

Univerzitet u Beogradu
Fizički fakultet

Svetlana Živković-Radeta

**STRUKTURALNE PROMENE U
GRANULARNOM MATERIJALU TOKOM
PROCESA KOMPAKTIFIKACIJE**

doktorska disertacija

Beograd, 2013

Univerzitet u Beogradu
Fizički fakultet

Svetlana Živković-Radeta

**STRUKTURALNE PROMENE U
GRANULARNOM MATERIJALU TOKOM
PROCESA KOMPAKTIFIKACIJE**

doktorska disertacija

Beograd, 2013

University of Belgrade
Faculty of physics

Svetlana Živković-Radeta

**STRUCTURAL CHANGES OF THE
GRANULAR MATERIAL DURING THE
COMPACTION PROCESS**

doctoral dissertation

Beograd, 2013

Mentor, član komisije

Dr. Zorica Jakšić

Viši naučni saradnik

Institut za fiziku Beograd

Univerzitet u Beogradu

Član komisije

Dr. Milan Knežević

Redovni profesor

Fizički fakultet Beograd

Univerzitet u Beogradu

Član komisije

Dr. Sunčica Elezović-Hadžić

Redovni profesor

Fizički fakultet Beograd

Univerzitet u Beogradu

Član komisije

Dr. Slobodan Vrhovac

Naučni savetnik

Institut za fiziku Beograd

Univerzitet u Beogradu

Doktorska disertacija Svetlane Živković-Radeta je odbranjena

Doktorska disertacija pod nazivom „Strukturalne promene u granularnom materijalu tokom procesa kompaktifikacije” je urađena u Centru za Fotoniku Instituta za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom mentora prof. dr Zorice Jakšić.

Veliku zahvalnost dugujem svom mentoru prof. dr Zorici Jakšić na ukazanom poverenju i pomoći koju mi je pružila tokom izrade doktorske disertacije.

Takođe se zahvaljujem prof. dr Slobodanu Vrhovcu na velikoj pomoći tokom obrade teorijskih i eksperimentalnih rezultata, i na pomoći u obradi teksta.

I ovu priliku bih iskoristila da se zahvalim, na velikom strpljenju tokom mojih doktorskih studija, svojoj majci Veri i suprugu Ranku.

Rezime doktorske disertacije

Strukturalne promene u granularnom materijalu tokom procesa kompaktifikacije

Pomoću numeričkih simulacija, proučavana je dinamika kompaktifikacije ansambla frikcionih diskova koji su podvrgnuti vertikalnim vibracijama. Vibracione pobude granularnog materijala su modelovane kao niz sukcesivnih vertikalnih dilatacija pakovanja diskova, koje su praćene dinamičkom rekompresijom skupine diskova pod uticajem gravitacije. Druga faza vibracione pobude je bazirana na efikasnom molekularno-dinamičkom algoritmu hlađenja granularnog gasa. Dinamika kompaktifikacije je proučavana za razne vrednosti koeficijenta trenja i koeficijenta normalne restitucije. Pokazano je da se vremenska evolucija gustine odigrava po zakonu $\rho(t) = \rho_\infty - \Delta\rho E_\alpha[-(t/\tau_r)^\alpha]$, gde je E_α Mittag-Leffler-ova funkcija reda $0 < \alpha < 1$. Parametar τ_r opada sa porastom intenziteta vibracione pobude Γ .

Promene strukture unutar granularnog pakovanja tokom procesa kompaktifikacije kvantitativno su opisane korišćenjem Voronoï-eve teselacije. Analizom distribucije faktora oblika ζ Voronoï-evih poligona dat je uvid u prisustvo i transformacije domena različite uređenosti unutar granularnog pakovanja. Pokazano je da je sužavanje distribucije verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika u saglasnosti sa činjenicom da se monodisperzna pakovanja diskova spontano organizuju u oblasti sa kristalnim uređenjem. Osim toga, organizacija granula na lokalnom nivou proučavana je pomoću analize vremenske evolucije brojeva povezanosti (koneksnosti) i distribucije pora (šupljina). U slučaju dvodimenzionalnog granularnog sistema metalnih diskova eksperimentalno su izučavane distribucije faktora oblika i poređene sa rezultatima simulacija. Memorijski efekti koji se ispoljavaju prilikom nagle promene intenziteta vibracija Γ interpretirani su na osnovu analize vremenske evolucije brojeva povezanosti, distribucije pora i faktora oblika.

Izgrađen je model kompaktifikacije zasnovan na specifičnim svojstvima stohastičkih procesa frakcionog tipa koji adekvatno odslikavaju mikrostrukturalne transformacije granularnog pakovanja tokom procesa vibracione kompaktifikacije. U modelu se pretpostavlja da postoje samo dve moguće orijentacije granula. Orijehtacijom je određen slobodni prostor (šupljina) koji granula generiše u svom neposrednom okruženju. Imajući za cilj jednostavnu imitaciju procesa kompaktifikacije granularnog

materijala pod uticajem slabe eksterne pobude, pretpostavlja se da je prebacivanje granula iz jednog stanja orijentacije u drugo moguće opisati pogodno izabranim stohastičkim procesom. Zapravo, interakcija granula sa okolnim granulama je stohastički proces i ona je formalno inkorporirana u model kroz metod subordinacije stohastičkih procesa u vremenu. Osnovna fizička ideja tog pristupa je da vremenske intervale između uzastopnih preorijentacija objekata u modelu određuje pogodno izabrana distribucija vremena čekanja $\psi(t)$. Izborom ovog stohastičkog procesa obezbeđuje se neophodno svojstvo modela da reprodukuje sporu dinamiku kompaktifikacije i memorijske efekte. Iako je model dovoljno jednostavan da dozvoljava analitički tretman, teorijski rezultati su potkrepljeni numeričkim simulacijama odgovarajućih stohastičkih procesa frakcionog tipa.

Kinetika procesa depozicije dimera na jednodimenzionalnoj rešetki u prisustvu desorpcije je proučavana Monte-Carlo simulacijama. Osnovni cilj je bio istražiti kako razne vremenske zavisnosti verovatnoće P_{des} ubrzavaju, ili usporavaju, porast gustine θ tokom procesa reverzibilne depozicije. Analiziran je rast pokrivenosti $\theta(t)$ iznad granice zagušenja θ_{jam} , ka stacionarnoj vrednosti θ_{∞} , u slučajevima kada se verovatnoća desorpcije P_{des} smanjuje skokovito i linearno (kontinualno) u određenom vremenskom intervalu. Numerički je potvrđeno da se vreme koje je potrebno sistemu da dostigne zadatu gustinu θ može značajno redukovati ukoliko se P_{des} smanjuje u toku vremena. Razvijen je i analiziran samousaglašeni protokol optimizacije procesa depozicije u kome se optimalna vrednost verovatnoće desorpcije P_{des} u nekom trenutku t određuje na osnovu trenutno dostignute vrednosti gustine $\theta(t)$. Dobijeni rezultati sugerišu da se proces vibracione kompaktifikacije može optimizovati korišćenjem vremenski zavisnog intenziteta spoljašnje pobude.

Ključne reči: *granularni materijali, kompaktifikacija, molekularno-dinamičke simulacije, pore, faktor oblika, reverzibilna depozicija, optimizacija depozicije, frakcioni kinetički model, subordinacija stohastičkih procesa, memorijski efekti*

Naučna oblast: Fizika

Uža naučna oblast: Fizika kondenzovanog stanja materije

UDK broj: 538.9 (043.3)

Abstract of the doctoral disertation
Structural changes of the granular material during the
compaction process

Compaction dynamics of frictional hard disks subjected to vertical shaking is studied by numerical simulation in two dimensions. Shaking is modeled by a series of vertical expansion of the disk packing, followed by dynamical recompression of the assembly under the action of gravity. The second phase of the shake cycle is based on an efficient event-driven molecular-dynamics algorithm of cooling. The compaction dynamics is analyzed for various values of friction coefficient and coefficient of normal restitution. It was shown that the time evolution of the density is described by $\rho(t) = \rho_\infty - \Delta\rho E_\alpha[-(t/\tau_r)^\alpha]$, where E_α denotes the Mittag-Leffler function of order $0 < \alpha < 1$. The parameter τ_r is found to decay with tapping intensity Γ .

Voronoi tessellation and a certain *shape factor*, which is a clear indicator of the presence of different domains in the packing, were used to quantify the changes in the internal structure of packing during the compaction. It was found that the narrowing of the probability distribution of the shape factor during the compaction is in accordance with the fact that the packings of monodisperse hard disks spontaneously assemble into regions of local crystalline order. In addition, the local organization of disks is characterized in terms of contact connectivity and distribution of the Delaunay ‘free’ volumes. The distributions of the shape factor in a 2D granular system of metallic disks were investigated experimentally and compared with the simulation results. An interpretation of the memory effects observed for a discontinuous shift in tapping intensity Γ is provided by the analysis of the time evolution of connectivity numbers, volume distribution of pores and distribution of shape-factor.

The simple model of granular compaction based on subordination of stochastic processes is presented. In order to imitate, in a very simplified way, the compaction dynamics of granular material under tapping, it is imposed that particles switch stochastically between the two possible orientational states characterizing the average volumes of the grain in the presence of other grains. The main physical idea of approach is that the interaction of grains with their environment is taken into account with the aid of the temporal subordination. Accordingly, it is assumed that the time intervals between the consecutive grain’s reorientations are governed by a certain waiting-time

distribution $\psi(t)$. It is demonstrated how the presence of the trapping events leads to the macroscopic observation of slow compaction dynamics, described by an exact fractional kinetic equation. Numerical simulations are performed to examine our analytical result. In addition, memory effects are reproduced numerically by considering the response of the system to the abrupt change in the external excitation.

Kinetics of the deposition process of dimers in the presence of desorption is studied by Monte-Carlo method on a one-dimensional lattice. The aim is to investigate how do various temporal dependences of the desorption rate hasten or slow down the deposition process. The growth of the coverage $\theta(t)$ above the jamming limit to its steady-state value θ_∞ is analyzed when the desorption probability P_{des} decreases both stepwise and linearly (continuously) over a certain time domain. It is reported a numerical evidence that the time needed for a system to reach the given coverage θ can be significantly reduced if P_{des} decreases in time. Finally, a self-consistent optimization procedure, when the probability P_{des} depends on the current coverage density $\theta(t)$, is formulated and tested. The present model reproduces qualitatively the densification kinetics and the memory effects of vibrated granular materials. The obtained results suggest that the process of vibratory compaction of granular materials can be optimized by using a time dependent intensity of external excitations.

Keywords: *granular material, compaction process, molecular-dynamics simulations, pores, shape factor, reversible deposition, optimization the deposition process, fractional kinetic model, subordination of stochastic processes, memory effects*

Field of science: Physics

Research area: Physics of condensed matter

UDC number: 538.9 (043.3)

Sadržaj

1. Uvod	1
2. Modelovanje sudara	11
2.1. Walton-ov kolizioni model	13
3. Opis numeričke simulacije	18
4. Dinamika procesa kompakfikacije	23
5. Analiza strukturalnih svojstava granularnog materijala	30
5.1. Najbliži susedi	31
5.2. Voronoï-ev dijagram	36
5.3. Analiza šupljina	38
5.4. Analiza oblika Voronoï-evih poligona	43
5.4.1. Distribucija faktora oblika	49
6. Memorijski efekti	53
6.1. Efekti promena intenziteta vibracione pobude	55
6.2. Veza memorijskih efekata i strukturalnih promena granularnog pakovanja	56
7. Eksperimentalna analiza granularnih pakovanja	60
7.1. Opis aparature i eksperimentalne metode	61
7.2. Analiza rezultata eksperimenta	64
8. Frakcioni kinetički model kompakfikacije granularnog materijala	66
8.1. Model kompakfikacije i njegova svojstva	69
8.2. Numerički proračuni i poređenja sa analitičkim rezultatima	79
8.3. Memorijska svojstva modela	86
9. Optimizacija procesa komaktifikacije	90
9.1. Opis metoda numeričke simulacije	91
9.2. Rezultati	93
9.2.1. Slučaj stepenaste promene verovatnoće desorpcije P_{des}	98
9.2.2. Slučaj linearne promene verovatnoće desorpcije P_{des}	101

9.2.3. Slučaj promene verovatnoće desorpcije P_{des} koja je kontrolisana gustinom	105
10. Zaključak	108
11. Prilog	115
11.1. Molekularno dinamička simulacija vibracione kompaktifikacije granularnog materijala	115
11.2. Simulacija frakcionog modela kompaktifikacije	146
12. Literatura	150
Biografija autora	155

1. Uvod

Granularni materijali - osnovna svojstva

Pod granularnim materijalima podrazumevamo ansamble velikog broja makroskopskih objekata. Smatra se da ti objekti, granule, interaguju tokom sudara ili prilikom dugotrajnijih međusobnih kontakata. Osnovna karakteristika te interakcije je disipacija energije u toplotnu (Jaeger and Nagel, 1996; Kadanoff, 1999). Zbog toga granularni sistem može biti u kretanju samo ukoliko postoji eksterna pobuda (npr. vibracije, tok nekog fluida unutar sistema, smicanje, itd.). Podrazumeva se da je veličina granula veća od nekoliko desetina mikrona, jer tada možemo zanemariti dugodometnu interakciju indukovanu površinskim naelektrisanjem koje se javlja usled trenja. Osim disipacije energije, druga karakteristika granularnih materijala je voluminoznost granula. To znači da same granule zauzimaju veliki deo zapremine sistema, što bitno utiče na kinetiku transportnih procesa unutar granularnog materijala. Za fiziku granularnih sistema, za razliku od klasičnih fluida, termodinamička temperatura nije od bitnog značaja. Energija termalnog kretanja je za 20 redova veličine manja od porasta potencijalne energije prilikom podizanja staklene kuglice dijametra 1 cm na visinu jednaku njenom dijametru.

Poznato je da materijali sa kojima čovek najviše manipuliše tokom sprovođenja raznih tehnoloških procesa su fluidi, odnosno voda; na drugom mestu nalaze se granularni materijali. Na primer, većina prehrambenih proizvoda u nekoj fazi svoje proizvodnje nalazi se u obliku zrnastog materijala. Manipulacija granularnim materijalima prilikom dobijanja metala, legura, keramika, stakala, plastičnih materijala i betona je nezaobilazan tehnoloski proces. Većina osnovnih produkata farmaceutske i kozmetičke industrije je u obliku zrnastog materijala (Cleef, 1991; Ennis et al., 1994). Iz prethodnog je jasno da dublje razumevanje ponašanja granularnih materijala može da doprinese ogromnim uštedama tokom raznih tehnoloških procesa. Takođe, za razumevanje većine geoloških procesa bitno je pravilno shvatanje ponašanja zrnastih sistema. To nam može omogućiti pravilniju predikciju pojave lavina, odrona, zemljotresa i vulkana.

Napredna svemirska istraživanja su stavila imperativ na razvoj fizike granularnih materijala. U skorijoj budućnosti prve građevine na drugim nebeskim telima praviće roboti koji će morati da manipulišu granularnim materijalima u uslovima izmenjene

gravitacije i atmosfere. Ispostavlja se da su naša znanja o ponašanju granularnih materijala u takvim izmenjenim uslovima krajnje oskudna. U ovom trenutku to predstavlja teško premostiv problem za naučnike koji treba da dizajniraju robote za „građevinske” radove na drugim nebeskim telima. Stoga je neophodno da fizičari veliko iskustvo koje ljudi imaju u manipulisanju granularnim materijalima potkrepe adekvatnim fizičkim teorijama. Samo tako možemo biti u stanju da vršimo tačne predikcije u susretu sa pojavama u kojima učestvuju granularni materijali.

I pored svoje prividne jednostavnosti, granularni materijali se ponašaju bitno drugačije od drugih oblika materije - čvrstih supstanci, tečnosti ili gasova. Odavno je data sugestija da granularne materijale treba smatrati još jednim, dodatnim stanjem materije (Jaeger and Nagel, 1996). Pojasnimo ovu ideju na nekoliko primera koji ukazuju na specifičnosti granularnih sistema.

Pod granularnim gasom podrazumeva se dovoljno jako fluidiziran granularni sistem tako da interakciju između granula možemo opisati binarnim sudarima. Polaznu tačku u razumevanju kinetike brzih granularnih tokova predstavlja izučavanje procesa slobodne evolucije granularnog gasa. Kako se energija tog sistema disipira pri međusobnim (neelastičnim) sudarima granula, možemo govoriti o „hlađenju” slobodnog granularnog gasa tokom kojeg srednja kinetička energija sistema opada tokom vremena. Kinetička teorija dobro opisuje taj proces hlađenja samo za dovoljno mala vremena. Naime, revidirana kinetička teorija Enskog daje tzv. Haff-ov zakon hlađenja, koji predviđa da „temperatura” (srednja kinetička energija) homogenog granularnog gasa opada algebarski ($\propto 1/t^2$) u vremenu (Goldshtein and Shapiro, 1995). Nakon dovoljno dugo vremena dolazi do odstupanja od Haff-ovog zakona. Tada u sistemu, koji je inicijalno bio homogen, počinju da se pojavljuju nestabilnosti, prvo u polju brzina, a nakon toga i u distribuciji gustine. Pri tome dolazi do spontanog obrazovanja klizajućih tokova i klasterovanja unutar granularnog materijala.

Klasteri predstavljaju tipičnu pojavu nestabilnosti tokom hlađenja granularnog gasa. Zamislimo da se granularni gas nalazi u stanju homogenog hlađenja. Iako je sistem homogen, u njemu postoje fluktuacije brzine i gustine. Usled tih fluktuacija u jednom malom delu granularnog gasa (lokalno) može doći do porasta kolizione frekvence. U tom delu, zbog pojave učestalijih sudara, gas će se brže hladiti. To će indukovati lokalno smanjenje pritiska u toj oblasti. Ta depresija pritiska dalje će

proizvesti pojavu lokalnog toka fluida ka toj oblasti, dalje povećanje gustine i sve brže hlađenje. Time je objašnjeno zašto u disipativnom gasu dolazi do narastanja fluktuacija, odnosno do pojave nestabilnosti.

Analiza uzroka koji dovode do pojave klastera je od suštinskog značaja za razumevanje tokova granularnih materijala. Klasterovanje je jedan od osnovnih mehanizama koji dovode do „jamming-a (zagušenja) granularnog toka. Takođe, klasterovanje polidisperznih granularnih materijala veoma utiče na procese mešanja i segregacije, koji su u osnovi mnogih tehnoloških procesa. Izučavanje granica važenja Haff-ovog zakona hlađenja takođe predstavlja osnovni test za svaku teoriju koja treba da opiše rapidni granularni tok.

Granularni materijali pokazuju neka svojstva koja su tipična za tečnosti, ali između njih postoje neke bitne razlike. Na primer, ako statičnu hrpu peska lagano naginjemo, dostizanjem odgovarajućeg kritičnog ugla, počće kretanje (tok) granularnog materijala. Međutim, taj tok će se oformiti samo u tankom površinskom sloju, dok će unutrašnjost materijala ostati „zamrznuta”.

Sledeći primer takođe ukazuje na specifičnosti u ponašanju granularnih materijala. Ukoliko se visoki silos napuni granularnim materijalom, pritisak na bazu silosa nije zavisn od visine stuba u silosu, kao što bi bilo u slučaju obične tečnosti. Umesto neprekidnog rasta pritiska sa porastom visine stuba, pritisak dostiže odgovarajuću maksimalnu vrednost koja se više ne menja sa porastom visine stuba. Razlog ovome su kontaktne sile između granula i statičko trenje. Mreža sila koja se generiše unutar pakovanja, prenosi se na bočne zidove suda. Znači, umesto da se težina celog stuba prenosi na dno suda, deo njegove težine se prenosi na bočne zidove.

Prethodni primeri pokazuju da izučavanje granularnih materijala nije važno samo zbog njihove velike primene u svakodnevnom životu, već predstavlja veliki izazov za fizičare zbog nepostojanja sveobuhvatne teorije koja bi omogućila kvalitativnu i kvantitativnu predikciju njihovog ponašanja. Ovaj rad treba da posluži kao spona između teorijskih modela i modelovanja realnih fizičkih procesa u kojima učestvuju granularni materijali. I pored svoje jednostavnosti numerički modeli kojima se bavi ovaj rad treba jasno da odslikaju osnovne procese koji su inherentni za realne granularne materijale i time omoguće njihovo dublje shvatanje.

Kompaktifikacija granularnih materijala

U ovom radu bavićemo se gustim i slabo fluidiziranim granularnim materijalima čije ponašanje se nalazi na granici između tečnosti i gasova. Jedna od osnovnih veličina koja karakteriše granularni materijal je gustina pakovanja. Ona je jednaka količniku ukupne zapremine svih granula i zapremine granularnog sistema. Taj broj je uvek manji od jedinice. Kada je granularni materijal izložen slučajnim pobudama koje nad celim sistemom vrši neka spoljašnja sila (npr. vibracije), gustina pakovanja u slučaju trodimenzionalnog sistema ne može preći vrednost 0.64 (random close packing) (Aste, 2005).

Kompaktifikacija granularnog materijala je proces tokom koga se povećava njegova gustina kao rezultat dejstva spoljašnje pobude, kao što su vibracije ili periodične deformacije smicanja. Tipičan eksperiment u kome se prati relaksacija gustine predstavlja niz vremenski separisanih pojedinačnih ubrzanja cilindričnog suda u kome je smešten granularni materijal (Knight et al., 1995; Villarruel et al., 2000; Philippe and Bideau, 2002; Ribière et al., 2005; Ribière et al., 2007). Pri tome je vremenski interval između dve pobude dovoljno dug, tako da uvek dolazi do deponovanja granula i formiranja statičnog pakovanja. Reorganizacija granula, a time i promena gustine se odigrava tokom procesa sleganja granula. Sposobnost granularnog pakovanja da nakon perturbovanja menja svoju gustinu je svojstvo koje je prisutno, bez izuzetka, kod svakog zrnastog materijala; zavisi od fizičkih karakteristika granula, ali i od načina agitacije, prisustva okolnog fluida, efektivne gravitacije, itd. Još uvek mnogi aspekti ponašanja granularnog pakovanja pod uticajem spoljašnjih perturbacija nisu poznati. Zato problem kompaktifikacije predstavlja veoma aktivnu oblast istraživanja u fizici (Richard et al., 2005).

Do sada je predloženo nekoliko zakona koji treba da opišu zavisnost gustine granularnog pakovanja ρ od broja vibracionih pobuda t . Prvi eksperimenti u kojima je kvantitativno analizirana vibraciona kompaktifikacija sfernih i anizotropnih granula urađeni su u Čikagu 1995. i 2000. godine (Knight et al., 1995; Villarruel et al., 2000), respektivno. Ovi eksperimenti su bili urađeni u visokoj posudi - cevi, malog dijametra (veličina granula nije bila zanemarljivo mala u odnosu na dijametar suda) tako da su bočni zidovi imali znatan uticaj na ukupnu uređenost pakovanja. Dinamika ovako jako

konfiniranog granularnog materijala može se opisati inverznom logaritamskom zavisnošću gustine od broja vibracionih pobuda (Knight et al., 1995):

$$\rho_{\infty} - \rho(t) \sim 1/\ln(t) \quad (1.1)$$

Finalna gustina, koja predstavlja gustinu sistema u stacionarnom stanju, $\rho(\infty)$, je monotono opadajuća funkcija intenziteta vibracija Γ . Intenzitet vibracija je bezdimenziona veličina definisana kao količnik $\Gamma = A/g$, gde je A maksimalna vrednost ubrzanja vibracione pobude, a g je ubrzanje zemljine teže. Noviji eksperimenti grupe iz Renne-a (Philippe and Bideau, 2002; Ribièere et al., 2005; Ribièere et al., 2007) su pokazali da je dinamika kompaktifikacije u saglasnosti sa Kohlrausch-Williams-Watts (KWW) zakonom (stretched exponential function):

$$\rho_{\infty} - \rho(t) \sim \exp[-(t/\tau_r)^{\alpha}] \quad (1.2)$$

Ovi eksperimenti su bili dizajnirani tako da se efekti zidova na organizaciju (uređenje) pakovanja mogu zanemariti, što nije bilo moguće uraditi u slučaju eksperimenata grupe iz Čikaga (Knight et al., 1995; Villarruel et al., 2000). Osim toga, u eksperimentima grupe iz Renne-a je primećena konvekcija unutar celokupne zapremine pakovanja. Konvekcija se održava tokom procesa kompaktifikacije i utiče na brzinu procesa. Gustina sistema u stacionarnom stanju određena je dinamičkim balansom između konvekcije i kompaktifikacije.

Nekoliko drugih eksperimenata vezanih za proučavanje kompaktifikacije granularnih materijala je izvršeno u sistemima sa izmenjenom geometrijom ili sa drugačijim načinom pobude. Eksperimentalni rezultati Lumay-a and Vandewalle-a (Lumay and Vandewalle, 2005; Lumay and Vandewalle, 2006) za dvodimenzionalni (2D) granularni sistem pokazali su da je spora dinamika procesa kompaktifikacije povezana sa kristalizacijom kojom upravlja difuzija defekata unutar pakovanja. Nicolas et al. (Nicolas et al., 2000; Pouliquen et al., 2003) eksperimentalno je proučavao kompaktifikaciju granularnog sistema sfera pod uticajem deformacija smicanja, pri čemu su utvrdili da se kristalni rasporedi generišu duboko unutar pakovanja tokom procesa kompaktifikacije, čime je pokazano da uređenje koje nastaje nije indukovano samo prisustvom zidova suda. Njihov osnovni rezultat je bila činjenica da u slučajevima kada se kompaktifikacija odigrava uz porast kristalizacije pakovanja, prethodno navedeni zakoni relaksacije (inverzna logaritamska zavisnost, KWW zakon) ne daju korektan opis vremenske evolucije gustine. Može se tvrditi da različite procedure

pobude i različite geometrije eksperimenta daju suštinski različite dinamike kompaktifikacije kojima upravljaju različiti kolektivni mehanizmi. Zato još uvek ne postoji konsenzus koji se tiče oblika vremenske zavisnosti promene gustine (videti na primer, tabelu 1 u Lumay, G., and N. Vandewalle, 2006).

U ovom radu su izvršene opsežne numeričke simulacije procesa vibracione kompaktifikacije dvodimenzionalnog sistema frikcionih tvrdih diskova iste veličine. Analizirana je dinamika procesa i mikrostrukturalna svojstva pakovanja za razne vrednosti koeficijenta trenja i koeficijenta normalne restitucije. Pokazano je da relaksaciono ponašanje sistema veoma zavisi od materijalnih svojstava granula. Detaljno je analizirana vremenska evolucija gustine sistema. Potvrđeno je da Mittag-Lefflerova funkcija opisuje dinamiku kompaktifikacije za svaki izbor parametara kojima su okarakterisana materijalna svojstva granula (definicija Mittag-Leffler-ove funkcije je kasnije data u tekstu; videti jednačine (8.1.26), (8.1.27) i (8.1.28)). Mittag-Leffler-ova funkcija je jedna od često korišćenih fenomenoloških funkcija kojom su fitovani relaksacioni procesi u mnogim kompleksnim razuređenim sistemeima kao što su stakla, feroelektrici i dielektrici (Hilfer, 2002).

Značajno je istaći da postoje neke sličnosti između prethodno opisane vremenske evolucije gustine granularnog sistema i rasta pokrivenosti rešetke tokom procesa reverzibilne slučajne i sekvencijalne adsorpcije (RSA, Random Sequential Adsorption) složenih objekata (Kolan et al., 1999; Talbot et al., 2000; Tarjus and Viot, 2004; Budinski-Petković et al., 2005). Reverzibilni adsorpciono-desorpcioni model može da kvalitativno reprodukuje porast gustine (Talbot et al., 2000), memorijske efekte (Tarjus and Viot, 2004; Budinski-Petković et al., 2005; Budinski-Petković and Vrhovac, 2005) i druga svojstva granularnih materijala pod uticajem slabih vibracija. Rezultati numeričkih simulacija urađenih na reverzibilnom RSA modelu za veliki broj složenih objekata na triangularnoj rešetki (Budinski-Petković et al., 2005) su pokazali da porast pokrivenosti rešetke u potpunosti sledi Mittag-Leffler-ov zakon (jednačina (8.1.26)).

Isti zakon relaksacije (8.1.26) je dobijen u numeričkim simulacijama kompaktifikacije 3D granularnog sistema kome je varirana temperatura (Vargas and McCarthy, 2007; Divoux et al., 2008) (u simulacijama je primenjen modifikovani metod konačnih elemenata). Nedavno je detaljno eksperimentalno proučena uloga koju ima dilatacija pakovanja prilikom vibracionih pobuda (Mueggenburg, 2012). Spoljašnjom

silom je granularno pakovanje konfinirano tako da je veličina dilatacije pakovanja bila ograničena tokom vibracionih pobuda. Ovi eksperimenti su pokazali da se brzina kompakfikacije znatno smanjuje u prisustvu konfinirajuće sile. Zbog toga, opisanom eksperimentalnom postavkom bilo je nemoguće dostići stacionarno stanje sistema. Pošto je bilo nemoguće eksperimentalno odrediti stacionarnu gustinu sistema, ona je procenjivana fitovanjem zavisnosti gustine od vremena Mittag-Leffler-ovom funkcijom (8.1.26). Važno je napomenuti da će u ovom radu biti pokazano da se Mittag-Leffler-ovom funkcijom (8.1.26) mogu veoma uspešno fitovati rezultati prethodno spomenutih eksperimenata grupe iz Renne-a (Philippe and Bideau, 2002; Ribière et al., 2005; Ribière et al., 2007).

Frakcioni model kompakfikacije

Prethodna razmatranja ukazuju na to da Mittag-Leffler-ov zakon (4.1) dobro opisuje relaksaciju granularnog materijala za veoma različite tipove eksternih pobuda (Vargas and Carthy, 2007; Divoux et al., 2008; Mueggenburg, 2012; Arsenović et al., 2006). Međutim, nije očigledno da li je jednačina (4.1) samo jedan pogodan analitički izraz kojim se fituje vremenska zavisnost gustine $\rho(t)$, ili ima neko dublje fizičko značenje koje je povezano sa mikrostrukturnim promenama koje se dešavaju tokom procesa kompakfikacije. U ovom radu, navedeni problem biće detaljno analiziran kroz izgradnju modela kompakfikacije koji reprodukuje relaksaciju Mittag-Leffler-ovog tipa. Model je baziran na specifičnim svojstvima stohastičkih procesa frakcionog tipa koji adekvatno odslikavaju mikrostrukturne transformacije granularnog pakovanja tokom procesa vibracione kompakfikacije.

U radu je izgrađen apstraktni model granularnog materijala sličan takozvanom „dvozapreminskom” modelu koji je predložio Edwards (Edwards and Grinev, 1998). Polazeći od opisa evolucije sistema kao markovskog procesa sa ukupno dva moguća stanja, modelni proces kompakfikacije se generiše kao subordinisani (potčinjeni, podređeni) slučajni proces. U opštem slučaju subordinirani proces $Y[U(t)]$ se dobija randomizacijom vremena slučajnog procesa $Y(t)$, korišćenjem slučajnog procesa $U(t)$. Ovaj drugi proces, $U(t)$, se uobičajeno naziva randomizovanim vremenom (ili satom). Novi randomizovani sat je generalizacija determinističkog vremenskog sata u kinetičkoj jednačini za markovski proces. Ova generalizacija je stohastičkog porekla i njenom

primenom se kinetičke jednačine transformišu u evolucionu jednačinu za gustinu u kojoj se javljaju frakcioni izvodi. Iako je model dovoljno jednostavan da dozvoljava analitički tretman, teorijski rezultati su potkrepljeni numeričkim simulacijama odgovarajućih stohastičkih procesa frakcionog tipa.

Osnovna motivacija za izgradnju novog modela je implementacija dinamike kooperativnih struktura (lukova i mostova) koja može biti osnovni razlog veoma sporog relaksaciji sistema tokom procesa kompaktifikacije. Brojne činjenice koje opravdavaju ovakav pristup, a tiču se mikrostrukturnih transformacija granularnog pakovanja tokom procesa kompaktifikacije su detaljno izložene u uvodu 8 poglavlja ovog rada.

Model reverzibilne depozicije: Optimizacija procesa

U poslednje dve decenije uloženo je mnogo napora na razvoju i shvatanju modela slučajne sekvencijalne adsorpcije (random sequential adsorption - RSA) (Evans, 1993; Privman, 2000; Cadilhe et al., 2007). Tokom RSA procesa čestice se slučajno, sekvencijalno i reverzibilno deponuju na substrat. Pri tome, dominantni efekat u tom procesu predstavlja zauzimanje i blokiranje raspoložive površine substrata, jer u modelu nije dozvoljeno preklapanje čestica. Ukoliko je depozit jednoslojan, tada svaka adsorbovana čestica ima uticaj na geometriju depozita, a time i na adsorpciju svake naredne čestice. Ako adsorbovane čestice ostaju fiksirane na mestima gde su deponovane, proces adsorpcije prestaje u trenutku kada na površini koja nije zauzeta, ne postoji ni jedna oblast koja je dovoljno velika da primi novu česticu. Za sistem tada kažemo da je „zagušen” (jammed); stanje sistema je tada neravnotežno i njemu odgovara granično pokrivanje θ_{jam} , ili tzv. granica zagušenja (jamming coverage). Granica zagušenja θ_{jam} uvek ima nižu vrednost od najgušćeg mogućeg pakovanja θ_{CPL} za dati oblik čestica.

Kinetika procesa depozicije može se opisati vremenskom zavisnošću pokrivanja $\theta(t)$. Veličina $\theta(t)$ se definiše kao količnik površine dela supstarata koji je pokriven adsorbovanim česticama i ukupne površine supstrata. Na osnovu prirode supstrata, RSA modele moguće je podeliti na kontinualne modele i modele na rešetkama (diskretne). Ove dve klase modela se razlikuju prema načinu na koji se gustina asimptotski približava granici zagušenja θ_{jam} . U slučaju adsorpcije na kontinuumu, taj prilaz je algebarski (Feder, 1980; Swendsen, 1981; Pomeau, 1980; Bonnier, B., 2001), dok za

modele na rešetkama ova zavisnost je eksponencijalna (Bartelt and Privman, 1990; Nielaba et al., 1990; Manna and Švrakić, 1991; Budinski- Petković and Kozmidis-Luburić, 1997; Budinski- Petković and Kozmidis-Luburić, 1997).

Ukoliko se u RSA model uvede mogućnost desorpcije čestica, proces postaje reverzibilan. Tada sistem nužno, nakon dovoljno vremena, dostiže stacionarno stanje u kome broj događaja desorpcije i adsorpcije u jedinici vremena postaje približno jednak. Gustina čestica u stacionarnom stanju zavisi samo od odnosa verovatnoća desorpcije i adsorpcije (Krapivsky and Ben-Naim, 1994; Budinski- Petković and Kozmidis-Luburić, 2001). Prilaz sistema stacionarnom stanju je veoma spor proces za male vrednosti verovatnoće desorpcije. U slučaju adsorpciono desorpcionih procesa na 1D rešetki približavanje pokrivenosti stacionarnoj vrednosti se dešava u skladu sa KWW zakonom (Lončarević et al., 2009) (jednačina (1.2)). Međutim, za dvodimenzionalne rešetke taj prilaz je dobro opisan Mittag-Leffler-ovom funkcijom, bez obzira na geometriju i veličinu objekata (Budinski-Petković et al., 2005).

Očigledno je da su najbitniji geometrijski efekti karakteristični za guste granularne materijale (geometrijska frustracija, postojanje promenljive slobodne zapremine) prisutni i u modelu reverzibilne depozicije. Može se smatrati da adsorpciono-desorpcioni model opisuje porast gustine unutar tankog sloja granularnog materijala koji je normalan na pravac u kome se vrši vibraciono pobuđivanje. Vibracione pobude dovode do toga da neke čestice napuštaju sloj. Neke čestice u njega pristižu pod uticajem gravitacije, popunjavaju prazninu u sloju i time povećavaju njegovu gustinu. Analogno tome, u reverzibilnom RSA modelu količnik $K = k_-/k_+$ učestalosti desorpcionih i adsorpcionih događaja igra ulogu sličnu intenzitetu vibracija Γ u realnim eksperimentima (Kolan et al., 1999).

U ovom radu, u okvirima adsorpciono-desorpcionog modela biće analizirana mogućnost ubrzavanja rasta pokrivenosti rešetke pomoću promene verovatnoće desorpcije tokom procesa reverzibilne depozicije. Odgovor na pitanje, kako različite vremenske zavisnosti verovatnoće desorpcije ubrzavaju, ili usporavaju proces depozicije još uvek nije dat u literaturi. Ovo pitanje prvi je formulisao i donekle aktuelizovao Talbot sa saradnicima (Talbot et al., 2000). Ovaj problem je dobio na značaju sa razvojem fizike granularnih materijala. Određivanje optimalne strategije za sprovođenje procesa vibracione kompaktifikacije je još uvek otvoren i aktuelan problem. Zato, na

modelu reverzibilne RSA će biti analizirana mogućnost optimizacije procesa kompaktifikacije u smislu smanjenja vremena i uložene energije prilikom dostizanja neke unapred zadate gustine. Ovaj rad po prvi put pruža detaljniji i dublji uvid u dinamiku depozicionih procesa sa vremenski promenjivim verovatnoćama desorpcije. Dobijeni rezultati sugerišu da se proces vibracione kompaktifikacije može optimizovati korišćenjem vremenski zavisnog intenziteta spoljašnje pobude.

2. Modelovanje sudara

Jedno od osnovnih svojstava granularnih materijala je disipacija energije prilikom interakcije konstituenata. Svaki kolizioni model koji opisuje tu interakciju treba da vodi računa o gubitku kinetičke energije čestica prilikom sudara. Prvo će biti opisan najjednostavniji kolizioni model, koji je jednoparametarski jer uvodi samo jedan koeficijent restitucije kojim se opisuje ukupna disipacija energije prilikom neelastičnih sudara čestica.

Posmatrajmo elastični sudar dve tvrde sfere (3D), ili diska (2D), čije su brzine kretanja pre sudara jednake \vec{v}_1 i \vec{v}_2 . Njihove brzine nakon elastičnog sudara \vec{v}'_1 i \vec{v}'_2 , date su izrazima:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 - (\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}) \vec{e}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 + (\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}) \vec{e}, \quad (2.1)$$

gde je \vec{v}_{12} relativna brzina kretanja čestica u trenutku sudara. Jedinični vektor $\vec{e} \equiv \vec{r}_{12}/r_{12}$ usmeren je od centra druge ka centru prve sfere (diska) u trenutku sudara.

Pri opisivanju disipativnih sudara čestica uvodi se koeficijent normalne restitucije koji određuje smanjenje normalne komponente relativne brzine čestica prilikom sudara. Koliziona pravila za neelastični sudar čestica mogu se predstaviti sledećim jednačinama:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 - \frac{1+\varepsilon}{2} (\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}) \vec{e}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 + \frac{1+\varepsilon}{2} (\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}) \vec{e}. \quad (2.2)$$

Gornjim izrazima su određene brzine čestica nakon sudara, \vec{v}'_1 i \vec{v}'_2 , ako su poznate njihove brzine pre sudara, \vec{v}_1 i \vec{v}_2 . Koeficijent normalne restitucije ε uzima vrednosti iz intervala (0,1). Ako je sudar elastičan, tada je $\varepsilon = 1$, pa se jednačina (2.2) svodi na jednačinu (2.1). Ovakav koncept sudara, zbog svoje jednostavnosti, uglavnom se koristi u kinetičkoj teoriji granularnih gasova. U simulacijama uglavnom se koriste znatno složeniji kolizioni modeli koji osim translacije, računavaju i rotaciju čestica. Pri tome smatra se da su čestice neelastične i frikционе. Trenje dodatno indukuje disipaciju kinetičke energije prilikom kontakta (sudara) čestica. Osim toga, veliki deo kinetičke energije se gubi usled privremenih ili trajnih deformacija čestica prilikom sudara.

U simulacijama molekularno dinamičkog (MD) tipa, kolizioni model sa konstantnim koeficijentom normalne restitucije može indukovati pojavu neelastičnog kolapsa. Neelastični kolaps se u MD simulacijama manifestuje kao pojava beskonačnog broja sudara čestica u konačnom vremenskom intervalu. Drugim rečima, broj sudara

čestica u jedinici vremena (kolizijska frekvencija) divergira. Prvi put neelastični kolaps je otkriven pri proučavanju jednodimenzionalnog (1D) stuba disipativnih čestica koji interaguje sa podlogom (Luding et al., 1994). Neelastični kolaps je takođe prisutan i u numeričkim simulacijama MD tipa u dve dimenzije. Ispostavlja se da u sistemu neelastičnih diskova koji se slobodno hladi (slobodni granularni gas), tri čestice su dovoljne za pojavu neelastičnog kolapsa ako je disipacija energije dovoljno velika (McNamara and Young, 1994; Goldman et al., 1998). U većim ansamblima neelastični kolaps može uključiti i veći broj čestica koje su pri tome razmeštene duž skoro prave linije. Ovo nas navodi na zaključak da je neelastični kolaps suštinski 1D efekat. Ispostavlja se da je u simulaciji, koja je u ovom radu predstavljena, samo mali broj čestica bio uključen u neelastični kolaps (Arsenović et al., 2006). Razlog za to je primena raznih algoritama za izbegavanje pojave neelastičnog kolapsa o čemu će biti više reči u delu koji opisuje numeričku simulaciju.

2.1 Walton-ov kolizioni model

U ovom poglavlju biće predstavljen kolizioni model koji je korišćen u numeričkoj simulaciji za opisivanje neelastičnih sudara između rotirajućih diskova u prisustvu Coulomb-ovog trenja. Model je uveo Walton (Walton and Braun 1986; Herbst et al., 2000) i predstavlja najčešće korišćenu parametrizaciju eksperimentalnih podataka u numeričkom modelovanju granularnih materijala. Model uključuje tri parametra:

- prvi je koeficijent normalne restitucije ε , i on karakteriše promenu normalne komponente relativne brzine \vec{v}_r tačke kontakta dva diska;
- drugi je Coulomb-ov koeficijent trenja μ . On utiče na redukciju tangencijalne komponente relativne brzine \vec{v}_r ;
- treći je granični parametar β_0 (ili koeficijent „hrapavosti“) koji određuje redukciju tangencijalne komponente relativne brzine \vec{v}_r u odsustvu frikcionog klizanja diskova prilikom kontakta (tada se govori o tzv. „slepljujućim“ kontaktima).

Sva tri parametra merena su eksperimentalno (Foerster et al., 1994) za različite materijale što daje dobru osnovu za teorijske i numeričke proračune.

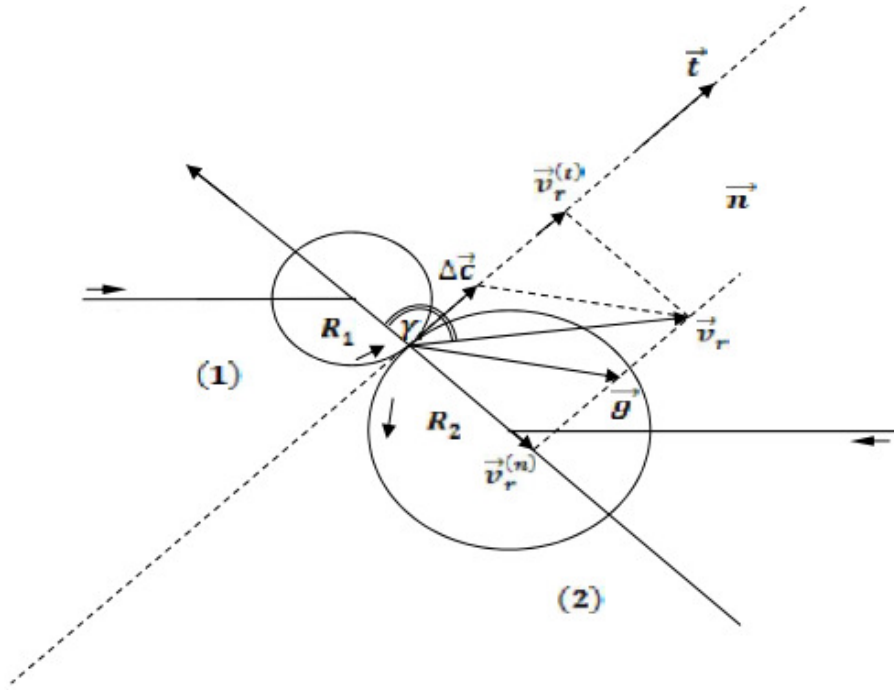
Posmatrajmo dva diska jednakih prečnika d , mase m , i momenta inercije $I = qm(d/2)^2$ (za homogene diskove, $q = 1/2$). Brzina i -te čestice pre sudara je označena sa \vec{v}_i , a njena ugaona brzina sa $\vec{\omega}_i$. Oznake koje označavaju veličine posle sudara biće „primovane“ u daljem tekstu. Neka je \vec{n} jedinični vektor rastojanja od centra diska 2 do centra diska 1. Relativna brzina tačke kontakta je

$$\vec{v}_r = \vec{g} + \Delta\vec{c} \quad (2.1.1)$$

gde je
$$\vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \quad (2.1.2)$$

i
$$\Delta\vec{c} = -(d/2)(\omega_1 + \omega_2) \times \vec{n}. \quad (2.1.3)$$

Sve relevantne veličine koje se odnose na kinematiku Walton-ovog modela prikazane su na slici 2.1.1.



Slika 2.1.1: Veličine koje opisuju kinematiku sudara dva neelastična, frikciona i rotirajuća diska. Oznake na slici su objašnjene u poglavlju 2.1.

Tokom sudara normalna komponenta relativne brzine \vec{v}_r se menja u skladu sa izrazom $\vec{n} \cdot \vec{v}_r = -\varepsilon \vec{n} \cdot \vec{v}_r$, gde je $\varepsilon \in [0,1]$ koeficijent normalne restitucije. Parametar ε opisuje gubitak kinetičke energije čestica, jer deo energije prilikom sudara prelazi u toplotnu energiju, energiju zvučnih talasa ili se troši na deformaciju granula (trajnu ili privremenu). Disipacija energije zbog hrapavosti površine, tj. zbog postojanja trenja, opisuje se kroz redukciju tangencijalne komponente relativne brzine. Zato se uvodi koeficijent tangencijalne restitucije β za koji važi da je $\vec{n} \times \vec{v}_r = -\beta \vec{n} \times \vec{v}_r$, $\beta \in [-1,1]$. U slučaju kada diskovi rotiraju i prilikom sudara klizaju jedan po drugome, koeficijent tangencijalne restitucije β može se dovesti u vezu sa koeficijentom trenja μ . Koeficijent trenja se formalno uvodi preko Coulomb-ovog zakona trenja:

$$|\Delta \vec{P}^{(t)}| = \mu |\Delta \vec{P}^{(n)}|, \mu \geq 0. \quad (2.1.4)$$

U predhodnoj jednačini $\Delta \vec{P}^{(n)}$ i $\Delta \vec{P}^{(t)}$ su normalna i tangencijalna komponenta promene linearnog momenta prilikom sudara:

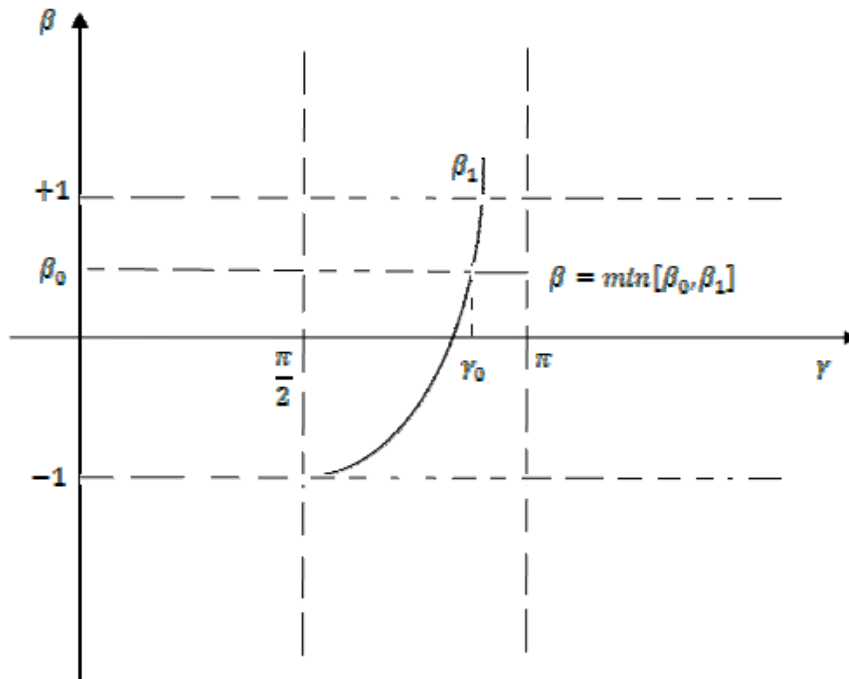
$$\Delta \vec{P} = \frac{m}{2} [\vec{g}' - \vec{g}], \quad (2.1.5)$$

$$\Delta \vec{P}^{(n)} = \vec{n}(\Delta \vec{P} \cdot \vec{n}), \quad (2.1.6)$$

$$\Delta \vec{P}^{(t)} = \Delta \vec{P} - \Delta \vec{P}^{(n)}. \quad (2.1.7)$$

Eksperimentalni podaci (Foerster et al., 1994) ukazuju na to da parametar β zavisi od ugla γ između vektora \vec{n} i \vec{v}_r (slika 2.1.1). Ta zavisnost je implementirana u ovom modelu na sledeći način. Sudarni ugao γ zadovoljava uslov $\gamma \in [\pi/2, \pi]$, tako da je $\cos \gamma = \vec{v}_r \cdot \vec{n} / |\vec{v}_r| < 0$ (slika 2.1.1). Pretpostavlja se da su kontakti između diskova klizajući za uglove sudara $\gamma \in [\pi/2, \gamma_0]$. Drugim rečima, Coulomb-ov zakon trenja je validan za sve sudare pri kojima je ugao γ manji od nekog kritičnog ugla γ_0 . Koristeći se zakonima održanja, dobija se sledeća veza koeficijenta tangencijalne restitucije β i koeficijenta trenja μ (Foerster et al., 1994):

$$\beta(\gamma) = -1 - \mu \left(1 + \frac{1}{q}\right) (1 + \varepsilon) \cot \gamma, \quad \gamma \in [\pi/2, \gamma_0]. \quad (2.1.8)$$



Slika 2.1.2: Zavisnost koeficijenta tangencijalne restitucije od ugla sudara. Za $\gamma \in [\pi/2, \gamma_0] \rightarrow \beta(\gamma)$ je dato izrazom (2.1.8), a za $\gamma \in [\pi/2, \gamma_0]$ važi da je $\beta(\gamma) = \beta_0 = \text{const}$. U simulaciji je uzeto $\beta_0 = 0.5$ (Foerster et al., (1994)).

