymas yra chaotiškas, tačiau akivaizdžiai įžvelgiama tendencija: kontaktinės jėgos yra didesnės dalelėse, esančiose arčiau dugno. Tai lemia mišinio svorio jėga, kuri pasiskirsto tarp atskirų dalelių. Pavyzdžiui, 8 pav. matyti, kad randamas tam tikras skaičius neaktyvių dalelių, kurios būdamos sistemos dalimi perima tik savojo svorio sukeltą apkrovą. Taigi šios dalelės turi daugiau laisvės judėti erdvėje nei kitos, todėl vien tik kontaktinės jėgos kaip makrorodiklis struktūros charakterizavimui nėra išsamus.

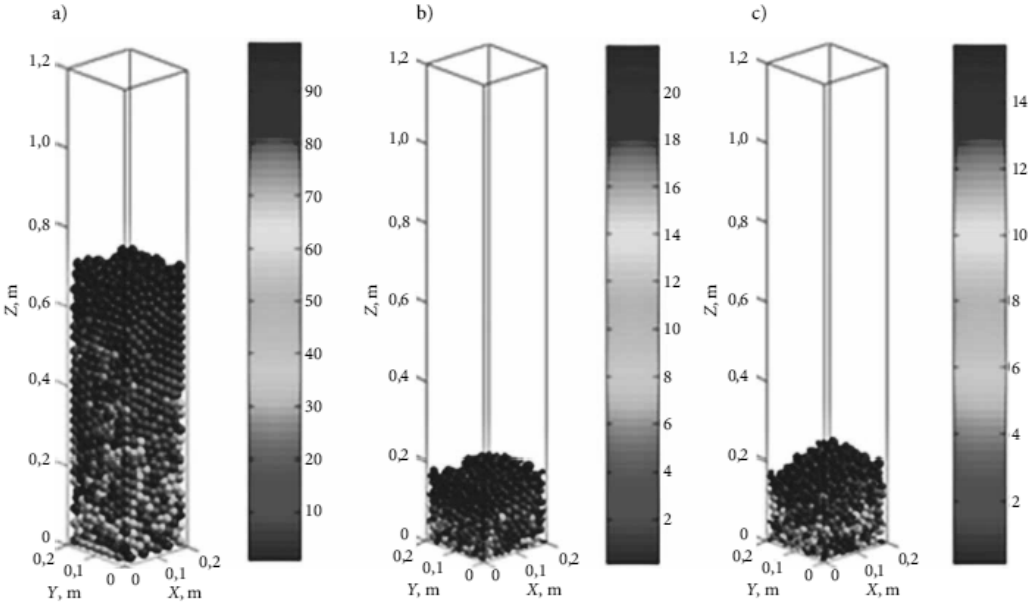
Likusiems dviem struktūros charakterizavimo makrorodikliams įvertinti pasinaudota dalelių padėties koordinačių kitimo viso modeliavimo metu rezultatais. Remiantis šiais duomenimis, kiekviename laiko žingsnyje buvo skaičiuotas vidutinis koordinacijos skaičius mišinyje bei formuota kiekvienos dalelės Voronoi celė (Abellanas *et al.* 1995). Voronoi celė yra iškilasis briaunainis, sudarytas iš plokštumų, išvestų statmenai nagrinėjamosios i-tosios dalelės ir artimiausių jai dalelių svorio centrus jungiančios atkarpos centre (9 pav.). Daugiadispersiuose dalelių mišiniuose naudojant standartinę Voronoi celę, gaunamos paklaidos dėl nepilno dalelės patekimo į celės vidų, todėl atlikta Lechenault *et al.* (2006) naudota modifikacija.

Modifikuotoji celė kuriama įtraukiant į jos viršūnių taškų gaubtinę papildomus gretimų dalelių kontakto taškus ir taip užtikrinant, kad celės plokštumos nekirstų dalelės. Santykis visų mišinio dalelių vidutinio tūrio su jų Voronoi celių vidutiniu tūriu $V_{m.dal}/V_{m.Vor}$, apskaičiuotas kiekvienu laiko momentu, leido nustatyti mišinio dalelių užimamą tūrio dalį (tankumą) skaičiuojamojoje erdvėje. Rezultatams atvaizduoti sudaryti minėtųjų rodiklių sąryšio grafikai, pateikti 10 pav. Siekiant palyginti rezultatus, viendispersio dalelių mišinio $V_{m.dal}/V_{m.Vor}$ santykis skaičiuotas naudojant modifikuotus dalelių tūrius, nustatytus pagal (3) formulę, gautą iš daugiadispersio dalelių mišinio kreivės pritaikymo analizės

$$V_{dal.mod} = \frac{V_{vor.dal} \cdot VKS}{VKS + 3,464}, \qquad (3)$$

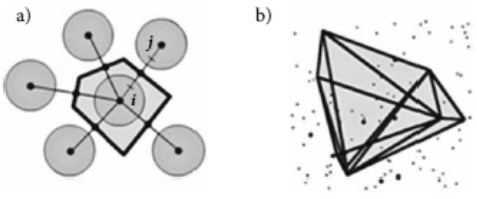
čia $V_{vor.dal}$ – atskiros dalelės Voronoi celės tūris; VKS – vidutinis koordinacijos skaičius.

Suprantama, kad norint gauti tankų dalelių mišinį, reikia efektyviai parinkti jo granuliometrinę sudėtį. 10 pav. pastebime akivaizdžiai spartesnį daugiadispersio dalelių mišinio koordinacijos skaičiaus augimą laike, palyginti su viendispersiu mišiniu, neatsižvelgiant į trinties koeficientą. Šis augimas rodo, kad mažesnės dalelės greičiau prasiskverbia į mišinio struktūros gi-



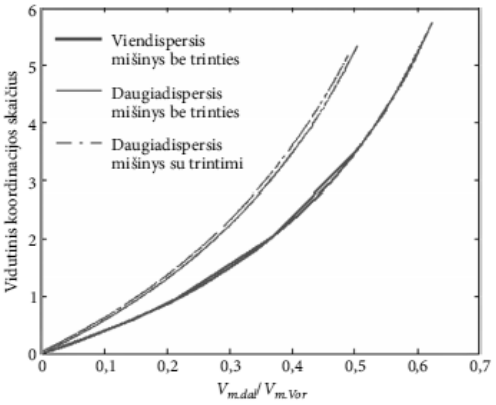
8 pav. Dalelių mišinių kontakinių jėgų spalvinės diagramos: a – viendispersis dalelių mišinys be trinties; b – daugiadispersis dalelių mišinys be trinties; c – daugiadispersis dalelių mišinys su trintimi

Fig. 8. Colour charts of the contact forces of particle mixtures: a – monodispersed particle mixture with no friction; b – polydispersed particle mixture with no friction; c – polydispersed particle mixture with friction



9 pav. Voronoi celės formavimas: a – formavimo dvimatė principinė schema; b – *i*-tosios dalelės Voronoi celė mišinyje (stambūs juodi taškai vaizduoja daleles, esančias arčiausiai nagrinėjamos *i*-tosios dalelės, pagal kurias yra formuojama Voronoi celė, o mėlyni taškai vaizduoja tolimesnes daleles)

Fig. 9. Generation of the Voronoi cell: a – two-dimensional principal scheme of generation; b – Voronoi cell of the i^{th} particle in the mixture (black points show the neighbours of the i^{th} particle used for Voronoi cell generation, blue points indicate other particles in the mixture)

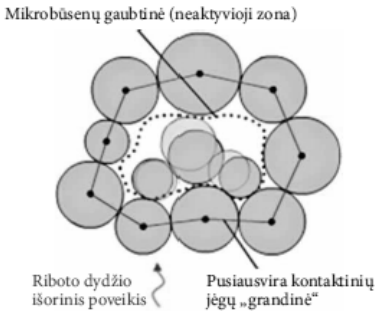


10 pav. Priklausomybė tarp vidutinio koordinacijos skaičiaus ir mišinio dalelių užimamos tūrio dalies (tankumo) (viendispersio mišinio kreivė yra dviguba dėl pradinės kristalinio pavidalo struktūros)

Fig. 10. Dependence between the mean coordination number and the volume fraction of the particle mixture (curve of the monodispersed mixture is duplicate due to initial crystalline structure)

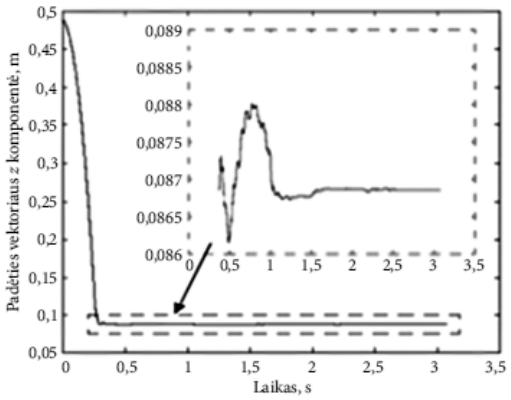
lumą. Kita vertus, iš 10 pav. matome, kad atvirkščiai nei koordinacijos skaičius, dalelių mišinio užimama tūrio dalis (tankumas) lėčiau auga daugiadispersiame mišinyje. Tai susiję su daugiadispersio dalelių mišinio neaktyvių dalelių zonų susiformavimu (11 pav.). Šie dariniai trukdo tolesniam mišinio tankėjimui be papildomo išorinio poveikio (pvz., mišinio vibravimo).

Analizuojant gautus tyrimo rezultatus, matyti, kad šie duomenys perteikia nepakankamą informaciją apie vidines struktūros ypatybes. Minėtieji rodikliai apibūdina tam tikrą sistemos makrobūseną, kurios egzistavimą gali tenkinti keletas ar keliolika mikrobūsenų (11 pav.), todėl būtina papildoma analizė.