Za uglove γ veće od kritičnog ugla γ_0 , kontakti su neklizajući (tzv. „slepljujući“ kontakti), kada možemo smatrati da je koeficijent tangencijalne restitucije β konstantan, tj. jednak $\beta_0 \in [-1,1]$. Svi ovi rezultati mogu biti objedinjeni, tako da koeficijent tangencijalne restitucije β , koji zavisi od ugla γ , može biti predstavljen izrazom:

$$\beta(\gamma) = \min \left\{ \beta_0, -1 - \mu \left(1 + \frac{1}{q} \right) (1 + \varepsilon) \cot \gamma \right\}. \quad (2.1.9)$$

Na slici 2.1.2 prikazana je zavisnost koeficijenta β od ugla γ_0 . Kritični ugao γ_0 zavisi od stanja i osobina površine čestica i dat je izrazom

$$\cot \gamma_0 = -\frac{q}{1+q} \frac{1+\beta_0}{1+\varepsilon} \quad (2.1.10)$$

Iz prethodne jednačine vidimo da γ_0 zavisi od materijalnih svojstava diskova, tj. od parametara ε , μ , i β_0 . Jednačine (2.1.9 i 2.1.10) slede iz zahteva da je funkcija $\beta(\gamma)$ kontinualna u tački γ_0 . Kritični ugao γ_0 odgovara sudarnom uglu na kome se dešava prelaz između Coulomb-ovog klizanja za $\gamma < \gamma_0$ i „slepljujućih“ kontakata za $\gamma \geq \gamma_0$. Ovaj kolizioni model i zakoni održanja za linearne i ugaone impulse određuju brzine translacije i rotacije nakon sudara:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{1}{m} \Delta \vec{P}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{1}{m} \Delta \vec{P} \quad (2.1.11)$$

$$\vec{\omega}'_1 = \vec{\omega}_1 - \frac{2}{qmd} \vec{n} \times \Delta \vec{P}, \quad \vec{\omega}'_2 = \vec{\omega}_2 - \frac{2}{qmd} \vec{n} \times \Delta \vec{P}, \quad (2.1.12)$$

gde je $\Delta \vec{P}$ promena linearnog impulsa čestice 1 u funkciji od ε , μ , i β_0 :

$$\Delta \vec{P} = -\frac{m}{2} (1 + \varepsilon) [\vec{n}(\vec{v}_1 - \vec{v}_2)] \vec{n} - \frac{m}{2} \frac{q[1+\beta(\gamma)]}{1+q} \vec{n} \times \left[(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \times \vec{n} + \frac{d}{2} (\vec{\omega}_1 + \vec{\omega}_2) \right]. \quad (2.1.13)$$

Na osnovu jednačina (2.1.13) mogu se izračunati brzine neposredno nakon sudara na osnovu njihovih brzina pre sudara.

Problem neelastičnog kolapsa je karakteristika simulacionog algoritma koji propagira sistem „od sudara - do sudara“, pri čemu su sudari trenutni događaji. U pitanju je tzv. „event-driven“ algoritam za slučaj tvrdih sfera ili diskova (McNamara and Young, 1994; Bernu et al., 1994). Problem neelastičnog kolapsa je prevaziđen korišćenjem koeficijenta normalne restitucije ε koji zavisi od brzine sudara čestica (McNamara and Falcon, 2005),

$$\varepsilon(v) = \begin{cases} 1 - (1 - \varepsilon_0) \left(\frac{v}{v_0} \right)^{1/5}, & v \leq v_0, \text{ viskoelastična disipacija} \\ \varepsilon_0 \left(\frac{v}{v_0} \right)^{-1/4}, & v \geq v_0, \text{ plastična disipacija.} \end{cases} \quad (2.1.14)$$

Kritična brzina v_0 razdvaja sudare prema tipu deformacije čestica na viskoelastične i plastične, koji se dešavaju na malim, odnosno velikim brzinama, respektivno. Koeficijent restitucije ε (2.1.14), koji zavisi od brzine v , koristi se za redukciju disipacije energije u režimu malih brzina, što je u skladu sa eksperimentalnim rezultatima. Ovaj model brzinski zavisnog koeficijenta normalne restitucije ε predhodno je korišćen za analizu vibracione fluidizacije granularnih materijala (McNamara and Falcon, 2005).

3. Opis numeričke simulacije

Ovom numeričkom simulacijom u dvodimenzionalnom (2D) sistemu, analizira se kompaktifikacija diskova iste veličine, prečnika d i mase m . Proučavani sistem diskova izložen je sukcesivnim vertikalnim vibracionim pobudama u pravougaonom sudu širine $L = 1$, sa ravnim dnom na mestu $y = 0$ i sa otvorenim vrhom (pri tome je y -osa normalna na dno suda). Gravitaciono polje deluje vertikalno naniže, tj. u negativnom smeru y -ose. Jedan ciklus procesa vibracione kompaktifikacije granularnog ansambla, koji odgovara jednom vremenskom koraku u simulaciji, podeljen je u dve faze: (i) vertikalna dilatacija (širenje) pakovanja diskova, koja je srazmerna intenzitetu vibracione pobude Γ , i (ii) formiranje statičkog pakovanja granula u prisustvu gravitacije (tzv. proces sleganja). Sukcesivnim ponavljanjem vertikalnih dilatacija i sleganja skupine diskova gradi se niz statičkih pakovanja, gde je svako novo pakovanje opisanim postupkom generisano od svog prethodnika.

U prvoj fazi ciklusa, slobodna zapremina se uvodi uniformno kroz celo pakovanje. Ostvaruje se tako što se svaki disk koji se nalazi na visini y podiže na novu visinu $y' = (1 + \xi)y$. Ovim se modeluje dilataciona faza procesa kompaktifikacije pod uticajem vertikalnih vibracija. U tom slučaju, parametar ξ u našem modelu igra sličnu ulogu kao intenzitet vibracije Γ u realnom eksperimentu. Intenzitet vibracija Γ je definisan kao odnos maksimalnog ubrzanja vibracione pobude sa gravitacionim ubrzanjem (Knight et al., 1995). Tačan funkcionalni odnos između ove dve veličine nije poznat, ali u gruboj aproksimaciji parametar ξ je proporcionalan kvadratu eksperimentalnog kontrolnog parametara Γ (Philippe and Bideau, 2001; Ribière et al., 2005). Jasno je da ovakav način modelovanja inicijalnog pobuđenja granularnog pakovanja ne odslikava realnu preraspodelu granularnog materijala pod uticajem spoljašnje pobude na početku jednog ciklusa. Ispostavlja se da za dinamiku kompaktifikacije to i nije mnogo bitno. Važno je da se dilatacijom pakovanja u sistemu generiše uniformno distribuirana slobodna zapremina, čime se omogućava dalja reorganizacija sistema koja vodi formiranju novog statičkog pakovanja.

Nakon dilatacije, daju se slučajne početne brzine svakom disku na takav način da je ukupan impuls svih diskova jednak nuli. Neka $\langle \Delta E_r \rangle$ označava srednje povećanje potencijalne energije po disku u toku vertikalnog širenja pakovanja diskova. Početne

linearne brzine v_x i v_y se generišu iz unofornne raspodele u intervalu $[-2v_T, 2v_T]$, gde je $v_T = [2\langle\Delta E_r\rangle/m]^{1/2}$. Slično tome, vrednosti početne ugaone brzine ω_z su odabrane kao slučajni brojevi iz uniformne raspodele u intervalu $[-2\omega_T, 2\omega_T]$, gde je $\omega_T = [2\langle\Delta E_r\rangle/I]^{1/2}$ a I je moment inercije diska. Ovim su zadati početni uslovi za drugu fazu ciklusa. Izbor distribucije početne brzine ne igra značajnu ulogu u ovoj simulaciji. Utvrdili smo da korišćenje različitih raspodela (npr. Gauss-ove) za inicijalne brzine daje kvantitativno vrlo slične rezultate, što dovodi do kvalitativno iste fenomenologije.

U drugoj fazi ciklusa, pakovanje je slegano pod uticajem gravitacije, korišćenjem tzv. „event-driven” algoritma (u daljem tekstu ED algoritma) (Lubachevsky, 1991). Pretpostavlja se da su diskovi neelastični sa grubom površinom za koju važi Coulomb-ov zakon trenja. U ED metodi, diskovi se neometano kreću između sudara pod uticajem gravitacije sve dok se ne desi sudar. U ED metodi o sudarima se govori kao o „događajima” čiji sled jednoznačno određuje propagaciju sistema. Pri tome je događaj svaki sudar dva diska ili sudar jednog diska sa zidom. Putanje između sudara su parabolični lukovi zbog prisustva gravitacionog polja. Da bi izvršili propagaciju sistema od jednog sudara do drugog, neophodno je nakon svakog sudara proračunati vreme do svih narednih sudara koji mogu da se dese u sistemu. Nakon toga se među njima identifikuje sudar koji će se prvi desiti u sistemu. Drugim rečima, identifikuje se kolizioni par čiji sudar će se desiti u budućnosti nakon najkaćeg vremena Δt_{min} . Sistem se tada propagira za taj minimalni vremenski interval Δt_{min} , a sudar identifikovanog para čestica obradi se korišćenjem kolizionih pravila (videti jednačine 2.1.11 - 2.1.13). Sudari čestica modeluju se pomoću Walton-ovog modela (Walton and Braun, 1986; Herbst et al., 2000). Ovaj model podrazumeva da dva rotirajuća diska pri kontaktu ili oba klizaju, sledeći Coulomb-ov zakon trenja, ili se slepljuju (neklizajući kontakt). Pravila sudara uzimaju u obzir smanjenje normalne komponente relativne brzine i smanjenje tangencijalne komponente relativne brzine dve čestice. Sudari sa zidom tretiraju se na isti način kao i sudari između čestica, osim što zid ima beskonačnu masu. Koristeći brzine neposredno pre kontakta, izračunavaju se brzine diskova posle kontakta na osnovu jednačina (2.1.11 - 2.1.13). Da bi se sprečio neelastični kolaps (Goldman et al., 1998; Falcon et al., 1998; McNamara and Falcon, 2005), koristi se koeficijent restitucije, koji zavisi od relativne brzine čestica prilikom sudara (jednačina 2.1.14).

Sa opisanim algoritmom, u kojem se neelastični kolaps ne dešava, kretanje diskova može teorijski trajati beskonačno dugo. Međutim, ovaj niz binarnih sudara nužno dovodi sistem u stanje gde su susedni diskovi vrlo blizu kontakta. Do „očvršćavanja” sistema dolazi zbog toga što diskovi gube skoro svu svoju kinetičku energiju i kreću se oko neke fiksne pozicije na sličan način kao atomi u kristalnoj rešetki. Dakle, u odsustvu ulazne energije, granularni materijal postaje gušći, odnosno, sistem se lokalno „učvršćuje” zbog disipacije energije. Lokalno zgušnjavanje prati formiranje kooperativnih struktura (npr. lukova) u svim delovima sistema (Miller and Luding, 2004).

Zbog disipativnosti sudara, potencijalna energija sistema teži ka konstanti, dok kinetička energija teži ka nuli u dugom vremenskom intervalu. Statička konfiguracija diskova sa nultom kinetičkom energijom generiše se korišćenjem sledećeg kriterijuma zaustavljanja. Smatra se da je disk u mirovanju ako su translaciona i rotaciona kinetička energija diska u poslednjih deset sudara pale ispod vrednosti praga $E_{tr}^{(t)}$ i $E_{tr}^{(r)}$, respektivno. Veličine $E_{tr}^{(t)}$ i $E_{tr}^{(r)}$ su slobodno izabrani parametri koji optimizuju numeričku metodu. Za dovoljno male vrednosti $E_{tr}^{(t)}$ i $E_{tr}^{(r)}$ rezultati ne zavise od njihovog izbora. U simulaciji koriste se veoma male vrednosti $E_{tr}^{(t)} = 5 \times 10^{-5}$ i $E_{tr}^{(r)} = 10^{-6}$, u bezdimenzionim jedinicama u kojima su širina suda L , masa diskova m i gravitaciono ubrzanje g jednaki jedinici.

Da bi se ubrzalo formiranje pakovanja u toku druge faze ciklusa, uvodi se dodatni algoritam za obradu ponašanja diskova koji se odbijaju više puta od površine nepokretnog diska. Posmatra se disk koji trpi uzastopne neelastične sudare sa drugim diskom koji već miruje. Tokom svakog odskoka deo kinetičke energije diska se izgubi. Normalna komponenta brzine diska nakon sudara je stoga manja nego pre sudara, a samim tim, smanjuje se visina odbijanja diska sa vremenom. U ovom slučaju, koeficijent normalne restitucije (jednačina 2.1.14) teži jedinici, zato što relativna brzina sudara čestica postaje veoma mala. Zato se proces neelastičnog kolapsa nikada ne realizuje. Dakle, zbog veoma velike frekvencije poskakivanja jednog diska po površini drugog koji već miruje, napredovanje ED algoritma je suspendovano. Pored toga, ako se disk odbija od površine nepokretnog diska, spuštajući se naniže, njegova kinetička

energija povećava se usled dejstva gravitacije, tako da kriterijum zaustavljanja ne može biti postignut.

Da bi se zaobišli ovi problemi, koristi se jednostavni algoritam za odvajanje jednog diska od površine drugog nepokretnog diska po kome on poskakuje. Procedura „odvajanja” uključuje samo one diskove koji su već obavili više od deset uzastopnih sudara sa jednim nepokretnim diskom, a kinetička energija nije im postala dovoljno mala. Razmotrimo disk i , koji poskakuje po nepokretnom disku j . Neka je $\Delta\tau_i$ vremenski interval između dva uzastopna odbijanja diska i . Da bi se vreme $\Delta\tau_i$ povećalo iznad određenog praga τ_{tr} vrši se odvajanje diska i od diska j na sledeći način: (i) na novoj poziciji disk i ne sme biti bliži nekom drugom disku od diska j po kome poskakuje, (ii) disk i se pomera najviše za $d\sqrt{2}/10$, (iii) ako pomeranje i -tog diska ima vertikalnu komponentu, tada se linearna brzina diska redukuje za odgovarajuću vrednost radi održanja ukupne energije u sistemu. Ako je novi vremenski interval $\Delta\tau_i$ i dalje manji od τ_{tr} , brzina i -tog diska se uzastopno redukuje za faktor 3 sve dok $\Delta\tau_i$ ne postane veće od τ_{tr} . Ako nije moguće da se poveća vremenski interval $\Delta\tau_i$ smanjenjem brzine, onda se disk i zaustavlja. Treba napomenuti da se samo mali broj diskova (manje od 1%) zaustavljao u simulaciji ovim kriterijumom. Većina diskova zaustavljala se tek kada im je kinetička energija postajala dovoljno mala. Ovi postupci omogućili su formiranje kompleksnih i kooperativnih struktura, kao što su lukovi i mostovi. Na kraju, simulacija u drugoj fazi ciklusa je završena kada su se svi diskovi zaustavili koristeći se jednim od navedenih kriterijuma zaustavljanja.

Početna konfiguracija diskova se formira postavljanjem $N = 1000$ diskova u nepreklapajuće pozicije unutar pravougaone oblasti širine $L = 1$, i visine $y = 0.5 L$. Pri tome se koristi metod slučajne sekvencijalne adsorpcije. Od ovog ansambla razuređenih diskova gustine $\rho = 0.5$, formira se prvo statičko pakovanje primenom već opisanog algoritma sleganja pakovanja. Početno pakovanje se zatim generiše korišćenjem jedne vibracione pobude sa željenim intenzitetom vibracije. Visina početnog statičkog pakovanja je obično oko $0.35 L$. Uočene razlike u početnim gustinama pakovanja sistema zavise od fizičkih karakteristika diskova. Uopšteno, početno pakovanje koje je kreirano sa manje disipativnim diskovima gušće je od onih koja su kreirana sa više disipativnim diskovima.

Jedan od osnovnih ciljeva ovog rada je ispitivanje uticaja materijalnih svojstava granula na dinamiku kompaktifikacije i na evoluciju mikrostrukturalnih svojstava pakovanja koja se tokom tog procesa obrazuju. Materijalna svojstva granula opisujemo sa nekoliko parametara koji karakterišu stanje površine granula i njihovu neelastičnost prilikom sudara. Važno je naglasiti da se u simulaciji hrapavost površine diskova i disipacija energije usled postojanja trenja opisuju korišćenjem dva parametra. Prvi je koeficijent trenja μ koji utiče na veličinu koeficijenta tangencijalne restitucije β (jednačina 2.1.9). Drugi je koeficijent maksimalne tangencijalne restitucije β_0 koji utiče na to da li će sudar biti klizajući, kada na njega može biti primenjen Coulomb-ov zakon trenja (jednačina 2.1.10). Disipacija energije se dodatno manifestuje kroz deformacije čestica prilikom sudara pri čemu dolazi do transformacije kinetičke energije u toplotnu. Za opisivanje ovih efekata koristi se koeficijent normalne restitucije koji zavisi od relativne brzine čestica (jednačina 2.1.14).

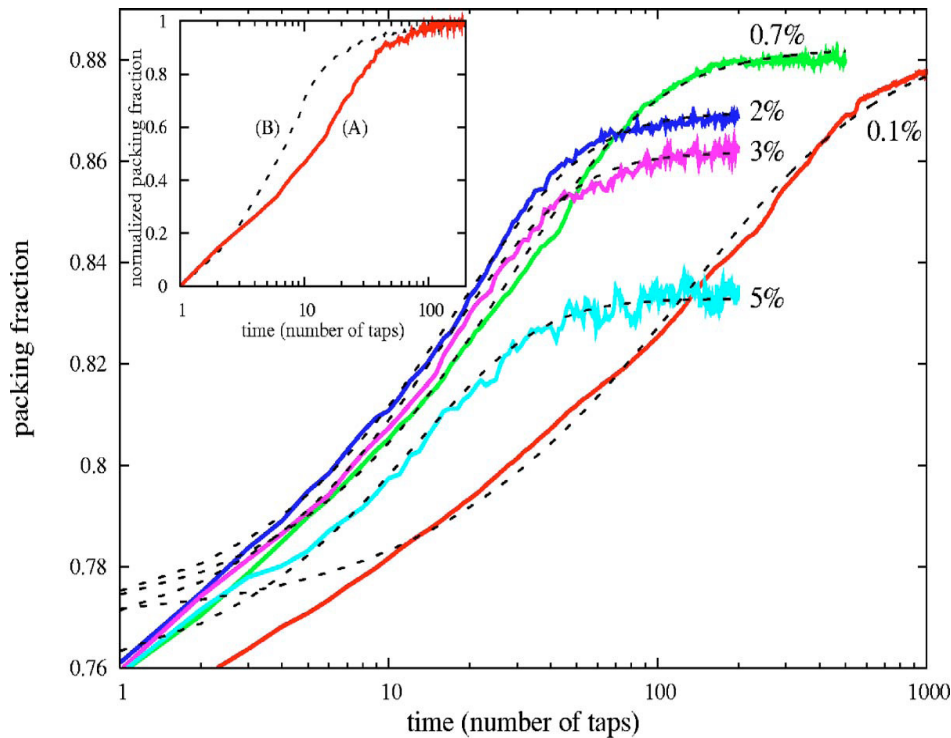
Da bi se ispitali uticaji neelastičnosti i trenja granula na proces kompaktifikacije, u simulacijama se koriste razne vrednosti materijalnih parametara kojima se opisuju dve različite vrste diskova:

- više disipativni i grubi diskovi (A) (nazivaju se u daljem tekstu - diskovi vrste (A)) opisuju se koeficijentima $\varepsilon_0 = 0.6$ i $\mu = 0.4$;
- parametrima $\varepsilon_0 = 0.9$ i $\mu = 0.2$, opisuju se manje disipativni diskovi (B) (diskovi vrste (B) - u daljem tekstu). Za sve simulacije u ovom radu, pretpostavlja se da je $\beta_0 = 0.5$ (Foerster et al., 1994). Važno je napomenuti da se u simulaciji isti koeficijenti neelastičnosti i trenja koriste za sudare granula - granula i granula - zid, uključujući i dno suda.

U svim simulacijama koriste se diskovi sa fiksnim prečnikom $d = 0.01784$ i kritična brzina sudara $v_0 = 0.02$ (videti jednačinu 2.1.14). Sve vrednosti su date u bezdimenzionim jedinicama u kojima je sud širine $L = 1$, diskovi su mase $m = 1$, i gravitaciono ubrzanje je $g = 1$. Međutim, tokom dalje prezentacije rezultata vezanih za dinamiku kompaktifikacije, vreme t se meri brojem vibracionih pobuda. Vrednost $v_0 = 0.02L/\sqrt{L/g}$ ($v_0 \approx 0.06 \text{ m/s}$ za $L = 1 \text{ m}$ i $g = 9.81 \text{ m/s}^2$) izabrana je zato što predstavlja tipičnu vrednost za tvrdi metalnu površinu (McNamara and Falcon, 2005).

4. Dinamika procesa kompaktifikacije

U ovom delu su predstavljeni rezultati analize vremenske evolucije gustine pakovanja tokom procesa vibracione kompaktifikacije. Gustina pakovanja ρ definisana je kao odnos zapremine svih granula i ukupne zapremine koja je njima zauzeta. Na slici 4.1 prikazane su zavisnosti gustine pakovanja diskova vrste (A) od vremena (tj. od broja vibracionih pobuda) za nekoliko različitih intenziteta vibracione pobude, $\xi = 0.1, 0.7, 2, 3, i 5\%$. Na istoj slici, na umetnutom grafiku, prikazano je poređenje vremenskih evolucija normalizovane gustine $\tilde{\rho}(t) = [\rho(t) - \rho(0)]/[\rho(\infty) - \rho(0)]$ za dve vrste diskova, (A) i (B), kada je intenzitet vibracija $\xi = 3\%$. Da bi se fluktuacije gustine dovoljno smanjile i tako dobila dovoljno dobra statistika, bilo je neophodno da se usrednji veliki broj rezultata iz pojedinačnih simulacija.



Slika 4.1: Prikazana je vremenska evolucija gustine pakovanja $\rho(t)$ za granule tipa (A) pri različitim intenzitetima vibracija $\xi = 0.1, 0.7, 2, 3, i 5\%$. Isprekidane linije su fitovi Mittag-Leffler-ovom funkcijom (jednačina 4.1). Odgovarajući parametri fita τ_r i α su dati u tabeli 4.2. Umetnuti grafik: Evolucija normirane gustine pakovanja za dve vrste granula (diskovi (A) - puna linija, diskovi (B) isprekidana linija), za slučaj kada je intenzitet vibracija jednak $\xi = 3\%$.

Zbog veoma dugog vremena računanja potrebnog za dostizanje stacionarne gustine sistema (steady-state gustine), prikazani rezultati su dobijeni usrednjavanjem rezultata iz najmanje osam nezavisnih simulacija za svaki skup kontrolnih parametara.

Prezentovane krive vremenske evolucije gustine sistema se veoma dobro kvalitativno slažu sa rezultatima eksperimenata u kojima su efekti granica na proces vibracione kompaktifikacije minimizirani (Philippe and Bideau, 2002; Ribière et al., 2005). Na primer, u numeričkim simulacijama je dobijeno da se dinamika kompaktifikacije usporava kada se intenzitet vibracione pobude smanjuje. Zapravo, kada je vibraciona pobuda malog intenziteta, evolucija gustine prema odgovarajućoj stacionarnoj vrednosti odigrava se tokom dugog vremenskog intervala. U slučajevima kada je pobuda bila veoma malog intenziteta, stacionarne vrednosti gustine nisu mogle biti dostignute u simulaciji. Osim toga, vrednosti stacionarnih gustina koje sistem dostiže za velika vremena su rasle sa smanjenjem intenziteta vibracione pobude, što je takođe u skladu sa eksperimentalnim rezultatima (Philippe and Bideau, 2002).

Jedno od još uvek otvorenih pitanja fizike granularnih materijala je problem nalaženja adekvatne analitičke zavisnosti gustine sistema od vremena tokom procesa vibracione kompaktifikacije. Nakon prvih eksperimenata koje je sprovela grupa profesora Jaeger-a (Knight et al., 1995), predloženo je da ta zavisnost može biti opisana inverznom logaritamskom funkcijom:

$$\rho(t) = \rho_{\infty} + \frac{\rho_0 - \rho_{\infty}}{1 + B \ln(1 + t/\tau_r)}$$

U prethodnoj jednačini ρ_0 i ρ_{∞} su gustine inicijalnog i finalnog pakovanja, B je parametar koji zavisi od intenziteta vibracija, a τ_r je vreme relaksacije sistema. Važno je napomenuti da su ti eksperimenti bili urađeni na aparaturi koja je dopuštala veliki uticaj bočnih zidova suda na ukupnu zapreminu kompaktifikovanog granularnog materijala. Razlog tome bila je veoma dugačka i uska posuda korišćena u eksperimentu. Njen dijametar bio je porediv sa veličinom granula, što je favorizovalo kristalizaciju i uticalo na nemogućnost obrazovanja konvektivnih tokova u sistemu.

Bideau sa saradnicima (Ribière et al., 2007) je ponovio eksperiment grupe iz Čikaga u donekle izmenjenoj geometriji. Korišćenjem cilindrične posude znatno većeg dijametra konfinirajući uticaj zidova na granularno pakovanje je znatno redukovano. U tom eksperimentu primećena je jaka kovekcija granularnog materijala. Pokazano je da se karakteristično vreme relaksacije gustine pakovanja može dovesti u vezu sa brzinom

konvekcije. Nakon analize vremenske evolucije gustine, za razne intenzitete pobude i za različite oblike granula, predloženo je da ona može da bude opisana KWW (Kohlrausch-Williams-Watts) funkcijom:

$$\rho(t) = \rho_{\infty} - (\rho_0 - \rho_{\infty}) \exp[-(t/\tau_r)^{\alpha}]$$

Eksponent α ima vrednost iz intervala (0,1) i zavisi od intenziteta vibracione pobude. Osim toga, eksperimenti u kojima je granularni materijal kompakfikovan u dve dimenzije (Lumay and Vandewalle, 2006; Lumay and Vandewalle, 2005) pokazali su da KWW funkcija odlično fituje vremensku zavisnost gustine, iako u tim eksperimentima nije primećena konvekcija. KWW funkcija je obično primenjivana za opisivanje sporih procesa u termalnim staklastim sistemima. Velika analogija u dinamici kompakfikacije u ova dva sistema implicira na postojanje bliske veze između njih.

U narednom tekstu biće objašnjena motivacija za uvođenje još jedne analitičke zavisnosti kojom može biti opisana vremenska evolucija gustine sistema tokom procesa kompakfikacije. Nedavno su urađene numeričke simulacije reverzibilne depozicije (u daljem tekstu RRSA, od „reversible random sequential adsorption”) objekata različite veličine i rotacione simetrije na planarnoj triangularnoj rešetki (Budinski-Petković et al., 2005). Ovaj stohastički model na triangularnoj rešetki može se smatrati jednostavnim modelom kompakfikacije granularnih objekata različitih oblika. Model zapravo opisuje relaksaciju gustine tankog sloja granularnog materijala normalnog na pravac vibracione pobude. Kao rezultat jedne vibracione pobude, neke čestice mogu da napuste posmatrani sloj ili u njega mogu da dospeju iz okolnog prostora. Intuitivno je jasno da do kompakfikacije dolazi kada se čestice deponuju u posmatranom sloju pod uticajem gravitacije, tako da nije teško uspostaviti korespondenciju između modela reverzibilne depozicije i realnog granularnog sistema. Adsorpcioni događaji su povezani sa nestajanjem ili popunjavanjem šupljina unutar granularnog pakovanja, dok su desorpcioni događaji odgovorni za stvaranje šupljina. Odnos verovatnoće desorpcije i verovatnoće adsorpcije određuje konačnu stacionarnu (steady-state) gustinu. Taj količnik u modelu reverzibilne depozicije igra ulogu sličnu onoj koju intenzitet vibracija igra u realnom eksperimentu. Dinamika reverzibilne depozicije zavisi od distribucije slobodne zapremine u sistemu i od veličine geometrijske frustracije indukovane konačnim dimenzijama i složenošću objekata. Ova svojstva igraju suštinsku ulogu i u procesu kompakfikacije granularnog materijala.

Pokazano je da je dinamika procesa reverzibilne depozicije konzistentna sa zavisnošću oblika (Budinski-Petković et al., 2005)

$$\rho(t) = \rho_{\infty} - \Delta\rho E_{\alpha}(-(t/\tau_r)^{\alpha}), \quad \Delta\rho = \rho_{\infty} - \rho_0. \quad (4.1)$$

U prethodnoj jednačini ρ_0 predstavlja inicijalnu gustinu, a ρ_{∞} odgovara stacionarnoj vrednosti gustine koju sistem dostiže za velika vremena. Parametar τ_r određuje karakteristično vreme procesa evolucije sistema ka stacionarnom stanju, dok parametar α definiše brzinu tog procesa.

Sa E_{α} obeležena je Mittag-Leffler-ova funkcija reda α (u daljem tekstu, M-L funkcija). M-L funkcija može se definisati inverznom Laplasovom transformacijom:

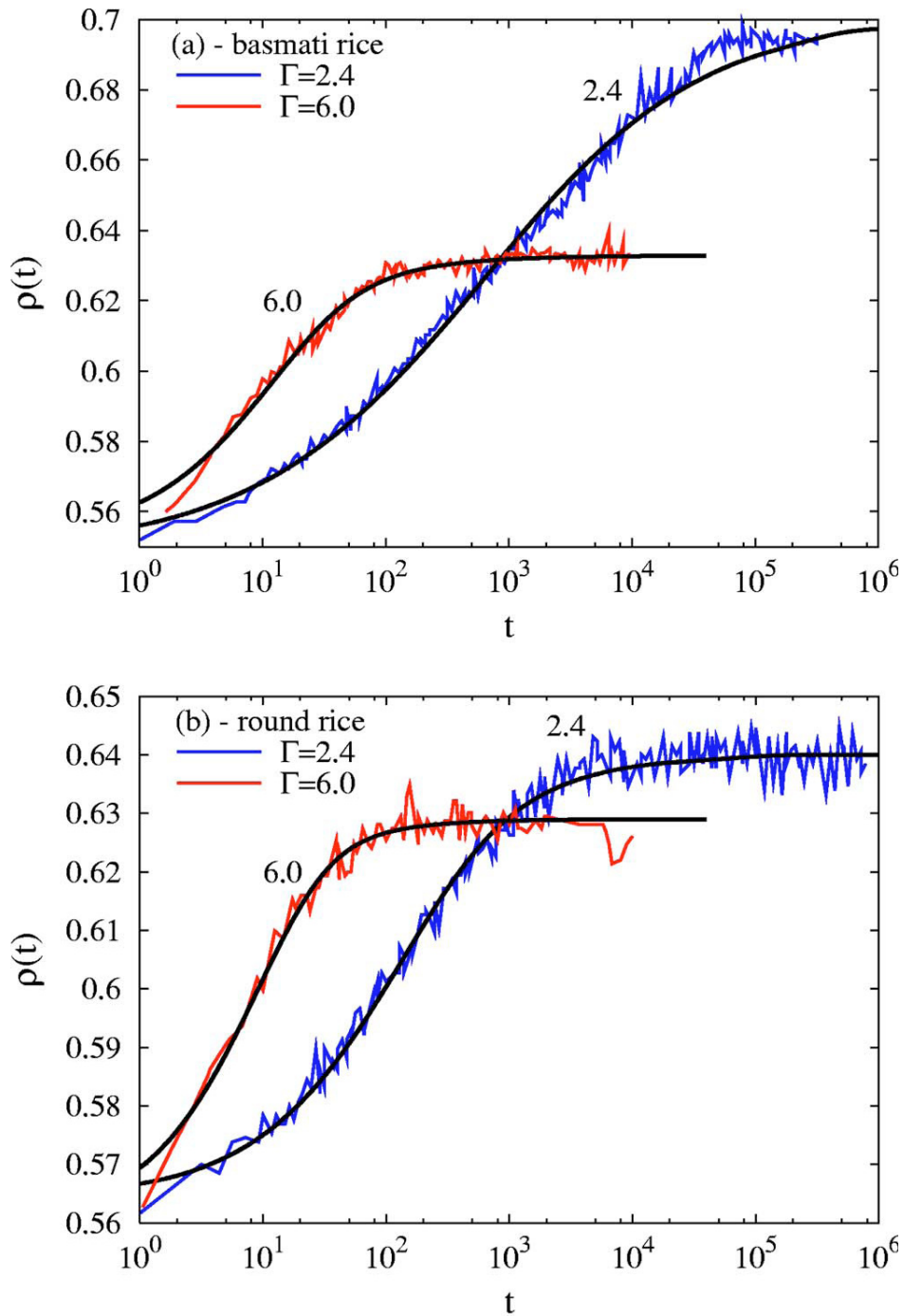
$$E_{\alpha}[-(t/\tau_r)^{\alpha}] = \mathcal{L}[(u + \tau_r^{-\alpha} u^{1-\alpha})^{-1}], \quad (4.2)$$

ili razvojem u red

$$E_{\alpha}[-(t/\tau_r)^{\alpha}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-(t/\tau_r)^{\alpha}]^n}{\Gamma(1+\alpha n)}. \quad (4.3)$$

M-L funkcija je jedna od često korišćenih funkcija kojom se fenomenološki opisuju relaksacioni procesi u mnogim kompleksnim razuređenim sistemima, kao što su staklasti sistemi, feroelektrični kristali i dielektrici (Hilfer, 2002).

Važno je prvo razmotriti da li rezultati prethodnih eksperimenata, koji se bave procesom vibracione kompaktifikacije, mogu biti dovedeni u vezu sa funkcionalnom zavisnošću M-L tipa (jednačina 4.1). Na *slici 4.2* prikazani su rezultati eksperimenta Bideau-a i saradnika (Ribière et al., 2005) za dva različita intenziteta vertikalnih vibracija, $\Gamma = 2.4, 6$ i za dve različite vrste granula. Jedan od važnih rezultata njihovih eksperimenata bio je da osnovna relaksaciona svojstva procesa kompaktifikacije kvalitativno ne zavise od oblika granula. Na istoj slici prikazani su i fitovi njihovih eksperimentalnih podataka M-L funkcijom (jednačina 4.1), a odgovarajući parametri fitova dati su u *tabeli 4.1*. Odlično slaganje koje je postignuto ukazuje na to da se relaksacija gustine u navedenom eksperimentu odigrava u skladu sa M-L zakonom (jednačina 4.1).



Slika 4.2: (Obojene linije) Eksperimentalni podaci (Ribière et al., 2005) vremenske evolucije gustine pakovanja $\rho(t)$ za (a) izduženi pirinač (dugačke granule) i (b) okrugli pirinač (kratke granule) pri različitim intenzitetima vibracionih pobuda $\Gamma = 2.4$ i 6.0 . Kontinualne linije su fitovi na osnovu jednačine 4.1. Parametri fita su predstavljeni u tabeli 4.1.

Tabela 4.1: Parametri fita na osnovu jednačine 4.1 eksperimentalnih podataka (Ribière et al., 2005) vremenske evolucije gustine pakovanja $\rho(t)$ prikazanih na *slici 4.2*. Anizotropne granule imaju dva različita oblika: dugačke granule (izduženi pirinač) i kratke granule (okrugli pirinač).

	Γ	ρ_∞	ρ_0	τ_r	α
izduženi pirinač	2.4	0.702	0.548	1004.0	0.440
okrugli pirinač	2.4	0.640	0.564	181.0	0.665
izduženi pirinač	6.0	0.633	0.552	15.0	0.750
okrugli pirinač	6.0	0.629	0.560	10.5	0.838

Vratimo se ponovo na rezultate numeričkih simulacija koji su prikazani na *slici 4.1*. Jasno se može videti da krive gustine mogu biti veoma dobro fitovane M-L funkcijom. Fitovi su prikazani isprekidanim linijama, a parametri fitova su dati u *tabeli 4.2*. Ovo je još jedna potvrda da se vremenska evolucija gustine nakon inicijalne relaksacije sistema može precizno opisati jednačinom (4.1). Jednačinom (4.1) ponekad nije moguće reprodukovati inicijalno stanje sistema kao i ponašanje gustine za veoma mala vremena na samom početku procesa kompaktifikacije. To se može objasniti memorijskim efektom na sledeći način. U početnoj fazi, relaksacija gustine ne zavisi samo od vrednosti početne gustine već i od metode koja se koristi za izgradnju inicijalnog pakovanja. Zbog toga, fitovanje podataka dobijenih numeričkim simulacijama rađeno je samo za vremena nakon kratkog inicijalnog prelaznog režima, tj. tek nakon 5-10 vibracionih pobuda.

Tabela 4.2: Parametri fita τ_r i α na osnovu jednačine 4.1 rezultata numeričkih simulacija vremenske evolucije gustine pakovanja $\rho(t)$ prikazanih na *slici 4.1*.

ξ	τ_r		α	
	(A)	(B)	(A)	(B)
0.1	163	95	0.760	0.690
0.2	78	45	0.860	0.710
0.3	67	32	0.870	0.740
0.5	42	22	0.878	0.780
0.7	31	17	0.890	0.815
1.0	26	14	0.900	0.850
2.0	19	10	0.945	0.890
3.0	17	7	0.956	0.910
5.0	13	5	0.960	0.950

5. Analiza strukturalnih svojstava granularnog materijala

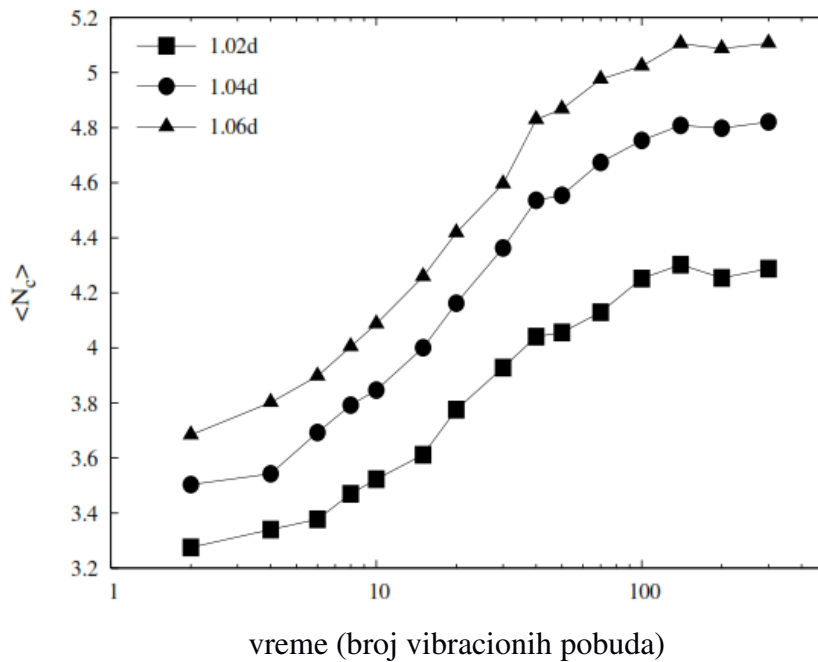
U predhodnim poglavljima prezentovani su rezultati vezani za dinamiku procesa kompaktifikacije granularnog sistema. Neophodno je dinamičke mehanizme koji su odgovorni za sporu vremensku evoluciju gustine dovesti u vezu sa mikrostrukturalnim promenama granularnog pakovanja tokom procesa kompaktifikacije. Analiza reorganizacije pakovanja na lokalnom nivou za odgovarajuće faze kompaktifikacionog procesa izvršena je proučavanjem:

1. najbližih suseda;
2. distribucije pora (šupljina);
3. distribucije „shape” faktora (faktora oblika) koji opisuje raspodelu klastera različite lokalne uređenosti unutar granularnog pakovanja.

Distibucija pora i analiza lokalne uređenosti sistema biće urađena metodom Voronoï-eva teselacije (mozaičenja). Voronoï-eva teselacija predstavlja veoma razvijen metod numeričke geometrije kojom se može kvantitativno opisati struktura razuređenih sistema na lokalnom nivou.

5.1. Najbliži susedi

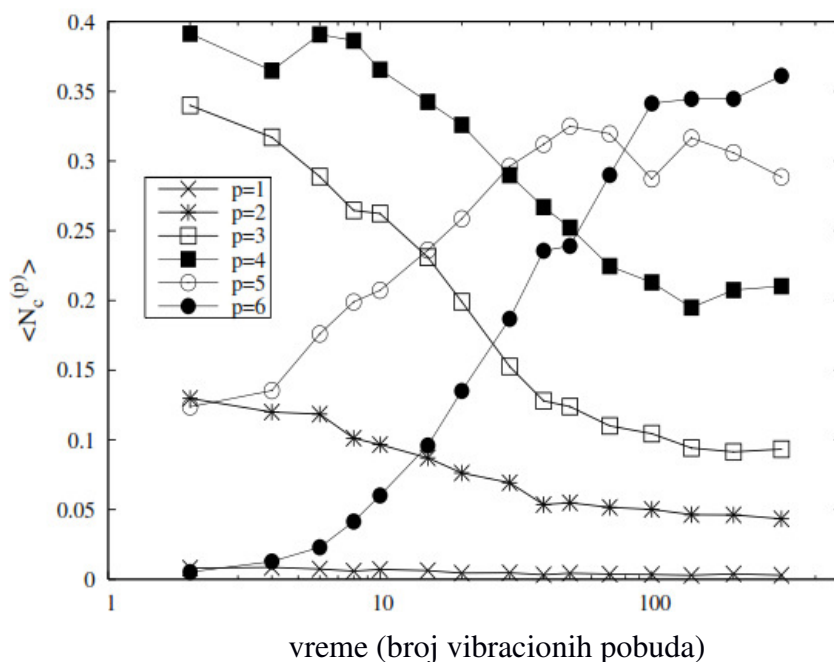
Analiza mikrostrukturnih svojstava granularnih pakovanja započeta je izučavanjem najbližih (lokalnih) suseda, tj. određivanjem koordinacionog broja. U slučaju pakovanja diskova, koordinacioni broj predstavlja srednji broj diskova koji su u kontaktu sa datim diskom. Koordinacioni broj je veličina koja je često izučavana u literaturi posvećenoj granularnim sistemima (Aste, 2005; Aste et al., 2005). Definicija koordinacionog broja usko je vezana za pravilno shvatanje pojma „kontakt” i zato ne postoji njeno jednoznačno određenje u literaturi. Smatra se da su dva diska u kontaktu ukoliko je njihovo rastojanje manje od nekog unapred zadatog rastojanja d_c (tzv. cutoff distance). Koordinacioni broj veoma zavisi od ovog minimalnog rastojanja između diskova ispod koga se smatra da kontakt postoji.



Slika 5.1.1. Vremenska evolucija srednjeg koordinacionog broja $\langle N_c \rangle$ tokom procesa kompaktifikacije za intenzitet vibracione pobude jednak $\xi = 3.0\%$. Simulacioni rezultati su dati za tri vrednosti cutoff parametara: $d_c = 1.02d$ (kvadrati), $1.04d$ (krugovi), i $1.06d$ (trouglovi).

Slika 5.1.1 prikazuje vremensku evoluciju srednjeg koordinacionog broja $\langle N_c \rangle$ tokom procesa kompaktifikacije za tri različita minimalna radijalna rastojanja: $d_c = 1.02d$, $1.04d$, i $1.06d$, gde je d dijametar diska. Intenzitet vibracione pobude je iznosio $\xi = 3.0\%$ i rezultati su dobijeni za diskove tipa (A). U svim slučajevima, koordinacioni broj $\langle N_c \rangle$ raste tokom vremena t i nalazi se u opsegu između 3.2 i 5.1 u zavisnosti od cutoff rastojanja d_c i od gustine pakovanja $\rho(t)$. Zbog ovoga je potrebno doneti odluku o tome koliko velika treba da bude vrednost minimalnog rastojanja d_c . Odgovor na to pitanje daju eksperimenti i neke numeričke simulacije. Ukoliko je $d_c = 1.04d$, dobijene vrednosti srednjeg broja suseda $\langle N_c \rangle$ za pakovanja u stacionarnom (steady-state) režimu su konzistentne sa vrednostima dobijenim u modelima baziranim na metodama kontaktne dinamike (Bratberg et al., 2002). Zbog toga u daljoj analizi za kritično rastojanje biće korišćena vrednost $d_c = 1.04d$.

Usled dinamičkih preraspodela diskova unutar pakovanja, broj suseda p sa kojima se ostvaruje kontakt menja se od čestice do čestice. U slučaju dvodimenzionalnog pakovanja konveksnih čestica broj p može da varira od 1 do 6. Povezanost (koneksnost) pakovanja može se opisati udelom $\langle N_c^{(p)} \rangle$ diskova koji ostvaruju p kontakata sa najbližim susedima. Tada se može reći da broj $\langle N_c^{(1)} \rangle$ odgovara tzv. „mrtvim krajevima” („dead ends”) nizova povezanih čestica (lanaca). Brojevi $\langle N_c^{(2)} \rangle$ i $\langle N_c^{(3)} \rangle$ mogu se dovesti u vezu sa obrazovanjem (ulančavanjem), odnosno sa grananjem nizova povezanih čestica, respektivno. Broj $\langle N_c^{(4)} \rangle$ odgovara situaciji gde čestica koja je odozdo oslonjena na dve čestice, podržava dve duge čestice iznad sebe (tzv. „piling”). Brojem $\langle N_c^{(5)} \rangle$ mogu se opisati čestice koje su zarobljene („jammed”) sa svojih pet najbližih suseda. Na kraju, broj $\langle N_c^{(6)} \rangle$ odgovara česticama koje obrazuju uređene heksagonalne konfiguracije.



Slika 5.1.2. Rezultati simulacije za vremensku evoluciju brojeva koneksnosti $\langle N_c^{(p)} \rangle$, ($p = 1, \dots, 6$), tokom procesa kompaktifikacije sa intenzitetom pobude $\xi = 3.0\%$.

Korišćeno cutoff rastojanje je iznosilo $d_c = 1.04d$.

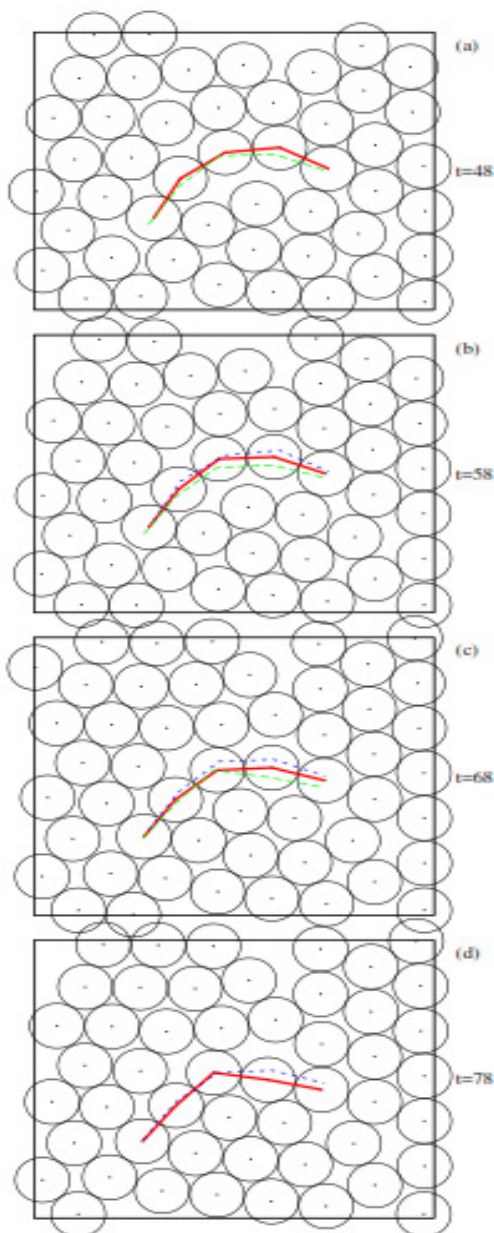
Slika 5.1.2 prikazuje promenu brojeva povezanosti (koneksnosti) $\langle N_c^{(p)} \rangle$, $p = 1, \dots, 6$ u vremenu (merenog brojem vibracionih pobuda), za diskove tipa (A) tokom procesa kompaktifikacije intenzitetom vibracione pobude $\xi = 3.0\%$. Svi brojevi koneksnosti monotono, ili rastu ili opadaju, sa porastom gustine sistema. U celom opsegu dostignutih gustina, brojevi $\langle N_c^{(5)} \rangle$ i $\langle N_c^{(6)} \rangle$ uvećavaju se na račun brojeva $\langle N_c^{(2)} \rangle$, $\langle N_c^{(3)} \rangle$ i $\langle N_c^{(4)} \rangle$, koji se smanjuju. Broj $\langle N_c^{(1)} \rangle$ ostaje približno konstantan tokom procesa kompaktifikacije. Struktura granularnog pakovanja u početnom stanju karakteriše grananje nizova povezanih čestica i „piling” (tj., $\langle N_c^{(3)} \rangle$ i $\langle N_c^{(4)} \rangle$ najveći su brojevi koneksnosti u trenutku $t = 0$). Relativno velike vrednosti broja $\langle N_c^{(2)} \rangle$, koji se dovodi u vezu sa ulančavanjem čestica, sugerise na prisustvo mostova (ili lukova) unutar pakovanja. Stadijum kompaktifikacije koji odgovara velikim vremenima karakterišu uređena pakovanja čestica, pri čemu je zagušenje („jammed”) $\langle N_c^{(5)} \rangle$ i heksagonalno uređenje $\langle N_c^{(6)} \rangle$ čestica veoma naglašeno. Važno je napomenuti da se kvalitativno isti

opis koneksnosti pakovanja dobija za različite vrednosti praga d_c za cutoff iz intervala $d_c = 1.02d - 1.06d$.

Jedna veoma važna osobenost strukture granularnih pakovanja je postojanje lukova (svodova) ili mostova (Mehta at al., 2004; Pagnaloni and Barker, 2004; Pagnaloni at al., 2006). Luk ili most je više-čestična struktura za koju je moguće trasirati neprekidnu putanju između svakog para čestica iz strukture (Pagnaloni and Barker, 2004). Stabilnosti te strukture doprinosi svaka gradivna čestica ponaosob. Uklanjanjem ili čak perturbovanjem položaja neke od konstitutivnih čestica čitava struktura svoda može izgubiti svoju stabilnost i urušiti se pod uticajem gravitacije. Svojim prisustvom svodovi generišu šupljine unutar pakovanja koje bitno utiču na gustinu sistema, kao i na distribuciju sila između granula (Mehta at al., 2004). Takođe, formiranje lukova predstavlja jedan od osnovnih mehanizama koji indukuju zagušenje granularnog toka kroz otvore i kanale (To at al., 2001).

Važno je napomenuti da simulacija, zahvaljujući fizički realnoj dinamici granula i adekvatnom kriterijumu za njihovo zaustavljanje u stabilnim položajima omogućava kreiranje lukova. Modeli i simulacije kod kojih se ne prati simultano kretanje svih čestica ne obezbeđuju formiranje ovih kooperativnih struktura. U kooperativne strukture uključen je veliki deo čestica jednog granularnog pakovanja. Pažljivom analizom može se zaključiti da glavni mehanizam kompaktifikacije pod uticajem slabih vibracija predstavlja postepen kolaps dugo-živećih mostova. Rezultat tih urušavanja je redukcija ili potpuni nestanak šupljina. Na *slici 5.1.3* prikazana je vremenska evolucija jednog tipičnog mosta formiranog u simulaciji. Luk je naznačen pomoću segmenata koji povezuju međusobno stabilizovane čestice. Izabrane slike ilustruju neke karakteristične momente tokom njegove evolucije u intervalu između 48 i 78 vibracione pobude. Intenzitet vibracija je bio $\xi = 0.1\%$ i generisane su slike u simulaciji za diskove tipa (A). Kao što se može videti, tokom slabih vibracionih pobuda, formiraju se kooperativne strukture nakon čega trpe spore deformacije. Jednom formirani luk obično može opstati tokom velikog broja vibracionih pobuda. Nekada jedna formirana struktura može da traje tokom celog eksperimenta. Time vremenske skale koje opisuju promene pakovanja na „mikrostrukturnom” nivou postaju poredive sa vremenskom skalom na kojoj se opisuje promena gustine sistema. Ovo odsustvo separacije vremenskih skala posebno je važno za tumačenje memorijskih efekata koji su prisutni kod granularnih

sistema. U režimu vibracione pobude velikog intenziteta, kooperativne strukture brzo se formiraju i nestaju. Drugim rečima, kooperativne strukture bivaju duže očuvane (neurušene) kada je intenzitet vibracione pobude manji.

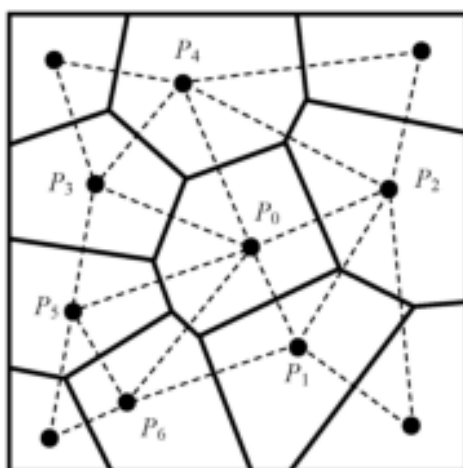


Slika 5.1.3. Evolucija mosta (puna linija) formiranog u simulaciji sa diskovima tipa (A), pri čemu je intenzitet pobude iznosio $\xi = 0.1\%$. Slike prikazuju deo pakovanja posle (a) 48 (b) 58 (c) 68 i (d) 78 vibracionih pobuda. Diskovi čiji centri se nalaze van pravougaonog okvira nisu prikazani. Kratke i duge isprekidane linije odgovaraju položaju mosta na predhodnoj, odnosno sledećoj slici, respektivno.

5.2. Voronoï-ev dijagram

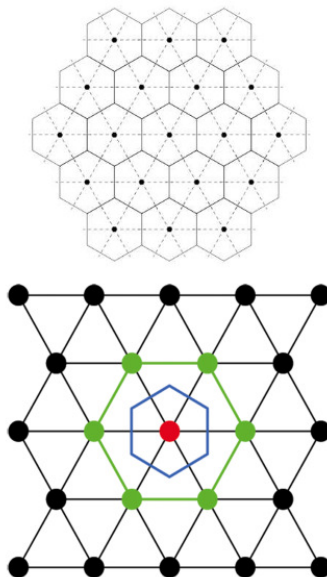
Voronoï-ev dijagram predstavlja jedan od načina na koji može biti dekomponovan metrički prostor. Dekompozicija je jednoznačno određena metrikom prostora i zadatom familijom objekata (podskupova) u tom prostoru. U literaturi se osim termina Voronoï-ev dijagram koriste izrazi Voronoï-eva teselacija (mozaičenje), Voronoï-eva dekompozicija, ili Dirichlet-ova teselacija (Aurenhammer, 1991). Voronoï-evu teselaciju možemo smatrati jednostavnim matematičkim modelom celularne strukture.

Objasnimo detaljnije Voronoï-evu teselaciju na primeru dekompozicije euklidske ravni pomoću diskretnog skupa tačka u njoj. Neka je dat diskretni skup A tačka u ravni π . Za skoro svaku tačku $x \in \pi$ u ravni π postoji jedna određena tačka $a_i \in A$ koja je najbliža tački x . Skup svih tačaka x u ravni π koje su bliže datoj tački $a_i \in A$ nego bilo kojoj drugoj tački $a_j \neq a_i, a_j \in A$ je unutrašnjost konveksnog poligona P_i koji se obično naziva Voronoï-eva ćelija tačke a_i . Skup poligona $\{ P_i \}$, pri čemu svaki sadrži jednu i samo jednu tačku $a_i \in A$ je Voronoï-eva teselacija koja odgovara skupu A . Voronoï-eva teselacija dekomponuje ravan π na disjunktne unije poligona. Voronoï-eve ćelije su konveksni poligoni čije se ivice sustiču u trovalentnim verteksima. Drugim rečima, svaki verteks je jednako udaljen od tačno tri susedne tačke skupa A . Voronoï-eva teselacija može biti definisana i u opštem slučaju N -dimenzionalnog euklidovog prostora. Na primer u trodimenzionalnom prostoru Voronoï-eve ćelije su konveksni poliedri.



Slika 5.2.1. Ilustracija „metoda ortogonalnih bisektrisa” za konstrukciju Voronoï-evog dijagrama u dve dimenzije.

Za dati skup tačaka postoji relativno jednostavan algoritam za generisanje odgovarajućeg Voronoï-evog dijagama. Jedan od metoda je tzv. metod ortogonalnih bisektrisa (MOB) koji je ilustrovan na slici 5.2.1. U MOB se polazi od proizvoljne tačke (P_0) datog skupa tačaka i prvo se detektuje njoj najbliža tačka (P_1) iz tog skupa. Deo ortogonalne simetrale duži P_0P_1 biće ivica Voronoï-evog poligona koji odgovara tački (P_0). Nakon toga određuje se druga najbliža tačka (P_2) tački (P_0) i ponovo se konstruiše simetrala duži P_0P_2 . Ovaj algoritam nastavlja se za treću (P_3), četvrtu (P_3), ... , n-tu (P_n) najbližu tačku, sve dok simetrale duži P_0P_3, P_0P_4, \dots ne oforme stabilan mnogougao koji se više neće menjati nakon razmatranja bilo koje nove tačke polaznog skupa. Ponavljanjem predhodnog algoritma za sve tačke polaznog skupa generiše se Voronoï-eva dekompozicija celog prostora (slika 5.2.1). Prilikom izučavanja dvodimenzionalnih pakovanja diskova polazni diskretni skup tačaka činiće centri svih diskova. Za potpuno regularno pakovanje jednakih diskova u heksagonalnu strukturu Voronoï-evi poligoni su pravilni šestouglovi, što je ilustrovano na slici 5.2.2. Svaka devijacija od regularne heksagonalne strukture uzrokuje „deformaciju” pravilnih Voronoï-evih šestouglova.



Slika 5.2.2. Dvodimenzionalno regularno heksagonalno pakovanje jednakih diskova (prikazani su samo centri diskova). Centri diskova su čvorovi triangularne rešetke. Voronoï-evi poligoni su pravilni šestouglovi. Donja slika: Najbliži susedi su označeni zelenom bojom.

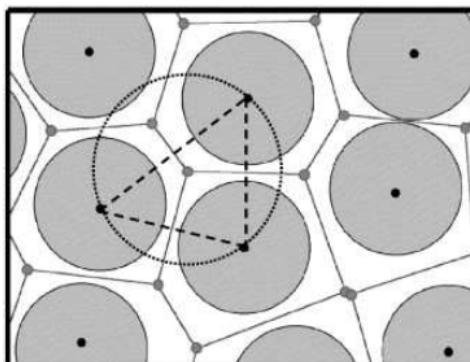
5.3. Analiza šupljina

Veoma važni parametri za kvantitativnu karakterizaciju strukturnih svojstava granularnih pakovanja su zapreminska distribucija i geometrijske karakteristike međučestičnih šupljina (pora) unutar pakovanja. Zapreminska distribucija šupljina $P(v)$ predstavlja dobar test za teoriju slobodne zapremine (Boutreux and Gennes, 1997). Ona predviđa eksponencijalno opadanje distribucije, tj. $P(v) \propto \exp(-v/v_0)$, gde je v zapremina jedne šupljine i v_0 karakteristična veličina šupljina.

Proučavanje šupljina koje se obrazuju unutar granularnog pakovanja biće bazirano na Voronoï-ovoj teselaciji kojom se dekomponuje zauzeti prostor. U poglavlju 5.2 je pokazano da struktura Voronoï-evog dijagrama zavisi od lokalnih karakteristika granularnog pakovanja (tj. od prostornog rasporeda diskova u ravni). Za datu dvodimenzionalnu distribuciju diskova Voronoï-eva teselacija jednoznačno je definisan skup konveksnih ćelija (poligona u 2D), pri čemu svaka ćelija (poligon) sadrži jedan i samo jedan disk. Voronoï-ev poligon uočenog diska geometrijsko je mesto tačaka koje su bliže tom disku nego bilo kom drugom disku koji obrazuje pakovanje. Dva diska smatraju se susedima ako njihovi Voronoï-evi poligoni imaju jednu zajedničku stranicu (*slika 5.2.2*).

Postoje dva načina pomoću kojih mogu da budu definisane šupljine unutar granularnog pakovanja jednakih diskova. Prvi način oslanja se na činjenicu da se svaki verteks Voronoï-evog dijagrama nalazi na jednakom rastojanju od tri susedna diska. Pora ili šupljina definiše se kao zamišljeni krug sa centrom u uočenom verteksu i u kontaktu je sa tri susedna diska (Philippe and Bideau, 2001; Richard et al., 2003). Druga uobičajena definicija šupljina bazirana je na Delaunay-ovoj triangulaciji. Delaunay-ova triangulacija predstavlja dekompoziciju dvodimenzionalne strukture pakovanja na sistem trouglova čija se temena nalaze u centima tri susedna diska (u smislu Voronoï-evog dijagrama). Veza Delaunay-ove triangulacije i Voronoï-evog dijagrama ostvaruje se i kroz činjenicu da kružnica opisana oko nekog Delaunay-ovog trougla ima centar u verteksu Voronoï-evog poligona (*slika 5.3.1*). Dakle, pora ili šupljina definiše se kao deo Delaunay-ovog trougla koji nije zauzet delovima susednih diskova (tzv. Delaunay-ova „slobodna” zapremina) (Aste, 2005; Aste, 2006). Prednost druge definicije je u tome što su tako definisane šupljine disjunktne. Krugovi koji određuju šupljine u skladu

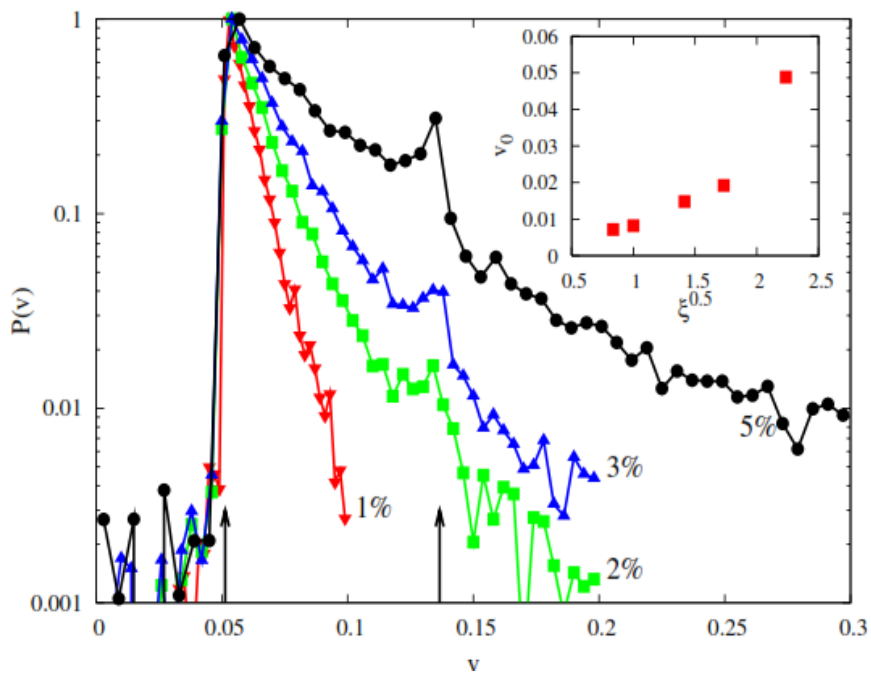
sa prvom definicijom se mogu međusobno seći i u svom zbiru ne daju ukupnu „slobodnu” zapreminu.



Slika 5.3.1. Delaunay-ova trianglacija predstavlja dekompoziciju dvodimenzionalne strukture pakovanja na sistem trouglova čija se temena nalaze u centrima tri susedna diska. Kružnica opisana oko Delaunay-ovog trougla ima centar u verteksu Voronoï-evog poligona. Pora ili šupljina se definiše kao deo Delaunay-ovog trougla koji nije zauzet delovima susednih diskova.

Na *slici 5.3.2* dato je poređenje zapreminskih distribucija pora $P(v)$ za pakovanja koja se nalaze u stacionarnom stanju za razne vrednosti intenziteta vibracione pobude. Prikazane distribucije pora odgovaraju stacionarnom režimu kompaktifikacije za intenzitete pobude jednake $\xi = 1\%, 2\%, 3\%$, i 5% ; pri tome, odgovarajuće stacionarne gustine iznose $0.876, 0.868, 0.863$ i 0.832 , respektivno. Zapremina šupljina v je normalizovana na zapreminu jedne granule (tj. na površinu diska), $v_d = d^2\pi/4$. Odmah može biti primećeno da prikazane distribucije $P(v)$ veoma zavise od intenziteta vibracija ξ , odnosno od vrednosti dostignute gustine u stacionarnom stanju. Ove distribucije primetno se sužavaju kada se gustina stacionarnog stanja uveća. Osim toga, na raspodelama pora $P(v)$ mogu se primetiti dva izdvojena pika sa fiksnim pozicijama koje se nalaze približno na $v = 0.05$ i 0.14 . Lako je razumeti kakve lokalne konfiguracije diskova dominantno doprinose svakom od pomenutih pikova na raspodeli $P(v)$. Delaunay-ova ćelija slobodne zapremine jednake $\sqrt{3}/\pi - 1/2 \approx 0.0513$ (normalizovane na $v_d = d^2\pi/4$) odgovara lokalnoj konfiguraciji diskova sa heksagonalnom simetrijom. U tom slučaju tri diska se međusobnom dodiruju, dok im se centri nalaze u temenima jednakostraničnog Delaunay-ovog trougla. Delaunay-ova

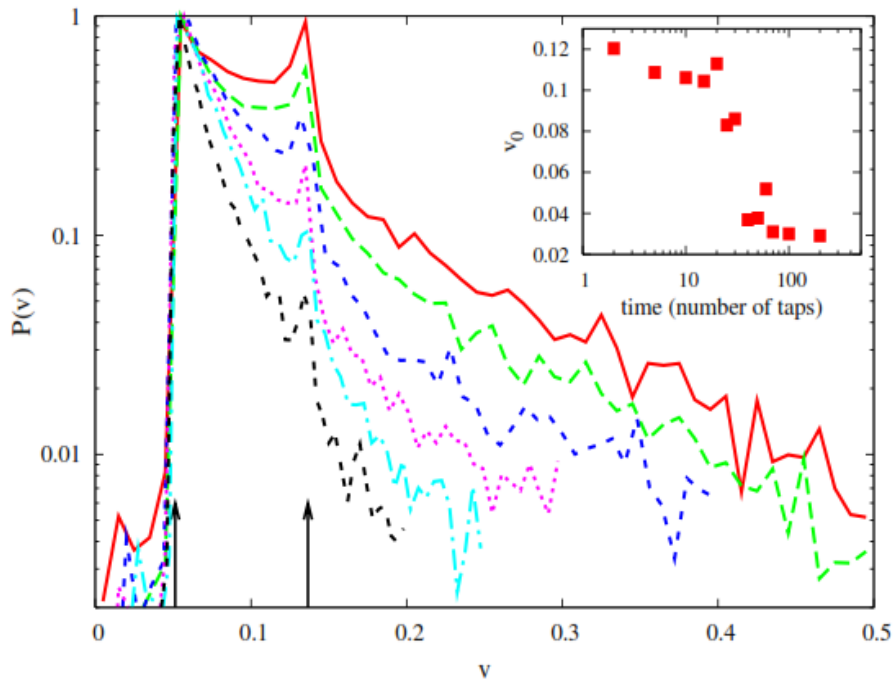
ćelija slobodne (normalizovane) zapremine jednake $2/\pi - 1/2 \approx 0.1366$ odgovara lokalnoj konfiguraciji diskova sa kvadratnom simetrijom. U tom slučaju četiri diska se međusobno dodiruju, dok im se centri nalaze u temenima kvadrata. Važno je napomenuti da drugačiji izbor slobodne zapremine (npr., šupljina je zamišljeni krug sa centrom u verteksu što se može videti u radovima Philippe and Bideau, 2001; Richard et al., 2003) ne daje jasan i izdvojen drugi pik na krivi raspodele $P(v)$.



Slika 5.3.2. Zapreminska distribucija pora $P(v)$, normalizovana na maksimalnu vrednost, za četiri različita stacionarna pakovanja dobijena za intenzitet vibracione pobude jednake $\xi = 0.1\%$ (trouglovi, naniže okrenuti), 2% (kvadrati), 3% (trouglovi naviše okrenuti), i 5% (krugovi). Vertikalne strelice odgovaraju normalizovanim zapreminama jednakim $\sqrt{3}/\pi - 1/2$ i $2/\pi - 1/2$. Svi rezultati su dobijeni za diskove tipa (A). Umetnuti grafit prikazuje karakterističnu zapreminu v_0 kao funkciju intenziteta vibracija $\xi^{1/2} \propto \Gamma$.

Dalji uvid u mikrostrukturalne promene granularnog pakovanja može se dobiti analizom vremenske evolucije zapreminske distribucije pora $P(v)$ tokom procesa kompaktifikacije. *Slika 5.3.3* prikazuje vremensku evoluciju distribucije $P(v)$ pri intenzitetu pobude $\xi = 3\%$. Za sve faze procesa kompaktifikacije krive zapreminske

distribucije pora $P(v)$ su asimetrične sa izraženim „repom” raspodele na desnoj strani. Rep raspodele se postupno redukuje sa porastom gustine pakovanja tokom procesa kompaktifikacije. Osim toga, rep svake prikazne distribucije $P(v)$ se može fitovati eksponencijalnom funkcijom, $P(v) \propto \exp(-v/v_0)$. Vremenska evolucija parametra fita v_0 (tzv. karakteristična slobodna zapremina) je prikazana na slici 5.3.3 (videti umetnutu sliku). Karakteristična slobodna zapremina v_0 za stacionarna pakovanja raste sa porastom intenziteta pobude $\xi^{1/2} \propto \Gamma$ (videti umetnutu sliku na slici 5.3.2).



Slika 5.3.3. Zapreminska distribucija pora $P(v)$, normalizovana na maksimalnu vrednost, za razne faze procesa kompaktifikacije. Linije (od vrha naniže) odgovaraju distribucijama $P(v)$ nakon $t = 5, 10, 20, 30, 40,$ i 100 vibracione pobude. Deo distribucije koji odgovara najvećim porama (tzv. „rep” distribucije) se tokom procesa kompaktifikacije redukuje. Rezultati su dobijeni za intenzitet vibracija $\xi = 3$. Vertikalne strelice odgovaraju normalizovanim zapreminama jednakim $\sqrt{3}/\pi - 1/2$ i $2/\pi - 1/2$. Svi rezultati su dobijeni za diskove tipa (A). Umetnuti grafik prikazuje vremensku evoluciju karakteristične zapremine v_0 tokom kompaktifikacije.

Važno je napomenuti da je slično ponašanje distribucija Delaunay-ove „slobodne” zapremine $P(v)$ dobijeno i u slučaju trodimenzionalnih pakovanja sfernih granula (Aste, 2005; Aste, 2006). Ali, za razliku od dvodimenzionalnog slučaja, trodimenzionalne konfiguracije sfera nisu dovodile do pojave pikova na eksponencijalnim repovima zapreminske distribucije pora. Odsustvo pomenutih pikova je očekivano pošto je tendencija ka potpunom uređenju (kristalizaciji) jednakih sfernih granula mnogo manje izražena u tri nego u dve dimenzije (Lumay and Vandewalle, 2005). Razlog za to se može objasniti na sledeći način. U dve dimenzije najgušća moguća lokalna konfiguracija je heksagonalno uređenje i ono je translatorno invarijantno (može se ponavljati u prostoru, tj. u ravni, neograničen broj puta bez narušavanja uređene strukture pakovanja). Međutim, u tri dimenzije najkompaktnija moguća lokalna konfiguracija u sistemu identičnih sfera nije kompatibilna sa translacionom simetrijom i zato se ne može ponavljati u prostoru bez generisanja znatnih šupljina. Zapravo, nakon smeštanja dvanaest sfera oko centralne, sa centrima u temenima pravilnog ikosaedra, u blizini centralne sfere preostaje dosta slobodnog prostora. Ali, taj slobodni prostor nije dovoljan za smeštanje trinaeste sfere. Možemo reći da je opisana kompaktna ikosaedralna lokalna konfiguracija sfera geometrijski „frustrirana” i zato je možemo smatrati generatorom strukturne heterogenosti trodimenzionalnog pakovanja.

5.4. Analiza oblika Voronoï-evih poligona

U ovom poglavlju biće nastavljena kvantitativna analiza strukture razuređenih pakovanja diskova koja se formira tokom procesa vibracione kompakfikacije. Posebno se prate strukturne promene do kojih dolazi prilikom povećanja gustine sistema. Voronoï-evi dijagrami ponovo se koriste za vizuelizaciju strukturnog uređenja granularnog pakovanja. Kvantitativna informacija o tipu uređenja može biti dobijena izračunavanjem *faktora oblika* (shape factor) Voronoï-evih poligona. Pojam faktora oblika uveden je u radu Moučka and Nezbeda (Moučka and Nezbeda, 2005), sa ciljem da budu praćene promene strukture u tečnostima i sistemima sličnim tečnostima kada se približavaju razuređenom stanju zagušenja (jammed state). Faktor oblika je bezdimenziona mera odstupanja Voronoï-eve ćelije od kružnog (sfernog u 3D) oblika. Funkcija raspodele faktora oblika jasno pokazuje prisustvo domena različite strukturne uređenosti unutar pakovanja. Važno je naglasiti da je distribucija faktora oblika mnogo senzibilnija na male promene uređenja pakovanja od, na primer, dvo-čestične korelacione funkcije položaja čestica sistema (Moučka and Nezbeda, 2005). Zato je ova veličina nedavno korišćena prilikom eksperimentalne analize procesa kristalizacije dvodimenzionalnih sistema (Reis at al., 2006). Osim toga, individualne karakteristike Voronoï-evih ćelija, kao što su broj stranica, obim i površina (u 2D), ne mogu detaljnije opisati fine strukturne promene (Fraser at al., 1990; Huerta and Naumis, 2003). Generalno, senzitivnost predhodno nabrojanih karakteristika Voronoï-evih poligona na strukturne promene je nedovoljna za analizu lokalnih svojstava pakovanja (Richard at al., 1999).

Međutim, znatno bolji indikator strukturnih promena je faktor oblika ζ koji kombinuje obim C i površinu S Voronoï-eve ćelije (Moučka and Nezbeda, 2005; Richard at al., 2001). Definiše se na sledeći način (u 2D):

$$\zeta = \frac{C^2}{4\pi S} \quad (5.4.1)$$

Za objekat kružnog oblika faktor oblika je minimalan i jednak jedinici, $\zeta = 1$. Za konveksan poligon, važi da je $\zeta > 1$ pri čemu se vrednost faktora oblika uvećava sa porastom njegove anizotropije. Na primer, za kvadrat je $\zeta = 4/\pi \approx 1.273$, za pravilni petougao je $\zeta = \pi/5 \tan(\pi/5) \approx 1.156$, dok za pravilni šetougao važi da je $\zeta =$

$6/\sqrt{3\pi^2} \approx 1.103$. Za pravilan N -trougao važi da je $\zeta = (N/\pi)\tan(\pi/N)$, što predstavlja donju granicu vrednosti faktora oblika za sve druge konveksne N -trouglove.

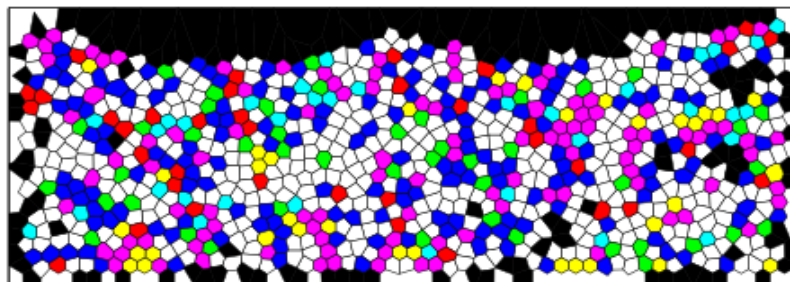
Faktor oblika se prvo koristi za indentifikaciju domena različite strukturne uređenosti u pakovanjima koja su generisana u numeričkoj simulaciji kompaktifikacije diskova. U narednom poglavlju analogna analiza će biti izvršena na pakovanjima formiranim u eksperimentu. Pri tome, svaki domen se sastoji od diskova čiji Voronoï-evi poligoni su povezani zajedničkom stranicom i imaju približno istu vrednost faktora oblika. Faktor oblika se određuje za svaki Voronoï-evi poligon, osim za otvorene Voronoï-eve ćelije koje su locirane na granicama sistema, zbog čega nemaju konačnu površinu. Distribucija faktora oblika za fluid dvodimenzionalnih diskova zavisi od gustine sistema (Moučka and Nezbeda, 2005). Ispostavlja se da za gustine koje odgovaraju analiziranim pakovanjima u ovom radu, distribucije faktora oblika ζ iščezavaju za vrednosti iznad $\zeta \approx 1.25 - 1.30$. Zbog jasnije vizuelizacije domena sačinjenih od različitih Voronoï-evih poligona, izvršena je njihova klasifikacija u osam grupa $G_1 - G_8$, na osnovu vrednosti njihovog faktora oblika $\zeta \in (1.0, 1.25)$. Klasifikacija je prikazana u tabeli 5.4.1. Grupa G_1 obuhvata skoro potpuno pravilne šestouglove, dok druge grupe sadrže manje pravilne (zaokružene) poligone.

Tabela 5.4.1. U tabeli je sumirana klasifikacija Voronoï-evih poligona u osam grupa

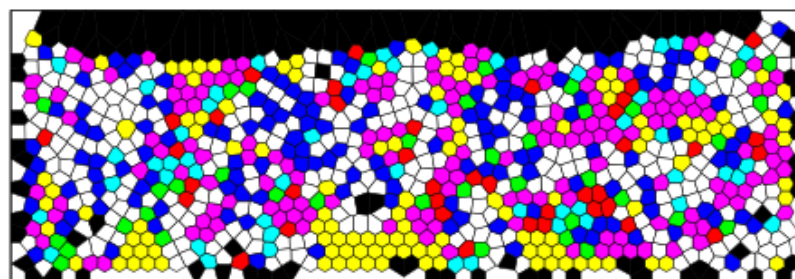
$G_1 - G_8$ na osnovu vrednosti faktora oblika (jednačina (5.4.1)). Za gustine koje odgovaraju pakovanjima dobijenim u simulaciji, distribucije faktora oblika iščezavaju iznad $\zeta \approx 1.30$.

Grupa	Opseg	Boja
G_1	$\zeta < 1.108$	yellow, žuta
G_2	$1.108 < \zeta < 1.125$	magenta, ružičasta
G_3	$1.125 < \zeta < 1.130$	cyan, tirkizna
G_4	$1.130 < \zeta < 1.135$	red, crvena
G_5	$1.135 < \zeta < 1.140$	green, zelena
G_6	$1.140 < \zeta < 1.160$	blue, plava
G_7	$1.160 < \zeta < 1.250$	white, bela
G_8	$1.250 < \zeta$	black, crna

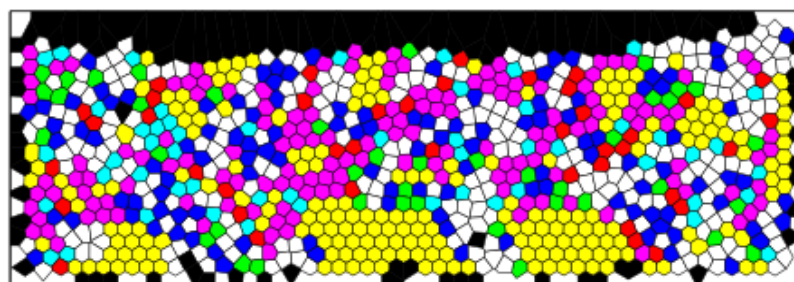
Na slici 5.4.1 prikazane su Voronoi-eve teselacije za pakovanja koja su formirana u simulacijama za diskove tipa (A), pri čemu je intenzitet vibracione pobude iznosio $\xi = 7$.



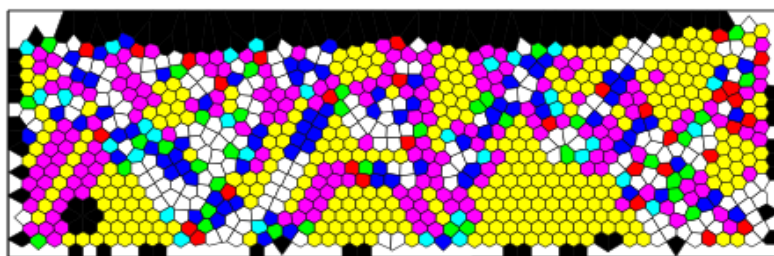
(a) $t = 2$



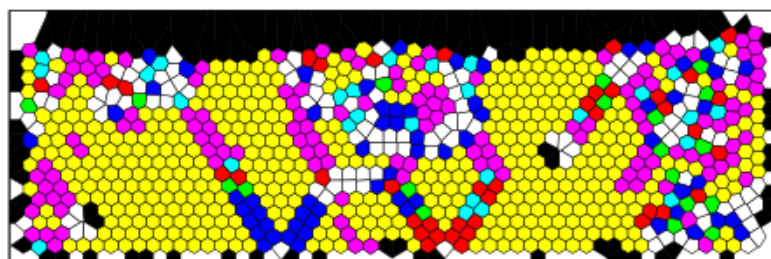
(b) $t = 8$



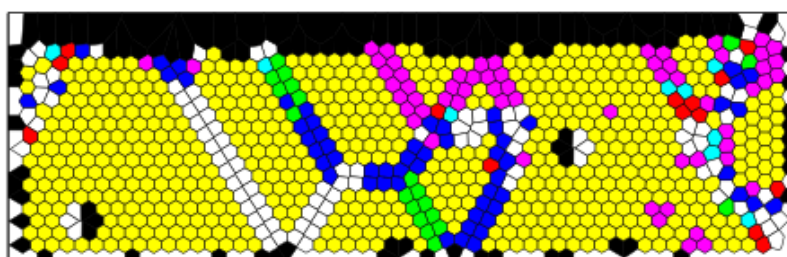
(c) $t = 15$



(d) $t = 30$



(e) $t = 50$



(f) $t = 70$

Slika 5.4.1. Voronoï-evi dijagrami granularnih pakovanja formiranih pomoću numeričke simulacije. Dijagrami odgovaraju različitim stadijumima procesa kompaktifikacije, i to:

$t = (a) 2, (b) 8, (c) 15, (d) 30, (e) 50$ i $(f) 70$ (t je jednako broju vibracionih pobuda). Voronoï-eve ćelije su obojene u skladu sa vrednošću njihovog faktora oblika ζ (jednačina (5.4.1)). Mapa boja Voronoï-evih poligona je definisana u tabeli 5.4.1.

Pikazani rezultati se odnose na diskove tipa (A). Intenzitet vibracione pobude je iznosio

$$\xi = 0.7\%.$$

Dijagrami odgovaraju pakovanjima nakon $t = (a)2, (b)8, (c)15, (d)30, (e)50$ i $(f)70$ vibracione pobude. Boje na dijagramima su kodirane u skladu sa distribucijom faktora oblika koja je data u tabeli 5.4.1 (na $G_1 - G_8$, na osnovu vrednosti $\zeta \in (1.0, 1.25)$). Ovo

omogućava lako uočavanje i analizu lokalnog grupisanja granula u dobijenim pakovanjima.

Na slici 5.4.1 (a) uočljiva je mešavina raznih Voronoï-evih poligona. Vidi se da poligoni koji pripadaju klasi G_7 dominiraju. Klasu G_7 čine uglavnom znatno deformisani petouglovi i šestouglovi. To znači da su u pakovanju 5.4.1 (a) diskovi prostorno distribuirani sasvim razuređeno, tj. diskovi lokalno ne obrazuju konfiguracije specifične uređenosti. Nakon $t = 8$ vibracionih pobuda (slika 5.4.1 (b)), mogu se primetiti male skupine (klasteri) skoro pravilnih šestouglova koji pripadaju klasi G_1 . Osim toga, uočljivi su i mali domeni koje čine poligoni klase G_2 . Sa porastom broja vibracionih pobuda (slike 5.4.1 (c) i (d)) uvećava se prisustvo Voronoï-evih ćelija pravilnog oblika. Klasteri koje obrazuju skoro pravilni mnogouglovi počinju da preovlađuju, iako je globalna struktura pakovanja još uvek razuređena, odnosno razuređeni regioni unutar pakovanja su lako uočljivi.

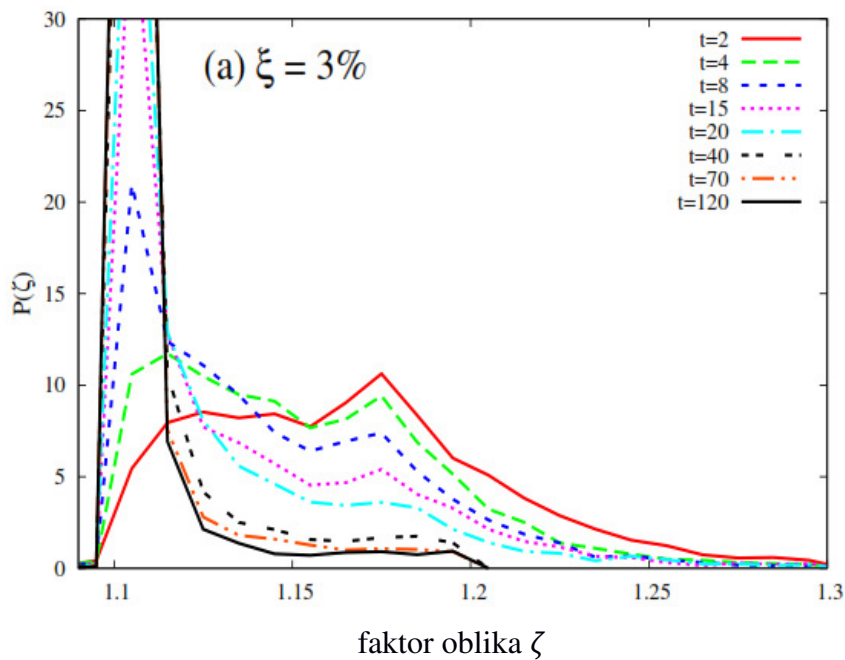
Nakon $t = 50$ vibracionih pobuda (slika 5.4.1 (e)), unutar pakovanja se uočavaju veliki domeni, uglavnom obrazovani od skoro pravilnih šestouglova (poligoni koji pripadaju klasama G_1 i G_2). Ovi klasteri brzo narastaju sa daljim povećanjem broja vibracionih pobuda. Konačno, kada sistem dospe u stanje blisko stacionarnom (slika 5.4.1 (f)), ili se nađe u njemu, diskovi su organizovani u nekoliko velikih klastera kojima odgovaraju Voronoï-eve ćelije pravilnog oblika (tj., pripadaju klasi G_1). Ovi kompaktni blokovi su jasno među sobom razdvojeni tankim regionima veće razuređenosti. Voronoï-eve ćelije koje separišu kompaktne G_1 klasterne su znatno deformisane i pripadaju grupama $G_5 - G_7$. Treba napomenuti da je gustina sistema prikazanog na slici 5.4.1 (f) za 1.7% manja od maksimalne (stacionarne) gustine za intenzitet vibracione pobude $\xi = 0.7\%$. Posle $t = 70$ vibracione pobude, iščezavaju mnogi defekti pakovanja koji su indukovani većim šupljinama između granula. Zato, na kraju procesa kompaktifikacije generisano pakovanje je polikristalno, tj. sačinjeno od više domena kristalne (heksagonalne) uređenosti.

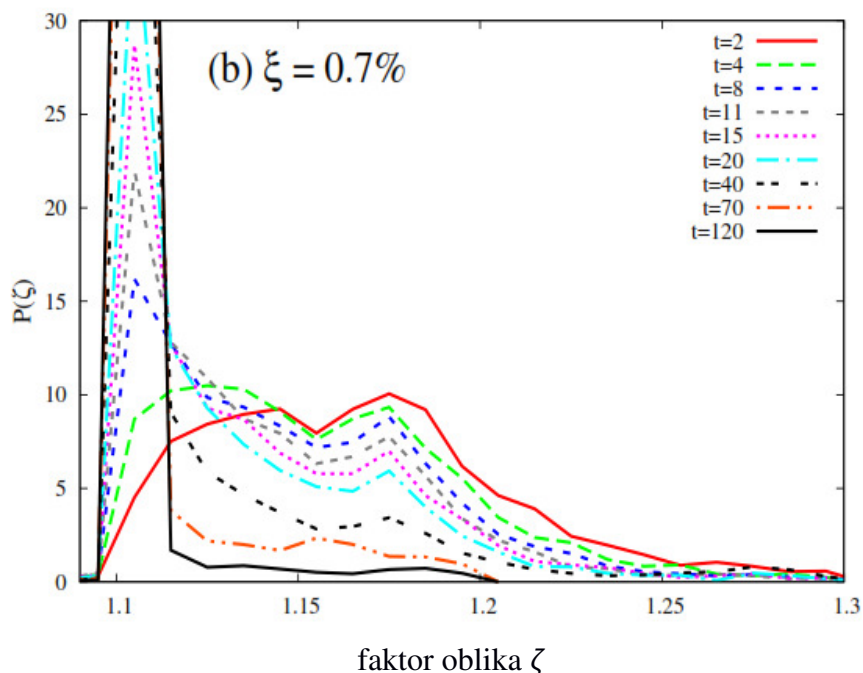
Posmatranjem evolucije pakovanja prikazanog na slici 5.4.1 može se sagledati jedno važno svojstvo dvodimenzionalnih pakovanja jednakih objekata. To je tendencija objekata (diskova) da se spontano lokalno organizuju u potpuno uređene konfiguracije tokom procesa kompaktifikacije. U početku procesa, takva lokalna organizacija je ograničena na mala rastojanja, reda nekoliko dijametara diska, čime se ipak generiše

razuređeno sveukupno pakovanje. Direktnim posmatranjem lako se uočava težnja diskova da spontano formiraju uređene heksagonalne konfiguracije, odnosno klustere sačinjene od skoro potpuno pravilnih Voronoï-evih ćelija malog faktora oblika. Međutim, orijentacija tih kompaktnih klastera koja se primećuje u unutrašnjoj zapremini pakovanja nije uvek paralelna zidovima suda, niti je u nekoj korelaciji sa njima. To je važna činjenica koja pokazuje da uređenje pakovanja nije uvek indukovano prisustvom zidova, već rast uređenosti može biti začet i u dubokoj unutrašnjosti granularnog pakovanja.

5.4.1. Distribucija faktora oblika

Da bi predhodno opisane strukturalne promene pakovanja tokom procesa kompaktifikacije bile kvantitativno okarakterisane, u ovom delu će biti analizirana distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika. Distribucija $P(\zeta)$ određuje verovatnoću da neka Voronoï-eva ćelija ima vrednost faktora oblika ζ . Drugim rečima, $P(\zeta)d\zeta$ je jednako verovatnoći nalaženja faktora oblika nekog Voronoï-evog poligona u intervalu $[\zeta + d\zeta]$. Distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ je normirana na jedinicu, tj. $\int_0^\infty d\zeta P(\zeta) = 1$. Prvo će biti analiziran uticaj intenziteta pobude ξ sistema na distribuciju $P(\zeta)$ za diskove oba tipa, (A) i (B). Nakon toga biće diskutovan uticaj materijalnih svojstava granula na ponašanje distribucije $P(\zeta)$ faktora oblika ζ tokom procesa kompaktifikacije.

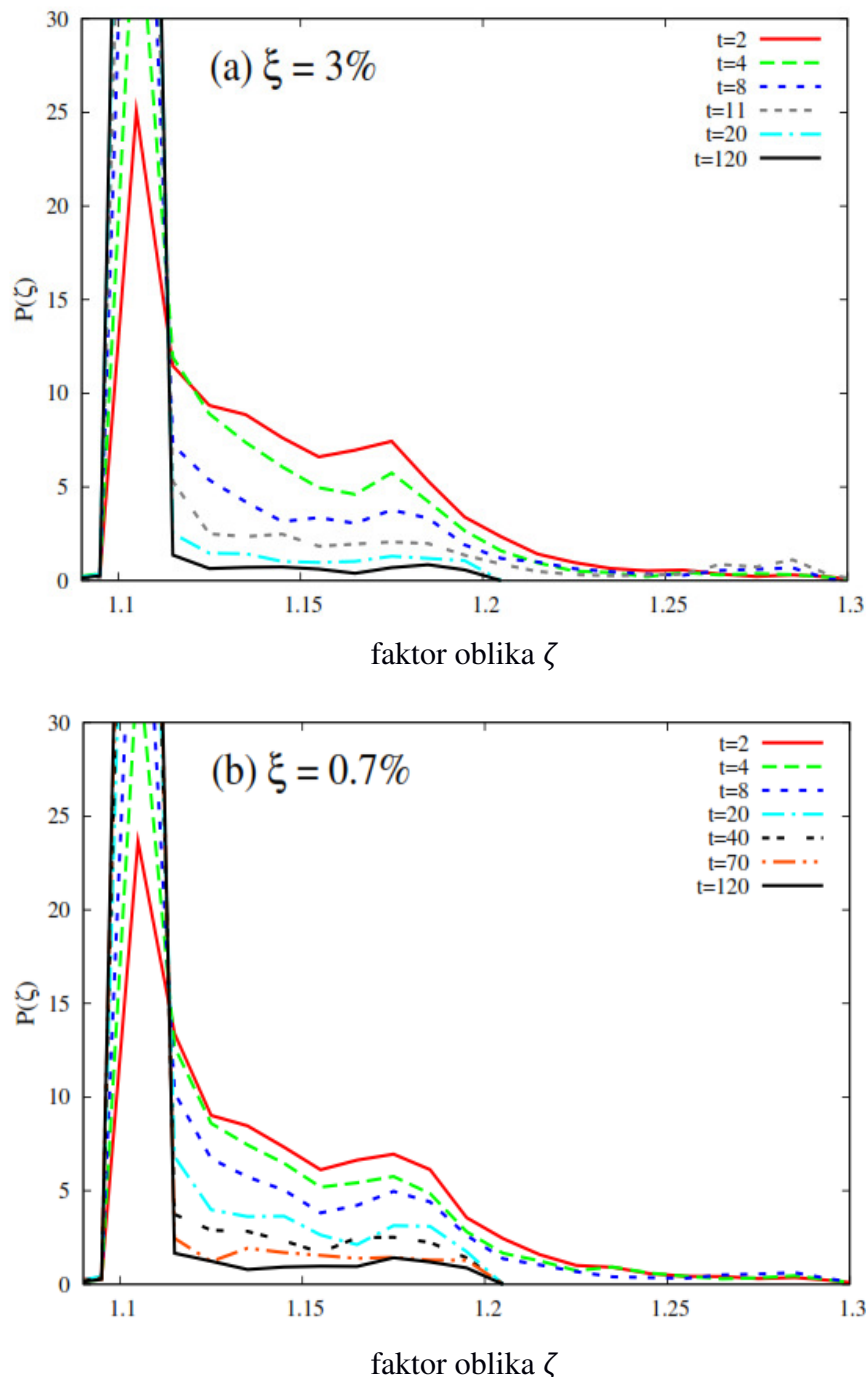




Slika 5.4.1.1. Vremenska evolucija distribucije verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika ζ za diskove tipa (A) (više disipativne granule). Vrednost vibracione pobude iznosi: (a) $\xi = 3.0\%$, i (b) $\xi = 0.7\%$.

Slika 5.4.1.1 prikazuje vremensku evoluciju distribucije $P(\zeta)$ u slučaju diskova tipa (A) (više disipativni diskovi) za dve različite vrednosti vibracione pobude: (a) $\xi = 3.0\%$ i (b) $\xi = 0.7\%$. U inicijalnoj fazi relaksacije gustine, Voronoï-ev dijagram obiluje ćelijama koje su nepravilne pravougaone, petougane ili šestougane strukture (videti, slike 5.4.1 (a) i 5.4.1 (b)). Posledica toga je široka distribucija $P(\zeta)$ faktora oblika koja nema izrazitih maksimuma. Distribucija $P(\zeta)$ pokazuje jasnu težnju sužavanja tokom procesa kompaktifikacije. Zapravo, sa povećanjem gustine pakovanja distribucija $P(\zeta)$ postaje sve više lokalizovana oko najniže vrednosti faktora oblika ζ za pakovanja jednakih diskova u dve dimenzije, a to je vrednost koja odgovara Voronoï-ovoj ćeliji pravilnog šestougona oblika, $\zeta = 6/\sqrt{3\pi^2} \approx 1.103$. Uočljivo je da su krive distribucije $P(\zeta)$ asimetrične sa dugim „repom“ na strani velikih vrednosti faktora oblika ζ (slika 5.4.1.1). Rep distribucije $P(\zeta)$ se postepeno redukuje sa porastom gustine sistema. Opisano sužavanje distribucije verovatnoće $P(\zeta)$ odgovara smanjenju udela Voronoï-evih poligona koji pripadaju klasama $G_5 - G_7$. Drugim rečima, na većim gustinama Voronoï-eve ćelije postaju više kružne, odnosno poprimaju pravilniji oblik.