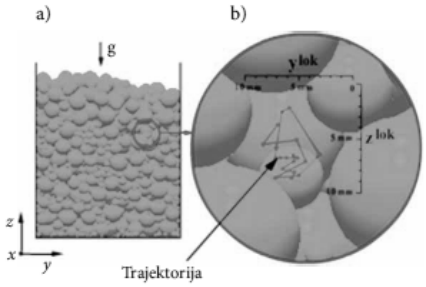
11 pav. Neaktyvioji zona kvazistatinio pusiausvyros būvio dalelių mišinyje

Fig. 11. Inactive zone of the particle mixture in the quasistatic equilibrium state



12 pav. Dalelių mišinio *i*-tosios dalelės padėties vektoriaus *z* komponentės kitimas laike

Fig. 12. Changes in the vector *z* component of the position of the i^{th} particle considering time



13 pav. Kvazistatnio pusiausvyros būvio daugiadispersio dalelių mišinio vidinė struktūra: a – neaktyvioji zona mišinyje; b – *i*-tosios dalelės svorio centro padėties kitimo laike trajektorija, pavaizduota lokalioje koordinačių sistemoje

Fig. 13. Internal structure of the particle mixture in the quasistatic equilibrium state: a – inactive zone in the mixture; b – trajectory of changes in the position of the mass centre of the i^{th} particle centre is displayed in the local coordinate system

4.2. Struktūros mikrobūsenos

Esant tam tikroms pastovioms kraštinėms sąlygoms, bet kitoms pradinėms dalelių konfigūracijoms galutinė pusiausvirojo mišinio struktūra gali būti kitokia. Tai galima paaiškinti antruoju termodinamikos dėsniu, kuris teigia, kad izoliuotosios pusiausvyros sistemos entropija yra didžiausia (Edwards, Oakeshott 1989). Šiuo atveju entropija gali būti informacijos apie sistemą stokos matas. Jei tik žinoma, kad taškas, reprezentuojantis sistemą fazinėje erdvėje, yra viduje tam tikro tūrio, kuris gali būti vadinamas reprezentatyviuoju tūriniu elementu, bet nežinoma tiksli jo padėtis šiame tūryje, tuomet taškas gali būti bet kuris vienas iš didžiulės daugybės taškų, kurie yra nagrinėjamame tūryje.

Jau minėta, kad kvazistatinė pusiausvyra yra sąlyginė pusiausvyra, nes ji reiškia dalelių makrobūsenos stabilizavimąsi, tačiau mikrolygiu judėjimas vis dar gali vykti. Tai matyti iš dalelių mišinio tam tikros *i*-tosios dalelės padėties vektoriaus *z* komponentės kitimo laike grafiko (12 pav.).

Iš 12 pav. matyti, kad dalelių mišiniui pasiekus kvazistatinės pusiausvyros būvį, atskira dalelė yra suvaržoma susiformavusioje padidėjusių kontaktinių jėgų zonoje (13 pav., a) ir prasideda jos mikrobūsenų kitimas (13 pav., b).

Taigi gali egzistuoti nemažas kiekis galimų sistemos būsenų, ir nežinoma, kuri iš jų yra tikroji. Šiai padėčiai įvertinti makrolygmeniu galimas tik statistinis problemos sprendimo būdas.

Dalelių kontaktinės jėgos yra nepakankamas struktūros charakterizavimo rodiklis. Siekiant turėti charakteristiką, kuri būdinga kiekvienam mišinio struktūros elementui ir kuria remiantis būtų galima sudaryti statistinį modelį, paprastai taikomos ne klasikinės Niutono mechanikos formuluotės, nagrinėjančios jėgų vektorius, o Hamiltono mechanikos principai (Gekle 2005). Čia analizuojamas judėjimas, remiantis dviem skaliarinėmis judesio charakteristikomis: kinetine ir potencine energija.

Mišinio dalelių mikrobūsenoms charakterizuoti pasitelksime fazinės erdvės sąvoką (Hilborn 2008). Fazinė erdvė – tai abstrakti daugiamatė erdvė, kurios koordinatėmis yra sistemos laisvės laipsniai, t. y. skaičius nepriklausomų kintamųjų, reikalingų sistemos dinaminei būsenai apibūdinti. Pagrindinis skirtumas

tarp fazinės ir koordinačių erdvės tas, kad fazinė erdvė yra būsenos erdvė, tai reiškia, jog kiekvienas taškas joje atitinka unikalią sistemos būseną, kur taškas koordinačių erdvėje nustato tik fizinę sistemos konfigūraciją. Rinkinys galimų mikrobūsenų gali būti išreikštas rinkiniu taškų fazinės erdvės trajektorijoje, kuri vaizduoja sistemos mikroskopinės būsenos kitimą laike.

Konservatyvios sistemos fazinės erdvės trajektoriją aprašo Hamiltono mechanikos lygtys (Lichtenberg, Lieberman 1992):

$$\dot{\boldsymbol{q}}_j = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}_j}, \tag{4}$$

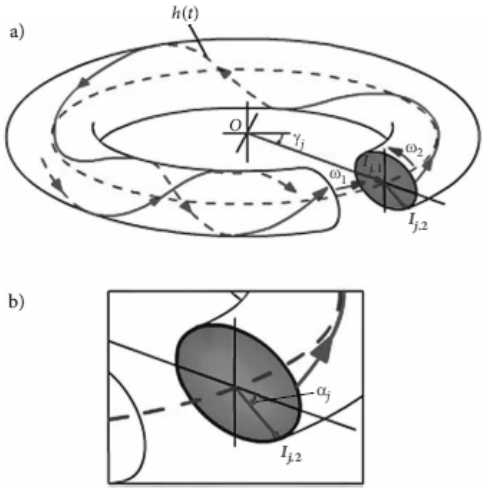
$$\dot{\boldsymbol{p}}_j = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}_j}, (j = 1, ..., l), \tag{5}$$

čia $\boldsymbol{q}_j$ – j-ojo laisvės laipsnio apibendrintoji koordinatė; $\boldsymbol{p}_j$ – j-ojo laisvės laipsnio apibendrintasis judesio kiekis, išreiškiamas masės ir greičio sandauga; H – Hamiltono funkcija, išreiškianti sistemos mechaninę energiją (kinetinės ir potencinės energijos sumą); H priklauso nuo visų $\boldsymbol{q}_j$ ir $\boldsymbol{p}_j$; l – mechaninių laisvės laipsnių skaičius; $\dot{\boldsymbol{q}}_j$, $\dot{\boldsymbol{p}}_j$ reiškia dydžių $\boldsymbol{q}_j$ ir $\boldsymbol{p}_j$ išvestines pagal laiką. Sistemos mikroskopinę būseną visiškai nusako $2l$ dydžių – l apibendrintųjų koordinačių $\boldsymbol{q}_j$ ir l apibendrintųjų judesio kiekių $\boldsymbol{p}_j$, priklausančių nuo pradinių sąlygų ir laiko.

Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) teorema (Broer 2004), judėjimo diferencialinių lygčių (4–5) geometrinę interpretaciją pateikia kaip trajektorijų rinkinį fazinėje erdvėje, dengiantį l-mačio toro paviršių. 14 pav. pateikta konservatyvios (nedisipatyvios) sistemos dvimačio toro, charakterizuojamo kampiniais dažniais ω_1 ir ω_2, schema.

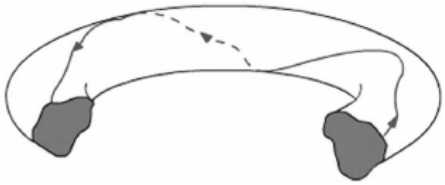
14 pav. pavaizduoto toro paviršių dengiančios fazinės trajektorijos $h(t)$ kiekvienas taškas atitinka vieną sistemos mikrobūseną, apibūdinamą fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais.

Analitinė Hamiltono mechanika tinka tik konservatyvios (nedisipatyvios) sistemos elgsenai tirti, tačiau Kolmogorov teorema (Broer 2004) teigia, kad esant gana mažam Hamiltono sutrikdymui, didžioji dalis energijos toro neišnyksta, o tik šiek tiek deformuojasi (15 pav.), kartu įvykstant ir fazinės trajektorijos globaliajai bifurkacijai, t. y. kokybiniam fazinės trajektorijos pobūdžio pokyčiui. Siekiant parodyti disipacijos įtaką fazinės trajektorijos elgsenai, 16 pav. pateiktas vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinių trajektorijų pokytis normalinio kontakto metu, skaičiavimuose keičiant normalinio slopinimo koeficientą ζ_n.



14 pav. Konservatyvios (nedisipatyvios) sistemos dvimatis energijos paviršius (toras) fazinėje erdvėje, aprašytas elgsenos kintamaisiais $\boldsymbol{I}_{j.1}$, $\boldsymbol{I}_{j.2}$, γ_j, α_j: a – fazinė trajektorija $h(t)$ toro paviršiuje; b – toro skerspjūvis ir elgsenos kintamieji $\boldsymbol{I}_{j.2}$ ir α_j

Fig. 14. Two-dimensional energy surface (torus) of the conservative (non-dissipative) system in phase space expressed in behaviour variables $\boldsymbol{I}_{j.1}$, $\boldsymbol{I}_{j.2}$, γ_j, α_j: a – phase trajectory $h(t)$ on torus surface; b – the torus section and behaviour variables $\boldsymbol{I}_{j.2}$ and α_j

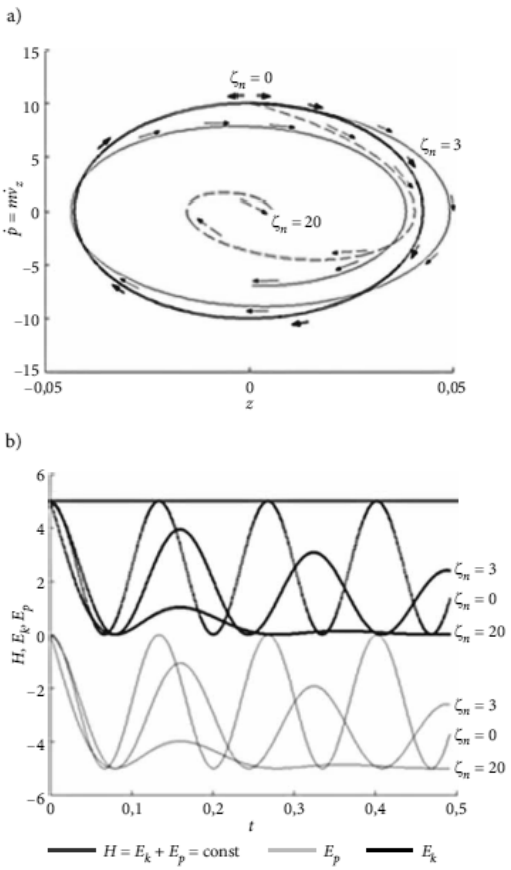


15 pav. Sutrikdytas dvimatis energijos toras

Fig. 15. Disturbed two-dimensional energy torus

16 pav., a, matoma, kai normalinio slopinimo koeficientas $\zeta_n = 0$, fazinė trajektorija turi elipsės pavidalą. Didinant normalinio slopinimo koeficientą, fazinė trajektorija įgauna spiralės formą. Kinetinės ir potencinės energijos pokyčiai, esant skirtingiems normalinio slopinimo koeficientams, pateikti 16 pav., b. Matoma, kad padidėjusios disipacijos poveikis pasireiškia kinetinės ir potencinės energijos kreivių slopimu laike.