Poređenje slike 5.4.1.1 (a) i 5.4.1.1 (b) pokazuje da je sužavanje distribucije $P(\zeta)$ tokom procesa kompaktifikacije više izraženo i brže se odvija u slučaju većeg intenziteta pobude ξ . Taj zaključak je u saglasnosti sa činjenicom da se dinamika procesa kompaktifikacije ubrzava sa porastom intenziteta vibracione pobude.

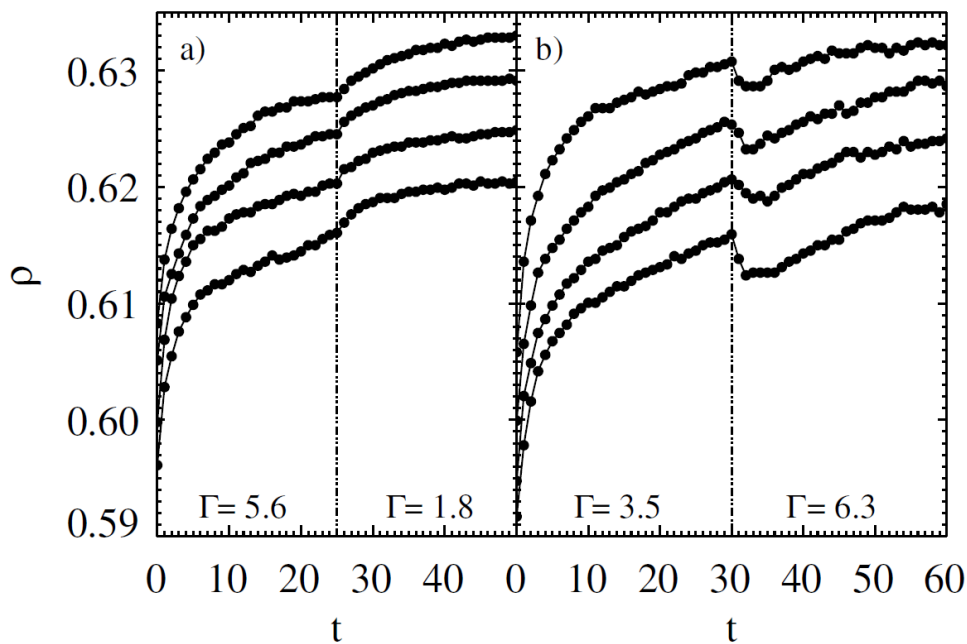


Slika 5.4.1.2. Vremenska evolucija distribucije verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika ζ za diskove tipa (B) (manje disipativne granule). Vrednost vibracione pobude iznosi: (a) $\xi = 3.0\%$, i (b) $\xi = 0.7\%$.

Distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika ζ je takođe senzitivna na promenu materijalnih svojstava granula. Na slici 5.4.1.2 su prikazane tipične distribucije $P(\zeta)$ u slučaju diskova tipa (B) (manje disipativne diskove) za dve različite vrednosti vibracione pobude: (a) $\xi = 3.0\%$ i (b) $\xi = 0.7\%$. Kao i u slučaju više disipativnih diskova tipa (A), krive distribucije $P(\zeta)$ su asimetrične sa dugim „repovima” sa desne strane. Međutim, u slučaju manje disipativnih diskova (B), redukcija „repova” distribucija $P(\zeta)$ je brža nego u slučaju kompaktifikacije više disipativnih diskova (A), bez obzira na vrednost intenziteta pobude ξ . Zaista, za manje disipativne diskove (B) prilaz sistema stacionarnom stanju tokom procesa kompaktifikacije se odvija na kraćoj vremenskoj skali nego u slučaju više disipativnih diskova (A) (Arsenović et al., 2006). Osim toga, za dati intenzitet vibracione pobude ξ , sistem diskova tipa (B) dostiže veće asimptotske (stacionarne) vrednosti gustine od diskova tipa (A) (Arsenović et al., 2006). Prema tome, u slučaju kompaktifikacije diskova tipa (B), kolektivne preraspodele granula indukuju efikasan rast domena heksagonalne uređenosti (Lumay and Vandewalle, 2005). Na taj način sistem dostiže stacionarno stanje u kome su konfiguracije diskova sačinjene od velikih klastera veoma pravilnih Voronoï-evih ćelija (heksagonalni domeni). Ovi kristalizovani domeni su uvek jasno među sobom separisani tankim i dugačkim regionima veće razuređenosti koji su uglavnom posledica kidanja velikih kompaktnih blokova granula unutar pakovanja. To je razlog zašto stacionarnom stanju odgovara veoma uska distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ sa izraženim maksimumom oko vrednosti $\zeta \approx 1.1$ (vrednosti faktora oblika koja odgovara pravilnom šestouglu).

6. Memorijski efekti

Fenomenologija procesa kompaktifikacije granularnog sistema je veoma bogata. Među najinteresantnijim pojavama koje prate kompaktifikaciju su razne forme ispoljavanja staklastog ponašanja gustog granularnog materijala. U ovom poglavlju posvećena je pažnja jednoj takvoj pojavi. Zapravo, biće analiziran dinamički odgovor granularnog sistema na naglu promenu „efektivne temperature”, odnosno intenziteta vibracione pobude Γ .



Slika 6.1. Vremenska evolucija gustine granularnog materijala ρ dobijena u eksperimentu (Josserand et al., 2000). Prikazani su rezultati četiri visine granularnog pakovanja (krive su translirane neviše zbog jasnoće prikaza). Realizovana su dva ekspeimenta: (a) Γ je smanjeno sa 5.6 na 1.8 u trenutku $t_0 = 25$; i (b) Γ je povećano sa 3.5 na 6.3 u trenutku $t_0 = 30$.

Pre početka analize, potrebno je ukazati na činjenice dobijene u eksperimentima u kojima je perturbovan intenzitet pobude Γ . Eksperimenti su pokazali (Josserand et al., 2000) da, tokom kompaktifikacije, odgovor sistema na naglu promenu intenziteta vibracije Γ je suprotan od ponašanja koje bi se očekivalo na osnovu znanja o dinamici pocesa kompaktifikacije kada je $\Gamma = const.$ (slika 6.1). Poznato je da brzina procesa kompaktifikacije opada sa smanjenjem intenziteta pobude Γ . Povećanjem intenziteta

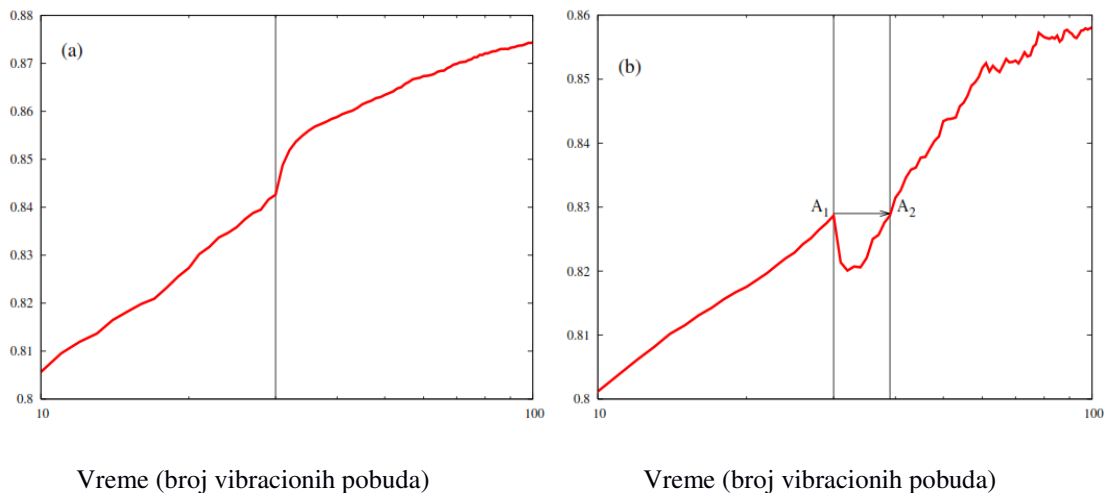
pobude Γ moguće je ubrzati proces kompaktifikacije. Pri tome je dostignuta stacionarna vrednost gustine $\rho(\infty)$ obrnuto proporcionalna intenzitetu pobude Γ . Međutim, prilikom naglog smanjenja intenziteta pobude Γ primećeno je da se u toku kratkog vremenskog intervala brzina kompaktifikacije povećava. Obrnuto, prilikom naglog povećanja intenziteta pobude Γ , umesto da dođe do ubrzanja porasta gustine sistema, dolazi do njegove dilatacije (smanjenje gustine sistema) u kratkom vremenskom intervalu. Opisano ponašanje sistema prilikom perturbacije Γ ima prelazni karakter – nakon nekoliko vibracionih pobuda uspostavlja se rezim kompaktifikacije koji je u skladu sa novom vrednošću intenziteta Γ koji se dalje ne menja u vremenu.

Slični efekti su takođe primećeni u eksperimentima kompaktifikacije granularnog sistema prilikom njegovog periodičnog smicanja (Nicolas et al., 2000; Pouliquen et al., 2003). U ovim eksperimentima je perturbovana amplituda smicanja granularnog pakovanja. Pokazano je da su brzine promene gustine indukovane naglom promenom ugla smicanja proporcionalne, ali i suprotne promeni tog ugla. Izučavanje svojstva odziva granularnog materijala i memorijskih efekata motivisalo je brojna numerička i teorijska istraživanja bazirana na konceptu slobodne zapremine i geometrijskih ograničenja (Nicodemi and Coniglio, 1999; Barrat and Loreto, 2000; Barrat and Loreto, 2001; Brey and Prados, 2001; Brey and Prados, 2003; Talbot et al., 2001; Tarjus and Viot, 2004; Budinski-Petković and Vrhovac, 2005).

6.1. Efekti promena intenziteta vibracione pobude

U nastavku će biti prikazano kako memorijski efekti mogu biti reprodukovani pomoću numeričke simulacije vibracione kompaktifikacije diskova. Nakon toga biće analizirane transformacije strukture pakovanja koje prate perturbaciju intenziteta vibracione pobude. Relaksaciona svojstva sistema biće proučavana tako što će intenzitet vibracione pobude Γ biti menjan sa jedne konstantne vrednosti Γ_1 na neku drugu konstantnu vrednost Γ_2 u nekom izabranom trenutku vremena t_ω . Pri tome će biti razmatrane mogućnosti kada je (a) $\Gamma_1 > \Gamma_2$, i kada je (b) $\Gamma_1 < \Gamma_2$.

Slika 6.1.1 prikazuje tipično ponašanje gustine sistema u kratkom vremenskom intervalu nakon nagle promene intenziteta pobude ξ . Intenzitet vibracione pobude ξ je skokovito promenjen u trenutku $t_\omega = 30$ na dva načina: (a) sa 3% na 0.5% (*slika 6.1.1 (a)*), i obrnuto (b) sa 0.5% na 3% (*slika 6.1.1 (b)*). Vidi se da rezultati dobijeni u simulaciji su potpuno konzistentni sa rezultatima eksperimenta prikazanim na *slici 6.1*. Nakon nekoliko vibracionih pobuda „anomalni” odgovor sistema na perturbaciju spoljašnje pobude prestaje. Prelazni režim je kratak i nakon njega se uspostavlja „normalo” ponašanje sistema u kome se brzine kompaktifikacije izjednačuju sa brzinama karakterističnim za kompaktifikaciju primenom spoljašnje pobude konstantnog intenziteta.

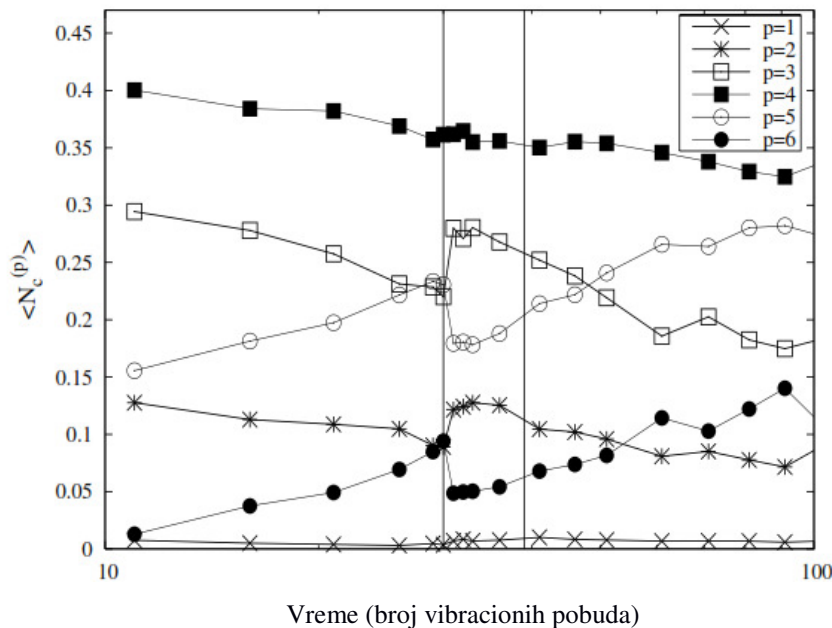


Slika 6.1.1. Vremenska evolucija gustine $\rho(t)$ kada se intenzitet vibracione pobude ξ menja u trenutku $t_\omega = 30$ na sledeći način: (a) sa 3% na 5%, i (b) sa 5% na 3%. Tačke A_1 i A_2 odgovaraju pakovanjima jednake gustine $\rho(t_\omega) = 0.828$ nakon $t_1 = 30$, odnosno $t_2 = 39$ vibracionih pobuda.

6.2. Veza memorijskih efekata i strukturalnih promena granularnog pakovanja

Cilj ovog poglavlja je nalaženje veze između makroskopske dinamike sistema i „mikroskopske“ strukture pakovanja tokom prelaznog režima koji nastaje prilikom perturbovanja intenziteta vibracione pobude ξ . Prvo je interesantno pogledati kako izgleda vremenska evolucija brojeva povezanosti (koneksnosti) $\langle N_c^{(p)} \rangle$, $p = 1, \dots, 6$ koji su uvedeni u poglavlju 5.1.

Na slici 6.2.1 prikazana je vremenska evolucija brojeva koneksnosti $\langle N_c^{(p)} \rangle$, $p = 1, \dots, 6$ do koje dolazi prilikom skoka intenziteta vibracione pobude ξ : 0.5% \rightarrow 3% u trenutku $t_\omega = 30$ (slučaj koji odgovara evoluciji gustine ρ prikazanoj na slici 6.1.1 (b)). Očigledno je da nagla promena inteziteta pobude ξ bitno utiče na čestice koje imaju 2, 3, 5 i 6 najbližih suseda. Interesantno je da je taj uticaj na čestice koje imaju četiri najbliža suseda veoma mali (tj., broj $\langle N_c^{(4)} \rangle$ koji odgovara „piling“-u se skoro ne menja u trenutku $t_\omega = 30$).



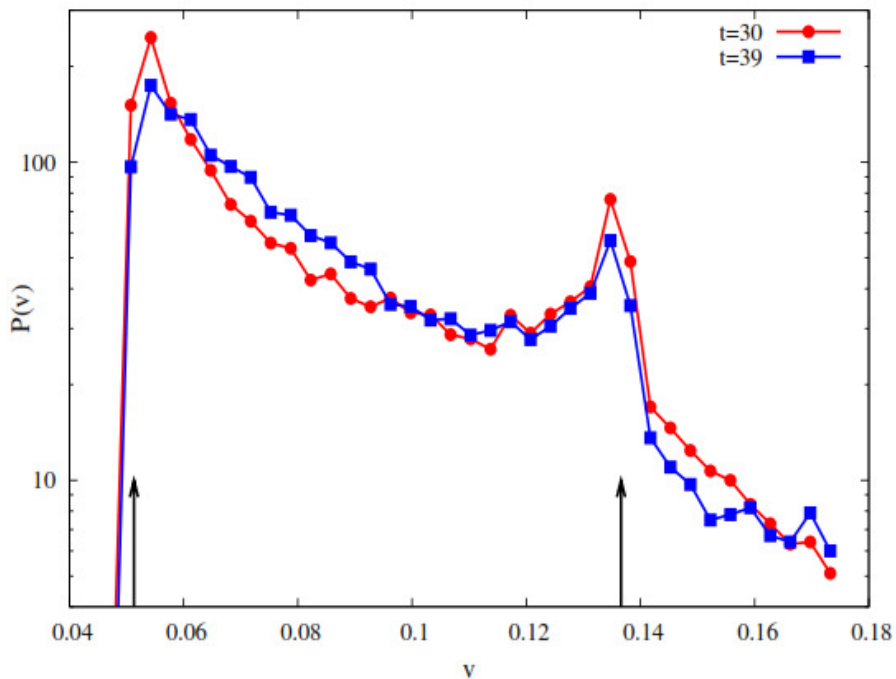
Slika 6.2.1. Vremenska evolucija brojeva koneksnosti $\langle N_c^{(p)} \rangle$ za ($p = 1, \dots, 6$), prilikom skoka intenziteta vibracione pobude ξ u trenutku $t_\omega = 30$, sa 0.5% na 3%. Tanke vertikalne linije odgovaraju stanjima jednake gustine $\rho(t_\omega) = 0.828$, u trenucima $t_1 = 30$ i $t_2 = 39$. Očigledno je bitno različita povezanost ganula („connectivity disorder“) u ta dva trenutka. Ovi podaci su dobijeni pri izboru praga $d_c = 1.02d$.

Međutim, najuočljiviji efekat do kojeg dolazi prilikom naglog povećanja intenziteta pobude ξ u trenutku t_ω je smanjenje udela lokalnih struktura koja su sačinjena od kompaktnih domena visoke uređenosti. Zbog toga se može primetiti naglo smanjenje brojeva koneksnosti $\langle N_c^{(5)} \rangle$ i $\langle N_c^{(6)} \rangle$ nakon trenutka t_ω u veoma kratkom vremenskom intervalu, pa shodno tome sistem postaje manje kompaktan. Istovremeno, udeo čestica koje učestvuju u ulančavanju i grananju nizova povezanih čestica se naglo povećava. Dugim rečima, brojevi koneksnosti $\langle N_c^{(2)} \rangle$ („chaining“) i $\langle N_c^{(3)} \rangle$ („branching“) imaju nagli porast u trenutku t_ω . Nakon veoma kratkog prelaznog režima, reda veličine nekoliko vibracionih pobuda, brojevi koneksnosti $\langle N_c^{(5)} \rangle$ i $\langle N_c^{(6)} \rangle$ se ponovo uvećavaju na račun brojeva $\langle N_c^{(2)} \rangle$ i $\langle N_c^{(3)} \rangle$, koji opadaju u vremenu.

Memorijski efekti impliciraju da se granularni sistem može nalaziti u stanjima kojima odgovaraju jednake gustine, ali koja različito evoluiraju u vremenu ukoliko su izložena daljoj pobudi istog intenziteta ξ . Ovom činjenicom se opravdava upotreba termina „memorijski“, a suština fenomena je ilustrovana na *slici 6.1.1*. Tačke A_1 ($t_1 = t_\omega = 30$) i A_2 ($t_2 = 39$) odgovaraju stanjima sa jednakom gustinom $\rho(t_\omega) = 0.828$ i jednakom vrednošću pobude $\xi = 3\%$, ali kojima odgovara različita dalja evolucija gustine. Odgovor sistema u tačkama A_1 i A_2 na intenzitet vibracione pobude $\xi = 3\%$ je različit: pakovanje A_1 postaje ređe, dok pakovanje A_2 nastavlja da se kompaktifikuje. Znači, evolucija gustine nakon tačaka A_1 i A_2 zavisi ne samo od gustine $\rho^{(A_1)} = \rho^{(A_2)} = \rho(t_\omega)$, već i od načina prethodne pobude sistema (tj. od „predistorije“ kojom je prepariran sistem). Može se reći da je predistorija sistema od trenutka koji odgovara gustini $\rho(t_\omega)$ zapamćena tako što je kodirana u rasporedu svih granula unutar pakovanja. Zaista, sa *slike 6.2.1* može se videti da koneksnost pakovanja nije jednoznačno određena gustinom $\rho(t_\omega)$ i intenzitetom vibracione pobude ξ . Ovi rezultati ukazuju na to da promene zapremine (ili gustine) granularnog pakovanja nisu rezultat samo promene srednjeg rastojanja između granula. Kompaktifikacija je proces koji je suštinski determinisan načinom na koji se dešava kooperativna reorganizacija granula u čvorištima mreže kontakata.

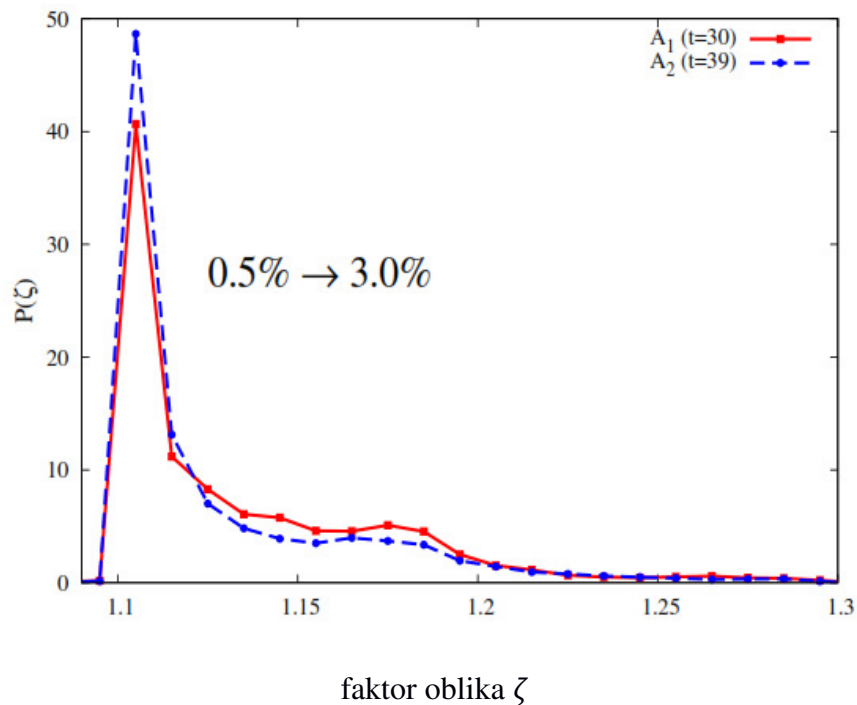
Memorijski efekti koji su reprodukovani numeričkom simulacijom jasno pokazuju da poznavanje gustine sistema nije dovoljno za tačnu predikciju dalje evolucije gustine sistema u procesu vibracione kompaktifikacije. Zato su interesantni

rezultati koji pokazuju da je zapreminska distribucija šupljina (pora) $P(v)$ senzitivna na male strukturalne promene tokom procesa kompaktifikacije. Time se distribucija pora $P(v)$ na sasvim prirodan način kvalifikuje da postane dodatni parametar koji jednoznačno definiše „mikrostanje” granularnog sistema date gustine ρ . Jednostavno može se proveriti da stanjima koja odgovaraju tačkama A_1 i A_2 na slici 6.1.1. (b) zaista odgovaraju različite distribucije $P(v)$. Zapreminske distribucija pora $P(v)$ koje su prikazane na slici 6.2.2 odgovaraju pakovanjima iste gustine $\rho(t_\omega) = 0.828$. Distribucije $P(v)$ za pakovanja u tačkama A_1 ($t_\omega = 30$) i A_2 ($t_2 = 39$) su sličnog oblika i strukture, ali su razlike lako uočljive. Za zapremine pora $0.06 \lesssim v \lesssim 0.11$, distribucija $P(v)$ pakovanja A_1 je neznatno manja od distribucije za pakovanja A_2 . Međutim, za pore veće od ≈ 0.11 i manje od ≈ 0.06 efekat je suprotan; vidi se da distribucija $P(v)$ koja odgovara pakovanju A_1 neznatno prevazilazi distribuciju za pakovanja A_2 .



Slika 6.2.2. Distribucija Delaunay-ove „slobodne” zapremine za pakovanja koja odgovaraju tačkama A_1 (krugovi) i A_2 (kvadrati) sa slike 6.1.1. Prikazane distribucije odgovaraju pakovanjima jednake gustine. Vertikalne strelice su pozicionirane kao na slici 5.3.2.

Osim distribucije šupljina $P(v)$, moguće je na sličan način analizirati promene distribucije faktora oblika $P(\zeta)$ kao odgovor sistema na perturbacije intenziteta spoljašnje pobude ξ . Distribucije faktora oblika $P(\zeta)$ koje su prikazane na slici 6.2.3 ponovo odgovaraju pakovanjima jednake gustine $\rho(t_\omega) = 0.828$ (videti sliku 6.1.1. (b)). Iako su distribucije $P(\zeta)$ za pakovanja A_1 ($t_\omega = 30$) i A_2 ($t_2 = 39$) slične, male razlike između njih su приметne. Za $1.125 \lesssim \zeta$, distribucija $P(\zeta)$ za pakovanje A_2 se nalazi ispod distribucije za pakovanje A_1 . Međutim, za faktor oblika ζ manji od ≈ 1.125 distribucija $P(\zeta)$ za pakovanje A_2 neznatno prevazilazi distribuciju faktora oblika za pakovanje A_1 . I ova poslednja analiza sugerise da za jednoznačnu karakterizaciju „stanja” u kojem se nalazi granularni materijal nije dovoljno znati samo njegovu gustinu; neophodno je poznavati jednu ili više dodatnih „opservabli” koje u sebi sadrže informaciju o predhodnoj preparaciji sistema. Dobijeni rezultati ukazuju na to da ta informacija može biti uskladištena u veličinama koje determinišu razna mikrostrukturalna svojstva granularnog pakovanja.



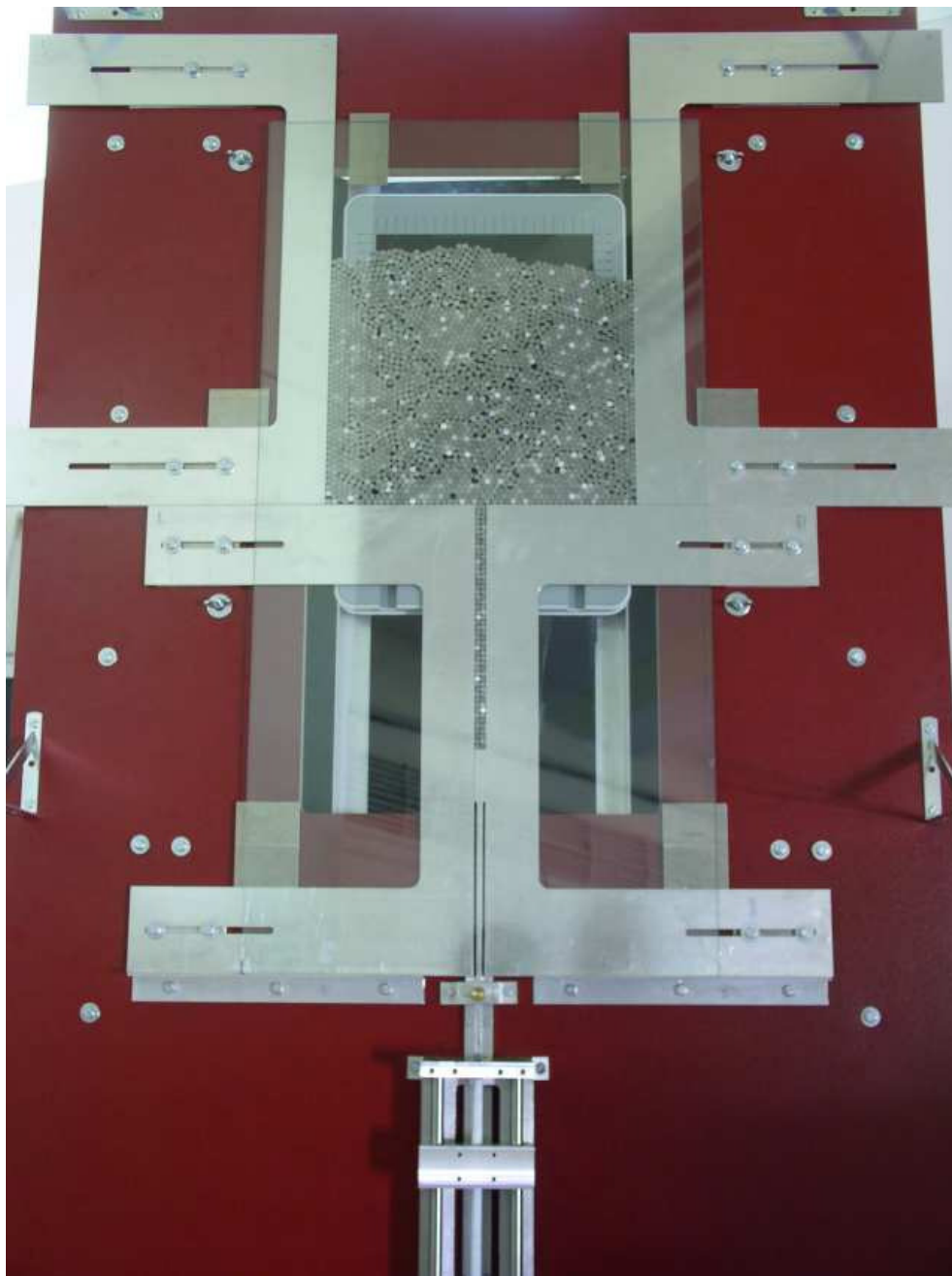
Slika 6.2.3. Distribucije faktora oblika $P(\zeta)$ za pakovanja koja odgovaraju tačkama A_1 (puna linija) i A_2 (isprekidana linija) sa slike 6.1.1. Prikazane distribucije odgovaraju pakovanjima jednake gustine.

7. Eksperimentalna analiza granularnih pakovanja

Jedna od osnovnih prednosti numeričkih simulacija nad eksperimentom sa granularnim materijalima je mogućnost poznavanja tačnih položaja svih čestica sistema u bilo kom trenutku vremena. Takva informacija nije lako eksperimentalno dostupna, pogotovo u slučajevima granularnih pakovanja u tri dimenzije (Aste, 2005). U tezi su prezentovani brojni rezultati koji se tiču mikrostrukturnih svojstava granularnih pakovanja. Ako bi neki od tih rezultata bio eksperimentalno potvrđen, to bi u velikoj meri potvrdilo valjanost numeričkog modela. U ovom poglavlju biće prvo opisan eksperiment koji je omogućio finu strukturnu analizu dvodimenzionalnih pakovanja diskova. Nakon toga biće dato poređenje distribucije faktora oblika $P(\zeta)$ koja je dobijena u numeričkoj simulaciji sa eksperimentalno dobijenom distribucijom $P(\zeta)$. Poređenje će biti izvršeno za pakovanja približno jednakih gustina. Poređenjem će biti dokazano da numerička simulacija, osim dinamike kompaktifikacije, korektno reprodukuje i male strukturne promene pakovanja do kojih dolazi sa porastom gustine tokom procesa kompaktifikacije.

7.1. Opis aparature i eksperimentalne metode

Eksperiment je omogućavao formiranje stabilnih granularnih pakovanja raznih gustina. Za svako dobijeno pakovanje, vršena je precizna optička detekcija svake pojedinačne granule. Na osnovu tih podataka, određivana je distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika ζ za razna eksperimentalno generisana razučena pakovanja diskova u dve dimenzije (2D). Time je bilo omogućeno kvantitativno poređenje rezultata simulacije sa podacima dobijenim u eksperimentu.



Slika 7.1.1. Eksperimentalna aparatura.

Korišćena eksperimentalna aparatura nastala je modifikacijom aparature koja je prvobitno bila razvijena za proučavanje prodiranja jednog granularnog materijala kroz unutrašnjost dugog, pod dejstvom spoljašnje sile (Jakšić et al., 2008). U daljem tekstu dat je njen kratak opis (vidi *sliku 7.1.1*). Eksperimentalna aparatura je omogućavala formiranje 2D pakovanja; odnosno, kretanje granula je bilo ograničeno na jednu ravan. Granularna pakovanja su bila sačinjena od metalnih cilindara visine $h = 3.00 \pm 0.01 \text{ mm}$. Dijametri cilindara su iznosili $d = 4.00, 5.00, \text{ i } 6.00 \pm 0.05 \text{ mm}$. Monodisperzna pakovanja diskova generisana su u posudi pravougaonog oblika, visine $H = 340 \text{ mm}$ i širine $L = 300 \text{ mm}$. Širina suda je mogla da se menja pomeranjem bočnih aluminijumskih zidova suda. Unutar pravougaone posude diskovi su bili konfinirani između dve paralelne ploče na rastojanju 3.4 mm , malo većem od visine diskova $h = 3.00 \pm 0.01 \text{ mm}$. Tipična granularna pakovanja koja su analizirana sastojala su se približno od 4500 do 6000 diskova, u zavisnosti od veličine diskova. Posuda je bila fiksirana za masivnu ploču čiji je nagib θ u odnosu na horizontalnu ravan mogao da se menja.

Proces preparacije razuđenih pakovanja diskova bio je sledeći. Potreban broj diskova se odjednom sipa na staklenu osnovu suda u horizontalnom položaju. Naneta hrpa diskova se proširuje unutar posude sve dok se ne dobije samo jedan sloj diskova na površini stakla. Pri tome, uvek se pazi da deponovani diskovi ne budu uređeni i da između njih nema kontakata. Može se reći da je ovom procedurom imitiran proces slučajne sekvencijalne depozicije u 2D. Nakon toga, posuda sa diskovima se rotira konstantnom ugaonom brzinom $\approx 5^0 \text{ s}^{-1}$ i tako lagano dovodi u vertikalni položaj $\theta = 90^0$. Tokom spore rotacije, diskovi slobodno klize naniže i konačno zauzimaju mehnički stabilna stanja kada njihovo kretanje prestaje. Pakovanja se formiraju sa otvorenom i slobodnom gornjom granicom, tako da se ravnoteža pakovanja uspostavlja kao balans između težina cilindara, kontaktnih sila, reakcije osnove posude i reakcije bočnih zidova.

Gustine granularnih pakovanja dobijenih na predhodno opisani način bile su $\rho = 0.78 - 0.80 \pm 0.01$. U eksperimentu je bilo moguće oformiti i delimično uređena pakovanjaa veće gustine. Delimično uređena pakovanja generisana su korišćenjem prethodno opisane preparacione procedure, nakon čega je sistem bio izložen mehničkim vibracijama malog intenziteta. Na taj način bilo je lako dobiti pakovanj

gustine $\rho = 0.81 - 0.86 \pm 0.01$. Treba napomenuti da su i ove gustine daleko ispod vrednosti gustine najgušćeg pakovanja identičnih diskova u 2D, $\rho_{cp} = \pi/2\sqrt{3} \approx 0.91$.

Pomoću opisane procedure preparacije, nije bilo moguće generisati pakovanja sa gustinama iz celog opsega gustina dostupnog u numeričkim simulacijama. Razlog za to je činjenica da stacionarne gustine koje odgovaraju intenzitetima vibracione pobude ξ ispod $\approx 3\%$, prevazilaze vrednost ≈ 0.86 (Arsenović et al., 2006). U skladu sa tim, nije bilo moguće porediti eksperimentalne rezultate sa rezultatima simulacije koji su dobijeni za male vrednosti intenziteta pobude ($\xi < 3\%$) i za velika vremena.

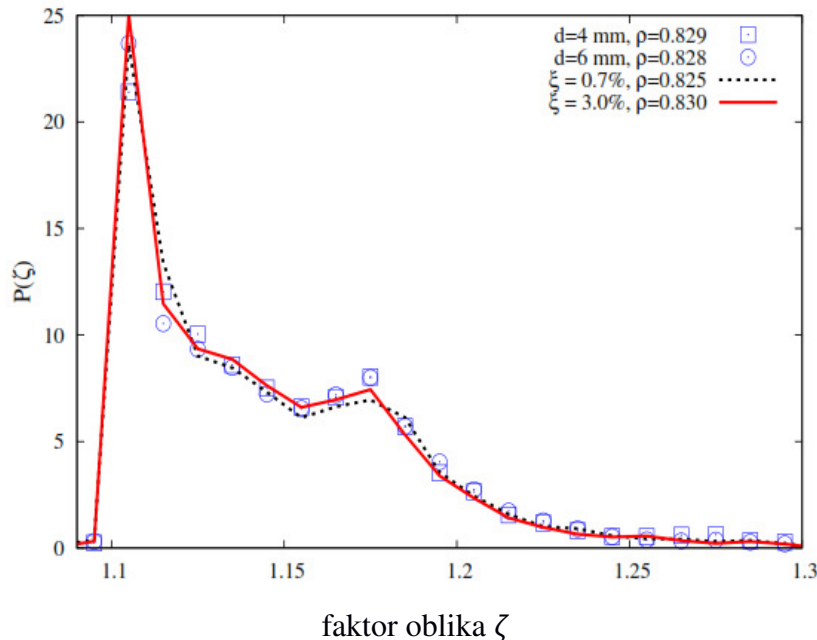
Eksperimentalno proučavanje kolektivnih preraspodela granula unutar pakovanja zahteva veoma tačno određivanje položaja svih granula. Zbog toga, razvoj preciznog optičkog metoda detekcije položaja granula bio je jedan od najbitnijih zadataka prilikom dizajniranja eksperimentalne aparature. Tokom eksperimenta, slike 2D pakovanja su dobijane pomoću digitalnog skenera, model HP Scanjet 3800. Skener je bio fiksiran veoma blizu donje staklene osnove pravougaonog suda. Sa njom nije bio u kontaktu jer svaka vibracija koju bi proizveo može da dovede do urušavanja kooperativnih struktura pakovanja ili do raznih drugih kretanja i pomeranja granula. Skenerom je bilo moguće obuhvatiti oblast veličine $210 \times 297 \text{ mm}$. Dobijene su slike BMP formata sa skalom od 256 sivih tonova i u rezoluciji $600 \times 600 \text{ dpi}$. Tokom daljeg procesuiranja slika, prvo je modifikovana distribucija intenziteta pixel-a radi povećanja kontrasta. Na generisanim BMP slikama dijametar diskova je obuhvatio $\approx 94, 118$, i 142 pixel-a, za diskove prečnika $4,5$ i 6 mm , respektivno. Znači, postignuta rezolucija slika dozvoljavala je detekciju položaja centara i dijametara diskova sa tačnošću od 0.04 mm . Položaj centara diskova određivan je programom baziranom na Standardnoj Hough-ovoj Transformaciji (SHT) (Drew, <http://mathworld.wolfram.com/HoughTransform.html>).

Važno je napomenuti da tokom eksperimenta nije bilo moguće kontrolisati ambijentalnu vlažost vazduha. Poznato je da prisustvo vlage u vazduhu može dovesti do formiranja kohezivnih mostova tečnosti između granula u bliskom kontaktu. Međutim, u eksperimentu sa punim metalnim diskovima milimetarskih dimenzija ne treba očekivati da navedeni efekat ima primetan uticaj.

7.2. Analiza rezultata eksperimenta

U ovom poglavlju, rezultati simulacije za distribuciju $P(\zeta)$ faktora oblika ζ biće upoređeni sa eksperimentalnim. Eksperimentalno su analizirana mikrostrukturalna svojstva 2D pakovanja čije su gustine bile u opsegu od $\rho_1 \approx 0.78$ do $\rho_2 \approx 0.86$. Rezultati simulacije koji su poređeni sa eksperimentalnim su prikazani na slikama 5.4.1.1 i 5.4.1.2, i ranije su bili diskutovani.

Slika 7.2.1 ilustruje slaganje rezultata eksperimentalnih merenja i numeričkih proračuna. Eksperimentalni rezultati za distribuciju $P(\zeta)$ faktora oblika ζ dati su za pakovanja diskova dijametra $d = 4 \text{ mm}$ i 6 mm , za gustine $\rho = 0.829 \pm 0.01$ i 0.828 ± 0.01 , respektivno. Kako se predhodno navedene gustine veoma malo razlikuju, može se tvrditi da distribucija $P(\zeta)$ ne zavisi od dijametra diskova.



Slika 7.2.1. Rezultati za distribuciju verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika ζ koji su dobijeni numeričkim proračunima (linije) i u eksperimentima (simboli). Eksperimentalni rezultati odgovaraju pakovanjima diskova dijametra $d = 4 \text{ mm}$ (\square) i 6 mm (\circ) na gustinama $\rho = 0.829$ i 0.828 , respektivno. Rezultati numeričkih simulacija odgovaraju pakovanjima manje disipativnih diskova (B) na gustinama $\rho = 0.825$ ($\xi = 0.7\%$) i 0.830 ($\xi = 3\%$), nakon druge vibracione pobude $t = 2$.

Na slici 7.2.1 dati su rezultati numeričkih simulacija za manje disipativne diskove (B). Pri tome su analizirana pakovanja koja su oformljena u ranoj fazi procesa kompaktifikacije, pri intenzitetima vibracione pobude $\xi = 0.7\%$, i 3% . Odgovarajuće gustine tih pakovanja su bile bliske eksperimentalnim; za $\xi = 0.7\%$ je $\rho = 0.825$, i za $\xi = 3.0\%$ je $\rho = 0.83$. Uočljivo je veoma dobro slaganje između numeričkih proračuna i eksperimentalnih rezultata. Sličan stepen slaganja sa rezultatima simulacije nađen je za sve eksperimentalno proučavane vrednosti gustine.

Poređenjem slike 5.4.1.1 (a) sa slikom 7.2.1 dolazi se do zaključka da mikrostrukturalna svojstva dobijena iz simulacije više disipativnih diskova (A) ne pokazuje dovoljno dobro slaganje sa eksperimentalnim rezultatima. To je očekivan rezultat zato što su vrednosti materijalnih parametara ε_0 , μ i ν_0 za diskove vrste (B) u simulaciji izabrani tako da odgovaraju vrednostima karakterističnim za vrlo tvrdu i glatku metalnu površinu korišćenu u eksperimentu (Johnson, 1985; McNamara and Falcon, 2005).

Ovim je još potvrđena valjanost upotrebljenog numeričkog modela procesa vibracione kompaktifikacije. Model, osim dinamike kompaktifikacije korektno reprodukuje i evoluciju fine strukture granularnog pakovanja. Povrh svega, model je senzibilan i na materijalna svojstva konstituenata, koja ne utiču samo na dinamiku procesa, već menjaju i mikrostrukturalna svojstva generisanih granularnih pakovanja.

8. Frakcioni kinetički model kompaktifikacije granularnog materijala

Veoma je interesantna činjenica da Mittag-Leffler-ov zakon (4.1) dobro opisuje relaksaciju granularnog materijala za veoma različite načine eksterne pobude (Arsenović et al., 2006; Vargas and McCarthy, 2007; Divoux et al., 2008; Mueggenburg, 2012). Brojni primeri koji ovo potvrđuju su navedeni u uvodu (poglavlje 1). Zapravo, nije jasno da li je jednačina (4.1) samo jedan pogodan analitički izraz kojim se sa četiri parametra fituje vremenska zavisnost gustine $\rho(t)$, ili ima neko dublje fizičko značenje koje je povezano sa mikrostrukturnim promenama koje se dešavaju tokom procesa kompaktifikacije. U ovom delu, navedeni problem biće detaljno analiziran kroz izgradnju modela kompaktifikacije koji reprodukuje relaksaciju Mittag-Leffler-ovog tipa. Model je baziran na specifičnim svojstvima stohastičkih procesa frakcionog tipa koji adekvatno odslikavaju mikrostrukturne transformacije granularnog pakovanja tokom procesa vibracione kompaktifikacije.

Veliki broj različitih pristupa je izgrađen sa ciljem da poveže veoma sporu dinamiku kompaktifikacije granularnog materijala sa strukturnim svojstvima granularnog pakovanja. Pri tome, dva najbitnija svojstva koje je trebalo uzeti u obzir su redukovanje efektivne zapremine sistema i prisustvo i evolucija kooperativnih struktura (lukova i mostova) unutar pakovanja. Najveći broj proučavanja u obzir je uzeo samo prvi navedeni efekat. Među njima se nalaze kontinualni reverzibilni adsorpciono-desorpcioni model (parking lot model) (Talbot et al., 2000; Talbot et al., 2001; Kolan et al., 1999), razni modeli frustriranih gasova na rešetkama (Nicodemi and Coniglio, 1999; Barrat and Loreto, 2000; Barrat and Loreto, 2001; Fierro et al., 2002), celularni gasni automati (Stadler et al., 2001), i jednodimenzionalni gasovi na rešetkama sa kratkodometnim dinamičkim ograničenjima (Brey and Prados, 2001; Brey and Prados, 2003; Brey et al., 1999; Prados and Brey, 2002). Osnovna motivacija za izgradnju novog modela je implementacija dinamike kooperativnih struktura. Ovde je izgrađen jednostavan apstraktni model granularnog materijala sličan takozvanom „dvozapreminskom” modelu koji je predložio Edwards (Edwards and Grinev, 1998). U modelu se pretpostavlja da postoje samo dve moguće orijentacije granula. Granule u stanju „dole” smatraćemo „dobro orijentisanim”, što znači da svojim prisustvom u neposrednom okruženju generišu minimalan slobodni prostor (šupljinu). Suprotno tome,

kada je granula u stanju „gore”, tj. kada „nije dobro orijentisana”, njome generisani slobodni prostor je maksimalan. Imajući za cilj jednostavnu imitaciju procesa kompaktifikacije granularnog materijala pod uticajem slabe eksterne pobude, pretpostavljamo da je prebacivanje granula iz jednog stanja orijentacije u drugo moguće opisati pogodno izabranim stohastičkim procesom. Izborom ovog stohastičkog procesa obezbeđuje se neophodno svojstvo modela da reprodukuje sporu dinamiku kompaktifikacije i memorijske efekte (Josserand et al., 2000; Nicolas et al., 2000).

Tokom spoljašnje pobude granularnog materijala, preraspodele će se dešavati između onih granula unutar pakovanja čiji međusobni raspored i položaj najbližih suseda generiše sile koje se mogu nadvladati eksterno izazvanim poremećajima. To znači da intenzitet sila između granula u kontaktu određuje da li će neka od njih promeniti svoj položaj u odnosu na okruženje. Ovo implicira da unutar granularnog pakovanja postoje oblasti u kojima se mreža kontaktnih sila između granula menja i oblasti u kojima je ona rigidna i čuva svoju strukturu tokom dužeg izlaganja pakovanja pobudama. Na primer, skupovi međusobno stabilisanih čestica, kao što su lukovi ili mostovi predstavljaju dugo-živeće strukture tokom procesa vibracione pobude (Arsenović et al., 2006; Pugnali and Barker, 2004; Pugnali et al., 2006; Arèvalo et al., 2006). Važno je napomenuti da je eksperimentalno potvrđeno da kretanje granula tokom procesa kompaktifikacije nije difuziono (u smislu normalne difuzije), nego subdifuzivno, uz očekivano prisustvo efekta kaveza kao prelaznog fenomena. Promene već oformljenih kaveza iziskuju prisustvo kompleksnih kooperativnih procesa povezanih sa transformacijama mreže sila (Pouliquen et al., 2003; Marty and Dauchot, 2005). Ovakve karakteristike kretanja pojedinih granula mogu se dovesti u vezu sa nemarkovskom prirodom stohastičkih procesa prisutnih u granularnom pakovanju izloženom eksternim pobudama.

Osnovni formalizam na kome počiva model može se sažeto predstaviti na sledeći način. Polazeći od opisa evolucije sistema kao markovskog procesa sa ukupno dva moguća stanja, modelni proces kompaktifikacije se generiše kao subordinisani (potčinjeni, podređeni) slučajni proces. Ovaj proces se razlikuje od markovskog po tome što vremenska varijabla postaje slučajan proces. Napomenimo da je subordinacija slučajnih procesa polazna tačka za CTRW (Continuous Time Random Walk) pristup (Metzler and Klafter, 2000). Zapravo, u modelu su evolucije broja objekata u stanjima

„gore” i „dole” subordinirane od strane drugog slučajnog procesa. U opštem slučaju subordinirani proces $Y [U(t)]$ se dobija randomizacijom vremena slučajnog procesa $Y (t)$ korišćenjem slučajnog procesa $U(t)$. Ovaj drugi proces, $Y (t)$, se uobičajeno naziva randomizovanim vremenom (ili satom). Novi randomizovani sat je generalizacija determinističkog vremenskog sata u kinetičkoj jednačini za markovski proces. Vidimo da je ova generalizacija stohastičkog porekla i njenom primenom kinetičke jednačine se transformišu u oblik u kome se javljaju frakcioni izvodi u evolucionoj jednačini za gustinu. Kako su frakcioni izvodi zapravo operatori integralnog tipa sa stepenim kernelom, vidimo da se memorijski efekti formalno uvode u model kroz subordinaciju stohastičkih procesa. Tako dobijena evolucionna jednačina korektno reprodukuje sva svojstva procesa kompaktifikacije do kojih se došlo eksperimentalnim posmatranjem. Uspeh modela u oponašanju ekperimentalnih saznanja indicira da su dominantni fizički mehanizmi procesa korektno identifikovani. Iako je model dovoljno jednostavan da dozvoljava analitički tretman, teorijski rezultati su potkrepljeni numeričkim simulacijama odgovarajućih stohastičkih procesa frakcionog tipa.