Disipacija labiausiai priklauso nuo dalelių klampumo ir trinties charakteristikų. Literatūroje randama nemažai atliktų tyrimų (Edwards, Oakeshott 1989), įrodančių, kad egzistuoja tiesioginis ryšys tarp energijos toro sutrikdymo laipsnio fazinėje erdvėje ir kiekvienos dalelės mechaninio laisvės laipsnio fizinėje mišinio



16 pav. Normalinio slopinimo koeficiento ζ_n įtaka vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinės trajektorijos elgsenai: a – dalelės fazinė trajektorija, kai $\zeta_n = 0$, $\zeta_n = 3$, $\zeta_n = 20$; b – dalelės Hamiltonas ir kinetinės bei potencinės energijos pokyčiai esant normalinio slopinimo koeficientams

Fig. 16. The influence of normal dissipation coefficient ζ_n on the behaviour of the phase trajectory of the particle with one mechanical degree of freedom: a – phase trajectory of a particle, when $\zeta_n = 0$, $\zeta_n = 3$, $\zeta_n = 20$; b – Hamiltonian particles and changes in the kinetic and potential energy of the particle under normal coefficients of dissipation

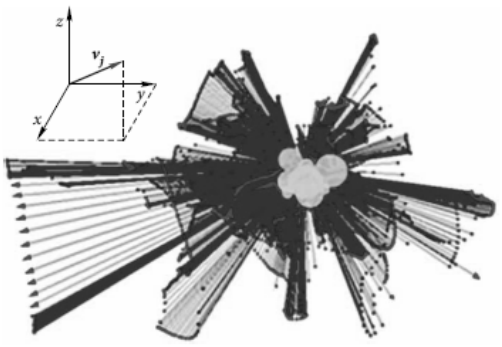
struktūroje: kuo mažesnis dalelės mechaninis laisvės laipsnis, tuo ji labiau atitinka Hamiltono mechanikos formuluotę. Galima manyti, kad kiekvienos mišinio dalelės svorio centro koordinačių vektorius siejasi su vektoriumi $\boldsymbol{I}_{j.1}$(čia $\boldsymbol{I}_{j.1}$ dėl sistemos disipatyvumo yra funkcija, priklausanti nuo kampo γ_j), o dalelės judesio kiekį reprezentuojantis greičio vektorius yra susijęs su vektoriumi $\boldsymbol{I}_{j.2}$, kuris priklauso nuo kampo α_j (14 pav., b). Tuomet kvazistatinio pusiausvyros būvio sistemos, nepatiriančios didelio disipacijos poveikio, bet kurios mikrobūsenos charakterizavimui pakanka žinoti tik fazinės trajektorijos kitimo dėsningumus toro paviršiuje, nusakomus kampais γ_j ir α_j (14 pav., a).

Taigi Kolmogorov teorema (Broer 2004) leidžia Hamiltono mechanikos principus pritaikyti suvaržytuose dalelių mišiniuose, pasižyminčiuose riboto dydžio disipacija.

Anksčiau buvo minėta, kad nagrinėjama kvazistatinės pusiausvyros būvio sistema. Kadangi esant šios būsenos dalelių masės centro koordinatės kinta tik mikrolygiu (energiją reprezentuojantis toro paviršius yra mažai iškreiptas), tad galima teigti, jog dalelės mikroskopinę būseną visiškai nusako trys judesio kiekiai: $p_{x.j}$, $p_{y.j}$ ir $p_{z.j}$, išreiškiami atitinkamomis dalelės greičio vektorių komponentėmis: $v_{x.j}$, $v_{y.j}$ ir $v_{z.j}$. Tuomet erdvėje atidėję visus vienos dalelės greičio vektorius kvazistatinės pusiausvyros būvio metu, gausime vektorių lauką, tam tikru būdu atspindintį konkrečios dalelės fazinę erdvę (17 pav.).

17 pav. pavaizduoti vienos dalelės greičio vektoriai teikia mažai naudos, nes visi jie yra Euklidinėje erdvėje $\mathbb{R}^3$. Šiuos greičio vektorius išreiškus 14 pav. parodytais fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais α_j ir γ_j, esančiais polinėje koordinačių sistemoje, būtų galima nustatyti fazinės erdvės trajektorijos pobūdį, t. y. globaliąją bifurkaciją, padėsiančią įvertinti kiekvienos mikrobūsenos pasireiškimo tikimybę dalelių mišinyje. Nustatytoji tikimybė leistų charakterizuoti ir viso dalelių mišinio makrobūseną, nes labiausiai tikėtina yra toji makrobūsena, kurios mikrobūsenų skaičius yra didžiausias.

Geometrinės charakteristikos, leidžiančios dalelės greičio vektorius atvaizduoti polinėje koordinačių sistemoje, yra *i*-tosios dalelės *j*-ojo greičio vektoriaus

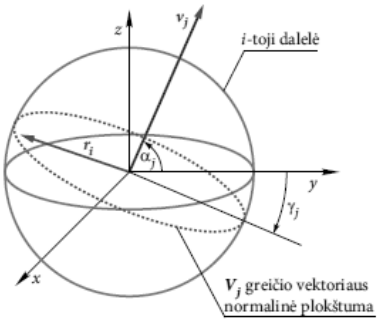


17 pav. *i*-tosios dalelės greičio vektoriaus kryptys erdvėje esant kvazistatiniam pusiausvyros būviui

Fig. 17. Directions of the velocity vector of the i^{th} particle in the quasistatic equilibrium state

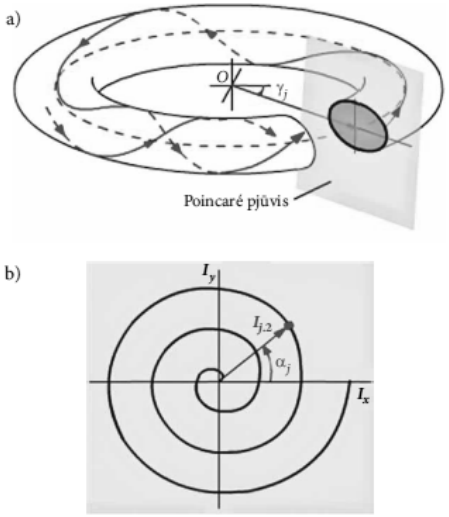
kampas su horizontu ir normalinės plokštumos posūkio horizonto atžvilgiu kampas (18 pav.). Šie kampai sutapatinami su fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais α_j ir γ_j.

Disipatyvios dinaminės sistemos energijos toro skerspjūvis nebėra suskaidytas atskirais energijos lygmenimis (Gekle 2005), o atrodo kaip spiralė (19 pav., b).



18 pav. *i*-tosios dalelės $\boldsymbol{v}_j$ greičio vektoriaus 26 taškų normalinės plokštumos orientacija (čia $\boldsymbol{r}_j$ – *i*-tosios dalelės spindulio vektorius)

Fig. 18. Orientation of the 26 points normal plane of the velocity vector of the i^{th} particle $\boldsymbol{v}_j$ (here, $\boldsymbol{r}_j$ is the radius vector of the i^{th} particle



19 pav. *i*-tosios dalelės energijos toro skerspjūvio vizualizacija: a – Poincaré pjūvis; b – disipatyvios sistemos energijos toro skerspjūvis elgsenos kintamųjų koordinatėse, apibūdinamas vektoriumi $\boldsymbol{I}_{j.2}$ ir kampu α_j

Fig. 19. Visualization of the section of the energy torus of the i^{th} particle: a – Poincaré section; b – the section of the energy torus of the dissipative system is defined using vector $\boldsymbol{I}_{j.2}$ and angle α_j

Tai patvirtina 16 pav., a, pateiktos apskaičiuotos dalelės fazinės trajektorijos.

Siekiant gauti 19 pav., b, parodytą toro skerspjūvį charakterizuojančių dydžių $\boldsymbol{I}_{j.2}$ ir α_j ryšį, šis skerspjūvis aproksimuojamas *Archimedo spirale*:

$$\boldsymbol{I}_{j.2} = m \cdot \alpha_j, \text{ kai } \alpha_j > 0, \tag{6}$$

čia m išreiškia atstumą tarp spiralės apsisukimų. Kadangi būsenai charakterizuoti pakanka žinoti tik kokybinius fazinės trajektorijos elgsenos dėsningumus, tad tikrasis m dydis nėra svarbus.

Elgsenos kintamieji α_j ir γ_j parametriniame paviršiuje $H = H(\alpha, \gamma)$ (20 pav., a) yra laiko funkcijos, t. y. $\alpha = \alpha(t)$, $\gamma = \gamma(t)$. Tuomet $h(t) = h(\alpha(t), \gamma(t))$ yra parametrinė kreivė paviršiuje $H = H(\alpha, \gamma)$.

Paviršiuje $H = H(\alpha, \gamma)$ laisvai pasirinktame taške P išvedama tangentinė plokštuma (20 pav., a). Šioje plokštumoje tangentinis vektorius $\dot{h}(t)$ susideda iš dviejų komponenčių $\boldsymbol{h}_\alpha$ ir $\boldsymbol{h}_\gamma$.