U daljem tekstu biće prvo data definicija modela i fizička interpretacija modelnih parametara (poglavlje 8.1). U poglavlju 8.2 dati su rezultati numeričkih simulacija, i kada je to bilo moguće, izvršena su poređenja sa analitičkim rezultatima. Memorijski efekti su reprodukovani u numeričkim simulacijama analizom odgovora sistema na nagle promene intenziteta eksterne pobude (poglavlje 8.3).

pod uticajem slabih vibracija je postepen kolaps (urušavanje) pomenutih kooperativnih struktura. Njihovim kolapsom isčezavaju brojne „šupljine” obuhvaćene lukovima, odnosno mostovima (Mehta at al., 2004; Pugnaloni and Barker, 2004; Pugnaloni at al., 2006). Na taj način dolazi do smanjenja slobodnog prostora unutar granularnog pakovanja, odnosno dolazi do povećanja gustine sistema. Fenomenološki opisani procesi mogu biti shvaćeni i na sledeći način. Slabe vibracije granularnog materijala prouzrokuju prostorne preraspodele granula i okolnog slobodnog međuprostora. Zato se može reći da granularni materijal skokovito prelazi iz jedne u drugu konfiguraciju koju definišu položaji svih granula. Dinamički odgovor sistema na spoljašnje pobuđivanje je takav da sistem lokalno minimizuje slobodan prostor („šupljine”) prelazeći u energetski povoljniju konfiguraciju („mikrostanje”). Ovo može biti postignuto u razmatranom modelu pomoću pogodno odabranog mehanizma eliminacije šupljina. Izgradnja ovog mehanizma biće detaljno opisana u daljem tekstu.

Prethodno opisane procese možemo prvo pokušati da modelujemo kao stohastičke procese neprekidne u vremenu. Njihovu dinamiku opisujemo sasvim opštim sistemom kinetičkih jednačina:

$$\frac{dp^{(d)}}{dt} = \omega_{du}p^{(u)}(t) - \omega_{ud}p^{(d)}(t) \quad (8.1.1)$$

$$\frac{dp^{(u)}}{dt} = \omega_{ud}p^{(d)}(t) - \omega_{du}p^{(u)}(t), \quad (8.1.2)$$

gde su $p^{(u)}(t)$ i $p^{(d)}(t)$ verovatnoće za nalaženje objekata u stanjima „gore” i „dole” u trenutku t , respektivno. Ove veličine ω_{du} i ω_{ud} predstavljaju vrednost verovatnoće da u jedinici vremena dođe do prelaza objekta iz stanja „gore” u stanje „dole”, odnosno iz stanja „dole” u stanje „gore”. Vrednosti verovatnoće ω_{du} i ω_{ud} se ne menja u vremenu. Član $\omega_{du}p^{(u)}$ opisuje prelaz objekta u stanje „dole” iz stanja „gore”, i član $\omega_{ud}p^{(d)}$ odgovara prelazu objekta iz stanja „dole” u stanja „gore”. Shodno tome, vremenska zavisnost gustine sistema $\rho(t)$ može biti predstavljena na sledeći način:

$$\rho(t) = \rho_d p^{(d)}(t) + \rho_u p^{(u)}(t) = \rho_u + (\rho_d - \rho_u)p^{(d)}. \quad (8.1.3)$$

Možemo razlikovati dva granična slučaja: $p^{(d)} = 1$, kada je $\rho = \rho_d$ (slobodna zapremina je minimalna) i $p^{(d)} = 0$, kada je $\rho = \rho_u$ (slobodna zapremina je maksimalna). Ne utičući na opštost modela, u daljem razmatranju možemo pretpostaviti da je $\rho_d = 1$ i $\rho_u = a/b < 1$. Zamenom $\left. \frac{dp^{(d)}}{dt} \right|_{t \rightarrow \infty} = 0$ i $\left. \frac{dp^{(u)}}{dt} \right|_{t \rightarrow \infty} = 0$ u jednačinama

(8.1.1) i (8.1.2) dobijamo sistem od dve algebarske jednačine čije rešenje daje vrednost stacionarne gustine sistema $\rho(\infty)$:

$$\rho(\infty) = \rho_d p^{(d)}(\infty) + \rho_u p^{(u)}(\infty) = (\rho_d \omega_{du} + \rho_u \omega_{ud}) / \omega, \quad (8.1.4)$$

gde je $\omega = \omega_{du} + \omega_{ud}$ totalna verovatnoća prelaza. Ovu stacionarna gustina će sistem dostići za svaku inicijalnu konfiguraciju $\{\sigma_n | n = 1, \dots, N\}$ nakon dovoljno dugo vremena. Predpostavimo da u početnom trenutku $t = 0$ stanja „gore” dominiraju, tj. neka je

$$p^{(u)}(0) = \frac{N_u(t=0)}{N} = 1, \quad p^{(d)}(0) = \frac{N_d(t=0)}{N} = 0, \quad (8.1.5)$$

pri čemu su N_u i N_d brojevi objekata u stanjima „gore” i „dole”, respektivno. Rešenje sistema jednačina (8.1.1) i (8.1.2) sa inicijalnim uslovom (8.1.5) je trivijalno. Prema tome, gustina sistema (jednačina 8.1.3) eksponencijalno raste u vremenu ka odgovarajućoj stacionarnoj gustini (jednačina 8.1.4):

$$\rho(t) = \rho(\infty) - [\rho(\infty) - \rho(0)] \exp(-\omega t), \quad (8.1.6)$$

gde je $\rho(0) = \rho_d p^{(d)}(0) + \rho_u p^{(u)}(0) = \rho_u$.

Sasvim očekivano, ovako pojednostavljeno koncipiran model ne opisuje ponašanje realnog granularnog materijala tokom procesa kompaktifikacije na korektan način; odnosno, on ne aproksimira dobro dinamiku kompaktifikacije. Rast gustine realnog granularnog sistema tokom vremena je znatno sporiji proces od eksponencijalnog rasta koji je opisan jednačinom (8.1.6). Osim toga, u navedenom modelu svaka buduća evolucija gustine sistema $\rho(t)$ nakon nekog trenutka t_0 zavisi samo od gustine $\rho(t_0)$ u tom trenutku. Međutim, ponašanje granularnog materijala pod uticajem slabih vibracija zavisi od sveukupne predistorije sistema, a ne od trenutne, inicijalne vrednosti neke makroskopske veličine koja se analizira. Matematički, ovo svojstvo granularnih materijala implicira da vremenska evolucija gustine sistema pod uticajem vibracija nužno ne zadovoljava zatvoren sistem diferencijalnih jednačina prvog reda.

Očigledno je da razmatrani model zahteva konceptualne promene i proširenja da bi uspešno reprodukovao dinamiku vibracione kompaktifikacije granularnog materijala i memorijske efekte primećene prilikom skokovite promene intenziteta vibracija. Pre nego što načinimo sledeći korak u izgradnji modela, treba da bude pomenuto nekoliko bitnih činjenica vezanih za strukturne promene granularnog pakovanja tokom procesa kompaktifikacije. Ranije je već pomenuto da prisustvo lukova i mostova predstavlja

jednu od najvažnijih mikrostrukturnih karakteristika granularnog pakovanja (Mehta at al., 2004; Pugnaloni and Barker, 2004; Pugnaloni at al., 2006). Pod lukom podrazumevmo skup čestica koji ima svojsto koneksnosti: to znači da se bilo koje dve čestice skupa mogu povezati neprekidnim nizom čestica koje su u međusobnom kontaktu (Pugnaloni and Barker, 2004). U realnim granularnim pakovanjima veliki broj čestica je uključen u ove kooperativne strukture. Lukovi su osnovni generatori velikih šupljina i zato svojim prisustvom bitno utiču na gustinu pakovanja (Mehta at al., 2004). Opisane višečestične strukture su stabilne zahvaljujući doprinosu svake čestice u njoj. Dovoljno je bilo koju česticu luka ili mosta ukloniti da bi došlo do njegovog potpunog kolapsa pod uticajem gravitacije.

Tokom vibracione pobude, granule u unutrašnjosti pakovanja osećaju spoljašnje perturbacije kao silu stohastičke prirode. Pod njenim uticajem granule mogu da se međusobno prostorno preraspodeljuju. Zato, promena određene konfiguracije sistema se dešava usled kooperativne preraspodele slobodne zapremine između susednih čestica. Pod kooperativnošću procesa se podrazumeva istovremeno učešće većeg broja čestica-suseda u formiranju luka ili mosta, odnosno slobodne zapremine koju pomenute višečestične strukture zarobljavaju. Ukoliko je intenzitet vibracija dovoljno mali, tada neke granule nisu u stanju da napuste klastere kojima pripadaju, tako da strukture kao što su lukovi i mostovi mogu biti dugovečni tokom vibracione pobude (videti *sliku 5.1.3*). Postoje direktne potvrde da jednom formirani mostovi obično opstaju tokom velikog broja vibracionih pobuda (Arsenović at al., 2006). Dakle, tokom procesa kompaktifikacije granule provode većinu vremena trapovane (zarobljene) u lokalizovanim oblastima („kavezima”), ali povremeno načine i neke veće pomeraje (Pouliquen at al., 2003; Ribièere et al., 2005; Marty and Dauchot, 2005). Sa povećanjem gustine pakovanja, vreme koje granule provode zarobljene unutar „kaveza” postaje sve duže i duže, pri čemu se one lokalizovano kreću oko nekog fiksnog položaja. Relaksacione procese u ovako gustim sistemima karakteriše vremenska nelokalnost nastala usled razuređenosti koja stvara prepreke i trapove u sistemu. Trapovanje onemogućava veću mobilnost čestica i unosi memorijske efekte u dinamiku kretanja. Ove činjenice se nalaze u osnovi daljeg pristupa modelovanju procesa kompaktifikacije. Osnovna fizička ideja tog pristupa je da vremenske intervale između uzastopnih preorijentacija objekata u modelu određuje pogodno izabrana distribucija

vremena čekanja $\psi(t)$. Tom distribucijom su određeni sličajni intervali između pojedinačnih skokova čestica (tj. između promena orijentacija „gore” \leftrightarrow „dole”). Na ovaj način postuliramo neka svojstva sistema na „mikroskopskoj” skali nadajući se da ćemo dobiti pravilan makroskopski opis dinamike sistema.

Interakcija granula sa okolnim granulama je stohastički proces i ona će formalno biti inkorporirana u model kroz metod subordinacije stohastičkih procesa u vremenu. Zato ćemo razmotriti procese vremenske evolucije broja objekata koji se nalaze u stanjima „gore”, odnosno „dole” i njih ćemo smatrati osnovnim (matičnim) stohastičkim procesima. Drugim rečima, ovi procesi su „roditeljski” procesi u smislu subordinacije stohastičkih procesa. Neka je $T_i, i = 1, 2, \dots$ niz negativnih, stohastički nezavisnih i identičnih (istovetno) distribuiranih slučajnih promenljivih koje predstavljaju vremenske intervale između uzastopnih preorijentacija objekata („gore” \leftrightarrow „dole”). Ovi intervali se uobičajeno nazivaju vremenima čekanja. Ukoliko vremena čekanja T_i pripadaju strogom domenu atrakcija neke α -stabilne distribucije ($0 < \alpha < 1$), tada njihova suma $n^{-1/\alpha} \sum_{i=1}^n T_i, n \in N$ konvergira (u smislu distribucije) stabilnoj raspodeli sa istim indeksom α (Janicki and Weron, 1994; Meerschaert and Scheffler, 2004). Neprekidna granica diskretnog procesa prebrojavanja $\{N_t\}_{t \geq 0} = \max\{n \in N \mid \sum_{i=1}^n T_i \leq t\}$ je stohastički proces $S(t)$ koji se uobičajeno naziva *prvo prolazno vreme*. Prvo prolazno vreme $S(t)$ je neopadajući proces i zato on definiše novu stohastičku strelu vremena. Drugim rečima, proces $S(t)$ se uzima za novi časovnik u sistemu. Gustina verovatnoće procesa $S(t)$ sledećeg je oblika (Mainardi, 1996):

$$p_\alpha^S(t, \tau) = \frac{1}{2\pi j} \int_{B_r} u^{\alpha-1} \exp(ut - \tau u^\alpha) du = t^{-\alpha} F_\alpha\left(\frac{\tau}{t^\alpha}\right), \quad (8.1.7)$$

gde (B_r) označava Bromvičevu konturu i $j = \sqrt{-1}$ imaginarnu jedinicu. Funkcija $F_\alpha(z)$ može biti razvijena Taylor-ov red:

$$F_\alpha(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-z)^k}{k! \Gamma(1 - \alpha - k\alpha)}, \quad (8.1.8)$$

gde je $\Gamma(1 - \alpha - k\alpha)$ gama funkcija. Gustina verovatnoće $p_\alpha^S(t, \tau)$ određuje verovatnoću da ukoliko je interno vreme (ili tzv. operativno vreme) procesa jednako τ , onda realno (fizičko) vreme procesa iznosi t (Stanislavsky, 2003).

Predhodno uvedena stohastička strela vremena može biti primenjena na

kinetičke jednačine (8.1.1) i (8.1.2). Pri tome se proces $S(t)$ koristi kao subordinator. Proces $S(t)$ određuje vremenski interval tokom kojeg objekat ne menja svoju orijentaciju. Neka verovatnoće $p^{(d)}(t)$ i $p^{(u)}(t)$, koje zadovoljavaju jednačine (8.1.1) i (8.1.2), predstavljaju stohastičke zakone koji opisuju *matične* („roditeljske”) stohastičke procese. Smatajući da verovatnoće $p^{(d)}(\tau)$ i $p^{(u)}(\tau)$ sada zavise od lokalnog vremena τ , tada *nakon subordinacije* rezultujuće verovatnoće $p_\alpha^{(d)}(t)$ i $p_\alpha^{(u)}(t)$ određuju integralni izrazi:

$$p_\alpha^{(d)}(t) = \int_0^\infty d\tau p_\alpha^S(t, \tau) p^{(d)}(\tau) \quad (8.1.9)$$

$$p_\alpha^{(u)}(t) = \int_0^\infty d\tau p_\alpha^S(t, \tau) p^{(u)}(\tau) \quad (8.1.10)$$

Ovim je proces kompaktifikacije sistema definisan pomoću dva stohastička procesa; odnosno, kompaktifikacija u modelu svedena je na slučajne promene stanja (orijentacije) objekata koje se dešavaju nakon slučajnih vremenskih intervala (vremena čekanja). Odnos broja objekata u stanju „gore” i preostalih objekata u stanju „dole” je subordinaran od strane procesa $S(t)$. Drugim rečima, proces kompaktifikacije (jednačine 8.1.9 i 8.1.10) dobijen je randomizacijom vremena u procesima stohastičke dinamike koji su opisani jednačinama (8.1.1) i (8.1.2), korišćenjem subordinatora-slučajnog procesa $S(t)$ (Stanislavsky, 2003).

U daljem tekstu će biti pokazano da jednačina kojom je opisan prezentovani model kompaktifikacije dobija formu sličnu jednačinama (8.1.1) i (8.1.2), ali da izvodi prvog reda postaju, u novoj jednačini, frakcioni izvodi reda $0 < \alpha < 1$. Pri tome, red frakcionog izvoda $0 < \alpha < 1$ je određen indeksom stohastičkog procesa $S(t)$. Zbog jednostavnosti zapisa, predstavimo jednačine (8.1.1) i (8.1.2) u kompaktnoj formi:

$$\frac{d}{dt} p(t) = \hat{\omega} p(t), \quad (8.1.11)$$

gde je $p(t) = [p^{(d)}(\tau) \ p^{(u)}(\tau)]^T$, i $\hat{\omega}$ označava tranzicioni operator:

$$\hat{\omega} = \begin{bmatrix} -\omega_{ud} & \omega_{du} \\ \omega_{ud} & -\omega_{du} \end{bmatrix}. \quad (8.1.12)$$

Važno je naglasiti da je tranzicioni operator $\hat{\omega}$ nezavisan od vremena. Stoga, jednačinu (8.1.11) moguće je napisati u integralnoj formi:

$$p(t) = p(0) + \int_0^\infty d\tau \hat{\omega} p(\tau). \quad (8.1.13)$$

Laplace-ovom transformacijom jednačine (8.1.13) dobija se izraz

$$\hat{\omega} \tilde{p}(s) = s\tilde{p}(s) - \tilde{p}(0), \quad (8.1.14)$$

pri čemu je Laplace-ova transformacija \mathcal{L} definisana sa:

$$\mathcal{L} p(t) \equiv \tilde{p}(s) = \int_0^{\infty} dt \exp(-st)p(t). \quad (8.1.15)$$

U Laplace-ovom prostoru, verovatnoće $p_{\alpha}(t) = [p_{\alpha}^{(d)}(t) p_{\alpha}^{(u)}(t)]^T$ (vidi jednačine 8.1.9 i 8.1.10) se prikazuju veoma jednostavnim izrazima,

$$\tilde{p}_{\alpha}(s) = s^{\alpha-1}\tilde{p}(s^{\alpha}), \quad (8.1.16)$$

jer važi da je (Stanislavsky, 2003)

$$\tilde{p}_{\alpha}^s(s, \tau) = s^{\alpha-1}\exp(-\tau s^{\alpha}). \quad (8.1.17)$$

Kada operator $\hat{\omega}$ deluje na funkciju $\tilde{p}(s)$ (jenačina (8.1.16)) u Laplace-ovom prostoru, jednostavno se dobija sledeća relacija:

$$\hat{\omega} \tilde{p}_{\alpha}(s) = s^{\alpha-1}\hat{\omega}\tilde{p}(s^{\alpha}) = s^{\alpha-1}(s^{\alpha}\tilde{p}(s^{\alpha}) - \tilde{p}(0)) = s^{\alpha}\tilde{p}_{\alpha}(s) - s^{\alpha-1}\tilde{p}(0). \quad (8.1.18)$$

Inverznom Laplace-ovom transformacijom \mathcal{L}^{-1} prethodno dobijenog izraza (8.1.18), dobija se apstraktna parcijalna diferencijalna jednačina koja sadrži frakcioni izvod po vremenu ${}^oD_t^{-\alpha}$:

$$p_{\alpha}(t) = p(0) + {}^oD_t^{-\alpha}\hat{\omega}p_{\alpha}(t). \quad (8.1.19)$$

U prethodnoj jednačini se pojavljuje frakcioni Riemann-Liouville-ov integralni operator definisan formulom

$${}^oD_t^{-\alpha}f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t d\tau (t - \tau)^{\alpha-1}f(\tau), \quad 0 < \alpha < 1. \quad (8.1.20)$$

Posebno je jednostavna Laplace-ova transformacija frakcionog Riemann-Liouville-ovog integralnog operatora (Mainardi and Gorenflo, 2000):

$$\mathcal{L}[{}^oD_t^{-\alpha}f(t)] = s^{-\alpha}\tilde{f}(s). \quad (8.1.21)$$

Korišćenjem jednačine (8.1.19) i uzimajući u obzir da je $\rho(t) = \rho_d p_{\alpha}^{(d)}(t) + \rho_u p_{\alpha}^{(u)}(t)$, dobijamo da odstupanje $\Delta\rho(t) = \rho(\infty) - \rho(t)$ gustine sistema $\rho(t)$ od stacionarne vrednosti $\rho(\infty)$ zadovoljava diferencijalnu jednačinu frakcionog tipa:

$$\Delta\rho(t) = \Delta\rho(0) - \omega[oD_t^{-\alpha}\Delta\rho(t)]. \quad (8.1.22)$$

Veličina $\omega = \omega_{du} + \omega_{ud}$ predstavlja totalnu verovatnoću prelaza, a vrednost gustine sistema u stacionarnom stanju, $\rho(\infty)$, data je jednačinom (8.1.4). U jednačini (8.1.22) frakcioni izvod na desnoj strani odgovara procesu koji je subordiniran jednostavnoj stohastičkoj preorijentaciji objekata „gore” \leftrightarrow „dole”. Pomenutu subordinaciju definiše neka α -stabilna distribucija vremena čekanja. Važno je napomenuti da nije bitan njen tačan analitički oblik već njena pripadnost strogom domenu atrakcija neke α -stabilne distribucije ($0 < \alpha < 1$). Diferenciranjem jednačine (8.1.22) po vremenu i uz korišćenje formule (Mainardi and Gorenflo, 2000)

$$\frac{d}{dt}oD_t^{-\alpha}f(t) = oD_t^{1-\alpha}f(t), \quad (8.1.23)$$

dobija se

$$\frac{d}{dt}\Delta\rho(t) = -\tau_r^{-\alpha}oD_t^{1-\alpha}\Delta\rho(t), \quad (8.1.24)$$

gde je

$$\tau_r = \omega^{-1/\alpha} \quad (8.1.25)$$

generalizovano vreme relaksacije. Jednačina (8.1.24) je integralno–diferencijalna jednačina. Riemann-Liouville operator $oD_t^{1-\alpha}$ (8.1.20) predstavlja konvolucioni integral sa kernelom stepenog oblika $M(t) \propto t^{\alpha-2}$. Zato možemo reći da je u frakcionu jednačinu (8.1.24) formalno inkorporirana dugotrajna memorija koju sistem ispoljava. To znači da gustina sistema $\rho(t)$ u trenutku t zavisi od njene vrednosti $\rho(t')$, $t' < t$ u svakom prethodnom trenutku vremena $t' < t$. Ovo je u saglasnosti sa činjenicom da su granularni materijali suštinski nelokalnog karaktera u vremenu (Richard at al., 2005).

Parametar $\tau_r = \omega^{-1/\alpha}$ se interpretira kao generalizovano vreme relaksacije. Zaista, rešenje jednačine (8.1.24) može biti predstavljeno pomoću Mittag-Leffler-ove funkcije E_α reda α na sledeći način (Mainardi and Gorenflo, 2000; Saxena at al., 2004):

$$\Delta\rho(t) = \Delta\rho(0)E_\alpha[-(t/\tau_r)^\alpha]. \quad (8.1.26)$$

Mittag-Leffler-ovu funkciju definiše sledeća inverzna Laplace-ova transformacija:

$$E_\alpha[-(t/\tau)^\alpha] = \mathcal{L}^{-1}\{(u + \tau^{-\alpha}u^{1-\alpha})^{-1}\}, \quad (8.1.27)$$

Iz prethodne jednačine sledi razvoj Mittag-Leffler-ove funnkcije u red

$$E_\alpha[-(t/\tau)^\alpha] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-(t/\tau)^\alpha]^n}{\Gamma(1+\alpha n)}, \quad (8.1.28)$$

koji asocira na generalizaciju eksponencijalne funkcije (Saxena et al., 2004).

Na dva važna pitanja još nije dat odgovor. Prvo, prezentovani model nije kompletiran sve dok u sebe ne uključi eksperimentalni parametar Γ , tj. intenzitet vibracija. Uspostavljanjem korespondencije između modela i eksperimenta, „gore”→„dole” događaj je povezan sa anihilacijom ili popunjavanjem šupljina unutar horizontalnog sloja granularnog materijala, dok „dole”→„gore” događaj je povezan sa kreacijom šupljina. Osnovni parametar koji određuje finalnu gustinu stacionarnog stanja $\rho(\infty)$, a ujedno kontroliše dinamiku procesa, je odnos $\gamma = \omega_{ud}/\omega_{du}$. Ovaj količnik u prezentovanom modelu je analogon intenzitetu vibracija Γ u realnim eksperimentima. Na osnovu relacije (8.1.4), vrednost gustine sistema u stacionarnom stanju $\rho(\infty)$ je određena izrazom

$$\rho(\infty) = \frac{\rho_d + \rho_u \gamma}{1 + \gamma}. \quad (8.1.29)$$

Prema tome, gustina sistema $\rho(\infty)$ je opadajuća funkcija parametra $\gamma \geq 0$ koja se u modelu menja između vrednosti $\rho_u = a/b$ ($\gamma \rightarrow \infty$) i $\rho_d \leq 1$ ($\gamma = 0$).

Drugo, važno je napomenuti da koeficijent α u modelu ne bi trebalo da bude slobodan parametar. Zato je potrebno razmotriti njegovu funkcionalnu zavisnost od „intenziteta vibracija” $\gamma = \omega_{ud}/\omega_{du}$. Pretpostavimo da parametri $0 < \alpha < 1$ i $\gamma > 0$ zadovoljavaju sledeću jednostavnu relaciju:

$$\alpha = \frac{1}{1 + 1/\gamma}. \quad (8.1.30)$$

Tada vrednost parametra α monotono raste ka jedinici, ukoliko se vrednost „intenziteta vibracija” γ povećava. Ovakvu funkcionalnu zavisnost može opravdati sledeći fenomenološki argument. Kako vremenski intervali T_i (vremena čekanja) pripadaju nekoj α -stabilnoj distribuciji ($0 < \alpha < 1$), verovatnoća da je T_i veće od neke vrednosti $t > 0$ je asimptotski opisana stepenim zakonom, tj. $P(T_i > t) \propto t^{-\alpha}$ kada $t \rightarrow \infty$ (Janicki and Weron, 1994). Ovo je veoma važno asimptotsko ponašanje repa funkcije raspodele vremena čekanja. Ono se čest navodi kao ključna pretpostavka koja vodi ka opisu makroskopske dinamike sistema fracionim kinetičkim jednačinama. U skladu sa prethodnim činjenicama, smanjenje parametra α na intervalu $(0, 1)$ povećava doprinos dugih vremena čekanja T_i tokom procesa kompaktifikacije. Ovo je u skladu sa činjenicom da tokom vibracija malog intenziteta neke kooperativne strukture unutar pakovanja su „dugoživeće” (opstaju tokom velikog broja vibracionih pobuda), dok u

režimu jakog vibracionog pobuđivanja kooperativne strukture se brzo formiraju i nestaju. Analogno tome, u prezentovanom modelu stanja „gore” i stanja „dole” su postojana tokom dugih vremenskih intervala ukoliko je intenzitet pobuđivanja sistema mali. Važno je primetiti da „intenzitet vibracija” γ utiče na dinamiku kompaktifikacije indirektno preko parametra α (jednačina (8.1.30)). Međutim, parametar α ne utiče na vrednost gustine sistema u stacionarnom stanju $\rho(\infty)$. U narednom poglavlju će na osnovu jednačine (8.1.30) biti pokazano da zavisnost vremena relaksacije τ_r od parametra γ zadovoljava Arrhenius-ov zakon $\tau_r \propto \exp(\gamma_0/\gamma)$ (Ribière et al., 2005). Zavisnosti Arrhenius-ovog tipa su primećene u brojnim eksperimentima kompaktifikacije granularnih materijala pod dejstvom vibracija (Richard et al., 2005; Philippe and Bideau, 2002; Philippe and Bideau, 2003; Gravish et al., 2012). Ovaj zakon relaksacije je takođe primećen kod nekih staklastih sistema. Procesi Arrhenius-ovog tipa opisuju verovatnoću da termalno ili mehanički aktivirana čestica napusti potencijalnu jamu. U granularnim sistemima, termalni efekti su zamemarljivi, i zato pretpostavljamo da mehaničke pobude igraju ulogu izvora „termalne energije”.

8.2. Numerički proračuni i poređenja sa analitičkim rezultatima

U ovom poglavlju biće izvršeno poređenje prethodno dobijenih teorijskih rezultata sa rezultatima numeričkih simulacija. Numeričke simulacije su bazirane na algoritmu za numeričko modelovanje stohastičkih procesa opisanih frakcionom Fokker-Plank-ovom jednačinom. Svi detalji ovog algoritma dati su u radovima (Heinsalu at al., 2006; Heinsalu at al., 2007). Ovde će biti prezentovane sve bitne pojedinosti algoritma. Posebna pažnja biće posvećena detaljima koji su specifični za sam model.

Numerički algoritam je Monte-Carlo (M-C) tipa. U svakom M-C koraku, na slučajan način se izabira jedan čvor rešetke i jedan od dva moguća prelaza („gore” ↔ „dole”) između dva različita stanja u kojima se može nalaziti objekat. Pri tome, izbor prelaza iz stanja „gore” u stanje „dole” se dešava sa verovatnoćom p_{du} ; prelaz iz stanja „dole” u stanje „gore” dešava se sa verovatnoćom p_{ud} . Verovatnoće prelaza p_{du} i p_{ud} zadovoljavaju uslov normiranja $p_{du} + p_{ud} = 1$ i njima je određen „intenzitet vibracija” γ . Ukoliko je slučajno izabrani proces „gore” → „dole” prelaz, a slučajno izabrani objekat se nalazi u stanju „gore”, tada se njegova orijentacija menja iz stanja „gore” u stanje „dole”. Nasuprot tome, ako se slučajno izabrani objekat već nalazi u stanju „dole”, tada se ne vrši preorijentacija tog objekta. Ukoliko je slučajno izabrani proces „dole” → „gore” prelaz tada se, pod uslovom da je slučajno izabrani objekat u stanju „dole”, menja njegova orijentacije iz stanja „dole” u stanje „gore”. U suprotnom, proces preorijentacije objekta se ne vrši. Pretpostavlja se da se procesi preorijentacije objekata dešavaju trenutno, ili u toku dovoljno malog vremenskog intervala koji se može zanemariti u odnosu na vremena čekanja T_i .

Slučajno vreme τ između dva sukcesivna pokušaja preorijentacije objekta se izabira na osnovu distribucije verovatnoće vremena čekanja $\psi(t)$. Jedan od adekvatnih izbora za distribuciju $\psi(t)$ je Mittag-Leffler-ova distribucija definisana

$$\psi(t) = -\frac{d}{d\tau} E_{\alpha}(-(\tau/\nu)^{\alpha}), \quad (8.2.1)$$

gde je konstanta ν proizvoljan parameter vremenskog skaliranja, dok je parametar α određen relacijom (8.1.30). Osnovna uloga Mittag-Leffler-ove funkcije raspodele gustine verovatnoće za vremena čekanja postala je dobro poznata nakon objavljivanja krucijalnog rada Hilfer-a i Anton-a (Hilfer and Anton, 1995). Fulger (Fulger at al., 2008) je posebnu pažnju obratio na njeno korišćenje kao distribucije vremena čekanja u CTRW simulacijama. Funkciju raspodele gustine verovatnoće $\psi(t)$ pomoću koje

određujemo vremena čekanja moguće je numerički izračunati pomoću stepenog razvoja u red (8.1.28). Ovakvim pristupom se dobija diskretna reprezentacija gustine verovatnoće na konačnom vremenskom intervalu. Slučajni brojevi tada mogu biti efikasno generisani na osnovu tabele, uz primenu metoda interpolacije. Međutim, mnogo pogodnije u numeričkom smislu je koristiti sledeću inverzionu formulu koju su predložili Kozubowski i Rachev (Kozubowski and Rachev, 1999):

$$\tau = -v \ln u \left(\frac{\sin(\alpha\pi)}{\tan(\alpha\pi v)} - \cos(\alpha\pi) \right)^{1/\alpha}. \quad (8.2.2)$$

Ovde su $u, v \in (0, 1)$ nezavisni uniformno distribuirani slučajni brojevi, v je parametar vremenskog skaliranja, dok je τ Mittag-Leffler-ov slučajni broj. Za $\alpha = 1$, jednačina (8.2.2) se redukuje na inverzionu formulu za eksponencijalnu distribuciju, tj. $\tau = -v \ln u$. Nakon svakog MC koraka u simulaciji se vreme t i gustina sistema ρ ažuriraju, $t \rightarrow t + \tau$ i $\rho \rightarrow \rho + \Delta\rho$, gde je $\Delta\rho \in \{\pm(1 - a/b)/N, 0\}$. Ponavljanjem ovog algoritma može biti dobijen kompletan rast gustine ρ , od inicijalne $\rho(0) = \rho_u = a/b$, pa do gustine stacionarnog stanja $\rho(\infty)$ (jednačina (8.1.4)).

Parametar vremenskog skaliranja v u jednačini (8.2.2) se određuje na osnovu procedure opisane u radu (Heinsalu et al., 2006; Heinsalu et al., 2007). Veličine $\omega_{du} = (p_{du}/N)v^{-\alpha}$ i $\omega_{ud} = (p_{ud}/N)v^{-\alpha}$ u frakcionoj kinetičkoj jednačini (8.1.22) se označavaju kao frakcije „gore” \rightarrow „dole” i „dole” \rightarrow „gore” kinetičke brzine. Korišćenjem uslova normiranja za verovatnoće prelaza, tj. $p_{du} + p_{ud} = 1$, jednostavno se dobija da važi

$$p_{du} = \frac{\omega_{du}}{\omega_{du} + \omega_{ud}}, \quad p_{ud} = \frac{\omega_{ud}}{\omega_{du} + \omega_{ud}}, \quad (8.2.3)$$

i

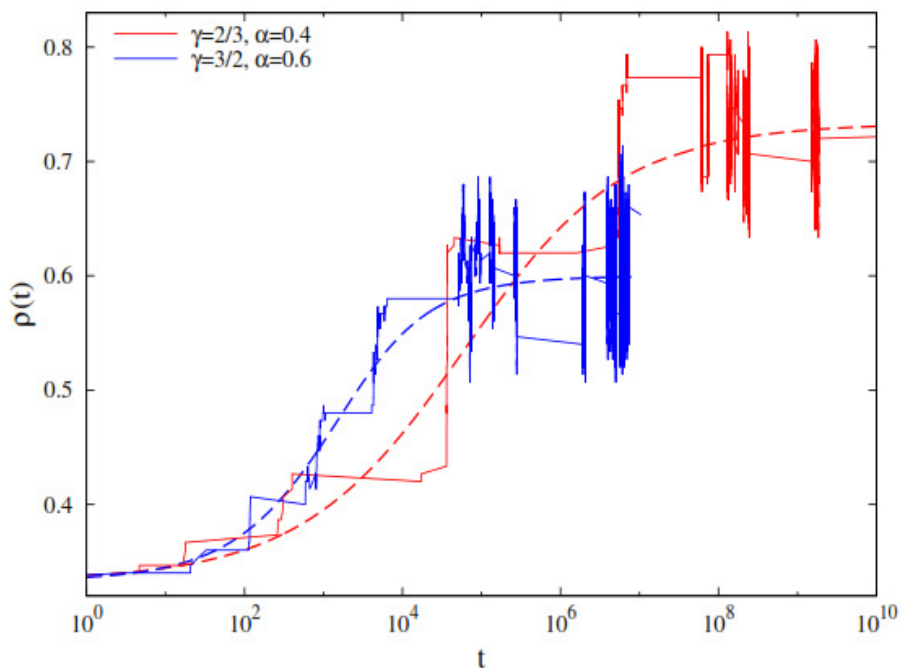
$$v = \left(N(\omega_{du} + \omega_{ud}) \right)^{-1/\alpha}. \quad (8.2.4)$$

U tom slučaju, rezultati simulacija su nezavisni od broja objekata u sistemu. Frakcione kinetičke brzine ω_{du} i ω_{ud} mogu biti izabrane na sledeći način:

$$\omega_{du} = \omega \frac{1}{1+\gamma}, \quad \omega_{ud} = \omega \frac{\gamma}{1+\gamma}, \quad (8.2.5)$$

gde je $\gamma = p_{ud}/p_{du}$. Pri tome se smatra da parametar $\omega > 0$ u jednačini (8.2.5) zavisi isključivo od mikromehaničkih svojstava granularnog sistema. Zapravo, relacije (8.2.5) za frakcione kinetičke brzine ω_{du} i ω_{ud} obezbeđuju da totalna frakciona kinetička brzina $\omega_{du} + \omega_{ud} = \omega \neq f(\gamma)$ ne zavisi od inteziteta eksterne pobude sistema γ .

Sve numeričke simulacije izvršene su na sistemu od $N = 100$ pravougaonih objekata čije su proporcije iznosile $a/b = 1/3$ (vidi sliku 8.1.1). Za vrednost parametra ω izabrana je vrednost $\omega = 10^{-2}$, tako da za vrednost parametra skaliranja dobijamo $\nu = 1$ (jednačina (8.2.4)). Ovaj izbor je donekle omogućio optimizaciju algoritma. Slika 8.2.1 prikazuje pojedinačne realizacije vremenske evolucije gustine sistema $\rho(t)$ za dve različite vrednosti „intenziteta vibracija”, $\gamma = 2/3$ ($\alpha = 0.4$) i $\gamma = 3/2$ ($\alpha = 0.6$). Očigledno je da manjim vrednostima parametra γ (ili, ekvivalentno, manjim vrednostima parametra α) odgovaraju, u proseku, duža vremena čekanja. Slične krive su dobijene za razne vrednosti „intenziteta vibracija” γ .



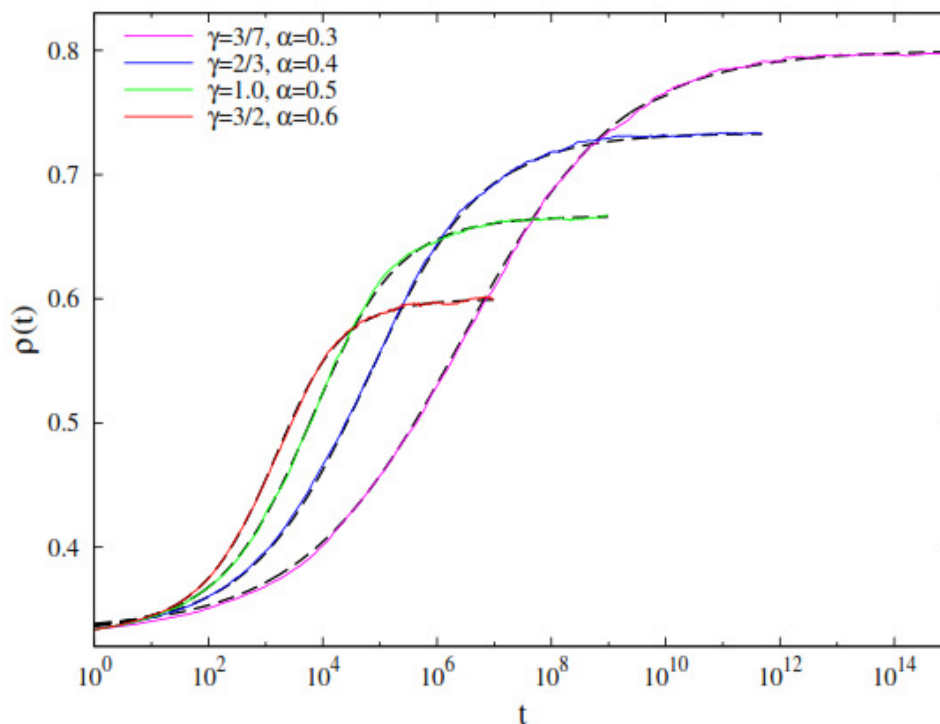
Slika 8.2.1. Pojedinačne realizacije vremenske evolucije gustine sistema $\rho(t)$ za dve vrednosti intenziteta vibracija, $\gamma = 2/3$ ($\alpha = 0.4$) i $\gamma = 3/2$ ($\alpha = 0.6$). Isprekidanim linijama prikazano je ponašanje odgovajuće Mittag-Leffler-ove funkcije (jednačina (8.1.26)), sa svrhom bolje vizuelne preglednosti grafika.

Na slici 8.2.1 možemo videti da fluktuacije gustine tokom svake pojedinačne realizacije evolucije sistema ka stacionarnom stanju mogu da budu veoma velike. Zato je neophodno dovoljno umanjiti uvek prisutne statističke fluktuacije. To se postiže usrednjavanjem velikog broja nezavisnih realizacija vremenske evolucije sistema za

svaku vrednost parametra γ . Zbog toga, krive relaksacije gustine koje su prezentovane u ovom radu, predstavljaju srednje vrednosti gustine dobijene iz rezultata $K = 1000$ nezavisnih simulacija. Da bismo izračunali srednju gustinu u nekom trenutku vremena, uvodimo monotono rastući niz vremena $t_m = t_f^{(m-1)/M}$, $m = 1, 2, \dots, M + 1$, gde je t_f završni trenutak vremena i $\log t_{m+1} - \log t_m = \log t_f / M = \text{const}$. Primetimo da je onda $\log(t_m)$, $m = 1, 2, \dots, M + 1$, niz ekvidistantnih tačaka na linearnoj skali. Svaka kriva gustine $\rho^{(k)}(t)$, $k = 1, \dots, K$ nezavisno evoluira u vremenu sve dok se ne dostigne finalni trenutak vremena t_f , $t \geq t_f$. Kada k -ta kriva gustine $\rho^{(k)}(t)$ dostigne neki predefinisani vremenski trenutak t_m , odgovarajuća gustina $\rho^{(k)}(t_m)$ se izračunava kao srednja vrednost gustina $\{\rho^{(k)}(t) | t_m \leq t \leq t_{m+1}\}$. Pri tome, za k -tu realizaciju evolucije sistema, sve se već dobijene gustine $\rho^{(k)}(t_m)$, $m = 1, 2, \dots, M + 1$ pamte. Nakon potpune realizacije ukupno K krivih gustina $\rho^{(k)}(t)$, $k = 1, \dots, K$, srednja gustina $\rho(t_m)$ se za svaki predefinisani vremenski trenutak t_m računa normalizacijom $\rho(t_m) = \sum_{k=1}^K \rho^{(k)}(t_m) / K$.

U daljem tekstu biće prezentovani i diskutovani rezultati koji su dobijeni prethodno opisanom numeričkom simulacijom. Ti rezultati se uglavnom odnose na vremensku evoluciju gustine sistema $\rho(t)$. Promene gustine $\rho(t)$ u toku vremena, za nekoliko vrednosti intenziteta pobude γ , prikazane su na slici 8.2.2. Primećujemo da su krive $\rho(t)$ u potpunoj kvalitativnoj saglasnosti sa eksperimentalnim rezultatima dobijenim u eksperimentima u kojima su redukovani uticaji bočnih granica sistema na granularno pakovanje (Philippe and Bideau, 2002; Ribière et al., 2005). Očigledno je da se dinamika procesa kompaktifikacije usporava ukoliko se intenzitet vibracione pobude γ smanjuje. Zapravo, primenom manjih intenziteta pobude, evolucija sistema ka stacionarnom stanju odigrava se na mnogo široj vremenskoj skali, dok asimptotska vrednost gustine koju sistem tada dostiže se uvećava. Na istoj slici, takođe su date relaksacione krive koje su analitički dobijene na osnovu jednačine (8.1.26). Time je pokazano da relaksacioni zakon Mittag-Leffler-ovog tipa (8.1.26) odlično opisuje rezultate simulacije. Za velike vrednosti parametra γ , sistem se brzo približava stacionarnom stanju i dostiže odgovarajuću asimptotsku gustinu $\rho(\infty)$. Pri tome, parametar α uzima vrednosti bliske jedinici (vidi jednačinu (8.1.30)). Kako je

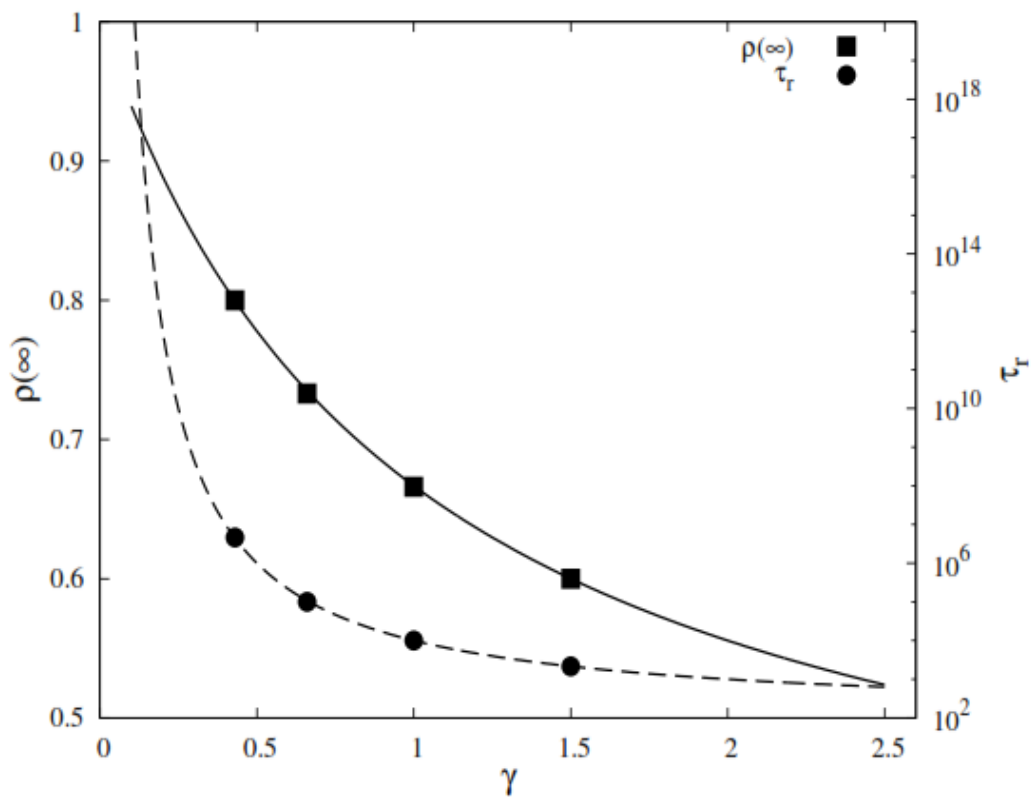
$E_\alpha[-(t/\tau_r)^\alpha] \rightarrow \exp(-t/\tau_r)$, kada $\alpha \rightarrow 1$, onda svojstvo spore („staklaste”) relaksacije sistema iščezava u režimu eksternih pobuda velikog intenziteta.



Slika 8.2.2. Vremenska evolucija gustine $\rho(t)$ dobijena na osnovu Monte-Carlo simulacija (pune linije) i analitički (isprekidane linije) za razne vrednosti intenziteta vibracione pobude $\gamma = 3/7, 2/3, 1, 3/2$.

Na slici 8.2.3 prikazana je zavisnost gustine sistema, $\rho(\infty)$, koji se nalazi u stacionarnom stanju, od kontrolnog parametra γ („intenzitet vibracija”) za uslove koji odgovaraju rezultatima simulacija prikazanim na slici 8.2.2. Može se videti da gustina $\rho(\infty)$ algebarski opada sa porastom vrednosti parametra γ (vidi jednačinu (8.1.29)). Napomenimo da smo na prezentovanom modelu sprovedi proceduru „kaljenja” na način analogan eksperimentima opisanim u radu (Nowak at al., 1997; Nowak at al., 1998). Tokom procedure „kaljenja”, intenzitet vibracija se prvo kontinualno uvećava do što većih vrednosti, nakon toga se smanjuje do što manjih vrednosti, pa se zatim ponovo uvećava. Primenjujući opisani protokol na model kompaktifikacije, može se dobiti samo reverzibilna grana procesa „kaljenja”. Ona se u ovom slučaju poklapa sa punom linijom na slici 8.2.3. Objašnjenje odsustva ireverzibilne grane je jednostavno. Jasno je da gustina stacionarnog stanja jedino zavisi od intenziteta vibracija, a ne od početnog

uslova. Tokom procesa „kaljenja” broj vibracija koji je korišćen u simulaciji je uvek bio dovoljno veliki da sistem postigne stacionarnost. Zato, dovoljno spora promena intenziteta vibracija je uvek generisala isti niz stacionarnih gustina, bez obzira da li se intenzitet vibracija postepeno uvećavao ili smanjivao. Odustvo ireverzibilne grane je takođe primećeno u eksperimentima vibracione kompaktifikacije granularnog materijala Renne-ove grupe (Ribière et al., 2007). Prema tome, možemo tvrditi da je starenje sistema i ireverzibilno-reverzibilno ponašanje granularnog sistema primećeno samo u eksperimentima i numeričkim simulacijama tokom kojih stacionarno stanje nije dostignuto nakon promene intenziteta vibracija.



Slika 8.2.3. Gustina sistema u stacionarnom stanju $\rho(\infty)$ i generalizovano vreme relaksacije τ_r , u funkciji intenziteta vibracija γ . Kvadrati predstavljaju rezultate simulacija za gustinu $\rho(\infty)$, za $\gamma = 3/7, 2/3, 1, 3/2$. Krugovima su prikazane odgovarajuće vrednosti vremena relaksacije, $\tau_r = 3/7, 2/3, 1, 3/2$. Opadajuća puna linija (leva osa) odgovara analitičkoj relaciji između stacionarne gustine $\rho(\infty)$ i parametra γ (vidi jednačinu (8.1.29)). Isprekidana linija (desna osa) odgovara Arrhenius-ovom zakonu $\tau_r \propto \exp(\gamma_0/\gamma)$, pri čemu je $\gamma_0 = \ln(1/\omega) \approx 4.6$.

Na slici 8.2.3 su takođe date vrednosti generalizovanog vremena relaksacije $\tau_r = \omega^{-1/\alpha}$ (jednačina (8.1.25)), za $\gamma = 3/7, 2/3, 1, 3/2$. Korišćenjem vrednosti $\gamma_0 = \ln(1/\omega)$ i $\tau_0 = 1/\omega$, na slici 8.2.3 je isprekidanom linijom prikazan Arrhenius-ov zakon:

$$\tau_r = \tau_0 \exp(\gamma_0/\gamma) \quad (8.2.6)$$

Ovo zapravo znači da smanjenje vremena relaksacije τ_r sa porastom γ može biti tačno opisano Arrhenius-ovim zakonom (8.2.6). Zaista, zamenom izraza $\gamma_0 = \ln(1/\omega) \neq f(\gamma)$ i $\tau_0 = 1/\omega \neq f(\gamma)$ u jednačinu (8.2.6), i eliminacijom γ uz pomoć jednačine (8.1.30), možemo dobiti izraz za generalizovano vreme relaksacije, $\tau_r = \omega^{-1/\alpha}$ (vidi jednačine (8.1.24) i (8.1.25)). Time je dokazana ekvivalentnost izraza (8.1.25) i (8.2.6) koja opravdava uvođenje postulata (8.1.30).

8.3. Memorijska svojstva modela

U ovom delu biće razmatran odziv frakcionog kinetičkog modela kompaktifikacije na nagle promene intenziteta pobude γ . Prvo navedimo šta se dešava u realnim granularnim sistemima tokom eksperimenata sa promenljivim intenzitetom vibracija (Josserand at al., 2000; Nicolas at al., 2000). U tim eksperimentima intenzitet vibracija (ili amplituda smicanja) se trenutno menja od neke vrednosti Γ_1 do neke druge vrednosti Γ_2 , u datom trenutku vremena t_w . Primećeno je da tokom naglog smanjenja intenziteta vibracija Γ ($\Gamma_1 > \Gamma_2$), na kratkim vremenskim skalama, dolazi do značajnog ubrzanja procesa kompaktifikacije, dok prilikom naglog povećanja intenziteta vibracija Γ ($\Gamma_1 < \Gamma_2$) sistem se širi (ili se gustina pakovanja smanjuje) tokom kratkog vremenskog intervala. Važno je napomenuti da je ovaj efekat prelaznog karaktera i da se nakon nekoliko vibracija ponovo uspostavlja uobičajeni režim kompaktifikacije, odnosno uspostavlja se brzina kompaktifikacije koja je u skladu sa dinamikom procesa za koje je $\Gamma = const$.

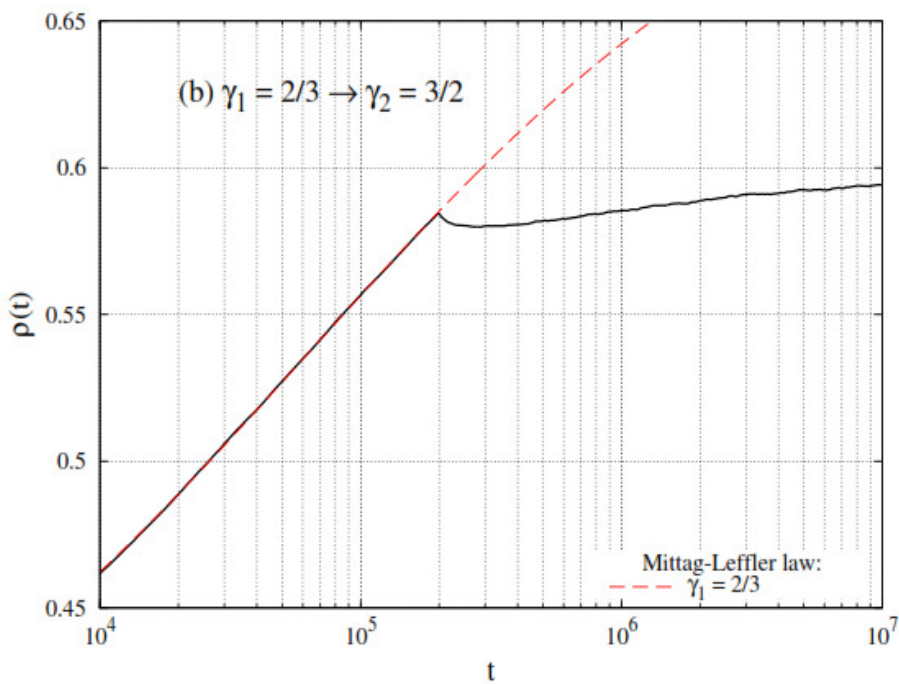
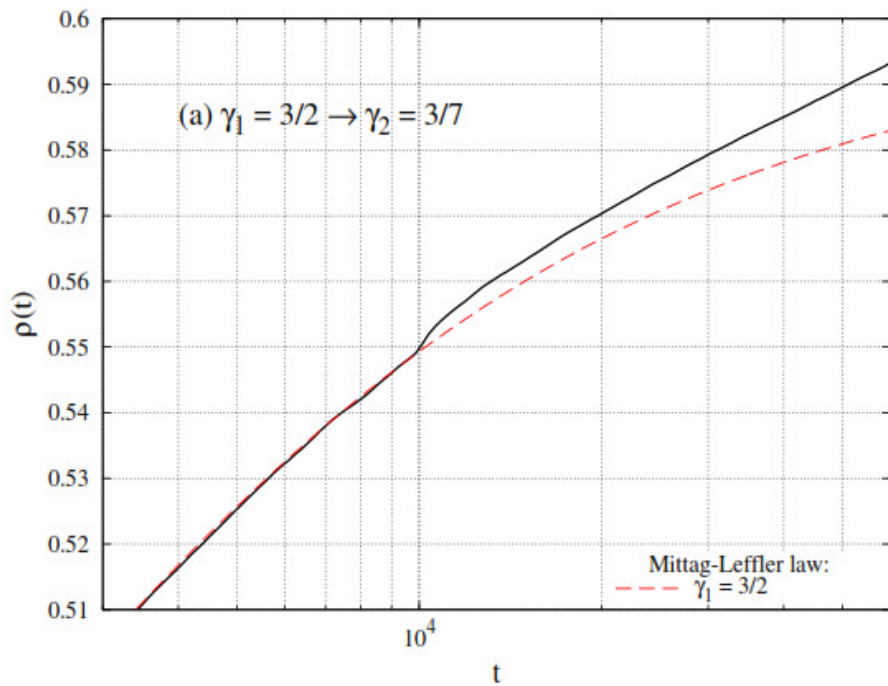
U prezentovanom modelu slučajni vremenski trenutak n -tog pokušaja preorijentacije objekta je dat sa $T(n) = \sum_{i=1}^n T_i$, $T(0) = 0$. Zbog toga, najjednostavniji način da se oponaša eksperimentalna procedura je uvođenje sledećih uslova koje treba da zadovoljavaju parametri γ i α (videti jednačinu (8.1.30)):

$$\gamma = \gamma_1, \alpha = \alpha_1 = (1 + 1/\gamma_1)^{-1}, \quad \text{ako } T(n) \leq t_w, \quad (8.3.1)$$

$$\gamma = \gamma_2, \alpha = \alpha_2 = (1 + 1/\gamma_2)^{-1}, \quad \text{ako } T(n) > t_w. \quad (8.3.2)$$

Za svaku nezavisnu MC realizaciju evolucije sistema, postoji indeks n takav da je $T(n) \leq t_w < T(n + 1)$. U skladu sa tim, vreme čekanja $T(n + 1) - T(n)$ se generiše na osnovu distribucije rezidentnih vremena $\psi(\tau)$ (jednačina (8.2.1)) koja zavisi od parametara γ_1 i α_1 . Slično tome, vremena čekanja $T(k + 1) - T(k)$, za $k > n$, su određena parametrima γ_2 i α_2 .

Slika 8.3.1 prikazuje tipični memorijski efekat do kojeg dolazi nakon nagle promene intenziteta vibracija γ u modelu. Napomenimo, da su svi ovde prikazani rezultati za evoluciju gustine $\rho(t)$ dobijeni usrednjavanjem 10^4 , realizacija numeričkog eksperimenta.

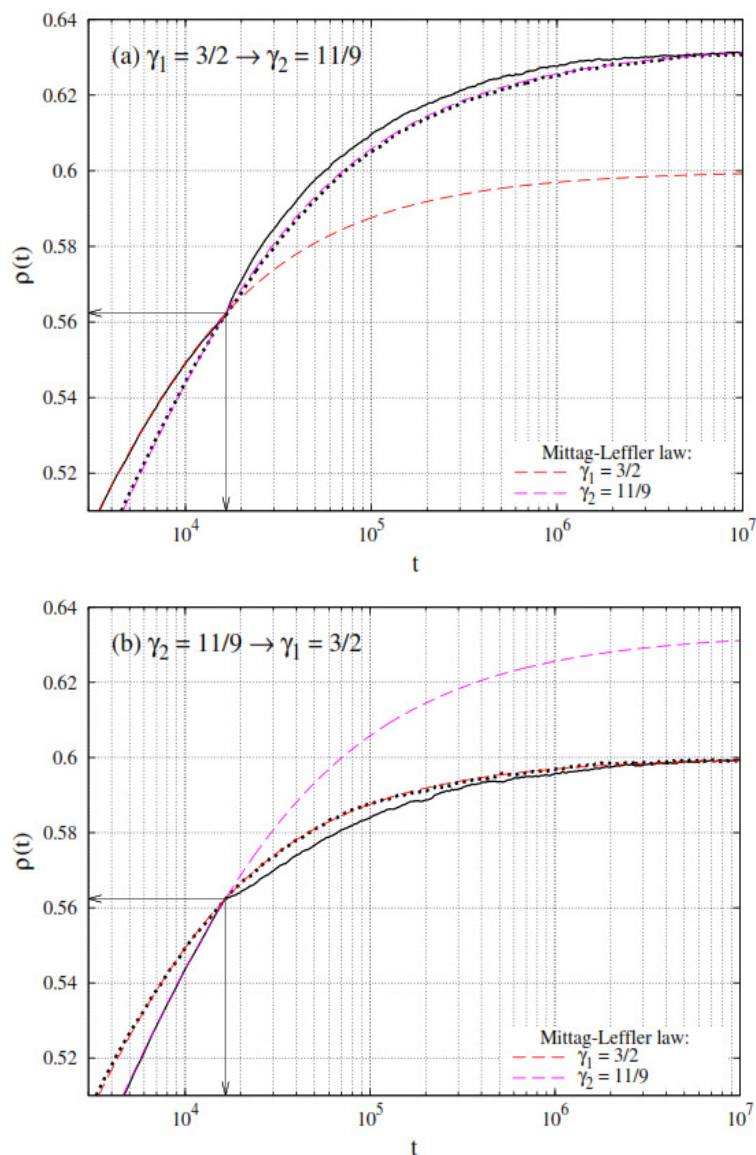


Slika 8.3.1. Memorijski efekti u modelu kompaktifikacije. Prikazana je vremenska evolucija gustine $\rho(t)$ kada se intenzitet vibracija promeni (a) sa $\gamma_1 = 3/2$ na $\gamma_2 = 3/7$ ($\alpha_1 = 0.6 \rightarrow \alpha_2 = 0.3$) u trenutku $t_w = 10^4$ (gornja puna linija), i (b) sa $\gamma_1 = 2/3$ na $\gamma_2 = 3/2$ ($\alpha_1 = 0.4 \rightarrow \alpha_2 = 0.6$) u trenutku $t_w = 2 \cdot 10^5$ (donja puna linija). Isprekidane krive su dobijene analitički na osnovu jednačine (8.1.26). One odgovaraju procesima pri konstantnoj vrednosti parametra $\gamma_1 = 3/2$ (a), i $\gamma_2 = 2/3$ (b).

Na *slici 8.3.1 (a)* intenzitet vibracija γ je smanjen sa vrednosti $\gamma = 3/2 (\alpha_1 = 0.6)$ na $\gamma_2 = 3/7 (\alpha_2 = 0.3)$ u trenutku $t_w = 10^4$. Primećuje se da nakon kratkog prelaznog intervala, „anomalni” odziv sistema prestaje, a nastaje prelaz ka „normalnom” ponašanju sistema, sa brzinom kompaktifikacije koja je ista kao u slučaju pobude konstantnog intenziteta.

Na *slici 8.3.1 (b)* prikazan je odziv sistema prilikom naglog porasta intenziteta pobude od vrednosti $\gamma_1 = 2/3 (\alpha_1 = 0.4)$ do $\gamma_2 = 3/2 (\alpha_2 = 0.6)$ u trenutku $t_w = 2 \cdot 10^5$. Možemo primetiti da je ovaj memorijski efekat suprotan efektu koji odgovara prethodnom slučaju; nalazimo da se sistem naglo širi nakon trenutka t_w u kome je intenzitet pobude naglo povećan. Oba rezultata sa *slike 8.3.1* su u suprotnosti sa onim što možemo očekivati na osnovu ponašanja sistema u toku dugog vremenskog intervala prilikom eksterne pobude konstantnog intenziteta γ .

Memorijski efekat implicira da se sistem može nalaziti u dva stanja, kojima odgovara ista gustina ρ , a koja različito evoluiraju tokom dalje pobude istim „intenzitetom vibracija” γ . Ovaj slučaj je ilustrovan na *slici 8.3.2*. Za intenzitete pobude $\gamma = 3/2 (\alpha = 0.6)$ i $11/9 (\alpha = 0.55)$ sistem dostiže gustinu $\rho = 0.5624$ u istom trenutku vremena $t_w = 1.654e + 4$. Razmotrićemo dva slučaja. U prvom slučaju, sistem je evoluiran pomoću dva različita intenziteta pobude, $\gamma_1 = 3/2$ i $\gamma_2 = 11/9$, do navedene gustine ρ_w koju, za oba intenziteta, sistem dostiže u istom trenutku t_w . Nakon dostizanja gustine ρ_w u trenutku t_w , dalja evolucija sistema se vrši samo sa jednim intenzitetom vibracija - onim koji je manji, tj. sa γ_2 . Odgovarajuća vremenska evolucija gustine je prikazana na *slici 8.3.2 (a)*. U drugom slučaju, nakon dostizanja gustine ρ_w u trenutku t_w intenzitet vibracija γ_2 je povećan na vrednost γ_1 (vidi *sliku 8.3.2 (b)*). Napomenimo da na svim prikazanim krivim $\rho(t)$ promena brzine kompaktifikacije tokom prelaznog režima ima suprotan znak od promene intenziteta pobude. *Slike 8.3.2 (a) i 8.3.2 (b)* jasno ilustruju da dva sistema, koja su na različite načine preparirana do određene gustine, pokazuju različito ponašanje ako se na njih nadalje primeni isti intenzitet vibracija. Zato se može tvrditi da gustina sistema nakon perturbacije intenziteta vibracija ne zavisi samo od gustine ρ_w u trenutku promene, već i od prethodno primenjenih protokola pobude.



Slika 8.3.2. Vremenska evolucija gustine sistema koji je kompakfikovan do gustine $\rho_w = 0.5624$ korišćenjem dva različita intenziteta vibracija, $\gamma_1 = 3/2$ ($\alpha_1 = 0.6$) i $\gamma_2 = 11/9$ ($\alpha_2 = 0.55$). Nakon toga, nastavljena je kompakfikacija sistema intenzitetom vibracija (a) $\gamma_2 = 11/9$, i (b) $\gamma_1 = 3/2$. Puna linija predstavlja rezultate simulacije u kojoj postoji promena intenziteta vibracije γ u trenutku $t_w = 1.654e + 4$ i to: (a) $\gamma_1 = 3/2 \rightarrow \gamma_2 = 11/9$, i (b) $\gamma_2 = 11/9 \rightarrow \gamma_1 = 3/2$. Krive koje odgovaraju procesu sa konstantnom vrednošću intenziteta vibracija su takođe prikazane radi poređenja (tačkasta linija). Isprekidane krive su dobijene analitički na osnovu jednačine (8.1.26). One odgovaraju rezultatima za procese pri konstantnoj vrednosti parametra $\gamma_1 = 3/2$ (a), i $\gamma_2 = 11/9$ (b). Evolucija sistema za vremena $t > t_w$ zavisi od njegove „predistorije”, odnosno od načina pobude za vremena $t < t_w$.

9. Optimizacija procesa komaktifikacije

Poznato je da model reverzibilne slučajne i sekvencijalne adsorpcije (RSA, Random Sequential Adsorption) veoma dobro reprodukuje većinu svojstava procesa vibracione komaktifikacije granularnog materijala, kao što su spora relaksacija ka stacionarnom stanju i memorijski efekti (Talbot et al., 2000; Tarjus and Viot, 2004; Budinski-Petković and Vrhovac, 2005; Kolan et al., 1999). Na modelu reverzibilne RSA biće analizirana mogućnost optimizacije procesa komaktifikacije u smislu smanjenja vremena i uložene energije prilikom dostizanja neke unapred zadate gustine.

U ovom poglavlju biće prezentovani rezultati numeričkih simulacija koje opisuju model reverzibilne RSA. Proračuni će biti izvršeni na jednodimenzionalnoj rešetki. Objekti koji se deponuju biće dimeri. Prvo se analizira proces reverzibilne RSA za slučaj konstantne vrednosti verovatnoće desorpcije. Pri tome će biti određena minimalna vremena potrebna da sistem dostigne zadatu gustinu $\theta > \theta_{jam}$. Sa θ_{jam} je označena gustina zagušenja (jamming density) i ona u slučaju RSA dimera na 1D rešetki iznosi $\theta_{jam} = 0.8766$. Mogućnost ubrzanja dinamike procesa reverzibilne RSA biće analizirana korišćenjem raznih načina smanjenja verovatnoće desorpcije u toku vremena. Pomoću numeričkih simulacija biće pokazano da stepenasto ili linearno smanjenje verovatnoće desorpcije u toku određenog vremenskog intervala može biti upotrebljeno za povećanje efikasnosti procesa komaktifikacije. Osim toga, biće razvijen i analiziran samousaglašeni protokol optimizacije procesa depozicije u kome je optimalna vrednost verovatnoće desorpcije P_{des} u nekom trenutku t određena trenutnom vrednošću gustine $\theta(t)$.

Ovaj rad po prvi put pruža detaljniji i dublji uvid u dinamiku depozicionih procesa sa vremenski promenljivim brzinama desorpcije. Prezentovani 1D model na rešetki ne predstavlja realističan mikroskopski model granularnog materijala, ali on veoma uspešno reprodukuje složenu fenomenologiju granularnih materijala. Zato dobijeni rezultati sugerišu da se proces vibracione komaktifikacije može optimizovati korišćenjem vremenski zavisnog intenziteta spoljašne pobude. U poglavlju 9.1 opisani su detalji Monte-Carlo simulacije. Rezultati numeričkih proračuna i diskusija rezultata data je u poglavlju 9.2.

9.1. Opis metoda numeričke simulacije

Monte-Carlo (MC) simulacije adsorpciono-desorpcionih procesa su izvršene na jednodimenzionalnoj (1D) rešetki veličine $L = 10^5$ sa periodičnim graničnim uslovima. Adsorbujući objekti su bili dimeri koji pokrivaju dva susedna čvora rešetke. Pokušaji adsorpcije i desorpcije statistički su nezavisni i sprovode se sekvencijalno sa odgovarajućim verovatnoćama. Vreme t prebrojava broj pokušaja adsorpcije i normirano je na broj čvorova rešetke L . Konačni rezultati su dobijeni usrednjavanjem 100 nezavisnih MC simulacija.

U svakom MC koraku adsorpcija objekta se pokušava sa verovatnoćom P_a , dok se desorpcija pokušava sa verovatnoćom P_{des} . Poznato je da kinetiku adsorpciono-desorpcionih procesa, određene vrste objekata, određuje jedino količnik verovatnoće desorpcije i verovatnoće adsorpcije P_{des}/P_a (Kolan et al., 1999; Lončarević et al., 2009; Ghaskadvi and Dennin, 2000). Kako je u razmatranom slučaju količnik P_{des}/P_a jedini relevantan parametar, to je u svrhu uštede vremena proračuna, pogodno uzeti da je verovatnoća adsorpcije jednaka $P_a = 1$.

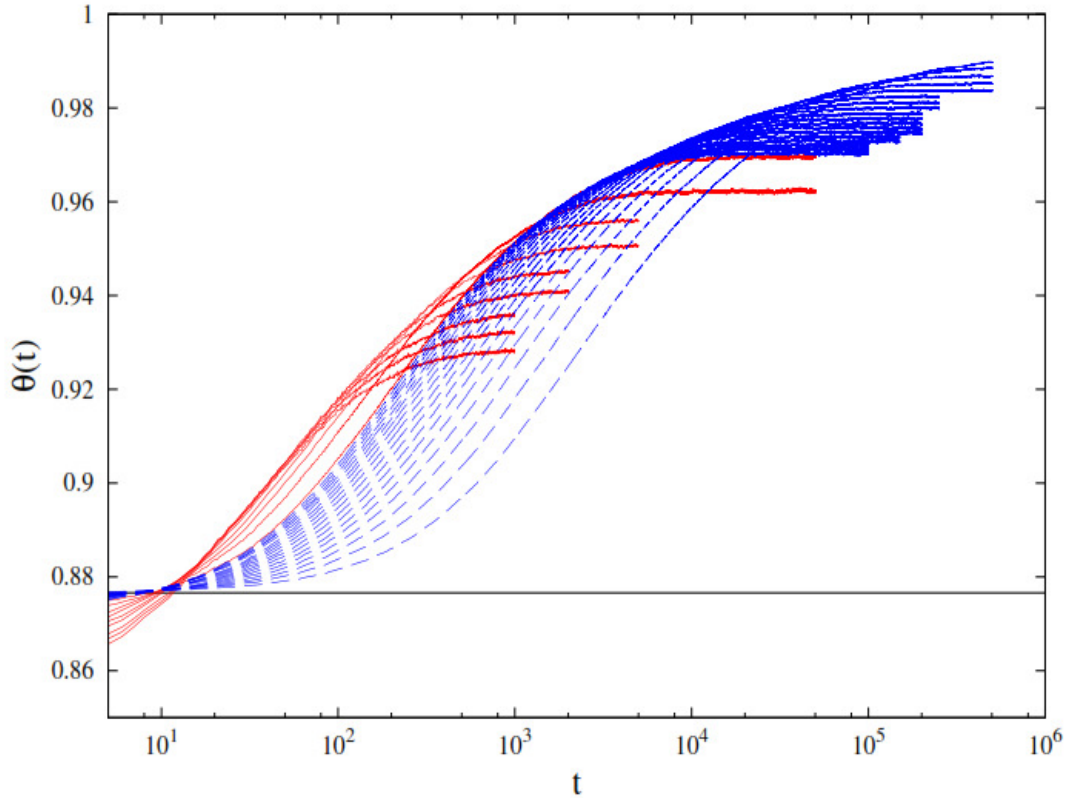
Prilikom svakog pokušaja realizacije adsorpcije ili desorpcije dimera izabira se jedan čvor rešetke na slučajan način. U slučaju adsorpcije, vrši se pokušaj smeštanja dimera na rešetku u slučajno izabranom pravcu i sa početkom u selektovanom čvoru rešetke. Zbog toga se proverava da li je susedni čvor u izabranom pravcu prazan. Ako jeste, vrši se smeštanje dimera. U suprotnom, pokušaj adsorpcije se odbacuje i prelazi se na pokušaj desorpcije. Ukoliko se pokušava realizacija desorpcije dimera ponovo se izabira jedan čvor rešetke na slučajan način. Ako je izabrani čvor zauzet nekim dimerom, vrši se njegovo uklanjanje sa rešetke sa verovatnoćom P_{des} . U suprotnom, pokušaj desorpcije se odbacuje i prelazi se na pokušaj adsorpcije.

Važno je napomenuti da ovde razmatramo slučaj brze adsorpcije i veoma spore desorpcije ($P_{des}/P_a \ll 1$). Tada sistem karakterišu dve vremenske skale koje kontrolišu vremensku evoluciju gustine $\theta(t)$. Tokom prve (početne) etape procesa reverzibilne depozicije dominiraju događaji adsorpcije, tako da kinetika procesa liči na ireverzibilnu adsorpciju. Sa porastom gustine, procesi desorpcije postaju sve bitniji za dalju kinetiku procesa. Rast pokrivenosti rešetke $\theta(t)$ iznad vrednosti gustine zagušenja θ_{jam} je moguć zbog postojanja kolektivnih preraspodela adsorbovanih dimera. Tokom kooperativnih procesa, desorpcijom *jednog* dimera se na rešetki otvara dovoljno

prostora za smeštanje dva nova dimera. Kooperativni procesi se dešavaju na mnogo većim vremenskim skalama tako da je rast pokrivenosti rešetke iznad θ_{jam} veoma spor. U daljem radu izučavano je ponašanje sistema u vremenima nakon dostizanja granice zagušenja θ_{jam} .

9.2. Rezultati

Simulacije adsorpciono-desorpcionih procesa dimera izvršene su u širokom opsegu vrednosti verovatnoće desorpcije $P_{des} = 0.001 - 0.050$. Na slici 9.2.1 prikazana je vremenska zavisnost gustine $\rho(t)$ za različite vrednosti verovatnoće P_{des} .

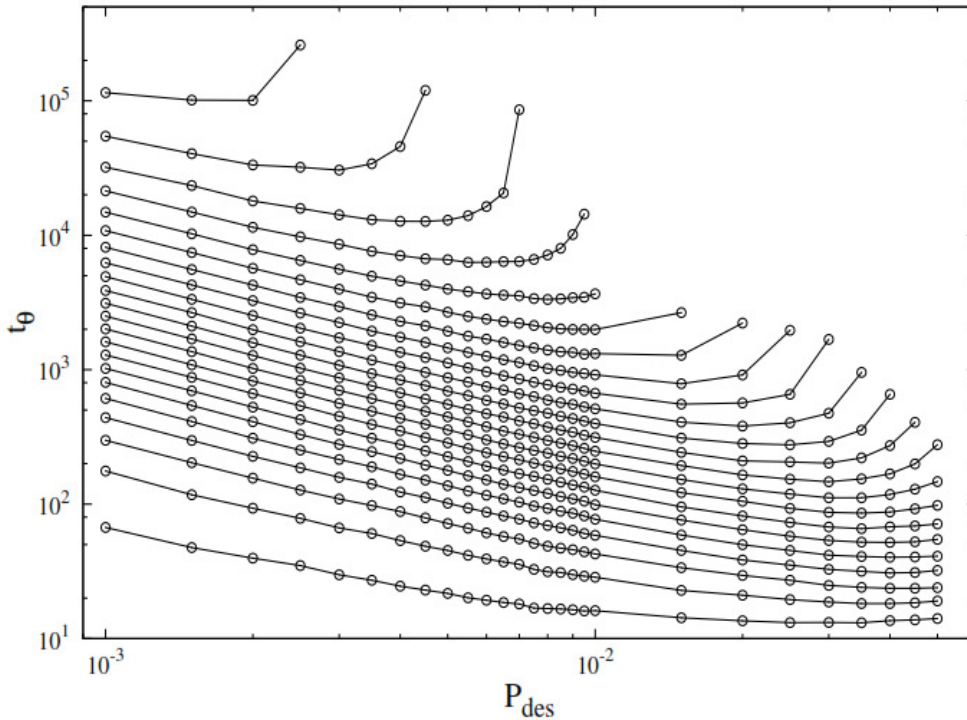


Slika 9.2.1. Zavisnost gustine $\theta(t)$ od vremena za razne vrednosti verovatnoće desorpcije P_{des} . Crvene (pune) linije odgovaraju vrednostima $P_{des} = 0.010 + n \times 0.005$, $n = 0, 1, 2, \dots, 8$. Plave (isprekidane) linije odgovaraju vrednostima $P_{des} = 0.0010 + n \times 0.0005$, $n = 0, 1, 2, \dots, 17$. Ravnotežna pokrivenost θ_{eq} se smanjuje sa povećanjem verovatnoće desorpcije P_{des} . Horizontalna linija predstavlja pokrivenost na granici zagušenja za dimere, $\theta_{jam} = 0.8766$.

Primetno je da se krive $\rho(t)$ koje odgovaraju različitim vrednostima P_{des} uvek presecaju. To znači da za reverzibilni RSA model, gustina nije uvek monotona funkcija od P_{des} . Na primer, na slici 9.2.1 se vidi da se depozicijom sa $P_{des} = 0.030$ dostiže veća pokrivenost rešetke nego sa $P_{des} = 0.010$ u intervalu vremena $15 \lesssim t \lesssim 500$. Nakon $t \approx 500$ pokrivenost je veća za nižu vrednost verovatnoće desorpcije, $P_{des} = 0.010$. Opisani fenomen je već diskutovan u kontekstu reverzibilnog 1D RSA modela

na kontinuumu (PLM, Parking Lot Model) (Talbot et al., 2000). Pokazano je da egzistencija minimuma funkcije verovatnoće umetanja objekta (frakcija supstrata koja je raspoloživa za umetanje novog objekta) je dovoljan uslov za postojanje opisanog fenomena. Odatle sledi da se proces depozicije može načiniti znatno efikasnijim ukoliko se verovatnoća desorpcije P_{des} menja tokom procesa depozicije.

Prvi važan korak je određivanje verovatnoće desorpcije $P_{des}(\theta)$ za koju je vreme potrebno za dostizanje date pokrivenosti $\theta > \theta_{jam}$ minimalno. Na osnovu rezultata prikazanih na slici 9.2.1, analizirana je zavisnost vremena t_θ potrebnog za dostizanje date gustine $\theta > \theta_{jam}$ od verovatnoće desorpcije P_{des} . Rezultati ove analize su sumirani na slici 9.2.2, na kojoj je prikazana zavisnost minimalnog vremena t_θ od verovatnoće desorpcije P_{des} za nekoliko vrednosti pokrivenosti rešetke θ .



Slika 9.2.2. Zavisnost vremena t_θ potrebnog da sistem dostigne datu pokrivenost $\theta > \theta_{jam}$ od verovatnoće desorpcije P_{des} . Od dole - ka vrhu grafika, linije $t_\theta = t_\theta(P_{des})$ odgovaraju gustinama $\theta = 0.880 + n \times 0.005$, $n = 0, 1, 2, \dots, 21$.

Linearan oblik funkcije $t_\theta = t_\theta(P_{des})$ na slici 9.2.2, za dovoljno male vrednosti verovatnoće desorpcije P_{des} , pokazuje da je tada minimalno vreme $t_\theta(P_{des})$ stepena funkcija. Njen oblik je

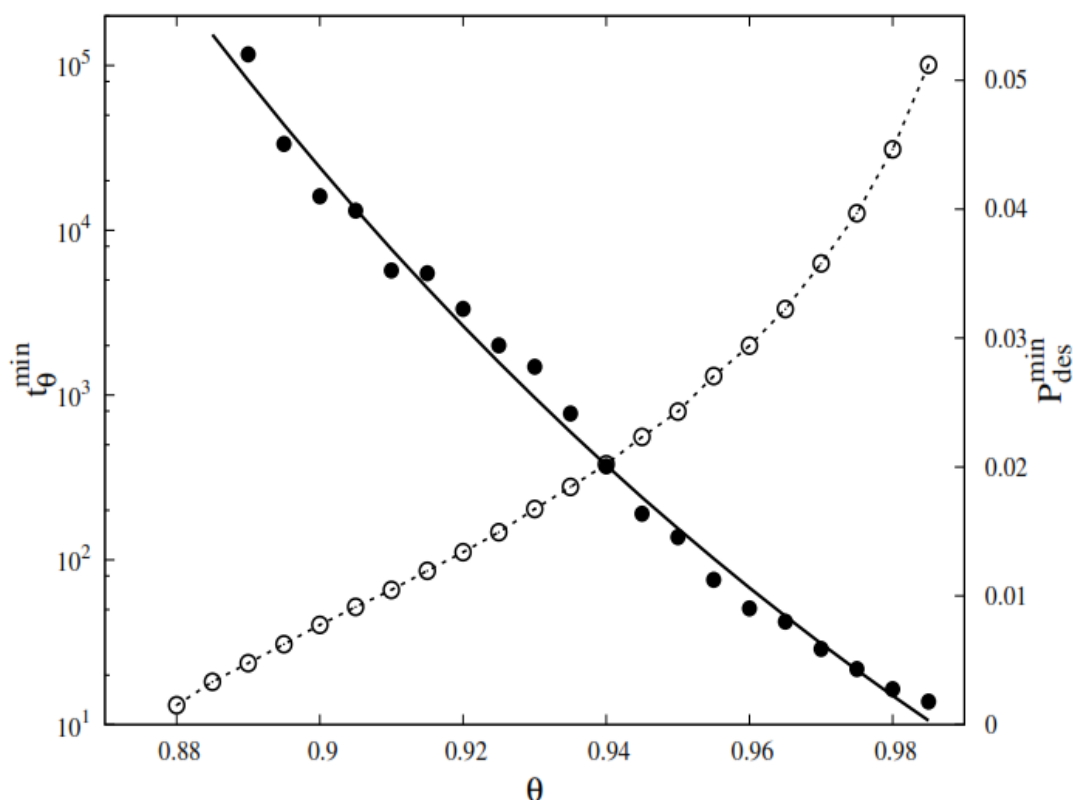
$$t_{\theta}(P_{des}) = A(\theta)P_{des}^{-\gamma}, \quad (9.2.1)$$

pri čemu eksponent γ ima približno konstantnu vrednost, $\gamma = 0.892 \pm 0.005$, za svaku analiziranu pokrivenost rešetke θ . Sa povećanjem pokrivenosti θ , stepena zavisnost minimalnog vremena t_{θ} je ograničena na sve manji i manji opseg vrednosti verovatnoće desorpcije P_{des} . Za svaku analiziranu pokrivenost rešetke $\theta > \theta_{jam}$ primećeno je da kriva $t_{\theta} = t_{\theta}(P_{des})$ nema monoton karakter. Sa porastom P_{des} ona prolazi kroz minimum t_{θ}^{min} , nakon čega teži nekoj konačnoj vrednosti koja odgovara vremenu potrebnom da sistem dostigne datu pokrivenost θ , ali kao ravnotežnu pokrivenost θ_{∞} za neku, u principu uvek poznatu, vrednost verovatnoće desorpcije P_{des} . Vrednosti za ravnotežne pokrivenosti θ_{∞} koje se ostvaruju prilikom reverzibilne RSA dimera na 1D rešetki su date u tabeli 9.2.1.

Tabela 9.2.1. Ravnotežne pokrivenosti rešetke θ_{∞} za razne vrednosti verovatnoće desorpcije P_{des} .

P_{des}	θ_{∞}	P_{des}	θ_{∞}
0.0010	0.9882	0.0080	0.9728
0.0015	0.9876	0.0085	0.9719
0.0020	0.9864	0.0090	0.9710
0.0025	0.9851	0.0095	0.9701
0.0030	0.9836	0.0100	0.9694
0.0035	0.9823	0.0150	0.9622
0.0040	0.9809	0.0200	0.9561
0.0045	0.9798	0.0250	0.9510
0.0050	0.9786	0.0300	0.9453
0.0055	0.9777	0.0350	0.9409
0.0060	0.9765	0.0400	0.9355
0.0065	0.9756	0.0450	0.9319
0.0070	0.9744	0.0500	0.9279
0.0075	0.9738

Slika 9.2.3 pruža mogućnost procene minimalnog vremena t_{θ}^{min} potrebnog sistemu da dostigne datu gustinu $\theta > \theta_{jam}$ tokom procesa reverzibilne RSA sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$. Na istoj slici su prikazane verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$ koje su potrebne da bi sistem dostigao datu gustinu θ u najkraćem vremenskom intervalu t_{θ}^{min} .



Slika 9.2.3. Prikazano je minimalno vreme t_{θ}^{min} (prazni krugovi) potrebno sistemu da dostigne datu pokrivenost θ tokom procesa reverzibilne depozicije sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$. Vrednosti koje odgovaraju punim krugovima očitavaju se na desnoj ordinati. One predstavljaju verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$ za koje sistem dostiže datu gustinu θ za najkraće vreme t_{θ}^{min} . Puna linija (desna ordinata) predstavlja fit eksponencijalnom funkcijom oblika $P_{des}^{min}(\theta) = P_1 + P_2 \exp(-\lambda\theta)$, gde je $P_1 = -5.915 \cdot 10^{-2}$, $P_2 = 32.30$, i $\lambda = 6.393$.

U daljem tekstu, prethodno opisana analiza će biti proširena na depozicione procese tokom kojih se verovatnoća desorpcije P_{des} menja u vremenu. Osnovni ciljevi pomenute generalizacije problema mogu se sažeti u sledeća dva pitanja:

1. Kako vremenska zavisnost verovatnoće desorpcije P_{des} utiče na sporu dinamiku procesa depozicije?
2. Koja je optimalna strategija procesa depozicije? Drugim rečima, kako i zašto razne vremenske zavisnosti verovatnoće P_{des} ubrzavaju, ili usporavaju, porast gustine θ tokom procesa reverzibilne depozicije?

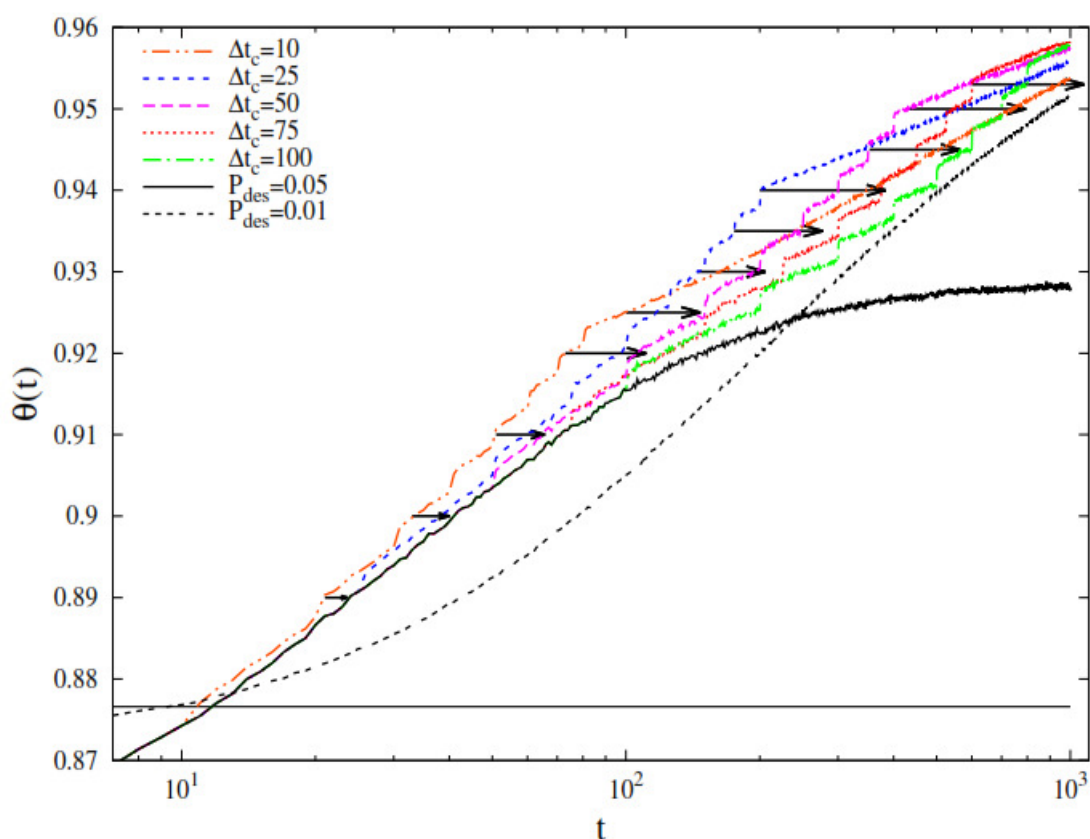
Prethodno definisani pristup može dati neke odgovore na ova pitanja. U narednom poglavlju biće pokazano da vreme koje je potrebno sistemu da dostigne datu gustinu θ može biti redukovano ukoliko se verovatnoća desorpcije P_{des} smanjuje u toku vremena. Biće analizirano nekoliko različitih protokola smanjivanja verovatnoće desorpcije P_{des} u vremenu.

9.2.1. Slučaj stepenaste promene verovatnoće desorpcije P_{des}

U ovom odeljku razmatra se mogućnost da dinamika procesa reverzibilne RSA bude ubrzana smanjivanjem verovatnoće desorpcije na stepenast način. Konkretno, desorpcija se trenutno smanjuje za neku malu vrednost ΔP_{des} po isteku vremenskog intervala date dužine Δt_c . Taj postupak se ponavlja sve dok se verovatnoća desorpcije ne smanji od početne vrednosti $P_{des}^{(I)} = 0.050$, do finalne vrednosti $P_{des}^{(F)} = 0.010$. Izbor početne i krajnje vrednosti verovatnoće desorpcije, veličine perturbacije desorpcije, kao i dužine vremenskog intervala u ovom primeru je proizvoljan.

U MC simulaciji se polazi od prazne rešetke, pri čemu sistem evoluira na fiksnoj vrednosti verovatnoće desorpcije do vrednosti inicijalne pokrivenosti rešetke $\theta^{(I)}$ koja se nalazi iznad granice zagušenja θ_{jam} za razmatrani sistem. Tada počinje proces tokom koga se po isteku svakog intervala vremena date dužine Δt_c verovatnoća desorpcije naglo smanjuje (intervali vremena se jedan za drugim nadovezuju). Nagle promene verovatnoće desorpcije su uvek iznosile $\Delta P_{des} = 0.005$, tako da je finalna verovatnoća desorpcije $P_{des}^{(F)} = 0.010$ dostizana nakon osam naglih promena verovatnoće $P_{des}(t) \rightarrow P_{des}(t) - \Delta P_{des}$. Verovatnoća desorpcije se nakon dostizanja konačne vrednosti $P_{des}^{(F)}$ više ne menja u vremenu.

Na slici 9.2.1.1 je pokazano da se depozicioni proces može načiniti znatno efikasnijim ukoliko se verovatnoća desorpcije P_{des} skokovito smanjuje u vremenu. Ovde je vremenska zavisnost gustine $\theta(t)$ prikazana za nekoliko izabranih vremenskih intervala Δt_c koji postoje između uzastopnih naglih promena verovatnoće desorpcije. Na slici 9.2.1.1 uneto je nekoliko strelica koje su smeštene na određenim vrednostima gustine θ u opsegu $[0.890, 0.955]$. Ove strelice pokazuju koliko je više vremena potrebno sistemu da dostigne zadatu pokrivenost θ u slučaju kada verovatnoća desorpcije ima konstantnu vrednost tokom procesa depozicije (za poređenje, videti sliku 9.2.3). Za gustine iznad $\theta \approx 0.92$ ove razlike su veće od 50%.



Slika 9.2.1.1. Promena gustine $\theta(t)$ u toku vremena kada se verovatnoća desorpcije P_{des} skokovito smanjuje od vrednosti $P_{des}^{(I)} = 0.050$ do vrednosti $P_{des}^{(F)} = 0.010$.

Verovatnoća desorpcije je skokovito smanjivana za fiksnu vrednost $\Delta P_{des} = 0.005$ po isteku vremenskih intervala dužine $\Delta t_c = 10, 25, 50, 75, 100$, kao što je naznačeno u legendi. Vertikalne koordinate strelica su

$\theta = 0.953, 0.950, 0.945, 0.940, 0.935, 0.930, 0.925, 0.920, 0.91, 0.9, 0.89$, od vrha na niže. Strelice pokazuju koliko je više vremena potrebno sistemu da dostigne datu gustinu θ u slučaju kada verovatnoća desorpcije ima konstantnu vrednost $P_{des}^{min}(\theta)$ (radi poređenja videti sliku 9.2.3). Horizontalna linija predstavlja pokrivenost na granici zagušenja za dimere, $\theta_{jam} = 0.8766$.

Interpretacija ovih rezultata je sasvim očigledna na osnovu rezultata ranijih istraživanja reverzibilne depozicije (Talbot et al., 2000; Budinski-Petković and Vrhovac, 2005; Talbot et al., 2001; Talbot et al., 1999). U određenom trenutku vremena, t_0 , verovatnoća desorpcije se menja od vrednosti P_{des}^1 na neku manju vrednost $P_{des}^2 = P_{des}^1 - \Delta P_{des}$. U slučaju kada je $P_{des}^1 > P_{des}^2$, primećujemo da se brzina

kompaktifikacije (tj. brzina kojom se popunjava rešetka) povećava u toku veoma kratkog vremenskog intervala (*slika 9.2.1.1*). Napomenimo da se u slučaju $P_{des}^1 < P_{des}^2 = P_{des}^1 + \Delta P_{des}$ dešava efekat suprotan prethodno opisanom; u kratkom vremenskom intervalu nakon perturbacije desorpcije, gustina sistema brzo opada (Talbot et al., 2000; Budinski-Petković and Vrhovac, 2005). Brzina kompaktifikacije neposredno pre trenutka t_0 (tj. u trenutku $t_0 - 0$) je određena verovatnoćom desorpcije $P_{des}(t_0 - 0)$ i onim delom supstrata, $\Phi(t_0 - 0)$, koji je raspoloživ za umetanje nove čestice. Veličina $\Phi(t_0 - 0)$ (verovatnoća umetanja objekta) veoma zavisi od stanja sistema u trenutku $t_0 - 0$, ali ona nije jednoznačno određena gustinom sistema $\theta(t_0 - 0)$ u tom vremenskom trenutku (Talbot et al., 2000; Budinski-Petković and Vrhovac, 2005). Ako se verovatnoća desorpcije P_{des} naglo smanji, prvi efekat koji dolazi do izražaja je da sistem favorizovanom adsorpcijom objekata brzo teži da smanji deo supstrata koji je slobodan za depoziciju nekog novog objekta. Na taj način sistem brzo i u kratkom vremenskom intervalu uvećava svoju gustinu, tj. postaje kompaktniji. Zbog toga se brzina kompaktifikacije prvo uvećava u odnosu na neperturbovani slučaj. Za veća vremena, kompaktifikacija se usporava stvaranjem gušćeg depozita i smanjenjem slobodne oblasti na rešetki koja je na raspolaganju za umetanje nove čestice.

9.2.2. Slučaj linearne promene verovatnoće desorpcije P_{des}

Ukoliko se uporede relaksacije pokrivenosti rešetke koje nastaju prilikom različitih skokovitih promena verovatnoće desorpcije, vidi se da je brzina i amplituda naglog porasta pokrivenosti veća ukoliko je veća perturbacija verovatnoće desorpcije (Budinski-Petković and Vrhovac, 2005). Međutim, važno je razmotriti slučaj kada se verovatnoća desorpcije kontinualno menja u određenom vremenskom intervalu. U ovom poglavlju biće pokazano da linearan pad verovatnoće desorpcije tokom nekog vremenskog intervala može biti korišćen za ubrzavanje depozicionog procesa.

Procedura koja se ovde koristi veoma je slična protokolu koji je opisan u prethodnom poglavlju 9.2.1; razlika je u tome što „kontinualna” promena verovatnoće desorpcije predstavlja niz veoma malih promena verovatnoće koje se dešavaju nakon svakog vremenskog MC koraka u simulaciji. Prema tome, sistem prvo evoluira na fiksnoj vrednosti verovatnoće desorpcije P_{des}^1 do trenutka $t_1 = 12$ oko koga se seku sve krive relaksacije i koji odgovara pokrivenosti $\theta^{(1)} \approx 0.8783 > \theta_{jam}$ (videti sliku 9.2.1). U trenutku $t = 12$ verovatnoća desorpcije počinje da se linearno smanjuje na sledeći način:

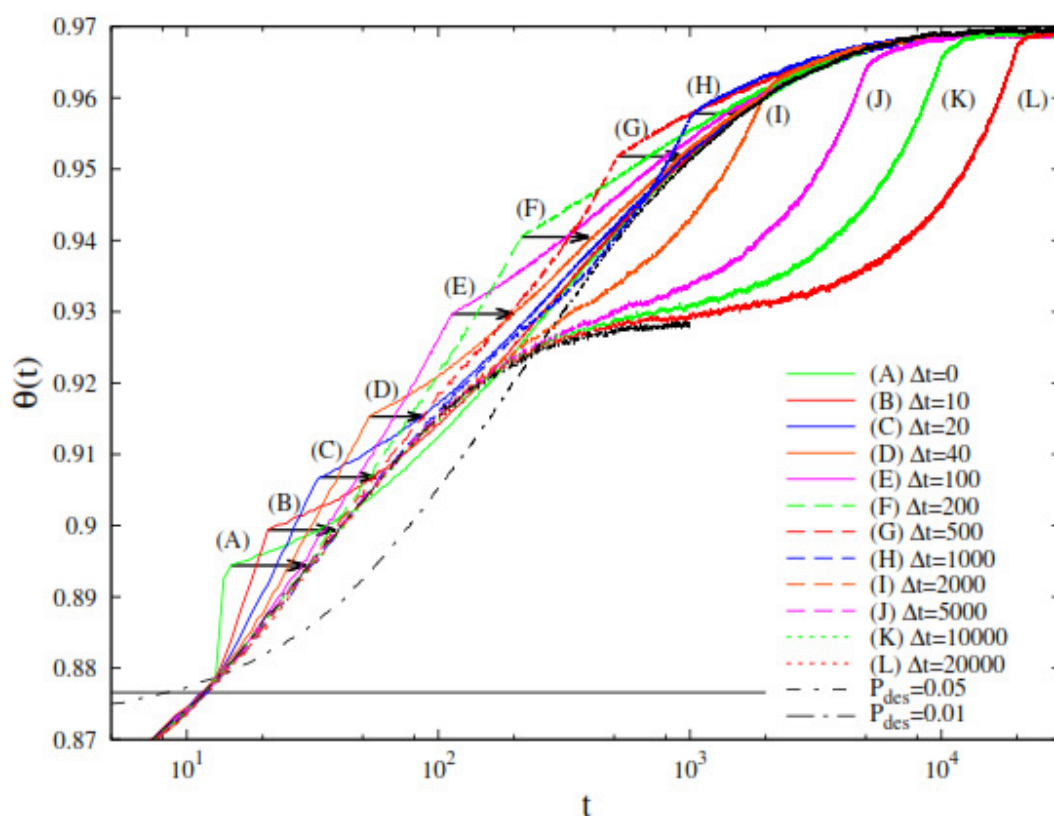
$$P_{des}(t) = K(t - t_1) + P_{des}^{(1)}, \quad (9.2.2.1)$$

pri čemu je $t_1 < t < t_2$. Finalna verovatnoća desorpcije $P_{des}^{(2)}$ dostiže se tokom vremenskog intervala $\Delta t = t_2 - t_1$, tako da negativni koeficijent nagiba prave (9.2.2.1)

$$K = -\left(P_{des}^{(1)} - P_{des}^{(2)}\right) / (t_2 - t_1) = -\Delta P_{des} / \Delta t, \quad (9.2.2.2)$$

zavisi od veličine vremenskog intervala Δt .