Tangentinis vektorius kreivei ant paviršiaus (20 pav., b) gaunamas diferencijuojant $h(t)$ laiko t atžvilgiu:

$$\dot{h}(t) = \frac{dh}{dt} = \frac{\partial h}{\partial \alpha} \cdot \frac{d\alpha}{dt} + \frac{\partial h}{\partial \gamma} \cdot \frac{d\gamma}{dt}. \tag{7}$$

Paviršiaus normalės vektorius $\boldsymbol{n}$, statmenas tangentinei plokštumai, išreiškiamas šia formule:

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{h}_\alpha \times \boldsymbol{h}_\gamma}{\left|\boldsymbol{h}_\alpha \times \boldsymbol{h}_\gamma\right|}. \tag{8}$$

Pažymėtina, kad *įprastasis taškas* P ant parametrinio paviršiaus $H = H(\alpha, \gamma)$ yra taškas, atitinkantis (9) sąlygą:

$$\boldsymbol{h}_\alpha \times \boldsymbol{h}_\gamma \neq 0. \tag{9}$$

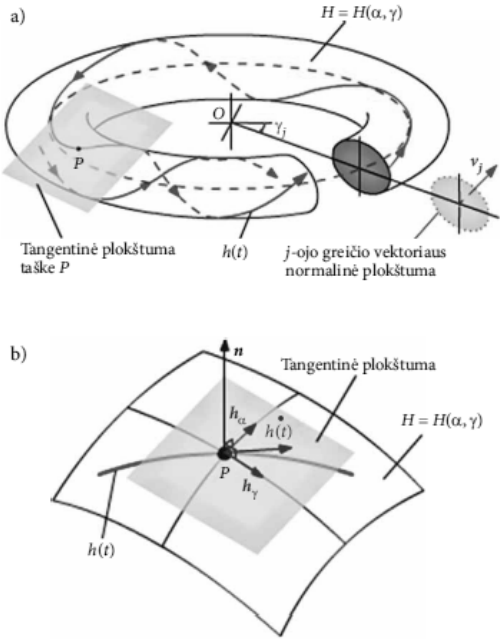
Sąlyga (9) reikalauja, kad taške P (20 pav.) vektoriai $\boldsymbol{h}_\alpha$ ir $\boldsymbol{h}_\gamma$ neišnyktų ir turėtų skirtingas kryptis, t. y. kad būtų tiesiškai nepriklausomi. Jei (9) sąlyga netenkinama, taškas P vadinamas *ypatinguoju*.

Galima perrašyti (6) išraišką, dydį m pakeičiant normalinio vektoriaus (8) moduliu $|\boldsymbol{n}|$, gaunant priklausomybę:

$$|\boldsymbol{I}_{j.2}| = |\boldsymbol{n}| \times \alpha_j, \text{ čia } |\boldsymbol{n}| = 1. \tag{10}$$

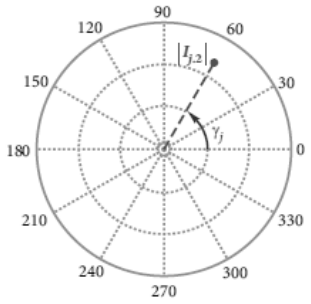
Polinėje koordinačių sistemoje (21 pav.) atvaizdavę visus modeliuojant DEM kvazistatinio pusiausvyros būvio mišinyje gautus i-tosios dalelės greičio vektorius atitinkančius dydžius $|\boldsymbol{I}_{j.2}|$ ir γ_j, sudarytume minėtosios dalelės fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos plokštuminę diagramą (gaubtinę).

Pažymėtina, kad gautoji diagrama nėra tikroji, tai tik fazinių trajektorijų sankirta su plokštuma, tačiau to visiškai pakanka dalelės fazinių trajektorijų elgsenos



20 pav. Fazinė trajektorija $h(t) = h(\alpha(t), \gamma(t))$ parametriniame paviršiuje $H = H(\alpha, \gamma)$ (energijos toras): a – tangentinė plokštuma toro paviršiaus taške P; b – fazinės trajektorijos $h(t)$ tangentinis vektorius $\dot{\boldsymbol{h}}(t)$ ir normalinis vektorius $\boldsymbol{n}$ toro paviršiaus taške P

Fig. 20. Phase trajectory $h(t) = h(\alpha(t), \gamma(t))$ on parametric surface $H = H(\alpha, \gamma)$ (energy torus): a – tangent plane at torus surface point P; b – tangent vector $\dot{\boldsymbol{h}}(t)$ and normal vector $\boldsymbol{n}$ of phase trajectory $h(t)$ at point P



21 pav. Kintamieji $|\boldsymbol{I}_{j.2}|$ ir γ_j polinėje koordinačių sistemoje

Fig. 21. Variables $|\boldsymbol{I}_{j.2}|$ and γ_j in the polar coordinate system

dėsningumams nustatyti. Diagramoje atsispindėtų ne tik mikrobūsenų pasirodymo statistika, bet ir informacija, susijusi su dalelės stabilumu.

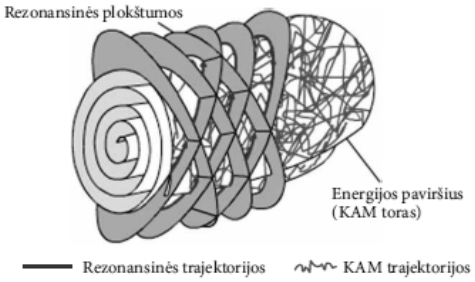
Fazinės trajektorijos gaubtinės formavimosi esminiams principams paaiškinti naudojamasi 22 pav., kuriame parodytas disipatyvios dinaminės sistemos energijos toro paviršiaus fragmentas, kertamas trikdžių sudaromų rezonansinių plokštumų (Gekle 2005).

22 pav. parodytos KAM trajektorijos sudaromos *įprastųjų* fazinių taškų, t. y. taškų, kuriuose vektoriai $\boldsymbol{h}_\alpha$ ir $\boldsymbol{h}_\gamma$ (20 pav., b) yra tiesiškai nepriklausomi. Rezonansinių plokštumų kraštais eina kitokios trajektorijos, charakterizuojamos *ypatingaisiais* faziniais taškais, neatitinkančiais (9) sąlygos.

Jeigu polinėje koordinačių sistemoje atidėsime elgsenos kintamuosius $|\boldsymbol{I}_{j.2}|$ ir γ_j, dydis $|\boldsymbol{I}_{j.2}|$, aprašomas (10) formule, sudarys fazinės trajektorijos „filtrą“ (23 pav.).

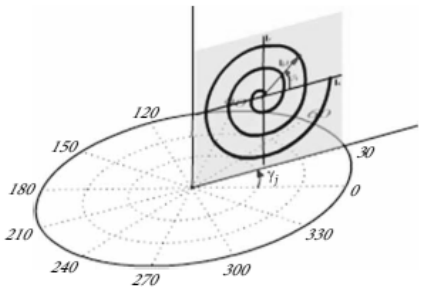
Kai bus netenkinama (9) sąlyga ir vektoriai $\boldsymbol{h}_\alpha$ bei $\boldsymbol{h}_\gamma$ taps tiesiškai priklausomi, polinėje koordinačių sistemoje bus formuojamas *Archimedo spiralės* vaizdas, nes šiuo atveju fazinės trajektorijos polinės diagramos plokštumos nekerta, o priklauso jai.

Aprašyto mikrolygmens struktūros charakterizavimo metodo taikymas ir gautųjų rezultatų analizė pateikiami antrojoje straipsnio dalyje.



22 pav. Fazinės trajektorijos energijos toro, kertamo rezonansinių plokštumų, paviršiuje (fragmentas)

Fig. 22. Phase trajectories on the surface of energy torus crossed by resonant planes (fragment)



23 pav. Fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos plokštuminės diagramos formavimo principas

Fig. 23. The principle of forming a planar diagram of the global bifurcation of phase space

5. Išvados

Šioje pirmojoje straipsnio dalyje pateiktas viendispersio ir daugiadispersio dalelių mišinio elgsenos skaitinio modeliavimo rezultatų apibendrinimas. Elgsena tirta mišinio kvazistatinio pusiausvyros būvio ribose. Aptarta modeliavimo metodika ir pagrįstas gautųjų rezultatų korektiškumas, remiantis kontroliuojamaisiais mechaniniais būvio parametrais. Gauta dalelių mišinių svorio jėgos pusiausvyra su skaičiuojamosios erdvės pagrindu patvirtino, kad pasiektas mišinio makrobūsenos kvazistatinis pusiausvyros būvis. Rezultatai yra pakankamo tikslumo.

Pagrindinis dėmesys straipsnyje skirtas mišinio mikro- ir makrostruktūros charakterizavimui, todėl pasirinkti trys struktūros charakterizavimo makrolygmeniu rodikliai: dalelių kontaktinės jėgos, mišinio užimama tūrio dalis (tankumas) ir koordinacijos skaičius. Atlikta šių dydžių analizė trims mišiniams. Lyginant viendispersio ir daugiadispersio mišinio dalelių užimamos tūrio dalies (tankumo) kitimą laike, pastebėtas lėtesnis tankumo augimas daugiadispersiuose mišiniuose, neatsižvelgiant į trintį. Tai paaiškinama padidėjusių kontaktinių jėgų zonų, „užblokuojančių“ mažesnes daleles, atsiradimu daugiadispersiuose mišiniuose.

Minėtųjų zonų atsiradimas paskatino mišinius tirti mikrolygiu. Pažymėtina, kad daugiadispersių dalelių mišinių mikrobūsenų tyrimas yra svarbus klausimas betono gamyboje, nes dalelių pasiskirstymas cemento tešloje turi tiesioginį ryšį su ilgalaikėmis konstrukcijų deformacijomis.

Dalelių mišinių mikrobūsenų charakterizavimo metodui sudaryti pasitelkti Hamiltono mechanikos principai. Tariama, kad suvaržytame ir riboto dydžio trikdžių veikiamame mišinyje kiekvienos dalelės elgsena (mikrobūsenos), esant kvazistatiniam pusiausvyros būviui, apibūdinama kaip trajektorija fazinėje erdvėje, dengianti tam tikrą energijos paviršių (torą), kurio forma priklauso nuo dalelės mechaninio laisvės laipsnio. Aprašyto metodo praktinei realizacijai sukurtas kompiuterinis algoritmas, kuriame iš modeliuojant DEM gautų duomenų formuojama kiekvienos dalelės fazinės trajektorijos gaubtinė. Ši gaubtinė parodo fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos dėsningumus ir naudotina mikrobūsenų pasireiškimo statistiniam įvertinimui bei atskiros mišinio dalelės stabilumui charakterizuoti.

Antrojoje straipsnio dalyje bus pateiktas šioje dalyje aprašyto mikrolygmens struktūros charakterizavimo metodo taikymas ir gautųjų rezultatų analizė.

Literatūra

Abellanas, M.; Hernandez, G.; Klein, R.; Neumann-Lara, V.; Urrutia, J. 1995. Voronoi diagrams and containment of families of convex sets on the plane, in *Proc. 11th Annu ACM Sympos. Comput. Geom.*, 71–78.

Aste, T.; Weaire, D. 2000. *The Pursuit of Perfect Packing.* Institute of Physics Publishing, Bristol. http://dx.doi.org/10.1887/0750306483

Balevičius, R.; Džiugys, A.; Kačianauskas, R. 2004. Discrete element method and its application to the analysis of penetration into granular media, *Journal of Civil Engineering and Management* 10(1): 3. http://dx.doi.org/10.1080/13923730.2004.9636280

Balevičius, R.; Kačianauskas, R.; Džiugys, A.; Maknickas, A.; Vislavičius, K. 2006. Investigation of performance of programming approaches and languages used for numerical simulation of granular material by the discrete element method, *Computer Physics Communications* 175(6): 404. http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2006.05.006

Balevičius, R.; Kačianauskas, R.; Mroz, Z.; Sielamowicz, I. 2011. Analysis and DEM simulation of granular material flow patterns in hopper models of different shapes, *Advanced Powder Technology* 22: 235.