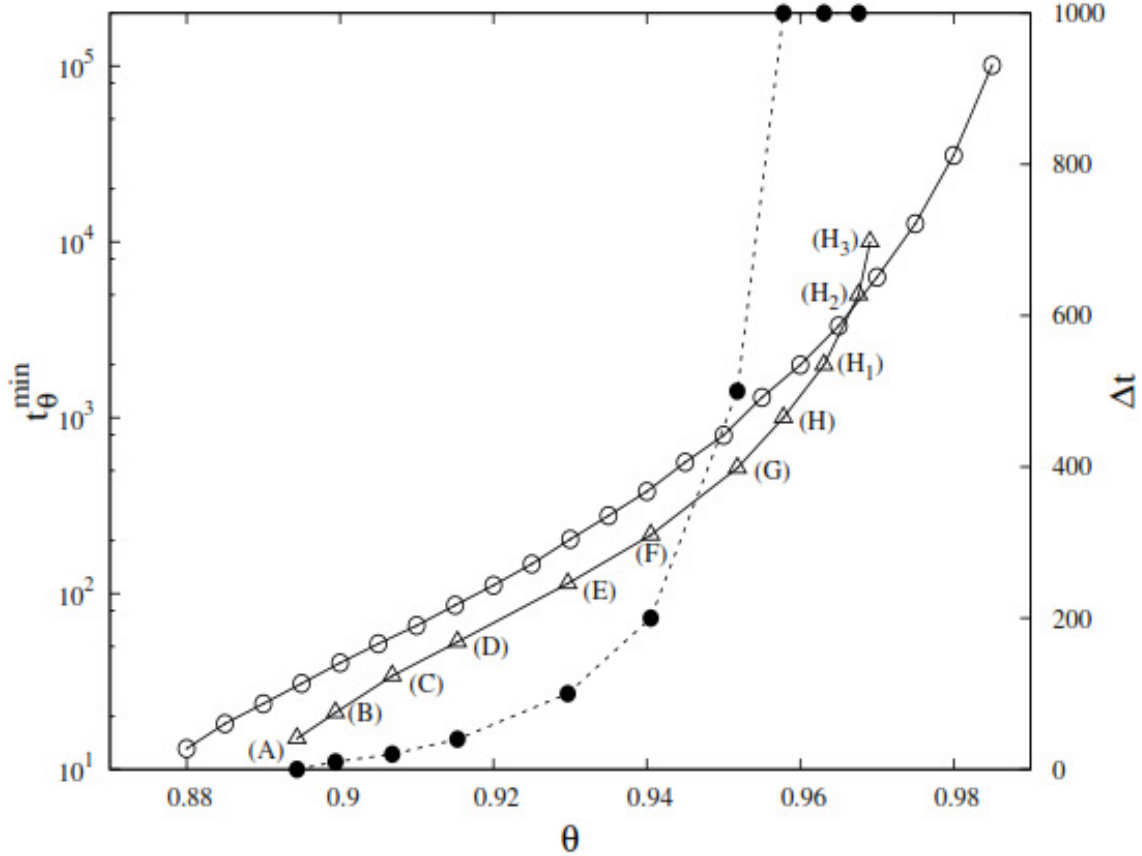
Na slici 9.2.2.1 prikazana je vremenska zavisnost gustine $\theta(t)$ za fiksne vrednosti verovatnoća $P_{des}^{(1)} = 0.050$ i $P_{des}^{(2)} = 0.010$, ali za različite vremenske intervale $\Delta t = 0, 10, 20, 40, 100, 200, 500, 10^3, 2 \times 10^3, 5 \times 10^3, 10^4, 2 \times 10^4$. Nekoliko horizontalnih strelica je postavljeno na određenim vrednostima pokrivenosti rešetke kao ilustracija koliko je više vremena potrebno za dostizanje date gustine θ u slučaju kada verovatnoća desorpcije ima konstantnu vrednost $P_{des}^{min}(\theta)$ (radi poređenja videti sliku 9.2.3).



Slika 9.2.2.1. Promena gustine $\theta(t)$ u toku vremena kada se verovatnoća desorpcije P_{des} linearno smanjuje (jednačina (9.2.2.1)) u toku vremena, od $P_{des}^{(I)} = 0.050$ do $P_{des}^{(F)} = 0.010$. Pri tome, finalna verovatnoća $P_{des}^{(2)}$ se dostiže tokom vremenskih intervala Δt koji su naznačeni u legendi. Krive (A) – (L) odgovaraju procesima za različite vremenske intervale Δt koji se nalaze u opsegu od 0 do 2×10^4 . Vertikalne koordinate strelica su $\theta = 0.9578(H), 0.9518(G), 0.9405(F), 0.9297(E), 0.9153(D), 0.9068(C), 0.8994(B), 0.8944(A)$, od vrha na dole. Strelice prikazuju koliko je više vremena potrebno za dostizanje date gustine θ u slučaju kada verovatnoća desorpcije ima konstantnu vrednost $P_{des}^{min}(\theta)$ (radi poređenja videti sliku 9.2.3). Horizontalna linija predstavlja pokrivenost na granici zagušenja za dimere, $\theta_{jam} = 0.8766$.

Polazne tačke horizontalnih vektora na slici 9.2.2.1 su smeštene u tačkama (A) – (H), kada prestaje linearna promena verovatnoće desorpcije $P_{des}(t)$. Obvojnica (envelopa) koja sadrži tačke (A) – (H) određuje minimalna vremena t_{θ}^{min} koja su sistemu potrebna za dostizanje datih pokrivenosti θ , pod uslovom da se verovatnoća $P_{des}(t)$ linearno smanjuje u vremenu. Ova minimalna vremena t_{θ}^{min} su prikazana na

slici 9.2.2.2 za slučaj reverzibilne RSA sa linearnim padom verovatnoće desorpcije, od vrednosti $P_{des}^{(1)} = 0.050$ do vrednosti $P_{des}^{(2)} = 0.010$, tokom različitih vremenskih intervala Δt .



Slika 9.2.2.2. Prikazana su minimalna vremena t_{θ}^{min} (prazni trouglovi) potrebna za dostizanje datih pokrivenosti θ tokom procesa reverzibilne depozicije sa linearnim padom verovatnoće desorpcije P_{des} , od $P_{des}^{(1)} = 0.050$ do $P_{des}^{(2)} = 0.010$, tokom vremenskog intervala Δt . Puni krugovi (desna ordinata) daju dužine vremenskih intervala Δt kojima odgovaraju gustine u tačkama (A) – (H), (H₁), (H₂), i (H₃). Radi poređenja, prazni krugovi odgovaraju minimalnom vremenu t_{θ}^{min} potrebnom za dostizanje date gustine θ tokom procesa reverzibilne depozicije sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$ (radi poređenja videti sliku 9.2.3).

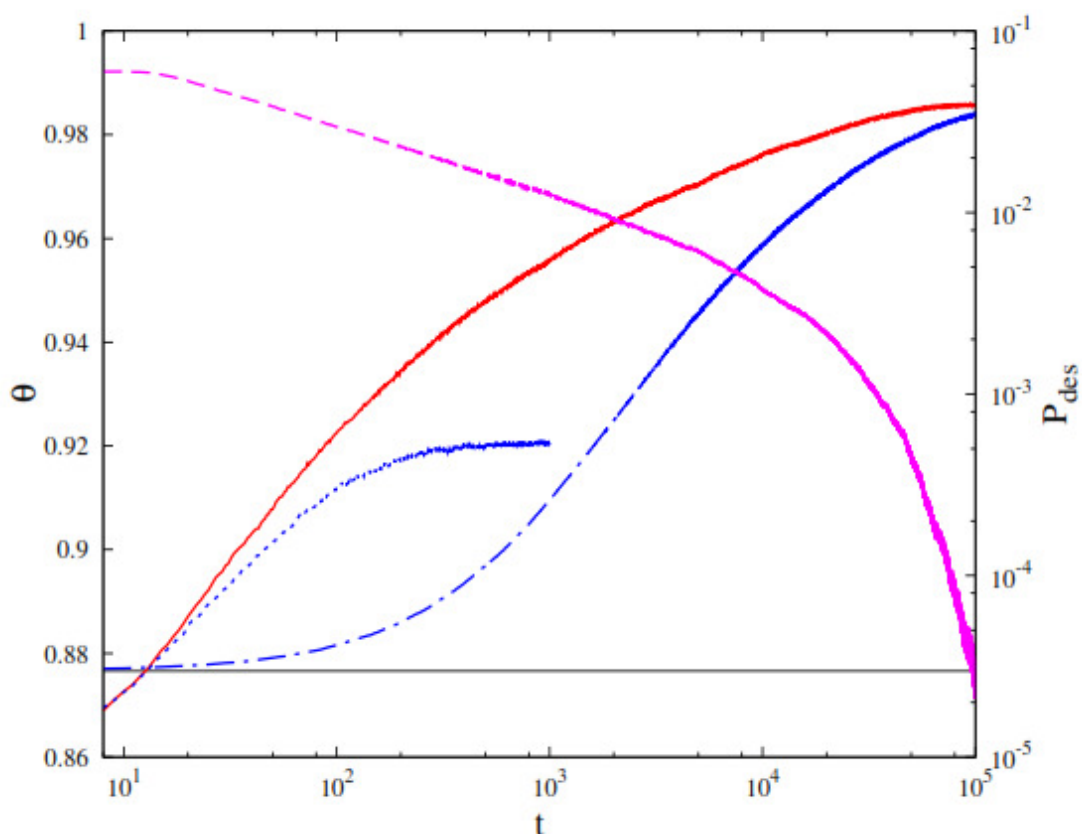
Slika 9.2.2.2 takođe ilustruje da proces dostizanja pokrivenosti koje su bliske stacionarnoj pokrivenosti $\theta_{\infty}(P_{des}^{(2)}) \approx 0.97$ nije moguće značajno ubrzati samo linearnim smanjivanjem verovatnoće desorpcije. Drugim rečima, vreme koje je

potrebno sistemu da dostigne pokrivenosti veće od $\theta(H) \approx 0.9578$, ne može biti dalje redukovano povećavanjem vremenskog intervala Δt (videti *sliku 9.2.2.2*).

9.2.3. Slučaj promene verovatnoće desorpcije P_{des} koja je kontrolisana gustinom

U ovom poglavlju biće uveden novi protokol za proces reverzibilne depozicije koji optimizuje taj proces. Pri tome se unapred ne zadaje nikakva vremenska zavisnost verovatnoće desorpcije P_{des} od vremena, već je verovatnoća P_{des} određena trenutno dostignutom vrednošću gustine $\theta(t)$ tokom procesa. U slučaju depozicije sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije, određene su verovatnoće $P_{des}^{min}(\theta)$ potrebne za dostizanje date gustine $\theta > \theta_{jam}$ za najkraće vreme t_{θ}^{min} . Ovi rezultati su prikazani na slici 9.2.3, gde je punom linijom prikazan fit eksponencijalnom funkcijom oblika $P_{des}^{min}(\theta) = P_1 + P_2 \exp(-\lambda\theta)$, gde je $P_1 = -5.915 \times 10^{-2}$, $P_2 = 32.30$ i $\lambda = 6.393$. Novi protokol, kao i ranije, prvo podrazumeva dostizanje inicijalne gustine $\theta^{(I)}$, koja se nalazi neposredno iznad granice zagušenja θ_{jam} , pomoću procesa depozicije sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije. Od tog trenutka, verovatnoća desorpcije P_{des} se samousaglašeno redukuje tokom procesa, u saglasnosti sa eksponencijalnom zavisnošću optimalne verovatnoće $P_{des}^{min}(\theta)$ od gustine θ (vidi sliku 9.2.3). Tokom opisanog postupka moguće je numerički odrediti unapred nepoznatu vremensku zavisnost verovatnoće desorpcije $P_{des}(t)$.

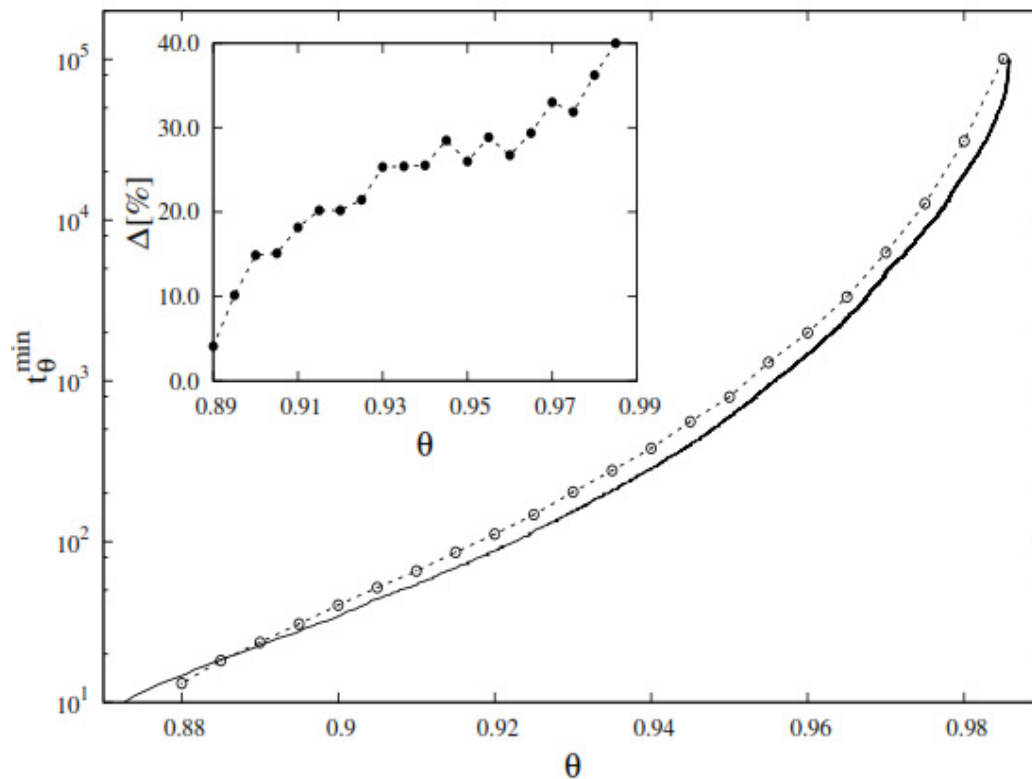
Monte-Carlo simulacije koje odgovaraju prethodno opisanom protokolu depozicije izvršene su za inicijalnu verovatnoću desorpcije jednaku $P_{des} = 0.060$. Na slici 9.2.3.1 prikazana je vremenska zavisnost pokrivenosti $\theta(t)$ za vremena $t < 10^5$. Radi poređenja, na istoj slici su prikazane vremenske zavisnosti pokrivenosti rešetke $\theta(t)$ za slučaj dve fiksne vrednosti verovatnoće, $P_{des} = 0.060, 0.001$. Važno je primetiti da je rast pokrivenosti tokom procesa depozicije, koji koristi novi protokol za određivanje verovatnoće desorpcije, znatno brži nego rast koji se ostvaruje tokom procesa sa nepromenljivom vrednošću verovatnoće desorpcije. Osim toga, očigledno je da je rast pokrivenosti mnogo brži na početku procesa. Na istoj slici, vremenska zavisnost odgovarajuće verovatnoće desorpcije P_{des} je prikazana na log-log skali. U početnoj fazi procesa, verovatnoća desorpcije se algebarski smanjuje u toku vremena. Međutim, tokom kasne faze procesa promene verovatnoće desorpcije postaju veoma male.



Slika 9.2.3.1. Prikazana je vremenska zavisnost pokrivenosti rešetke θ u slučaju kada je verovatnoća desorpcije kontrolisana dostignutom gustinom $P_{des}(t) = P_{des}^{min}(\theta(t))$ (crvena, puna linija, leva ordinata). Zavisnost verovatnoće $P_{des}^{min}(\theta)$ od gustine θ je prikazana na slici 9.2.3. Tačka-tačka i crta-tačka linije (plave boje) predstavljaju rezultate dobijene za $P_{des} = 0.060$ i 0.001 , respektivno. Isprekidana linija (ružičasta, desna ordinata) predstavlja numerički dobijenu vremensku zavisnost verovatnoće desorpcije $P_{des}(t)$. Horizontalna linija predstavlja pokrivenost na granici zagušenja za dimere, $\theta_{jam} = 0.8766$.

Radi poređenja, na slici 9.2.3.2 zajedno su prikazane vrednosti vremena koja su potrebna za dostizanje date gustine $\theta > \theta_{jam}$ u slučaju primene prethodno opisanog protokola, i u slučaju reverzibilnog RSA procesa sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$. Novi protokol značajno ubrzava proces dostizanja velikih pokrivenosti, što predstavlja osnovni cilj ovog istraživanja. U poglavlju 9.2.2 je naglašeno da nije moguće proces dostizanja velikih pokrivenosti $\theta \gtrsim 0.97$ ubrzati linearnim smanjivanjem verovatnoće desorpcije. Korišćenjem opisanog protokola desorpcije, moguće je vreme potrebno sistemu za dostizanje velikih pokrivenosti θ u

opsegu (0.965, 0.985) redukovati za 29% – 40%; za pokrivenosti $\theta \in (0.93, 0.96)$, ta vremena se redukuju za 25% (videti umetak na slici 9.2.3.2).



Slika 9.2.3.2. Puna linija predstavlja vreme potrebno za dostizanje date gustine $\theta > \theta_{jam}$ u slučaju depozicionog procesa tokom koga je verovatnoća desorpcije $P_{des}(t) = P_{des}^{min}(\theta(t))$ kontrolisana vrednošću dostignute gustine $\theta(t)$ (videti sliku 9.2.3.1). Radi poređenja prikazano je minimalno vreme t_{θ}^{min} (prazni krugovi) potrebno sistemu da dostigne datu gustinu θ u slučaju reverzibilne RSA sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije $P_{des}^{min}(\theta)$ (videti sliku 9.2.3). Novi protokol ubrzava depozicioni proces, a odgovarajuće relativno umanjeње Δ vremena potrebnog za dostizanje gustine θ je prikazano u umetku slike.

10. Zaključak

U ovom radu je razmatrano nekoliko važnih aspekata procesa kompaktifikacije granularnog materijala pod uticajem vertikalnih vibracija. Težište analize je bilo na izučavanju „mikrostrukturalnih” promena granularnog pakovanja tokom procesa kompaktifikacije. Proučavanje je izvršeno korišćenjem numeričkih simulacija, modelnih sistema i eksperimenata. Eksperimentom je potvrđena valjanost numeričkih simulacija, dok je razvojem frakcionog modela kompaktifikacije dovedena u vezu dinamika procesa sa promenama strukture granularnog pakovanja. Stečena saznanja su omogućila da se po prvi put analizira mogućnost optimizacije procesa kompaktifikacije, što predstavlja bitan iskorak ka problemima koji su veoma važni u tehnološkin primenama.

U radu je pokazano da numeričke simulacije procesa vibracione kompaktifikacije mogu korektno reprodukovati dinamiku procesa i dati uvid u evoluciju strukture pakovanja tokom procesa zgušnjavanja granularnog materijala. Većina ranijih modela procesa kompaktifikacije je bila bazirana isključivo na idejama vezanim za geometrijsku frustraciju i ponašanje slobodne zapremine. Međutim, u ovom radu je numerički model baziran na realnoj dinamici konstituenata. Na primer, tokom druge faze vibracionog ciklusa (faza depozicije) finalno pakovanje je kreirano putem molekularnodinamičkog algoritma. Pri tome je korišćen Walton-ov model interakcije (Walton and Braun, 1986; Herbst et al., 2000) koji vodi računa o materijalnim svojstvima granula, kao što su viskoelastična restitucija granula i frikcione karakteristike njihove površine.

Vremenska zavisnost gustine granularnog pakovanja je fitovana Mittag-Lefflerovom funkcijom (4.1). Dobijeni rezultati su pokazali da dinamika kompaktifikacije veoma zavisi od materijalnih svojstava granula. Pokazano je da se brzina relaksacije sistema znatno usporava sa porastom njihove neelastičnosti. Osim toga, parametar τ_r koji određuje vremensku skalu relaksacionog procesa (vidi jednačinu (4.1)) brzo opada sa porastom intenziteta vibracione pobude Γ .

Važno je napomenuti da prethodno opisano ponašanje karakterističnog vremena relaksacije τ_r ima nekih sličnosti sa dinamikom reverzibilne depozicije složenih objekata na 2D rešetki (Budinski-Petković et al., 2005). Zapravo, simetrijska svojstva složenih objekata u RSA modelu mogu se korelisati sa disipativnim svojstvima granula

u MD simulaciji procesa kompaktifikacije. U oba modela su za usporavanje dinamike procesa kompaktifikacije odgovorne karakteristike samih objekata. Zaista, za brzinu rasta gustine iznad granice zagušenja u procesu reverzibilne RSA odgovorni su višečestični događaji. Sa rastom reda rotacione simetrije objekta povećava se učestalost jednočestičnih readsorpcija objekata na rešetki (Budinski-Petković et al., 2005). Time se uvećava srednje vreme koje protekne između dva uzastopna dvočestična događaja, što direktno usporava rast pokrivenosti rešetke. Ovom analogijom se otvara mogućnost implementacije materijalnih svojstava granularnog materijala u reverzibilni RSA model kompaktifikacije kroz simetrijska svojstva složenih objekata.

U predstavljenom numeričkom modelu, na dinamiku relaksacije tokom druge faze vibracionog ciklusa (depozicije pakovanja) utiču promene koeficijenta normalne restitucije ε i trenja μ koje direktno menjaju brzinu kojom se kinetička energija disipira u sistemu. Zato se u slučaju veoma disipativnih granula sistem brzo zaustavlja i formira statično pakovanje male gustine. Povećanjem površinskog trenja i neelastičnosti granula favorizuje se formiranje lukova i mostova, odnosno šupljina, unutar pakovanja. Rezultat ovih procesa, na prostornim skalama veličine granula, je formiranje pakovanja manje gustine.

Organizacija granula na lokalnom nivou je prvo proučavana pomoću analize vremenske evolucije brojeva povezanosti (koneksnosti) $\langle N_c^{(p)} \rangle$. Primećeno je da se tokom kompaktifikacije brojevi povezanosti menjaju na različite načine u zavisnosti od njihovog reda (p). Registrovane promene su direktno dovedene u vezu sa formiranjem kooperativnih struktura, kao što su lukovi ili mostovi. Potvrđeno je da je obrazovanje navedenih struktura povezano sa redukovanjem međučestičnih kontakata, odnosno sa povećanjem brojeva koneksnosti nižeg reda. Osim toga, primećeno je da kolektivne preraspodele granula u 2D pakovanju uvek vode ka brzom rastu domena sa heksagonalnom uređenošću (Lumay and Vandewalle, 2005).

Reorganizacija granula tokom procesa kompaktifikacije je izučavana praćenjem promena oblika distribucije šupljina (pora) unutar granularnog pakovanja. Važno je napomenuti da je ova distribucija senzitivna na male strukturne promene sistema. Delaunay-ove „slobodne” zapremine (pore) imaju asimetričnu distribuciju sa izraženim „repom” na desnoj strani. Rep raspodele se postupno redukuje sa porastom gustine pakovanja tokom procesa kompaktifikacije. Funkcija raspodele pora ima dva izražena

lokalna maksimuma koji ukazuju na dominantno prisustvo lokalnih konfiguracija sa heksagonalnom i kvadratnom simetrijom.

Mikrostrukturne promene granularnog pakovanja tokom procesa kompaktifikacije su proučavane analizom faktora oblika ζ Voronoï-evih poligona (jednačina (5.4.1)). Faktor oblika ζ je bezdimenziona mera odstupanja Voronoï-eve ćelije od kružnog (sfernog, u 3D) oblika. Oblik Voronoï-eve ćelije, a samim tim i njena cirkularnost je u direktnoj vezi sa geometrijskom strukturom najbližeg okruženja svake granule. Zato faktor oblika pruža jasnu sliku o raspodeli manje i više uređenih domena unutar pakovanja. Raspored domena različite uređenosti vizuelizovan je korišćenjem distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ faktora oblika ζ . Pokazano je da je distribucija $P(\zeta)$ veoma senzitivna na male strukturne promene pakovanja. Sužavanje distribucije $P(\zeta)$ odgovara povećanju udela Voronoï-evih ćelija veoma pravilnog oblika. To je u saglasnosti sa poznatom činjenicom da se u 2D diskovi veoma lako i efikasno organizuju između sebe formirajući velike domene heksagonalne uređenosti. Ovi heksagonalni domeni su uvek jasno razgraničeni uskim i izduženim regionima niže uređenosti. Skorašnji eksperimenti su pokazali da prethodno opisani tip strukturne organizacije može da se dešava u kvazi-dvodimenzionalnim fluidiziranim sistemima tvrdih sfera (Berardi et al., 2010) kod kojih su domeni kristalne uređenosti razdvojeni uskim graničnim oblastima znatno veće razuređenosti.

Distribucija verovatnoće $P(\zeta)$ je takođe zavisna od materijalnih svojstava granula. Slaganja između rezultata simulacija i izvršenog eksperimenta su dobijena samo u slučaju manje disipativnih granula (tzv. diskova tipa (B)). Ovaj rezultat je u skladu sa činjenicom da su vrednosti za materijalne parametre ε_0, μ , i v_0 , koji karakterišu koliziona svojstva diskova tipa (B), izabrane tako da opisuju veoma tvrde metalne diskove kakvi su korišćeni u eksperimentu. Eksperimentom je potvrđeno da numerička simulacija korektno reprodukuje strukturu granularnog pakovanja, što se jasno videlo na poređenju eksperimentalno i numerički dobijenih distribucija faktora oblika $P(\zeta)$. Ovim je opravdana ideja da ovom numeričkom simulacijom mogu biti uspešno analizirane fine mikrostrukturne promene do kojih dolazi tokom procesa vibracione kompaktifikacije.

Posebna pažnja je posvećena izučavanju odgovora granularnog sistema na trenutnu promenu intenziteta vibracija kojim se pobuđuje. Rezultati dobijeni u

numeričkim simulacijama se kvalitativno slažu sa opažanjima u eksperimentima koji se bave memorijskim efektima (Josserand at al., 2000). Tokom procesa kompaktifikacije, odgovor sistema na naglu promenu intenziteta vibracija je suprotan od ponašanja koje bi očekivali na osnovu znanja o dinamici procesa prilikom konstantne pobude. Osim toga, promena brzine kompaktifikacije tokom veoma kratkog prelaznog režima ima suprotan znak od promene intenziteta pobude. Numeričkim eksperimentom je pokazano da granularna pakovanja, koja su istu gustinu dostigla putem različitih protokola kompaktifikacije, imaju različite distribucije slobodne zapremine i zato različito reaguju na promenu (izjednačavanje) intenziteta spoljašnje pobude. Ovim numeričkim eksperimentima je potvrđeno da globalna gustina sistema nije dovoljna za potpun opis statičnog pakovanja, zato što evolucija gustine pakovanja u budućnosti ne zavisi samo od njene inicijalne vrednosti, već i od sveukupne predistorije pobude. Kvalitativno, opisani efekat odlikava heterogenost sistema. Zaista, fiksiranjem svih makroskopskih parametara (tj. gustine i intenziteta vibracija) ne sprečava se postojanje lokalnih fluktuacija koje mogu čuvati informaciju o prošlosti sistema. Na kraju, pokazano je da pakovanja jednake gustine, koja su formirana na različite načine, imaju različite distribucije faktora oblika $P(\zeta)$. Zbog toga pakovanja kompaktifikovana do iste gustine putem različitih procedura, različito reaguju na promenu intenziteta pobude. Ova činjenica kvalifikuje distribuciju $P(\zeta)$ za dodatnu veličinu kojom bi jednoznačno bilo okarakterisano makrostanje granularnog sistema date gustine.

U radu je pokazano da Mittag-Leffler-ov zakon (4.1) veoma dobro opisuje relaksaciju granularnog materijala tokom procesa vibracione kompaktifikacije (Arsenović at al., 2006; Vargas and McCarthy, 2007; Divoux at al., 2008; Mueggenburg, 2012). Osnovni cilj razvoja frakcionog kinetičkog modela kompaktifikacije je bio demonstracija da jednačna (4.1) nije samo jedan pogodan analitički izraz kojim se sa četiri parametra fituje vremenska zavisnost gustine $\rho(t)$, već da ima dublje fizičko značenje koje je povezano sa mikrostrukturnim promenama koje se dešavaju tokom procesa kompaktifikacije. Analiza koja je sprovedena je pokazala da kretanje granula tokom procesa kompaktifikacije nije difuziono (u smislu normalne difuzije), nego subdifuzivno, uz očekivano prisustvo efekta „kaveza” kao prelaznog fenomena. Promene već oformljenih kaveza iziskuju prisustvo kompleksnih kooperativnih procesa povezanih sa transformacijama mreže sila (Pouliquen at al.,

2003; Marty and Dauchot, 2005). Ovakve karakteristike kretanja pojedinih granula mogu se dovesti u vezu sa nemarkovskom prirodom stohastičkih procesa prisutnih u granularnom pakovanju izloženom eksternim pobudama. Zbog toga je model baziran na specifičnim svojstvima stohastičkih procesa frakcionog tipa koji adekvatno odslikavaju mikrostrukturalne transformacije granularnog pakovanja tokom procesa vibracione kompaktifikacije.

U ovom radu je razvijen 1D model kompaktifikacije sa ciljem da što bolje oponaša sporu relaksaciju gustine i memorijske efekte. Pri tome se evolucija sistema sa ukupno dva dozvoljena stanja modeluje kao frakcioni stohastički proces. Ovaj opšti probabilistički formalizam tretira kompaktifikaciju granularnog sistema tako što ne vodi računa o tačnoj prirodi lokalnih interakcija. Shodno tome, ulogu interakcija u modelu zamenjuje odgovarajuća distribucija verovatnoće vremena čekanja između dva pokušaja promene stanja. Stohastičnost vremena u modelu ima jasnu fizičku interpretaciju: granule interaguju sa razuređenom okolinom u trenucima vremena koji su sasvim slučajni. Ovi trenuci, iako su slučajni, distribuirani su u skladu sa nekom α -stabilnom distribucijom vremena čekanja. Važno je napomenuti da nije bitan njen tačan analitički oblik, već njena pripadnost strogom domenu atrakcija neke α -stabilne distribucije ($0 < \alpha < 1$). Ovo je jedan od bitnih postulata u modelu kojim se u njega uvodi memorija kao bitno svojstvo procesa koji se modeluje.

Model je reprodukovao sve bitne karakteristike procesa kompaktifikacije pod uticajem vibracione pobude. Izveden je empirijski zakon relaksacije gustine (jednačina (8.1.26)) i za njega je dobijena odgovarajuća makroskopska jednačina (jednačina (8.1.24)). Pokazano je da zavisnost generalizovanog vremena relaksacije τ_r od intenziteta spoljašnje pobude može biti opisana Arrhenius-ovim zakonom (8.2.6).

Valjanost opisanog stohastičkog pristupa je proverena na primeru nagle promene intenziteta pobude. Potvrđeno je da gustina sistema nije dovoljna za potpun opis makroskopskog stanja u kojem se nalazi granularno pakovanje, jer evolucija gustine u neposrednoj budućnosti ne zavisi samo od njene trenutne vrednosti, već i od načina pobuđivanja sistema u prošlosti. Linerani odgovor na promenu spoljašnjeg polja ansambla čestica koje učestvuju u CTRW je detaljno izučavan u nekoliko radova (Sokolov at al., 2001; Sokolov at al., 2001; Sokolov,2006). Taj odgovor zavisi od kašnjenja između trenutka merenja i trenutka kada je sistem prepariran u dato stanje;

drugim rečima CTRW proces pokazuje starenje. Ponašanje ovakvih sistema takođe bitno zavisi od njihove predistorije. Zato se može reći da su memorijski efekti direktna posledica činjenice da slučajni vremenski intervali T_i (vremena čekanja) pripadaju nekoj α -stabilnoj distribuciji ($0 < \alpha < 1$), za koju je verovatnoća da je T_i veće od neke vrednosti $t > 0$ asimptotski opisano stepenim zakonom, tj. $P(T_i > t) \propto t^{-\alpha}$ kada $t \rightarrow \infty$ (Janicki and Weron, 1994) (vidi jednačinu (8.2.1)). Potpuno očekivano, kompaktifikacija granularnog materijala je primer vremenski nelokalnog fenomena kod kojeg frakcione diferencijalne jednačine mogu imati centralnu ulogu.

Na modelu reverzibilne RSA je analizirana mogućnost optimizacije procesa kompaktifikacije u smislu smanjenja vremena i uložene energije prilikom dostizanja neke unapred zadate gustine. Korišćenjem numeričkih simulacija izučavana je kinetika procesa depozicije dimera na 1D rešetki u prisustvu desorpcije. Sistematski pristup je načinjem proučavanjem depozicije tokom koje se verovatnoća desorpcije P_{des} objekata menja na različite načine. Pri tome, pažnja je bila fokusirana na evoluciju pokrivenosti rešetke $\theta(t)$ za vremena nakon dostizanja granice zagušenja, $\theta(t) > \theta_{jam}$. U slučaju depozicije sa konstantnom vrednošću verovatnoće desorpcije, za svaku vrednost P_{des} određena su vremena t_θ potrebna za dostizanje neke zadate pokrivenosti $\theta > \theta_{jam}$. Drugim rečima, dobijena je zavisnost vremena t_θ od verovatnoće P_{des} za veliki broj fiksnih vrednosti gustine $\theta > \theta_{jam}$. Smanjivanjem verovatnoće P_{des} , vreme t_θ može postati proizvoljno veliko, tj. funkcija $t_\theta(P_{des})$ algebarski divergira kada $P_{des} \rightarrow 0$. Za svaku pokrivenost $\theta > \theta_{jam}$, postoji minimalno vreme t_θ^{min} koje je potrebno sistemu da u procesu reverzibilne RSA dostigne datu pokrivenost θ . Za gustine neposredno iznad granice zagušenja θ_{jam} , dobijeno je da se minimalno vreme t_θ^{min} eksponencijalno uvećava sa porastom gustine. Međutim, na velikim gustinama rast minimalnog vremena t_θ^{min} sa porastom gustine je brži nego eksponencijalni (videti sliku 9.2.3). Možemo očekivati da minimalno vreme t_θ^{min} divergira u tački maksimalno gustog pakovanja dimera $\theta = 1$.

Pokazano je da vreme koje je potrebno sistemu da dostigne datu pokrivenost θ može biti manje od t_θ^{min} , ako se P_{des} smanjuje u vremenu. Razmotreno je ponašanje sistema kada se verovatnoća desorpcije P_{des} smanjuje (a) skokovito i (b) linearno (neprekidno) tokom određenog vremenskog intervala. Važno je napomenuti da

inicijalne i finalne verovatnoće desorpcije ne mogu imati proizvoljnu vrednost. Ako je verovatnoća P_{des} dovoljno velika, sistem neće dostići granicu zagušenja. Znači, postoji gornja granica P_{des}^B verovatnoće desorpcije iznad koje će vrednost stacionarnog pokrivanja rešetke biti niža od granice zagušenja. Za razmatrani 1D sistem ta vrednost je iznosila $P_{des}^B \approx 0.10$. Najveći uticaj za brzinu depozicije je dobijen kada je inicijalna vrednost verovatnoće depozicije $P_{des}^{(I)}$ odgovarala graničnoj vrednosti P_{des}^B . Finalna vrednost verovatnoće desorpcije $P_{des}^{(F)}$ određuje maksimalnu vrednost pokrivenosti $\theta_{\infty}(P_{des}^{(F)})$ koja može biti dostignuta. Pokazano je da za svaku gustinu θ između θ_{jam} i $\theta_{\infty}(P_{des}^{(F)})$, postoji optimalan nagib K za linearni pad verovatnoće $P_{des}(t)$ pri kome je vreme potrebno za dostizanje date gustine θ minimalno. Na kraju, formulisana je i testirana samousaglašena procedura optimizacije procesa reverzibilne RSA. U ovom slučaju, verovatnoća P_{des} se tokom procesa depozicije određuje na osnovu dostignute vrednosti gustine $\theta(t)$. Ova vrednost se bira kao verovatnoća depozicije za koju sistem trenutnu gustinu $\theta(t)$ dostiže za najkraće vreme tokom procesa sa nepromenljivom desorpcijom. Posebno je značajno da novi protokol depozicije bitno ubrzava dostizanje velikih pokrivenosti rešetke.

11. Prilog

11.1. Molekularno dinamička simulacija vibracione kompaktifikacije granularnog materijala

```
//=====
// Program: Tapsphb.cpp
//=====
#define GCC
#include <math.h>
#include <time.h>
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include <assert.h>
#include <fcntl.h>
#include <sys/stat.h>
#ifdef VISUALSTUDIO6
#include <io.h>
#include <conio.h>
#endif
#ifndef PANDORA
#include <complex>
#endif

#ifdef VISUALSTUDIO6
#pragma warning (disable : 4244)
#pragma warning (disable : 4101)
using namespace std;
#endif

#define ASSERTTEST(FIRST,SECOND,THIRD) note(FIRST,SECOND,THIRD)
#define M_PI 3.14159265358979323846
#define VERYBIG 2e10
#define TOLL 1e-6
#define PATHRESOLUT 40
#define MINGRID 1
#define SQSTOPPEDVEL 1e-4
#define REPEAT 10
#define VELOCITYDEPENDENTR2
#ifdef VELOCITYDEPENDENTR2
const bool veldep = true;
#else
const bool veldep = false;
#endif

int writcn ( const char *cnfile );

long errent = 0;
int colcnt;
int totcolcnt = 0;
int tottap = 0;
int tapcnt = 0;
```



```

bool continuation = false;

void note(int test, char *text, double amount = 0.0)
{
if (!test) {
if (errcnt == 0) writen("errorconfig.txt");
errcnt++;
if (errcnt > 100000) exit(1);
printf("After %d collisions: %s %.15g\n",colcnt,text,amount);
}
}

double energy();

struct sphere
{
double rx, ry;
double vx, vy;
double omega;
int xgrid, ygrid;
double coltim, lastcol;
int partn;
short flag;
short stopped;
short glide;
short criterion;
};

struct colinfo
{
colinfo *next;
double time, e;
double rx, ry;
double vx, vy;
double omega;
int partn;
colinfo();
};

colinfo::colinfo()
{
next = NULL;
}

struct collistinfo
{
colinfo *first, *last;
int nrec;
collistinfo();
};

collistinfo::collistinfo()
{
first = last = NULL;
nrec = 0;
}

int nxgrid = -1, nygrid = -1;

```

```

double pathres = fabs(1.0/(nxgrid*20.0));
int numofmix = 24;
int numofsph = 1000;
int numtot = numofmix + numofsph;
#define SQDIAMETERRATIO 1.0
double sqmixdiameter = 1e-6;
double mixdiameter = sqrt(1e-6);
double sqdiameter = 1e-6;
double diameter = 1e-3;
double sqcrossdiameter = pow((diameter+mixdiameter)/2.0,2.0);
double mixmass = 2;
double mass = 1;
double redmass = mass*mixmass/(mass+mixmass);
int ncol = 100;
int ntap = 100;
int freq = 100;
double mixmixr = 1;
double mixr = 1;
double r = 1;
double friction = 0.6;
double ax = 0;
double ay = 1;
double v0 = 0.02;
double initheight = 1.0;
int numofstopped = 0;
int failtoseparate = 0;
int slowdown = 0;
int bigcolfreq = 0;
double tapintensity = 1.0;
double nearfactor = 3.0;

double elapsedtime = 0.0;
unsigned long paths[PATHRESOLUT];
double totalpath = 0.0;
int pathcnt = 0;

sphere *powder = NULL;
collistinfo *trajec = NULL;
bool trajecerr = false;

enum flags { readflag = 0x01, writeflag = 0x02, colflag = 0x04 };
int fileflags = 0;

void memorize(int nmix)
{
if (trajecerr) return;
colinfo *pnew = new colinfo;
if (!pnew) {
if (!trajecerr) printf("Out of memory for trajectory history\n");
trajecerr = true;
return;
}
sphere &one = powder[nmix];
if (!trajec[nmix].nrec) trajec[nmix].first = pnew;
trajec[nmix].nrec++;
if (trajec[nmix].last) trajec[nmix].last->next = pnew;
trajec[nmix].last = pnew;
pnew->rx = one.rx;
}

```

```

pnew->ry = one.ry;
pnew->vx = one.vx;
pnew->vy = one.vy;
pnew->time = elapsedtime;
pnew->e = energy();
pnew->omega = one.omega;
pnew->partn = one.partn;
}

void deltrajec()
{
if (!trajec) return;
int cnt;
colinfo *pCI, *ptmp;
for (cnt = 0; cnt < numofmix; cnt++) {
pCI = trajec[cnt].first;
while (pCI) {
ptmp = pCI->next; delete pCI; pCI = ptmp;
}
trajec[cnt].first = trajec[cnt].last = NULL;
trajec[cnt].nrec = 0;
}
}

void delcolinfo()
{
if (!trajec) return;
deltrajec();
delete [] trajec;
}

double lineartime(sphere *first, sphere *second, double sqdistance)
{
double dx, dy, dvx, dvy, b;
dx = first->rx - second->rx;
dy = first->ry - second->ry;
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(dx*dx+dy*dy > 0.999999*sqdistance,"Overlap\n",
(dx*dx+dy*dy-sqdistance)/sqdistance);
#endif
dvx = first->vx - second->vx;
dvy = first->vy - second->vy;
b = dx*dvx + dy*dvy;
if (dx*dx+dy*dy < sqdistance && b < 0.0) return 0.0;
if (b > 0.0) return VERYBIG;
double rsq, vsq, discr;
rsq = dx*dx + dy*dy;
vsq = dvx*dvx + dvy*dvy;
if (vsq == 0.0) return VERYBIG;
if ((discr = b*b - vsq*(rsq-sqdistance)) < 0.0) return VERYBIG;
double checkit;
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST((checkit = (-b-sqrt(discr))/vsq) >= 0,
"Negative collision time\n",checkit);
#endif
checkit = (-b-sqrt(discr))/vsq;
return checkit >= 0 ? checkit : 0.0;
}

```

```

const double rotangle = 2.09439510239319549230842892218634;

template <class T>
void swapt(T &x, T &y)
{
    T tmp = x;
    x = y;
    y = tmp;
}

int third(double a3, double b3, double c3, double &res0, double &res1,
double &res2)
{
    double tmp, tmpa, tmpb, tmpc, tmpd, tmpe, theta3, q, r, A, B;
    tmp = a3*a3; tmpd = a3/3.0;
    q = (tmp-3.0*b3)/9.0;
    r = (2.0*tmp*a3-9.0*a3*b3+27.0*c3)/54.0;
    tmpa = r*r; tmpb = pow(q,3.0);
    if (tmpa < tmpb) {
        tmpc = sqrt(q);
        tmpe = r/(q*tmpc);
        if (tmpe >= 1.0) theta3 = 0.0;
        else if (tmpe <= -1.0) theta3 = rotangle/2.0;
        else theta3 = acos(tmpe)/3.0;
        res0 = -2.0*tmpc*cos(theta3)-tmpd;
        res1 = -2.0*tmpc*cos(theta3+rotangle)-tmpd;
        res2 = -2.0*tmpc*cos(theta3-rotangle)-tmpd;

        if (res0 > res1) swapt(res0,res1);
        if (res1 > res2) swapt(res1,res2);
        if (res0 > res2) swapt(res0,res2);
        #ifndef CHECKIT
        ASSERTTEST(fabs(pow(res0,3.0)+a3*res0*res0+b3*res0+c3) < 1e-7,
            "Inefficiency: cubic (1)\n", pow(res0,3.0)+a3*res0*res0+b3*res0+c3);
        ASSERTTEST(fabs(pow(res1,3.0)+a3*res1*res1+b3*res1+c3) < 1e-7,
            "Inefficiency: cubic (2)\n", pow(res1,3.0)+a3*res1*res1+b3*res1+c3);
        ASSERTTEST(fabs(pow(res2,3.0)+a3*res2*res2+b3*res2+c3) < 1e-7,
            "Inefficiency: cubic (3)\n", pow(res2,3.0)+a3*res2*res2+b3*res2+c3);
        #endif
        return 3;
    }
    else {
        if (r == 0.0) A = 0.0;
        else if (r > 0.0) {
            A = r+sqrt(tmpa-tmpb);
            if (A >= 0.0) A = -pow(A,1.0/3.0);
            else A = pow(-A,1.0/3.0);
        }
        else {
            A = -r+sqrt(tmpa-tmpb);
            if (A >= 0.0) A = pow(A,1.0/3.0);
            else A = -pow(-A,1.0/3.0);
        }
        B = (A == 0.0) ? 0.0 : q/A;
        res2 = A + B - tmpd;
        res0 = res1 = res2-1.0;
    }
}

```

```

#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(fabs(pow(res2,3.0)+a3*res2*res2+b3*res2+c3) < 1e-7,
  "Inefficiency: cubic (4)\n", pow(res2,3.0)+a3*res2*res2+b3*res2+c3);
#endif
return 1;
}
}

inline double fvalue(double b, double c, double d, double e, double x)
{
return (((x+b)*x+c)*x+d)*x+e;
}

inline double fdvalue(double b, double c, double d, double x)
{
return ((4.0*x+3.0*b)*x+2.0*c)*x+d;
}

double fourth(double b, double c, double d, double e)
{
if (d < 0.0 && e < 0.0) return 0.0;
double max[3], left, righty, lefty;
if (d > 0.0 && e < 0.0) {
third(b,c,d,max[0],max[1],max[2]);
if (max[2] < 0.0) return VERYBIG;
else return max[1];
}
double a3=0.75*b, b3=0.5*c, c3=0.25*d, x1, x2;
double err, delta;
int lastmax, loopcnt;
double lead = ax*ax+ay*ay;
third(a3,b3,c3,max[0],max[1],max[2]);

left = 0.0;
  if (max[0] > 0.0) lastmax = 0;
else if (max[1] > 0.0) lastmax = 1;
else if (max[2] > 0.0) lastmax = 2;
else lastmax = 3;
lefty = e;
if (lastmax != 3) righty = fvalue(b,c,d,e,max[lastmax]);
while (1) {
if (lastmax == 3) {
return VERYBIG;
}
else {
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(!(lefty < 0.0 && lefty > 0.0),
  "Positive derivative in the solution\n", 0.0);
#endif
if ((lefty >= 0.0 && righty <= 0.0)) {
if (2.25*b*b-6.0*c > 0) {
x2 = (b > 0) ? -0.5*(1.5*b+sqrt(2.25*b*b-6.0*c)) :
-0.5*(1.5*b-sqrt(2.25*b*b-6.0*c));
x1 = x2/3.0;
x2 = 0.5*c/x2;
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(fabs(3.0*x1*x1+1.5*b*x1+0.5*c) < 1e-7,
  "Inefficiency: quadratic (1)\n",