Bernal, J. D.; Mason, J. 1960. Packing of spheres: co-ordination of randomly packed spheres, *Nature* 188: 910. http://dx.doi.org/10.1038/188910a0

Broer, H. W. 2004. KAM theory: the legacy of Kolmogorov's 1954 paper, *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* 41(4): 507–521.

Cundall, P. A.; Strack, O. D. L. 1979. A Discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* 29: 47. http://dx.doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47

Džiugys, A.; Peters, B. J. 2001. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers, *Granular Material* 3(4): 231. http://dx.doi.org/10.1007/PL00010918

Edwards, S. F.; Oakeshott, R. B. S. 1989. Theory of powders, *Physica* 157: 1080–1090. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V. http://dx.doi.org/10.1016/0378-4371(89)90034-4

Gekle, S. 2005. PhD: *Construction of Invariant Tori in Near-Integrable Hamiltonian systems with Three Degrees of Freedom.* Stuttgart. 83 p.

Hilborn, C. R. 2008. *Chaos and Nonlinear Dynamics. An introduction for Scientists and Engineers.* Second edition. Oxford: Oxford University Press. 654 p.

Yu, A. B.; Zou, R. P. 1998. Prediction of the porosity of particle mixturs: a review, *KONA Powder Part.* 16: 68.

Lechenault, F.; da Cruz, F.; Dauchot, O.; Bertin, E. 2006. Free volume distributions and compactivity measurement in a bidimensional granular packing, *J. Stat. Mech.* P0700.

Lichtenberg, A. J.; Lieberman, M. A. 1992. *Regular and Chaotic Dynamics.* Second edition. Applied Mathematical Sciences 38. New York: Springer-Verlag. 716 p.

Mason, G. 1968. Radial distribution functions from small packings of spheres, *Nature* 217: 733. http://dx.doi.org/10.1038/217733a0

Mindlin, R. D.; Deresiewicz, H. 1953. Elastic spheres in contact under varying oblique forces, *Journal of Applied Mechanics* 20: 327.

Popov, V. L. 2010. *Contact Mechanics and Friction*: Physical Principles and Applications. Berlin: Springer-Verlag. 362 p. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-10803-7

Scott, G. D. 1962. Packing of spheres: packing of equal spheres, *Nature* 194: 956. http://dx.doi.org/10.1038/194956a0

SIMULATION OF POLY- AND MONODISPERSED GRANULAR MATERIAL. PART I: STRUCTURE CHARACTERISTICS

G. Pocius, R. Balevičius

Abstract. The paper presents two part investigation into the behaviour of poly- and monodispersed granular material applying the discrete element method (DEM). Granular aggregates involve the compaction of spherical particles within the wall-bounded domain under gravity force and randomly induced small velocities of the grains.

Part I discusses the modelling technique and correctness of the obtained results and analyzes the characteristics of granular material structure after the compaction process relying on the coordination number, particle contacting forces and volume fraction distribution. Referring to the stressed arches, the locked clusters of granular material containing small particles were detected. For the purpose of providing the characterization of micro and macrostates of these clusters, Hamiltonian mechanics was introduced.

Keywords: discrete element method, polydispersed, monodispersed granular material, microstructure, quasistatic state, Hamiltonian mechanics, phase space.

Gvidas POCIUS. BSc (CE) at the Department of Reinforced Concrete and Masonry Structures, Vilnius Gediminas Technical University, Lithuania. Research interests: influence of concrete composition on the mechanical behaviour of structures, computer-aided modelling of structures.

Robertas BALEVIČIUS. MSc (CE), PhD at the Department of Reinforced Concrete and Masonry Structures, Vilnius Gediminas Technical University, Lithuania. Research interests: mechanics of time-dependent materials, finite and discrete element methods.

C.2. Daugiadispersio ir viendispersio dalelių mišinio elgsenos tyrimas. II dalis: stabilumo būsenų charakterizavimas

STATYBINĖS KONSTRUKCIJOS IR TECHNOLOGIJOS
ENGINEERING STRUCTURES AND TECHNOLOGIES

DAUGIADISPERSIO IR VIENDISPERSIO DALELIŲ MIŠINIO ELGSENOS TYRIMAS. II DALIS: STABILUMO BŪSENŲ CHARAKTERIZAVIMAS

Gvidas Pocius[1], Robertas Balevičius[2],

[1,2] Vilniaus Gedimino Technikos Universitetas, Saulėtekio al. 11, Vilnius, Lietuva; gpocius@gmail.com, robertas.balevicius@vgtu.lt

Received , accepted

Santrauka. Sioje straipsnio dalyje pagrindinis dėmesys skiriamas viendispersio ir daugiadispersio sferinių dalelių mišinio mikrostruktūros charakterizavimui, analizuojant atskirų mišinio dalelių stabilumą kvazistatiniame būvyje. Tiriamos ir vizualizuojamos atskirų dalelių greičio vektorių normalinių plokštumų formuojamos tekstūros, kurios kvazistatiniame būvyje interpretuojamos kaip tam tikri rezonansinio poveikio dariniai, gaubiantys dalelių paviršių.

Reikšminiai žodžiai: Diskrečiųjų elementų metodas, daugiadispersis, viendispersis sferinių dalelių mišiniai, makrostruktūra, mikrostruktūra, kvazistatinis dalelių pusiausvyros būvis, Hamiltono mechanika, fazinė erdvė.

1. Įvadas

Modeliuojant diskrečiųjų elementų metodu (DEM), daugelyje atvejų svarbu analizuoti ne tik dalelių dinamiką, bet ir kvazistatinį būvį, kurio metu dalelių greičiai, pagreičiai nykstamai sumažėja. Daugelis kontinuumo mechanikos sprendinių išvedami, laikantis dalelių greičių invariantiškumo prielaidos laiko ir padėties atžvilgiu. Toks požiūris iš esmės supaprastina teorinius sprendinius, nes nebūtina ieškoti įtempių ir greičių sąsajos, lemiančios visos medžiagos įtempių būvį. Edwards (1989) pasiūlyta kontroversiška teorija, paremta statistine termodinamika, pateikė visiškai naują požiūrį į granuliuotą medžiagą, pabrėžiant dalelių mikrobūsenų tyrimo svarbą.

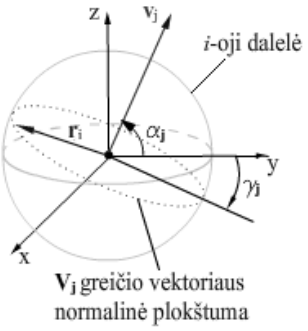
Diskrečiųjų elementų metodas, kadangi pagrįstas judėjimo lygtimis, daugeliu atvejų labai gerai modeliuoja dalelių dinaminį procesą. Pereinant iš šio proceso link kvazistatinio būvio medžiagos elgsenos, susiduriama su tam tikrais sunkumais. Norint gauti kvazistatinę būseną, dažnai nepakanka įvertinti tik dalelių trintį ir būtina įvesti kitus kinetinės energijos praradimo faktorius, tokius kaip klampus slopinimas. Toks modeliavimas lemia kvazistatinį būvį, tačiau išlieka tam tikras dalelių mikrobūsenų kitimas, susijęs su pusiausvyros padėčių stabilumu, nes energija, kaip taisyklė, nesumažėja iki visiško nulio.

Kvazistatinis pusiausvyros būvis, ypač taikant DEM, dalelių mikrolygmenyje literatūroje beveik nėra nagrinėtas. DEM taikymo galimybės, atsižvelgiant į medžiagos pusiausvyros sąlygas, nagrinėtos (Xuxin ir kt., 2008). Šiame darbe autoriai kvazistatinio būvio pasiekimą gaudavo algoritmiškai kalibruodami išreikštinę dinamikos lygčių sprendimo schemą. Pusiausvyros kriterijumi laikyti homogenizuoti įtempiai, gauti skaičiuojant vidutinę reikšmę tam tikrame dalelių tūryje veikiančių dalelių kontakto jėgų, ir tą tūrį veikiančių išorinių jėgų.

Pirmojoje straipsnio dalyje tirta viendispersio ir daugiadispersio dalelių mišinio elgsena, aptarta modeliavimo metodika. Kvazistatinio būvio ribose gautas daleles veikiančių kontaktinių jėgų pasiskirstymas, analizuota jėgų-reakcijų pusiausvyra, dalelių koordinacijos skaičius bei struktūros tankumas. Šioje straipsnio dalyje unikaliu būdu analizuojant atskirų mišinio dalelių stabilumą, pateikiama, pirmojoje dalyje aprašyto, mikrolygmens struktūros charakterizavimo modelio realizacija.

2. Tyrimo rezultatai

Šioje straipsnio dalyje nagrinėjamas atskirų dalelių stabilumas mišinio kvazistatinės pusiausvyros būvyje. Kvazistatinė pusiausvyra yra sąlyginė pusiausvyra, kadangi ji reiškia dalelių makroskopinės būsenos stabilizavimąsi, kuomet dalelė yra suvaržoma apie ją susiformavusios tam tikros mišinio struktūros, tačiau mikrolygyje tam tikras judėjimas vis dar yra įmanomas, sąlygojantis mikrobūsenų kitimą.

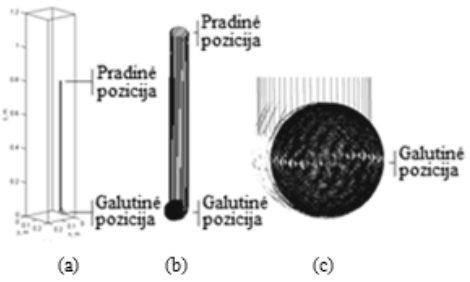


1 pav. *i*-osios dalelės v_j greičio vektoriaus normalinės plokštumos orientacija (čia r_i - *i*-osios dalelės spindulio vektorius)

Fig. 1. Orientation of the normal plane of the i^{th} particle's velocity vector v_j (here r_i is the radius vector of the i^{th} particle)

Siekiant ištirti dalelės mikrobūsenas, sukurtas kompiuterinis algoritmas, kuriame pasirenkama viena konkreti mišinio dalelė ir, pasinaudojant diskrečiųjų elementų metodu gautais rezultatais, erdvėje atidedamos visos jos greičio vektorių normalinės plokštumos. Šios apvalios plokštumos, kurių spindulys lygus dalelės spinduliui r_i, yra statmenos greičio vektoriams (1 pav.). Tokiu būdu gaunama šių plokštumų gaubtinė, vaizduojanti dalelės trajektorijos kitimą mišinyje viso modeliavimo metu.

2 pav. parodyta dalelės greičio vektorių normalinių plokštumų suformuota gaubtinė. Krisdama *i*-oji dalelė (kol jos trajektorija nedaug trikdoma) turi greitį, nukreiptą žemyn, taigi, greičio vektorių normalinės plokštumos suformuoja cilindrą (2 b pav.). Šis cilindras gali būti laikomas greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtine. Cilindro spindulys apytiksliai lygus dalelės spinduliui.



2 pav. *i*-osios dalelės greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinė: (a) gaubtinės padėtis skaičiuojamojoje erdvėje; (b) pilnoji gaubtinė; (c) gaubtinė mišinio kvazistatinės pusiausvyros būvio sąlygomis

Fig. 2. Envelope of the i^{th} particle's velocity vectors normal planes: (a) position of the envelope in the computational space; (b) full envelope; (c) envelope in mixture's quasistatic equilibrium state

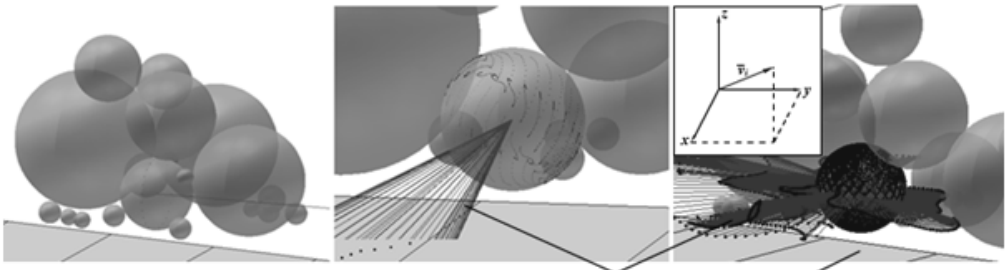
Kadangi dalelių stabilumas tiriamas mišinio kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis, tad vertinamas tik 2 c pav. parodytas evoliucijos etapas. 4 pav. parodyta detali 2 c pav. susidarymo eiga, kartu su normalinėmis plokštumomis pavaizduojant ir greičio vektorius. 3 pav. vaizduojama galutinėje pozicijoje (2 a pav.) esanti atsitiktinai pasirinkta daugiadispersio mišinio dalelė, kartu su artimiausiomis jos judėjimą varžančiomis dalelėmis. Ši dalelė turi tik mikrolygio poslinkius, todėl varžančioje aplinkoje prasideda galimai chaotiškas dalelės greičio krypties kitimas, suformuojant visą vektorių lauką su atitinkamomis jų normalinėmis plokštumomis. Šiuo atveju greičio vektorių normalinių plokštumų gaubtinė pavirsta į sferinį r_i spindulio paviršių su tam tikra *tekstūra* (4 c pav.).

Analogiškus greičio vektorių ir jų normalinių plokštumų laukus sudarius kiekvienai daugiadispersio mišinio dalelei bei palyginus rezultatus, vektorių laukuose akivaizdžių dėsningumų įžvelgti nepavyko, tuo tarpu normalinių plokštumų sankirtos dalelių paviršiuje sudaryta *tekstūra* daugumoje atvejų parodė invariantiškumą, nepriklausomai nuo trinties mišinyje (3 pav.).



3 pav. *i*-osios daugiadispersio mišinio dalelės greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje sudaroma *tekstūra*

Fig. 3. Texture on the i^{th} polydispersed mixture particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes

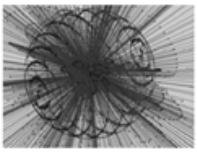


4 pav. *i*-osios dalelės greičio vektorių lauko plėtotė varžančioje aplinkoje: (a) pirmasis greičio vektorius (raudonas) ir jo normalinė plokštuma (mėlynas taškinio perimetro apskritimas); (b) dalinė vektorių lauko vizualizacija; (c) pilnas vektorių laukas ir normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje sudaroma *tekstūra*

Fig. 4. Development of the i^{th} particle's velocity vectors field in the constrained environment: (a) the first velocity vector (red) and it's normal plane (the blue circle with dotted circumference)

3 pav. pavaizduota *tekstūra* nėra vienintelė pastebėta dalelių mišiniuose. Viendispersiame mišinyje dominuoja visiškai kitokia *tekstūra*, turinti *koncentrinių apskritimų* pavidalą (5 pav.).

Koncentrinių apskritimų tekstūros atvejai aptikti ir daugiadispersių mišinių dalelėse, esančiose prie skaičiuojamosios erdvės sienų. Tai leidžia daryti išvadą, kad susiformavusių *tekstūrų* pavidalas yra tiesiogiai susijęs su dalelių mechaniniu laisvės laipsniu.



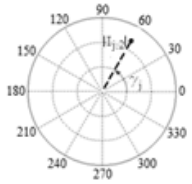
5 pav. *i*-osios viendispersio mišinio dalelės greičio vektorių ir jų normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje sudaroma *tekstūra*

Fig. 5. Texture on the i^{th} monodispersed mixture particle's surface formed by the intersection of the velocity vectors normal planes

Siekiant detaliau išanalizuoti *tekstūros* dalelių paviršiuje formavimosi eigą, pagal pirmojoje straipsnio dalyje aprašytą metodiką sudaroma polinė diagrama (6 pav.), vaizduojanti dalelės greičio vektorių normalinių plokštumų posūkio kampo γ_j (1 pav.) bei dydžio $|\boldsymbol{I}_{j,2}|$, priklausančio nuo kampo α_j (1 pav.) ir apskaičiuojamo pagal (1) formulę, kitimą laike.

$$|\boldsymbol{I}_{j,2}| = |\boldsymbol{n}| \cdot \alpha_j, \qquad (1)$$

čia $|\boldsymbol{n}| = 1$ - vienetinio normalinio vektoriaus modulis.

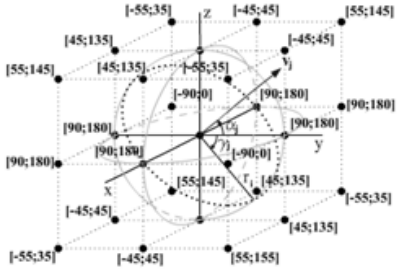


6 pav. Kintamieji $|\boldsymbol{I}_{j,2}|$ ir γ_j polinėje koordinačių sistemoje

Fig. 6. Variables $|\boldsymbol{I}_{j,2}|$ and γ_j in the polar coordinate system

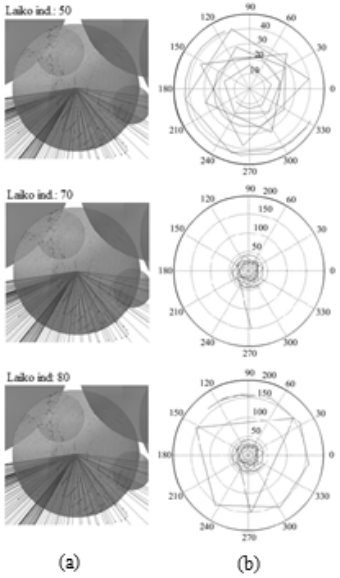
Kompiuteriniu algoritmu gautų kampų α_j ir γ_j kitimo ribos parodytos 7 pav.

8-10 pav. pateikiama greičio vektorių normalinių plokštumų tinklo susidarymo eiga daugiadispersio mišinio *i*-osios dalelės paviršiuje, kartu su greičio vektoriaus krypties kitimą vaizduojančiais poliniais grafikais (6 pav).



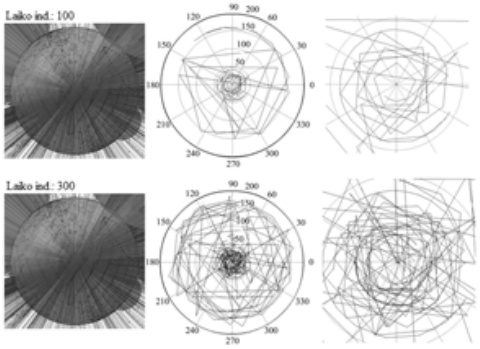
7 pav. Kampai α_j ir γ_j, greičio vektoriui $\boldsymbol{v}_j$ esant konkrečiame taške. Laužtiniuose skliaustuose pažymėti kampai yra. $[\gamma_j, \alpha_j]$.

Fig. 7. Angles α_j and γ_j, when velocity vector $\boldsymbol{v}_j$ is on a particular point. The numbers in brackets are $[\gamma_j, \alpha_j]$.



8 pav. *i*-osios dalelės greičio vektorių ir jų normalinių plokštumų laukų formavimosi eiga daugiadispersiame mišinyje: (a) greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje suformuota *tekstūra* konkrečiu laiko momentu; (b) greičio vektoriaus krypties kitimas polinėje koordinačių sistemoje. Laiko indeksai: 50, 70, 80.

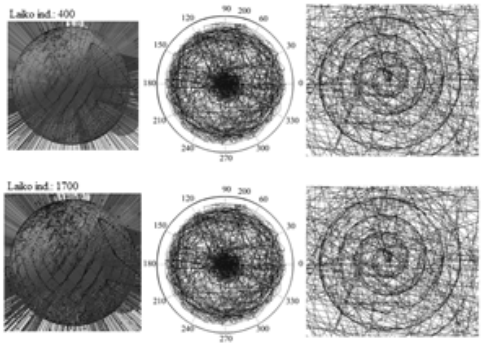
Fig. 8. Formation of the i^{th} particle's velocity vectors and their normal planes field in the polydispersed mixture: (a) texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes at particular time; (b) change of the velocity vector's direction in polar coordinate system. Time indexes: 50, 70, 80.



(a) (b) (c)

9 pav. *i*-osios dalelės greičio vektorių ir jų normalinių plokštumų laukų formavimosi eiga daugiadispersiame mišinyje: (a) greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje suformuota *tekstūra* konkrečiu laiko momentu; (b) greičio vektoriaus krypties kitimas polinėje koordinačių sistemoje; (c) centrinė diagramos dalis. Laiko indeksai: 100, 300.

Fig. 9. Formation of the i^{th} particle's velocity vectors and their normal planes field in the polydispersed mixture: (a) texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes at particular time; (b) change of the velocity vector's direction in polar coordinate system. Time indexes: 100, 300.

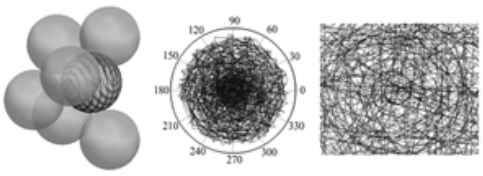


(a) (b) (c)

10 pav. *i*-osios dalelės greičio vektorių ir jų normalinių plokštumų laukų formavimosi eiga daugiadispersiame mišinyje: (a) greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje suformuota *tekstūra* konkrečiu laiko momentu; (b) greičio vektoriaus krypties kitimas polinėje koordinačių sistemoje; (c) centrinė diagramos dalis. Laiko indeksai: 400, 1700.

Fig. 10. Formation of the i^{th} particle's velocity vectors and their normal planes field in the polydispersed mixture: (a) texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes at particular time; (b) change of the velocity vector's direction in polar coordinate system. Time indexes: 400, 1700.

Viendispersio mišinio dalelėms, pasižyminčioms *koncentrinių apskritimų tekstūra*, sudaryta minėtoji diagrama (6 pav.) rodo skirtingą charakterį, lyginant su 8-10 pav., tačiau vis vien įžvelgiamas tam tikras diagramos centrinės dalies panašumas (11 pav.).

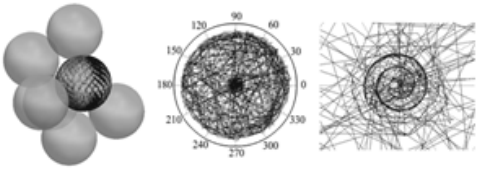


(a) (b) (c)

11 pav. Normalinių plokštumų laukas viendispersio mišinio *i*-oje daleléje, pasižyminčioje *koncentrinių apskritimų tekstūra*: (a) greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje suformuota *tekstūra* galutiniu laiko momentu; (b) greičio vektoriaus krypties kitimas polinėje koordinačių sistemoje; (c) centrinė diagramos dalis

Fig. 11. Normal planes field in the monodispersed mixture's i^{th} particle, which is characterized by concentric circles texture: (a) The final texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes; (b) change of the velocity vector's direction in polar coordinate system; (c) the central part of the chart

Kaip jau minėta, paviršiaus *tekstūros* pavidalas yra susijęs su dalelės mechaniniu laisvės laipsniu mišinyje, todėl viendispersiame mišinyje aptikta *tekstūros*, artimos pastebėtai daugiadispersiuose mišiniuose, pasireiškimo atvejų (12 pav.).



(a) (b) (c)

12 pav. Normalinių plokštumų laukas viendispersio mišinio *i*-oje daleléje, pasižyminčioje daugiadispersiuose mišiniuose dominuojančia *tekstūra*: (a) greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje suformuota *tekstūra* galutiniu laiko momentu; (b) greičio vektoriaus krypties kitimas polinėje koordinačių sistemoje; (c) centrinė diagramos dalis

Fig. 12. Normal planes field in the monodispersed mixture's i^{th} particle, which is characterized by the texture, dominant in polydispersed mixtures: (a) The final texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes; (b) change of the velocity vector's direction in polar coordinate system; (c) the central part of the chart

8-10 pav. parodo, kad daugiadispersio mišinio dalelėse vyksta kvaziperiodinis polinės koordinačių sistemos (6 pav.) dydžių $|I_{j,2}|$ ir γ_j brėžiamos trajektorijos „šokinėjimas“ tarp diagramos centrinės ir išorinės dalies, taip suformuojant aiškų *spiralinį kontūrą* centrinėje dalyje. Viendispersiame mišinyje panašus vaizdas pastebimas 12 pav., o 11 pav. matomas tik plonos vienasluoksnės „spiralės“ susiformavimas.

3. Tyrimo rezultatų interpretacija

Tiriant 8-10 pav. grafikus minėta, jog dalelių greičio vektorių krypties kitimą daugiadispersiuose mišiniuose vaizduojančiose polinėse diagramose pastebimas charakteringas grafiko kreivės kvaziperiodinis „šokinėjimas“ tarp centrinės ir išorinės diagramos dalies. Schmidt (2009) teigia, jog kvaziperiodinis judesys, tiksliau, disipatyvioje (nagrinėjamu atveju disipaciją sukelia slydimo ir riedėjimo trintys bei klampaus kontakto modelis) netiesinėje sistemoje (dalelių mišinys laikomas netiesine sistema) gali būti sužadinami neslopinami svyravimai (Leine, Campen) šiais atvejais:

- Netiesinėse sistemose su savuoju svyravimų dažniu, veikiamose išorinės periodinės jėgos ir šie dažniai konkuruoja tarpusavyje.
- Netiesinėse sistemose, kurios spontaniškai pradeda svyruoti dviem dažniais, kintant vienam iš sistemos parametrų. Šiuo atveju vyksta konkuravimas tarp skirtingų pačios sistemos svyravimo dažnių formų.

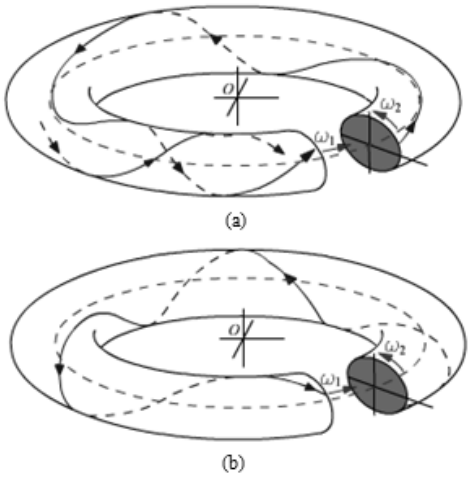
Dalelių mišiniuose netiesiškumų „šaltiniais“ galėtų būti: netiesinės-tamprios kontakto spyruoklės ir netiesinės kraštinės sąlygos.

Grįžtant prie pirmoje straipsnio dalyje aprašyto atskiros dalelės elgsenos nagrinėjimo kaip dinaminės sistemos, artimos Hamiltoninei, 8-10 pav. parodytos dalelės elgsenos plėtotę, galima iliustruoti dvimačiu energijos toru fazinėje erdvėje (13 pav.). 13 pav. reikėtų interpretuoti kaip konkrečios nagrinėjamos dalelės fazinės trajektorijos judėjimą energijos toro paviršiumi, charakterizuojamu dviem kampiniais dažniais ω_1 ir ω_2 (šie dažniai susiję su dalelės laisvės laipsniais), atitinkamai, didesniuoju ir mažesniuoju apskritimu. Kadangi laikoma, jog nagrinėjamų dalelių mišinių elgsena yra tik artima Hamiltoninei, todėl, pagal Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) teoremą (Broer, 1954), energijos lygiai nebėra izoliuoti vienas nuo kito ir energijos toro skerspjūvį reikėtų įsivaizduoti esantį spiralinės formos. Santykis tarp kampinių dažnių gali būti racionalus ir irracionalus. Jei dažniai turi racionalų santykį, fazinės trajektorijos judesys yra periodinis ir ji grįš į savo pradinį tašką (rezonansinė elgsena (Lacey, 2003)) (13 b pav.), jei irracionalus – toro paviršius tankiai užpildomas trajektorijomis (KAM trajektorijos) (13 a pav.). KAM teorema teigia, jog trajektorijos su racionaliaisiais santykiais yra nestabiliausios veikiant trikdžiams.

Gali egzistuoti ryšys tarp fazinės trajektorijos plėtotės energijos paviršiuje ir DEM pagalba analizuotų mišinių dalelių paviršiuose greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos suformuotos *tekstūros*. Ši *tekstūra* gali būti interpretuojama kaip dalelės fazinė trajektorija energijos paviršiuje, o plonas kvazikristalinę struktūrą sudarančių juostų tinklas (14 pav.) yra energijos paviršių kertančios rezonansinės plokštumos (Lacey, 2003), atskiriančios dviejų skirtingų judėjimo režimų trajektorijas.

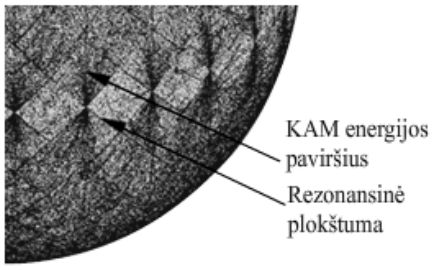
pagrindžiama aprašytu ryšiu tarp dalelės fazinės erdvės ir paviršiaus *tekstūros*. Galima manyti, jog ši gaubtinė išreikš fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos charakterį.

Pasinaudojant ankstesniame skyriuje pateiktomis dalelės greičio vektoriaus krypties kitimo eigą vaizduojančiomis diagramomis ir išanalizavus jų dėsningumus, trimatis dalelės fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos pavidalas gali būti atvaizduotas taikant (Lichtenberg, Lieberman, 1992) modelį (15 pav.).



13 pav. Fazinės trajektorijos dvimačio energijos toro paviršiuje: (a) irracionalus kampinių dažnių santykis; (b) racionalus kampinių dažnių santykis (rezonansinis toras)

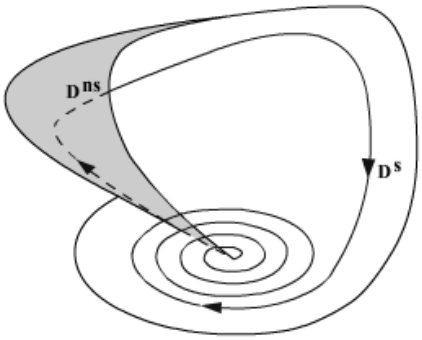
Fig. 13. Phase trajectories on two-dimensional energy torus surface: (a) irrational ratio of the angular frequencies; (b) rational ratio of the angular frequencies (resonant torus);



14 pav. Greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelės paviršiuje suformuotos *tekstūros* interpretacija (fragmentas)

Fig. 14. Interpretation of texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes (fragment)

Buvo minėta, kad sužadinamų neslopinamų svyravimų pasireiškimas netiesinėje fizinėje sistemoje (McMillan, 1997) yra glaudžiai susijęs su sistemos pusiausvyros padėčių stabilumu. Taigi, siekiant charakterizuoti dinaminės sistemos mikrobūseną konkrečiu laiko momentu, būtina nustatyti jos fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos (Lichtenberg, Lieberman, 1992), išreiškiančios kokybinius evoliucionuojančios dinaminės sistemos elgsenos pokyčius, pavidalą. Šiam tikslui pasinaudosime anksčiau pateiktu teiginiu, jog dalelės greičio vektoriaus krypties kitimą vaizduojanti polinė diagrama (6 pav.) išreiškia dalelės, kaip dinaminės sistemos, fazinių trajektorijų, esančių energijos toro paviršiuje, sankirtos taškų su diagramos plokštuma, gaubtinę. Visa tai parodytą 16 a pav., dinaminėje evoliucijoje patyrė rezonansinį poveikį (Lacey, 2003), charakterizuojamą skirtingų judėjimo režimų pasireiškimu ir suformuota susikertančių juostų *tekstūra* dalelės paviršiuje. *Koncentrinių apskritimų* ar panašaus pavidalo paviršiaus *tekstūra* (16 b pav.) rodo, jog dinaminėje evoliucijoje dalelės buvo suvaržytos ir, nesant *hiperbolinių ypatingųjų taškų* (Broer, 2004), rezonansinis poveikis nepasireiškė, kas leido įvykti greitam dalelės būsenos stabilizavimuisi.



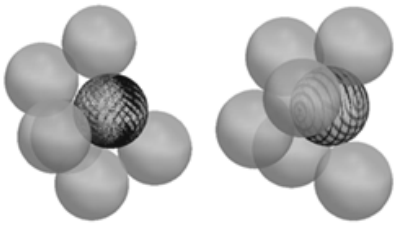
15 pav. Kvazistatinio pusiausvyros būvio daugiadispersio mišinio dalelių dinaminės elgsenos homoklininės globaliosios bifurkacijos trimatė interpretacija: čia D^{s} vaizduoja stabilią fazinės erdvės daugdarą, o D^{ns} – nestabilią daugdarą (mėlyna linija rodo tipinės fazinės trajektorijos charakterį)

Fig. 15. Three-dimensional interpretation of polydispersed mixture's particles dynamical behavior's homoclinic global bifurcation in a quasistatic equilibrium state: here D^{s} shows a stable phase space manifold and D^{ns} shows unstable manifold (blue line shows the typical character of phase trajectory)

15 pav. parodyta globaliosios bifurkacijos trimatė reprezentacija (Lichtenberg, Lieberman, 1992) charakterizuojama *homoklinine orbita* į fiksuotą tašką, sudaryta iš stabilios daugdaros D^{s} (*angl.* manifold) ir nestabilios daugdaros D^{ns}. Viena iš dviejų D^{s} atšakų fazinėje erdvėje visada konverguoja link *spiralinio kontūro*, o atšaka D^{ns} yra trumpa ir atlieka fazinės tajektorijos atkūrimo funkciją. Daugdarai D^{s} artėjant prie „*spiralės*“ centro, pasireiškia sąveika su D^{ns} (De Feo, 2004), kurios metu fazinėje erdvėje sukuriamas begalinis skaičius judėjimo trajektorijų su visais galimais periodais.

Literatūroje (De Feo, 2004) randama, jog minėtosios fazinės trajektorijos globaliosios bifurkacijos elgsena yra artima Shilnikov globaliajai bifurkacijai.

Išanalizavus atskiros dalelės fazinės trajektorijos elgsenos dėsningumus bei nustačius jos globaliosios bifurkacijos pavidalą, galima charakterizuoti mišinių atskirų dalelių būseną pagal jų greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos paviršiuje suformuotą *tekstūrą*. Dalelės, kurių paviršiaus *tekstūra* yra panaši į jos diagrama, charakterizuojanti kiekvieną konkrečią dalelės būsena (kartu ir jos pasireiškimo dažnumą, priklausantį nuo stabilumo), įgalina statistiškai vertinti kiekvienos būsenos pasireiškimo tikimybę, kas yra svarbu charakterizuojant viendispersių ir ypač daugiadispersių dalelių mišinių mikrobūsenas, suvaržytas išorinės makro lygmens struktūros. Rezonansinės elgsenos pasireiškimas gali būti naudojamas kaip būdas tinkamai parinkti granuliometrinę sudėtį bei medžiagos fizikines charakteristikas, gaunant didžiausią sistemos atsaką (Muratov 2005, Sailer, 2006, Schlesner, 2008), kas sudarytų galimybes efektyviam dalelių mišinių tankinimo procesui ir jų struktūros organizavimui. Tyrimai taip pat gali būti naudingi analizuojant įvairių DEM modelių kvazistatinės pusiausvyros generuojamus rezultatus.



16 pav. Greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelių paviršiuje suformuotos *tekstūros* interpretacija: (a) stiprus rezonansinis poveikis; (b) stabilizavimasis be rezonansinio poveikio pasireiškimo

Fig. 16. Interpretation of texture on the particle's surface, formed by the intersection of the velocity vectors normal planes: (a) strong resonant effect; (b) stabilization without resonant effect

4. Išvados

Šioje antrojoje straipsnio dalyje nagrinėtas kvazistatinio pusiausvyros būvio mišinio dalelių greičio vektorių normalinių plokštumų sankirtos dalelių paviršiuje formuojamos *tekstūros* įvertinimui tirti pasiūlytas modelis. Tyrimo tikslams sukurtas kompiuterinis algoritmas, kurio pagalba, pasinaudojant pirmojoje dalyje aprašytu DEM modeliavimu gautais rezultatais daugiadispersiams ir viendispersiam dalelių mišiniams, atvaizduotos atskirų dalelių greičio vektorių krypties kitimą, kvazistatinio pusiausvyros būvio sąlygomis, charakterizuojančios diagramos polinėje koordinačių sistemoje. Galima manyti, jog šios diagramos parodo dalelių fazinių trajektorijų sankirtos taškų su diagrama gaubtinę, išreiškiančią šių trajektorijų globaliosios bifurkacijos pavidalą. Gautos globaliosios bifurkacijos charakteris panašus į Shilnikov (De Feo, 2004) globaliąją homoklininą bifurkaciją. Taigi, galima susieti atskirų dalelių paviršiuje suformuotą tekstūra su jų fazinių trajektorijų elgsena, priklausančia nuo dalelės mechaninio laisvės laipsnio mišinyje, bei charakterizuoti atskiros dalelės stabilumo būseną. Fazinių trajektorijų globaliosios bifurkacijos pavidalą turinti diagrama taip pat leido charakterizuoti daugiausia daugiadispersių dalelių mišiniuose pasireiškiančius ir nuo trinties beveik nepriklausančius sužadinamuosius neslopinamuosius svyravimus. Šie svyravimai gali būti siejami su kontakto jėgų modelių netobulumais, skaitinių metodų paklaidomis.

Kalbant apie gautųjų rezultatų praktinę vertę, galima pasakyti, jog fazinės trajektorijos globaliosios bifurkaci-

Simulation of the poly- and monodispersed granular material. Part II: The stability state characterization

G. Pocius, R. Balevičius

Abstract. In the Part I of the paper, a granular aggregates structure obtained after the compaction process of poly- and monodispersed spherical particles was characterized in terms of the coordination number, particles contacting forces and volume fraction distributions. Meanwhile, this part of investigation deals with the stability state characterization under the quasistatic conditions of the formed granular aggregates structure. The method proposed is based on the visualization of the plane of the particle radius size plotted normally to the particle velocity vector. At the beginning of the compacting process, when the

Literatūra

Broer H. W. KAM theory: the legacy of Kolmogorov's 1954 paper. *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, 41(4), 2004, p. 507-521.

De Feo O. Qualitative Resonance of Shilnikov-like Strange Attractors, Part I: Experimental Evidence. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, World Scientific Publishing Company, Vol. 14, No. (3), (2004) 873-891.

Edwards S. F., Oakeshott R. B. S. Theory of Powders. Physica. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V., 1989, 157, p. 1080-1090.

Lacey S. M. PhD: Ray and Wave Dynamics in Three Dimensional Asymmetric Optical Resonators. 2003 August. Oregon. 201 p.

Leine R.I, Campen D. H. Some Aspects of Bifurcations in Non-Smooth Mechanical Systems. 2011-09-29. Interneto prieiga: www.zfm.ethz.ch

Lichtenberg A. J., Lieberman M. A. Regular and Chaotic Dynamics. Second Edition. Applied Mathematical Sciences 38. New York: Springer-Verlag, 1992. 716 p.

McMillan. A Non-Linear Friction Model for Self-Excited Vibrations. *Journal of Sound and Vibration*. Staffordshire: 1997, 205. p. 323-335.

Muratov C. B., Vanden-Eijnden E., Weinan E. Self-induced stochastic resonance in excitable systems. Physica. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V., 2005, (210), p. 227-240.

Sailer Franz-Xaver H. PhD: Controlling Excitable Media With Noise. 2006 January 10. Berlin. 148 p.

Schlesner J., Zykov V. S., Brandtstadter H., Gerdes I., Engel H. Efficient control of spiral wave location in an excitable medium with localized heterogeneities. *New Journal of Physics* 10 (2008), 17 p.

Schmidt G., Tondl A. Non-Linear Vibrations. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. 421 p.

Xuxin T., Andrade J. E. Criteria for static equilibrium in particulate mechanics computations. *Int. J. Numer. Meth. Engng* 2008; 75: 1581-1606.

discrete particle drops down under the gravity acceleration (almost free of contact with other particles), the planes plotted at each time step form the cylinder-like pattern. At the quasistatic state, when the acceleration of the settled particles tends to negligible values, the plot of these planes represents a certain texture appearing on the particle surface. For the interpretation of these textures, Shilnikov's homoclinic bifurcation theory was discussed and applied. In particular, it was found that the quasistatic state specifying textures were mainly resulted from the resonant effect depending on the degree of freedom for the analyzed particles.

Keywords: Discrete Element Method, poly-dispersed, mono-dispersed granular material, micro-structure, quasi-static state, Hamiltonian mechanics, phase space.

Gvidas POCIUS. BSc (CE), Dept of Reinforced Concrete and Masonry Structures at Vilnius Gediminas Technical University, Vilnius, Lithuania. Research interests: concrete composition's influence on the mechanical behavior of structures, computer-aided modelling of structures.

Robertas BALEVIČIUS. MSc (CE), PhD. Dept of Reinforced Concrete and Masonry Structures at Vilnius Gediminas Technical University, Vilnius, Lithuania. Research interests: mechanics of time-dependent materials, finite and discrete element methods.