```

```

    fabs(3.0*x1*x1+1.5*b*x1+0.5*c));
ASSERTTEST(fabs(3.0*x2*x2+1.5*b*x2+0.5*c) < 1e-7,
    "Inefficiency: quadratic (2)\n",
    fabs(3.0*x2*x2+1.5*b*x2+0.5*c));
#endif
if (x1 <= left || x1 >= max[lastmax]) {
x1 = x2;
if (x1 <= left || x1 >= max[lastmax])
x1 = left;
}
}
else {
x1 = left;
}
err = fvalue(b,c,d,e,x1);
loopcnt = 0;
while (fabs(err) > 1e-10/lead && loopcnt < 40) {
x1 -= err/fdvalue(b,c,d,x1);
err = fvalue(b,c,d,e,x1);
loopcnt++;
}
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(loopcnt < 40, "Slow convergence/divergence (1)\n",
    (double) loopcnt);
#endif
if (loopcnt < 40) return x1;
}
left = max[lastmax];
lefty = righty;
lastmax++;
if (lastmax != 3) righty = fvalue(b,c,d,e,max[lastmax]);
}
}
}

double parabolictime(sphere *first, sphere *second, double ax, double ay,
double sqdistance)
{
double a4p, b4p, c4p, d4p, e4p, b4, c4, d4, e4;
double dx, dy, dvx, dvy;
a4p = (ax*ax+ay*ay)/4.0;
if (a4p == 0.0) {
return lineartime(first,second,sqdistance);
}
dx = first->rx - second->rx;
dy = first->ry - second->ry;
dvx = first->vx - second->vx;
dvy = first->vy - second->vy;
b4p = ax*dvx+ay*dvy;
c4p = dx*ax+dy*ay+dvx*dvx+dvy*dvy;
d4p = 2.0*(dx*dvx+dy*dvy);
e4p = dx*dx+dy*dy-sqdistance;
b4 = b4p/a4p; c4 = c4p/a4p; d4 = d4p/a4p; e4 = e4p/a4p;
double res = fourth(b4,c4,d4,e4);
return res >= 0.0 ? res : 0.0;
}

double hitwalltime(int nfirst, int nsecond)

```

```

{
double a, b, c, tmp;
if (nfirst > nsecond) swapt(nfirst, nsecond);
if (powder[nfirst].stopped) return VERYBIG;
switch (nsecond - numtot) {
case 0:
tmp = (powder[nfirst].vx < 0.0) ?
-(powder[nfirst].rx-mixdiameter*0.5)/powder[nfirst].vx
: VERYBIG;
return tmp >= 0.0 ? tmp : 0.0;
break;
case 1:
a = ay;
b = 2.0 * powder[nfirst].vy;
c = 2.0 * (powder[nfirst].ry-mixdiameter*0.5);
tmp = (b < 0.0) ? (2.0*c)/(-b+sqrt(b*b-4.0*a*c)) :
(-b-sqrt(b*b-4.0*a*c))/(2.0*a);
return tmp >= 0.0 ? tmp : 0.0;
break;
case 2:
tmp = (powder[nfirst].vx > 0.0) ?
(1.0-powder[nfirst].rx-mixdiameter*0.5)/powder[nfirst].vx
: VERYBIG;
return tmp >= 0.0 ? tmp : 0.0;
break;
default:
break;
}
return VERYBIG;
}

double collisiontime(int nfirst, int nsecond)
{
if (nsecond >= numtot) return hitwalltime(nfirst, nsecond);
else if (nfirst >= numtot) return hitwalltime(nsecond, nfirst);
sphere *first = powder + nfirst, *second = powder + nsecond;
if (first->stopped && second->stopped)
return VERYBIG;
else if (!first->stopped && !first->glide && (second->stopped ||
second->glide))
return parabolictime(first, second, ax, ay, sqcrossdiameter);
else if ((first->stopped || first->glide) && !second->stopped &&
!second->glide)
return parabolictime(first, second, -ax, -ay, sqcrossdiameter);
else
return lineartime(first, second, sqdiameter);
return VERYBIG;
}

inline int arenear(sphere &first, sphere &second)
{
return (((first.xgrid >= second.xgrid-1 && first.xgrid <= second.xgrid+1))
&& ((first.ygrid >= second.ygrid-1 && first.ygrid <= second.ygrid+1))
|| (first.xgrid == 0 && &second-powder == numtot)
|| (first.xgrid == nxgrid-1 && &second-powder == numtot+2)
|| (first.ygrid == 0 && &second-powder == numtot+1)
|| (second.xgrid == 0 && &first-powder == numtot)
|| (second.xgrid == nxgrid-1 && &first-powder == numtot+2))
}

```

```

ll (second.ygrid == 0 && &first-powder == numtot+1);
}

inline int arenear2(sphere &first, sphere &second)
{
if (&second - powder >= numtot || &first - powder >= numtot) return 1;
if (fabs(first.rx - second.rx) > nearfactor * mixdiameter ||
fabs(first.ry - second.ry) > nearfactor * mixdiameter) return 0;
return 1;
}

void updatecoltime(int first)
{
int cnt;
double ctime;
powder[first].coltim = VERYBIG;
while (1) {
for (cnt = 0; cnt < numtot+3; cnt++) {
if (first != cnt && arenear2(powder[first],powder[cnt])) {
ctime = collisiontime(first,cnt);
if (ctime < powder[first].coltim && !powder[first].stopped) {
powder[first].coltim = ctime;
powder[first].partn = cnt;
}
if (ctime < powder[cnt].coltim && !powder[cnt].stopped) {
powder[cnt].coltim = ctime;
powder[cnt].partn = first;
}
}
}
if (powder[first].stopped) break;
if ((powder[first].partn == numtot && powder[first].rx >
nearfactor * mixdiameter) ||
(powder[first].partn == numtot + 1 && powder[first].ry >
nearfactor * mixdiameter) ||
(powder[first].partn == numtot + 2 && 1.0 - powder[first].rx >
nearfactor * mixdiameter))
nearfactor *= 2.0;
else break;
}
nearfactor = 3.0;
}

void updatecoltime(int first, int second)
{
int cnt;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if ((cnt == first && !powder[first].stopped) ||
(powder[cnt].partn == first)
|| (cnt == second && !powder[second].stopped) ||
(powder[cnt].partn == second)) {
updatecoltime(cnt);
}
}
}

void updatemoved(double x, double y)
{

```



```

int cnt;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (fabs(powder[cnt].rx - x) > 4.0 * mixdiameter ||
fabs(powder[cnt].ry - y) > 4.0 * mixdiameter) continue;
updatecoltime(cnt);
}
}

void initcoltimes()
{
int cnt, cnta;
double time;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++)
for (cnta = cnt+1; cnta < numtot+3; cnta++) {
if (arenear2(powder[cnt], powder[cnta])) {
time = collisiontime(cnt,cnta);
if (time < powder[cnt].coltim) {
powder[cnt].coltim = time;
powder[cnt].partn = cnta;
}
if (time < powder[cnta].coltim) {
powder[cnta].coltim = time;
powder[cnta].partn = cnt;
}
}
}
}

int findcollision()
{
int cnt, particle = 0;
double time = VERYBIG;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (powder[cnt].coltim < time) {
time = powder[cnt].coltim;
particle = cnt;
}
}
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(powder[particle].coltim < VERYBIG/2.0,
"Particle will not collide\n",(double) particle);
#endif
return particle;
}

void updatepathinfo(sphere &first)
{
if (&first - powder >= numtot) return;
double length;
int group;
if (first.lastcol < 0) {
first.lastcol = elapsedtime;
return;
}
length = (elapsedtime - first.lastcol)*
sqrt(first.vx*first.vx+first.vy*first.vy);
first.lastcol = elapsedtime;
totalpath += length;
}

```

```

pathcnt++;
if ((group = length/pathres) >= PATHRESOLUT) group = PATHRESOLUT-1;
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(group >= 0,"Bad group in updatepathinfo()\n", (double) group);
#endif
paths[group]++;
}

void updatepathinfo(sphere &first, sphere &second)
{
updatepathinfo(first);
updatepathinfo(second);
}

void docollision(int nfirst, int nsecond)
{
bool bounce = false, reflection = false;
double tmp;
if (nsecond >= numtot) {
bounce = true;
}
else if (nfirst >= numtot) {
bounce = true;
tmp = nfirst; nfirst = nsecond; nsecond = tmp;
}
else if (powder[nfirst].stopped) {
reflection = true;
tmp = nfirst; nfirst = nsecond; nsecond = tmp;
}
else if (powder[nsecond].stopped) {
reflection = true;
}
sphere *first = powder + nfirst, *second = powder + nsecond;
updatepathinfo(*first, *second);
double drx, dry, nnx, nny, ntx, nty, vrtx, vrt, vrn, vry, vrnx, vrny;
double vrn, vrt, m1, m2, m12, R1, R2, dvx, dvy;
double DeltaPx, DeltaPy, ctggama, beta, DeltaPn, DeltaPt;
double adjmixmixr;
const double q = 0.5;
R1 = (nfirst < numofmix) ? mixdiameter * 0.5 : diameter * 0.5;
R2 = (nsecond < numofmix) ? mixdiameter * 0.5 : diameter * 0.5;
if (bounce) {
switch (nsecond - numtot) {
case 0:
nnx = 1.0;
nny = 0.0;
break;
case 1:
nnx = 0.0;
nny = 1.0;
break;
case 2:
default:
nnx = -1.0;
nny = 0.0;
break;
}
}
}

```

```

else {
drx = first->rx - second->rx;
dry = first->ry - second->ry;
tmp = sqrt(drx*drx+dry*dry);
nnx = drx/tmp;
nny = dry/tmp;
}
ntx = -nny;
nty = nnx;
dvx = first->vx - second->vx;
dvy = first->vy - second->vy;
vrn = dvx * nnx + dvy * nny;
vrnx = vrn * nnx;
vrny = vrn * nny;
vrn = fabs(vrn);
vrt = dvx * ntx + dvy * nty;
vrt -= R1 * first->omega + R2 * second->omega;
vrtx = vrt * ntx;
vrt = fabs(vrt);
m1 = (nfirst < numofmix) ? mixmass : mass;
m2 = (nsecond < numofmix) ? mixmass : mass;
m12 = (bounce || reflection) ? m1 : m1 * m2 / (m1 + m2);
ctggama = (vrn > 30.0 * vrt) ? -30.0 : -vrn / vrt;
#ifdef VELOCITYDEPENDENTR
adjmixmixr = (vrn < sqrt(ay*mixdiameter)) ?
1.0 - (1.0 - mixmixr) * pow(vrn/sqrt(ay*mixdiameter), 3.0/4.0) :
mixmixr;
#else
#ifdef VELOCITYDEPENDENTR2
adjmixmixr = (vrn < v0) ?
1.0 - (1.0 - mixmixr) * pow(vrn/v0, 1.0/5.0) :
mixmixr * pow(vrn/v0, -(1.0/4.0));
#else
adjmixmixr = mixmixr;
#endif
#endif
beta = -1.0 - friction * (1.0 + 1.0 / q) * (1.0 + adjmixmixr) * ctggama;
if (beta > 0.5) beta = 0.5;
DeltaPn = -m12 * (1.0 + adjmixmixr);
DeltaPt = -(1.0 / (1.0 + 1.0 / q)) * m12 * (1.0 + beta);
DeltaPx = DeltaPn * vrnx + DeltaPt * vrtx;
DeltaPy = DeltaPn * vrny + DeltaPt * vrt;
first->vx += DeltaPx / m1;
first->vy += DeltaPy / m1;
first->omega -= (nnx * DeltaPy - nny * DeltaPx) / (q * m1 * R1);
if (!(bounce || reflection)) {
second->vx -= DeltaPx / m2;
second->vy -= DeltaPy / m2;
second->omega -= (nnx * DeltaPy - nny * DeltaPx) / (q * m2 * R2);
}

if (nfirst < numofmix) memorize(nfirst);
if (nsecond < numofmix) memorize(nsecond);
first->glide = second->glide = 0;
}

void advance(double time)

```

```

{
int cnt, xprev, yprev;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (powder[cnt].stopped) continue;
xprev = powder[cnt].xgrid;
yprev = powder[cnt].ygrid;
powder[cnt].coltim -= time;
powder[cnt].rx = powder[cnt].rx + powder[cnt].vx*time;
powder[cnt].ry = powder[cnt].ry + powder[cnt].vy*time;
if (cnt < numofmix && !powder[cnt].glide) {
powder[cnt].rx = powder[cnt].rx+ax*time*time/2.0;
powder[cnt].ry = powder[cnt].ry+ay*time*time/2.0;
powder[cnt].vx += ax*time;
powder[cnt].vy += ay*time;
}
powder[cnt].xgrid = powder[cnt].rx*nxgrid;
powder[cnt].ygrid = powder[cnt].ry*nygrid;
if (xprev != powder[cnt].xgrid || yprev != powder[cnt].ygrid)
    powder[cnt].flag = '\1';
}
}

inline double doublerand()
{
return ((double) rand())/RAND_MAX + 1.0/(2.0*RAND_MAX);
}

void initangularvelocity()
{
int cnt;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].omega = 0.0;
}
}

void eliminateoverlaps()
{
int cnt, cnta, nfirst, nsecond;
double sqdist, dx, dy, factor;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].flag = '\0';
powder[cnt].coltim = VERYBIG;
}
for (cnt = 0; cnt < numtot-1; cnt++) {
for (cnta = cnt+1; cnta < numtot; cnta++) {
sqdist = (powder[cnt].rx - powder[nta].rx) *
    (powder[cnt].rx - powder[nta].rx)
+ (powder[cnt].ry - powder[nta].ry) *
    (powder[cnt].ry - powder[nta].ry);
if (sqdist < powder[cnt].coltim) {
powder[cnt].coltim = sqdist;
powder[cnt].partn = cnta;
}
if (sqdist < powder[nta].coltim) {
powder[nta].coltim = sqdist;
powder[nta].partn = cnt;
}
}
}
}

```

```

}
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (powder[cnt].coltim > 4.0 * powder[cnt].rx * powder[cnt].rx) {
powder[cnt].coltim = 4.0 * powder[cnt].rx * powder[cnt].rx;
powder[cnt].partn = numtot;
}
if (powder[cnt].coltim > 4.0 * (1.0 - powder[cnt].rx) *
(1.0 - powder[cnt].rx)) {
powder[cnt].coltim = 4.0 * (1.0 - powder[cnt].rx) *
(1.0 - powder[cnt].rx);
powder[cnt].partn = numtot + 2;
}
if (powder[cnt].coltim > 4.0 * powder[cnt].ry * powder[cnt].ry) {
powder[cnt].coltim = 4.0 * powder[cnt].ry * powder[cnt].ry;
powder[cnt].partn = numtot + 1;
}
}
while (1) {
sqdist = VERYBIG;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (powder[cnt].coltim < sqdist) {
sqdist = powder[cnt].coltim;
nfirst = cnt;
}
}
nsecond = powder[nfirst].partn;
switch (nsecond - numtot) {
case 0:
if (powder[nfirst].rx >= mixdiameter*0.5*1.000001) goto finish;
powder[nfirst].rx = mixdiameter*0.5*1.02;
break;
case 1:
if (powder[nfirst].ry >= mixdiameter*0.5*1.000001) goto finish;
powder[nfirst].ry = mixdiameter*0.5*1.02;
break;
case 2:
if (powder[nfirst].rx <= 1.0 - mixdiameter*0.5*1.000001) goto finish;
powder[nfirst].rx = 1.0 - mixdiameter*0.5*1.02;
break;
default:
dx = powder[nsecond].rx - powder[nfirst].rx;
dy = powder[nsecond].ry - powder[nfirst].ry;
factor = (mixdiameter*1.02/sqrt(dx*dx+dy*dy)-1.0)*0.5;
if (mixdiameter < sqrt(dx*dx+dy*dy)) goto finish;
powder[nfirst].rx -= dx*factor;
powder[nfirst].ry -= dy*factor;
powder[nsecond].rx += dx*factor;
powder[nsecond].ry += dy*factor;
break;
}
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (cnt == nfirst || powder[cnt].partn == nfirst ||
cnt == nsecond || powder[cnt].partn == nsecond) {
powder[cnt].coltim = VERYBIG;
for (cnta = 0; cnta < numtot; cnta++) {
if (cnt == cnta) continue;
sqdist = (powder[cnt].rx - powder[cnta].rx) *
(powder[cnt].rx - powder[cnta].rx)

```

```

+ (powder[cnt].ry - powder[cnta].ry) *
  (powder[cnt].ry - powder[cnta].ry);
if (sqdist < powder[cnt].coltim) {
powder[cnt].coltim = sqdist;
powder[cnt].partn = cnta;
}
if (sqdist < powder[cnta].coltim) {
powder[cnta].coltim = sqdist;
powder[cnta].partn = cnt;
}
}
if (powder[cnt].coltim > 4.0 * powder[cnt].rx * powder[cnt].rx) {
powder[cnt].coltim = 4.0 * powder[cnt].rx * powder[cnt].rx;
powder[cnt].partn = numtot;
}
if (powder[cnt].coltim > 4.0 * (1.0 - powder[cnt].rx) *
  (1.0 - powder[cnt].rx)) {
powder[cnt].coltim = 4.0 * (1.0 - powder[cnt].rx) *
  (1.0 - powder[cnt].rx);
powder[cnt].partn = numtot + 2;
}
if (powder[cnt].coltim > 4.0 * powder[cnt].ry * powder[cnt].ry) {
powder[cnt].coltim = 4.0 * powder[cnt].ry * powder[cnt].ry;
powder[cnt].partn = numtot + 1;
}
}
}
}
}
finish:
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].flag = '\0';
powder[cnt].coltim = VERYBIG;
}
}

```

```

void simpleinit2()
{
int cnt;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].rx = doublerand();
powder[cnt].ry = doublerand() * initheight;
powder[cnt].vx = powder[cnt].vy = 0.0;
}
eliminateoverlaps();
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].xgrid = powder[cnt].rx * nxgrid;
powder[cnt].ygrid = powder[cnt].ry * nygrid;
}
initangularvelocity();
for (cnt = numtot; cnt < numtot + 3; cnt++) {
powder[cnt].vx = 0.0;
powder[cnt].vy = 0.0;
powder[cnt].omega = 0.0;
}
}

```

```

double energy()
{

```

```

int cnt;
double e = 0.0;
register double tmpvx, tmpvy;
for (cnt = 0; cnt < numofmix; cnt++) {
tmpvx = powder[cnt].vx;
tmpvy = powder[cnt].vy;
e += (tmpvx*tmpvx+tmpvy*tmpvy+diameter*diameter*powder[cnt].omega*
    powder[cnt].omega/8.0)*mixmass;
}
for (cnt = numofmix; cnt < numtot; cnt++) {
tmpvx = powder[cnt].vx;
tmpvy = powder[cnt].vy;
e += (tmpvx*tmpvx+tmpvy*tmpvy+mixdiameter*mixdiameter*powder[cnt].omega*
    powder[cnt].omega/8.0)*mass;
}
e /= numtot*2.0;
return e;
}

```

```

int readcn2()
{
FILE *stream;
char buffer[1024], *position;
int cnt;
continuation = true;
if ( (stream = fopen("descript.txt", "r")) == NULL) {
printf("Cannot find descript.txt\n");
return 1;
}
fgets(buffer, 1023, stream);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%d", &numofsph);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%d", &numofmix);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &initheight);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &sqdiameter);
numtot = numofsph + numofmix;
sqdiameter *= (4.0*initheight)/(M_PI*numtot);
sqmixdiameter = SQDIAMETERRATIO*sqdiameter;
mixdiameter = sqrt(sqmixdiameter);
diameter = sqrt(sqdiameter);
sqcrossdiameter = pow((mixdiameter+diameter)/2.0,2.0);
if (!(powder = new sphere[numtot+3]) ||
    !(trajec = new collistinfo[numofmix])) {

```

```

printf("Not enough memory\n");
return 1;
}

for (cnt = numtot; cnt < numtot + 3; cnt++) {
powder[cnt].vx = 0.0;
powder[cnt].vy = 0.0;
powder[cnt].omega = 0.0;
}

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &r);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &mixr);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &mixmixr);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &friction);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &mixmass);
redmass = mass*mixmass/(mass+mixmass);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%d", &ncol);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%d", &ntap);

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &ay);
ay = -ay;

fgets(buffer, 1023, stream);
position = (char *) memchr((void *) buffer, ':', 1023);
position += 2;
sscanf(position, "%lf", &tapintensity);

fileflags &= ~colflag;

```



```

fileflags &= ~writeflag;

if ( fclose (stream) ) {
printf("CLOSING FILE ERROR IN READCN2\n");
return 1;
}

if ( (stream = fopen("finals.txt","r+")) == NULL) {
printf("Cannot find finals.txt\n");
return 1;
}

tapcnt = 0;
sphere *trytoread;
trytoread = new sphere[numtot];
if (trytoread == NULL) return 2;

long sectionbegin;
bool goodend = true;
while (1) {
sectionbegin = ftell(stream);
if (fgets(buffer, 1023, stream) == NULL) break;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (fgets(buffer, 1023, stream) == NULL) break;
if (sscanf(buffer, "(%lf,%lf)", &trytoread[cnt].rx,
&trytoread[cnt].ry) != 2) break;
}
if (cnt == numtot) {
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].rx = trytoread[cnt].rx;
powder[cnt].ry = trytoread[cnt].ry;
}
tapcnt++;
fgets(buffer, 1023, stream);
}
else {
goodend = false;
break;
}
}

delete [] trytoread;
if ( fclose (stream) ) {
printf("CLOSING FILE ERROR IN READCN2\n");
return 1;
}

if (!goodend) {
printf("finals.txt corrupted\n");
exit(1);
}

return 0;
}

int readcn ( const char *cnfile )
{
FILE *stream;

```

```

int nn=0, k;
if ( (stream = fopen( cnfile, "r" )) == NULL ) {
printf("OPENING FILE ERROR IN READCN\n");
return 1;
}
if ( ( k = fscanf (stream, "%d %d %lg %lg %lg %lg %d %d %lg\n",
&numofmix, &nn, &sqmixdiameter, &sqdiameter, &mixmass, &mass, &nxgrid,
&nygrid, &ay) ) < 9 || k == EOF ) {
printf("READ ERROR IN READCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
pathres = 1.0/(nxgrid*20);
numofsph = nn;
numtot = numofsph + numofmix;
mixdiameter = sqrt(sqmixdiameter);
diameter = sqrt(sqdiameter);
sqcrossdiameter = pow((mixdiameter+diameter)/2.0,2.0);
redmass = mass*mixmass/(mass+mixmass);
delete [] powder;
delcolinfo();
if (!(powder = new sphere[numtot]) ||
!(trajec = new collistinfo[numofmix])) {
printf("Not enough memory\n");
exit(1);
}
for (k=0; k<numtot; k++) {
if ( fscanf (stream, "%lg %lg %lg %lg %lg %lg %d\n", &powder[k].rx,
&powder[k].ry, &powder[k].vx, &powder[k].vy, &powder[k].omega,
&powder[k].coltim, &powder[k].partn ) != 7 ) {
printf("READ ERROR IN READCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
powder[k].xgrid = powder[k].rx*nxgrid;
powder[k].ygrid = powder[k].ry*nygrid;
}
if ( fclose (stream) ) {
printf("CLOSING FILE ERROR IN READCN\n");
return 1;
}
return 0;
}

int writcn ( const char *cnfile )
{
FILE *stream;
int k;
if ( (stream = fopen( cnfile, "w" )) == NULL ) {
printf("OPENING FILE ERROR IN WRITCN\n");
return 1;
}
if ( fprintf (stream, "%d %d %.30g %.30g %.30g %.30g %d %d %.30g\n",
numofmix, numofsph, sqmixdiameter, sqdiameter, mixmass, mass, nxgrid,
nygrid, ay) < 0 ) {
printf("WRITE ERROR IN WRITCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
}

```

```

}
for (k=0; k<numtot; k++) {
if ( fprintf (stream, "%.30g %.30g %.30g %.30g %.30g %.30g %d\n",
    powder[k].rx, powder[k].ry, powder[k].vx, powder[k].vy,
    powder[k].omega,
    powder[k].coltim, powder[k].partn ) < 0 ) {
printf("WRITE ERROR IN WRITCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
}
if ( fclose (stream) ) {
printf("CLOSING FILE ERROR IN READCN\n");
return 1;
}
return 0;
}

```

```

void dounknowncollisions()

```

```

{
int cnt;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++)
if (powder[powder[cnt].partn].coltim < -1.5)
if (powder[cnt].coltim > -0.5)
powder[cnt].coltim = -1.0;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++)
if (powder[cnt].coltim < -0.5)
updatecoltime(cnt);
}

```

```

void liftv(int nfirst, double maxlift, bool pumpenergy = false)

```

```

{
int cnt, hit;
double drx, dry, distance, tmp, coltimefix, coltimepartnfix;
double meancoltime = elapsedtime / colcnt, timelimit;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (cnt == nfirst) continue;
drx = fabs(powder[cnt].rx - powder[nfirst].rx);
dry = powder[cnt].ry - powder[nfirst].ry;
if (dry <= maxlift * 0.5) continue;
distance = (drx * drx + dry * dry - mixdiameter * mixdiameter) /
    (2.0 * (mixdiameter + drx));
if (distance < maxlift) maxlift = distance;
}
powder[nfirst].ry += maxlift;
if (!pumpenergy) {
tmp = powder[nfirst].vy * powder[nfirst].vy - 2.0 * maxlift;
if (tmp < 0.0) {
tmp += powder[nfirst].vx * powder[nfirst].vx;
powder[nfirst].vy = 0.0;
if (tmp < 0.0) {
powder[nfirst].ry += tmp * 0.5;
powder[nfirst].vx = 0.0;
}
}
else {
powder[nfirst].vx = sqrt(tmp);
}
}
}
}

```

```

else
powder[nfirst].vy = sqrt(tmp);
}
updatecoltime(nfirst);
coltimefix = powder[nfirst].coltim;
coltimepartnfix = powder[powder[nfirst].partn].coltim;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[powder[nfirst].partn].coltim = VERYBIG;
hit = findcollision();
powder[powder[nfirst].partn].coltim = coltimepartnfix;
powder[nfirst].coltim = coltimefix;
if (powder[nfirst].coltim == 0.0) {
powder[nfirst].vx = powder[nfirst].vy = 0.0;
powder[nfirst].omega = 0.0;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[nfirst].stopped = 1;
powder[nfirst].criterion = 1;
numofstopped++;
failtoseparate++;
updatecoltime(nfirst);
printf("\r%d ", numofstopped);
goto lbl1;
}
timelimit = (meancoltime > powder[hit].coltim) ? meancoltime :
    powder[hit].coltim;
while (powder[nfirst].coltim * 3.0 < timelimit) {
if (powder[nfirst].vx == 0.0 && powder[nfirst].vy == 0.0) {
powder[nfirst].vx = powder[nfirst].vy = 0.0;
powder[nfirst].omega = 0.0;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[nfirst].stopped = 1;
powder[nfirst].criterion = 1;
failtoseparate++;
numofstopped++;
updatecoltime(nfirst);
printf("\r%d ", numofstopped);
goto lbl1;
}
powder[nfirst].vx /= 3.0;
powder[nfirst].vy /= 3.0;
updatecoltime(nfirst);
}
lbl1:
;
}

void lifth(int nfirst, int nsecond, double factor = 0.1)
{
int cnt, hit;
double drx, dry, distance, maxlift, locmaxlift;
double coltimefix, coltimepartnfix, timelimit;
double meancoltime = elapsedtime / colcnt;
if (nfirst == numtot || nfirst == numtot+2 || nsecond == numtot ||
    nsecond == numtot+2) return;
if (nfirst == numtot+1) {
liftv(nsecond, mixdiameter * 0.5, false);
return;
}
}

```

```

if (nsecond == numtot+1) {
liftv(nfirst, mixdiameter * 0.5, false);
return;
}
if (powder[nfirst].rx > powder[nsecond].rx) swapt(nfirst, nsecond);
maxlift = (mixdiameter - 0.9 * (powder[nsecond].rx - powder[nfirst].rx)) *
factor;
locmaxlift = maxlift;
if (!powder[nfirst].stopped) {
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (cnt == nfirst) continue;
drx = powder[cnt].rx - powder[nfirst].rx;
dry = fabs(powder[cnt].ry - powder[nfirst].ry);
if (drx >= -maxlift * 0.5) continue;
distance = (drx * drx + dry * dry - mixdiameter * mixdiameter) /
(2.0 * (mixdiameter + dry));
if (distance < locmaxlift) locmaxlift = distance;
}
distance = (powder[nfirst].rx - mixdiameter * 0.5) * 0.5;
if (distance < locmaxlift) locmaxlift = distance;
powder[nfirst].rx -= locmaxlift;
updatecoltime(nfirst);
coltimefix = powder[nfirst].coltim;
coltimepartnfix = powder[powder[nfirst].partn].coltim;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[powder[nfirst].partn].coltim = VERYBIG;
hit = findcollision();
powder[powder[nfirst].partn].coltim = coltimepartnfix;
powder[nfirst].coltim = coltimefix;
timelimit = (meancoltime > powder[hit].coltim) ? meancoltime :
powder[hit].coltim;
if (coltimefix * 3.0 < timelimit) {
liftv(nfirst, mixdiameter * 0.1);
if (powder[nfirst].coltim == 0.0) {
powder[nfirst].vx = powder[nfirst].vy = 0.0;
powder[nfirst].omega = 0.0;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[nfirst].stopped = 1;
powder[nfirst].criterion = 1;
numofstopped++;
failtoseparate++;
updatecoltime(nfirst);
printf("\r%d ", numofstopped);
goto lbl1;
}
while (powder[nfirst].coltim * 3.0 < timelimit) {
if (powder[nfirst].vx == 0.0 && powder[nfirst].vy == 0.0) {
powder[nfirst].vx = powder[nfirst].vy = 0.0;
powder[nfirst].omega = 0.0;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[nfirst].stopped = 1;
powder[nfirst].criterion = 1;
numofstopped++;
failtoseparate++;
updatecoltime(nfirst);
printf("\r%d ", numofstopped);
goto lbl1;
}
}

```

```

powder[nfirst].vx /= 3.0;
powder[nfirst].vy /= 3.0;
updatecoltime(nfirst);
}
}
}
lbl1:
locmaxlift = maxlift;
if (!powder[nsecond].stopped) {
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (cnt == nsecond) continue;
drx = powder[cnt].rx - powder[nsecond].rx;
dry = fabs(powder[cnt].ry - powder[nsecond].ry);
if (drx <= maxlift * 0.5) continue;
distance = (drx * drx + dry * dry - mixdiameter * mixdiameter) /
(2.0 * (mixdiameter + dry));
if (distance < locmaxlift) locmaxlift = distance;
}
distance = (1.0 - powder[nsecond].rx - mixdiameter * 0.5) * 0.5;
if (distance < locmaxlift) locmaxlift = distance;
powder[nsecond].rx += locmaxlift;
updatecoltime(nsecond);
coltimefix = powder[nsecond].coltim;
coltimepartnfix = powder[powder[nsecond].partn].coltim;
powder[nsecond].coltim = VERYBIG;
powder[powder[nsecond].partn].coltim = VERYBIG;
hit = findcollision();
powder[powder[nsecond].partn].coltim = coltimepartnfix;
powder[nsecond].coltim = coltimefix;
timelimit = (meancoltime > powder[hit].coltim) ? meancoltime :
powder[hit].coltim;
if (coltimefix * 3.0 < timelimit) {
liftv(nsecond, mixdiameter * 0.1);
if (powder[nsecond].coltim == 0.0) {
powder[nsecond].vx = powder[nsecond].vy = 0.0;
powder[nsecond].omega = 0.0;
powder[nsecond].coltim = VERYBIG;
powder[nsecond].stopped = 1;
powder[nsecond].criterion = 1;
numofstopped++;
failtoseparate++;
updatecoltime(nsecond);
printf("\r%d ", numofstopped);
goto lbl2;
}
while (powder[nsecond].coltim * 3.0 < timelimit) {
if (powder[nsecond].vx == 0.0 && powder[nsecond].vy == 0.0) {
powder[nsecond].vx = powder[nsecond].vy = 0.0;
powder[nsecond].omega = 0.0;
powder[nsecond].coltim = VERYBIG;
powder[nsecond].stopped = 1;
powder[nsecond].criterion = 1;
numofstopped++;
failtoseparate++;
updatecoltime(nsecond);
printf("\r%d ", numofstopped);
goto lbl2;
}
}
}

```

```

powder[nsecond].vx /= 3.0;
powder[nsecond].vy /= 3.0;
updatecoltime(nsecond);
}
}
}
lb12:
;
}

int stopping(int nfirst)
{
double sqstoppedvel = 0.1 * fabs(ay) * elapsedtime;
sqstoppedvel *= sqstoppedvel;
if (sqstoppedvel > SQSTOPPEDVEL) sqstoppedvel = SQSTOPPEDVEL;
double sqstoppedangvel = 4.0 * sqrt(sqstoppedvel) / mixdiameter;
int cnt;
colinfo *walker, *previous = NULL;
bool collapse = true, toofast = false, multifix = false;
double prevtime;
double meancoltime = elapsedtime / colcnt;
if (meancoltime < 1e-10) meancoltime = 1e-10;
if (nfirst >= numofmix) return 0;
if (powder[nfirst].stopped || trajec[nfirst].nrec < REPEAT) return 0;
for (cnt = 0, walker = trajec[nfirst].first;
cnt < trajec[nfirst].nrec - REPEAT;
cnt++, walker = walker->next)
;
prevtime = walker->time;
do {
if (walker->vx * walker->vx + walker->vy * walker->vy > sqstoppedvel ||
fabs(walker->omega) > sqstoppedangvel) toofast = true;
previous = walker;
walker = walker->next;
if (walker == NULL) break;
if (previous->partn != walker->partn) collapse = false;
if (walker->next == NULL && colcnt > 1000) {
if ((walker->time - prevtime) * 1000.0 < meancoltime)
multifix = true;
}
} while (1);
if (!toofast || multifix) {
powder[nfirst].vx = powder[nfirst].vy = 0.0;
powder[nfirst].omega = 0.0;
powder[nfirst].coltim = VERYBIG;
powder[nfirst].stopped = 1;
powder[nfirst].criterion = toofast ? 2 : 0;
numofstopped++;
if (!toofast)
slowdown++;
else
bigcolfreq++;
updatecoltime(nfirst);
printf("\r%d ", numofstopped);
return 0;
}
if (collapse) {
lifth(nfirst, powder[nfirst].partn);
}
}

```

```

return 1;
}
return 0;
}

int stopping(int nfirst, int nsecond)
{
int tmp;
tmp = stopping(nfirst);
return tmp + 2 * stopping(nsecond);
}

int writecolinfo()
{
FILE *stream;
int k;
colinfo *walker;
if ( (stream = fopen( "colinfo.txt", "w" )) == NULL ) {
printf("OPENING FILE ERROR IN WRITCN\n");
return 1;
}
if ( fprintf (stream, "%.30g %.30g %d %.30g %d\n",ax,ay,numofmix,
elapsedtime,colcnt) < 0 ) {
printf("WRITE ERROR IN WRITCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
for (k = 0; k < numofmix; k++) {
if ( fprintf (stream, "%d:\n",k) < 0 ) {
printf("WRITE ERROR IN WRITCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
for (walker = trajec[k].first; walker != NULL;
walker = walker->next) {
if ( fprintf (stream, "%.30g %.30g %.30g %.30g %.30g %.30g %.30g\n",
walker->time, walker->e, walker->rx, walker->ry, walker->vx,
walker->vy, walker->omega) < 0 ) {
printf("WRITE ERROR IN WRITCN\n");
fclose(stream);
return 2;
}
}
}
if ( fclose (stream) ) {
printf("CLOSING FILE ERROR IN READCN\n");
return 1;
}
return 0;
}

void run(int ncol)
{
int hit, cnt, tmp, hitpartn;
time_t breakpoint1, breakpoint2;
breakpoint1 = time(NULL);
double interval;
bool actual = false, forglide;

```



```

elapsedtime = 0.0;
char name[1024];
FILE *out;
for (colcnt = 0; colcnt < ncol; colcnt++) {
if (!(colcnt % (100 * numtot))) writecolinfo();
hit = findcollision();
#ifdef CHECKIT
ASSERTTEST(powder[hit].coltim >= 0.0,"Negative collision time\n",
    powder[hit].coltim);
#endif
elapsedtime += powder[hit].coltim;
advance(powder[hit].coltim);
hitpartn = powder[hit].partn;
docollision(hit, hitpartn);
tmp = stopping(hit, hitpartn);
if (numofstopped == numofmix) break;
forglide = (hitpartn == numtot+1);
switch (tmp) {
case 3:
updatemoved((powder[hit].rx + powder[hitpartn].rx) / 2.0,
    (powder[hit].ry + powder[hitpartn].ry) / 2.0);
break;
case 1:
updatemoved(powder[hit].rx, powder[hit].ry);
break;
case 2:
updatemoved(powder[hitpartn].rx, powder[hitpartn].ry);
break;
case 0:
default:
updatecoltime(hit, hitpartn);
break;
}

for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
if (powder[cnt].flag == '\1') {
updatecoltime(cnt);
powder[cnt].flag = '\0';
}
}
}

void preinit(int colisionflag)
{
int cnt;
for (cnt = 0; cnt < numtot+3; cnt++) {
if (colisionflag) {
powder[cnt].coltim = VERYBIG;
powder[cnt].partn = numofsph-1;
}
powder[cnt].flag = '\0';
powder[cnt].lastcol = -1;
powder[cnt].stopped = 0;
powder[cnt].glide = 0;
powder[cnt].criterion = -1;
}
}

```

```

void tap()
{
int cnt;
double potenergy = 0.0, velocitygain, angvelgain;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++)
potenergy += powder[cnt].ry;
potenergy *= fabs(ay * 0.01 * tapintensity / numtot);
velocitygain = sqrt(2.0 * potenergy);
angvelgain = 2.0 * sqrt(2.0) * velocitygain / mixdiameter;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++) {
powder[cnt].vx = (-2.0 + 4.0 * doublerand()) * velocitygain;
if (powder[cnt].ry < mixdiameter)
powder[cnt].vy = 0.1 * tapintensity + velocitygain;
else powder[cnt].vy = (-2.0 + 4.0 * doublerand()) * velocitygain;
powder[cnt].ry *= (1.0 + 0.01 * tapintensity);
powder[cnt].omega = (-2.0 + 4.0 * doublerand()) * angvelgain;
}
preinit(1);
numofstopped = 0;
}

void runtap(int ntap)
{
FILE *out;
FILE *outa;
FILE *outb;
int cnta;
if (!continuation) {
out = fopen("descript.txt","w");
fprintf(out, "%d %d %g\n", numtot, ntap, mixdiameter/2.0);
fprintf(out, "Number of spheres: %d\n", numofsph);
fprintf(out, "Number of mixtures: %d\n", numofmix);
fprintf(out, "Initial height: %g\n", initheight);
fprintf(out, "Density: %g\n", numtot*squdiameter*M_PI/(4.0*initheight));
fprintf(out, "Restitution parameter (granule - granule): %g\n", r);
fprintf(out, "Restitution parameter (mixture - granule): %g\n", mixr);
fprintf(out, "Restitution parameter (mixture - mixture): %g\n", mixmixr);
fprintf(out, "Friction: %g\n", friction);
fprintf(out, "m_mixture/m_granule: %g\n", mixmass);
fprintf(out, "Number of collisions: %d\n", ncol);
fprintf(out, "Number of taps: %d\n", ntap);
fprintf(out, "Acceleration(y): %g\n", -ay);
fprintf(out, "Tap intensity: %g\n", tapintensity);
if (veldep) fprintf(out, "Characteristic velocity: %g\n", v0);
fclose(out);
}
out = fopen("finals.txt", continuation ? "a+" : "w");
if (continuation) {
tap();
}
for ( ; tapcnt < ntap; tapcnt++) {
if (continuation) {
continuation = false;
}
initcoltimes();
run(ncol);
fprintf(out, "%d:\n", tapcnt);
}

```

```

for (cnta = 0; cnta < numtot; cnta++) {
fprintf(out, "(%g, %g) %d\n", powder[cnta].rx, powder[cnta].ry,
powder[cnta].criterion);
}
fprintf(out, "\n");
fflush(out);

totcolcnt += colcnt;
tottap++;
outb = fopen("stats.txt", "w");
fprintf(outb, "Collisions per tap: %g\n", (double)
totcolcnt/(double) tottap);
fprintf(outb, "Stopping conditions:\n");
fprintf(outb, "Small kinetic energy - %g%%\n", 100.0 *
(double) slowdown/(double) (slowdown + failtoseparate + bigcolfreq));
fprintf(outb, "Unable to separate discs that roll over each other
- %g%%\n",
100.0 * (double) failtoseparate/(double) (slowdown + failtoseparate +
bigcolfreq));
fprintf(outb, "Big collision frequency due to other causes - %g%%\n",
100.0 * (double) bigcolfreq/(double) (slowdown +
failtoseparate + bigcolfreq));
fclose(outb);
deltrajec();
if (tapcnt == 0) eliminateoverlaps();
tap();
printf("\r %d/%d", tapcnt+1, ntap);
}
fclose(out);
printf("\n");
}

int input()
{
char consolechar;
char filename[81];
double tmpa;
do {
printf("Start from file? (y/n) ");
scanf("%c", &consolechar);
} while (consolechar != 'y' && consolechar != 'n');
if (consolechar == 'y') {
fileflags |= readflag;
readcn2();
}
if (consolechar == 'n') {
numofsph = 0;
printf("Number of mixtures\n");
scanf("%d", &numofmix);
printf("Initial height\n");
scanf("%lf", &initheight);
printf("Density\n");
scanf("%lf", &sqdiameter);
numtot = numofsph + numofmix;
sqdiameter *= (4.0*initheight)/(M_PI*numtot);
sqmixdiameter = SQDIAMETERRATIO*sqdiameter;
mixdiameter = sqrt(sqmixdiameter);
diameter = sqrt(sqdiameter);
}
}

```

```

sqcrossdiameter = pow((mixdiameter+diameter)/2.0,2.0);
if (!(powder = new sphere[numtot+3]) ||
    !(trajec = new collistinfo[numofmix])) {
printf("Not enough memory\n");
return 1;
}
simpleinit2();
r = mixr = 1.0;
do {
printf("Restitution parameter (mixture - mixture)\n");
scanf("%lf",&mixmixr);
} while (mixmixr <= 0.0 || mixmixr > 1.0);
do {
printf("Friction\n");
scanf("%lf",&friction);
} while (friction < 0.0 || friction > 1.0);
mixmass = 1.0;
redmass = mass*mixmass/(mass+mixmass);
do {
printf("Number of collisions\n");
scanf("%d",&ncol);
} while (ncol <= 0);
do {
printf("Number of taps\n");
scanf("%d",&ntap);
} while (ntap <= 0);
printf("Acceleration(y)\n");
scanf("%lf",&tmpa);
if (tmpa > 0.0) tmpa = -tmpa;
if (tmpa != ay) fileflags &= ~colflag;
ay = tmpa;
do {
printf("Tap intensity\n");
scanf("%lf",&tapintensity);
} while (tapintensity < 0.0);
if (veldep) {
do {
printf("Characteristic velocity\n");
scanf("%lf",&v0);
} while (v0 < 0.0);
}
}
consolechar = 'n';
if (consolechar == 'y') fileflags |= writeflag;
return 0;
}

void setup()
{
freq = (int) sqrt((double) numtot);
freq *= 100;
int cnt, tmp;
preinit(!(fileflags & colflag));
double length, chi, rho;
length = 1.0/(2.0*sqrt(2.0));
length /= numtot*(mixdiameter < diameter ? mixdiameter : diameter);
rho = (M_PI/4.0)*(numofsph*sqdiameter+numofmix*sqmixdiameter);
chi = (1.0-7.0*rho/16.0)/pow(1-rho,2.0);

```

```

length /= chi;
printf("Mean free path: %g\n",length);
length += diameter;
printf("Adjusted mean free path: %g\n",length);
if ((nxgrid = nygrid = 1.0/(length*4.0)) < MINGRID)
    nxgrid = nygrid = MINGRID;
nxgrid = nygrid = 1;
printf("Grid size: %g\n",1.0/nxgrid);
pathres = 1.0/(nxgrid*20);
if (!(fileflags & colflag)) {
printf("Calculating all collision times...\n");
initcoltimes();
printf("... Done\n");
}
for (cnt = 0; cnt < numofmix; cnt++)
memorize(cnt);
dounknowncollisions();
}

```

```

void cleanup()
{
int cnt;
const char constfilename[] = "config.txt";
for (cnt = 0; cnt < PATHRESOLUT-1; cnt++) {
if (!(cnt % 23)) {
#ifdef VISUALSTUDIO6
#endif
#ifdef GCC
#endif
}
}
if (fileflags & writeflag) writcn(constfilename);
delete [] powder;
delcolinfo();
}

```

```

void setseed()
{
time_t t;
unsigned s;
s = (unsigned) time(&t);
FILE *out;
out = fopen("debug.txt","w");
fprintf(out,"%u\n",s);
fclose(out);
srand(s);
}

```

```

int main(int argc, char *argv[])
{
setseed();
int ret;
if (argc != 1) return 1;
if ((ret = input()) != 0) return ret;
setup();
runtap(ntap);
cleanup();
return 0;
}

```

```

}

int main2(int argc, char *argv[])
{
int cnt, cnta;
double res;
readcn("maxwell.txt");
for (cnta = 1; cnta < 11; cnta++) {
res = 0.0;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++)
res += pow(powder[cnt].vx * powder[cnt].vx, cnta);
res /= numtot;
for (cnt = 1; cnt <= 2*cnta-1; cnt += 2)
res /= cnt;
res = pow(res, 1.0/cnta);
printf("%g\n", res);
}
for (cnta = 1; cnta < 11; cnta++) {
res = 0.0;
for (cnt = 0; cnt < numtot; cnt++)
res += pow(powder[cnt].ry, cnta);
res /= numtot;
for (cnt = 1; cnt <= cnta; cnt++)
res /= cnt;
res = pow(res, 1.0/cnta);
printf("%g\n", res);
}
return 0;
}

```

11.2. Simulacija frakcionog modela kompaktifikacije

```

=====
% program: fmc7.m
=====
clc; clear; close all;
crtaj=0; % 1 - crta, 0 - ne crta;
%===
number_of_runs=30000;
N=25; % broj objekata
%--- vreme (zavisi od N):
t_trial_max=5.0e+11; % Max. vreme koje ce biti dosegnuto u simulaciji
      % = k*N, k=10,50,100,...;
t_length=1.0e+6; % Max. duzina vektora vremena = k*N, k=10,50,100,...;
%--- geometrija objekta:
l_up=1; % velicina objekta u stanju "up"
l_down=3; % velicina objekta u stanju "down"
L_N=l_down*N; % ukupna duzina sistema kada su svi objekti
      % u stanju 'down' = Max. duzina sistema;
rho_d=N*l_down/L_N; % = 1.0; % Max. gustina sistema kada su svi objekti
      % u stanju 'down';
rho_u=N*l_up/L_N; % = l_up/l_down = 1/3; % Min. gustina sistema kada su
      % svi objekti u stanju 'up';
%--- verovatnoce dogadjaja 'up <--> down' su odredjene parametrom
% Omega_c = 0 - 1;
Omega_c=0.4; % [ (0)... 'up <-- down' ... (Omega_c) ...
      % 'down <-- up' ... (1) ]
Omega_prob_ud=Omega_c; % verovatnoca dogadjaja 'up <-- down';
Omega_prob_du=1-Omega_c; % verovatnoca dogadjaja 'down <-- up';
Omega_prob=Omega_prob_ud+Omega_prob_du; % u modelu je Omega_prob = 1.0!;
Gama_c=Omega_prob_ud/Omega_prob_du; % Intenzitet vibracione pobude: Gama_c
      % = Omega_c/(1-Omega_c);

%=== parametri za odredjivanje waiting time tau_r:
gama_const=100.0;
%beta=0.8; %0.8; %1.0, ... , 0.8, 0.6, 0.4, 0.2, ... ,0.0;
beta=1.0 / (1.0 + 1.0/Gama_c); %--- BETA (postulirana veza intenziteta
      % vibracione pobude Gama_c i parametra beta);
gama_i=(gama_const/N)^(1.0/beta);
=====
conf=ones(N,1); % vektor u kome je zabelezena konf. sistema u nekom
      % trenutku vremena.
      % neki clan niza 'conf' moze imati vrednost ili l_up=1
      % ili l_down=3;
conf_0=conf*l_up; % pocetna konf. kada su svi objekti u stanju 'up';
L_0=sum(conf_0); % ukupna duzina pocetne konf. kada su svi objekti
      % u stanju 'up';
rho_0=L_0/L_N; % pocetna gustina kada su svi objekti u stanju 'up';
rho_inf=(rho_d*Omega_prob_du + rho_u*Omega_prob_ud)/Omega_prob;
% steady-state gustina (t-->Inf);
%--- ekvidistantna vremenska skala:
% Obrazovanje vektora t_log vremenskih trenutaka koji su ekvidistantni
% na log-skali;
a=1.0e+0; % donja granica
b=t_trial_max; % gornja granica = max. vreme koje je dostignuto
      % u SVIM run-ovima;
nn=500; % broj tacaka vektora t_log je (n+1); prva tacka je t_log(1)=a,
      % poslednja tacka je t_log(n+1)=b.
% t_log je vektor realnih brojeva

```

```

for i = 1:(nn+1)
    t_log(i)=a*(b/a)^((i-1)/nn); % ekvidist. log. skala realnih brojeva;
    %t_log(i)=a+(i-1)*(b-a)/nn; % ekvidist. lin. skala realnih brojeva
    % (alternativa);
end
% tt - vektor vremena ...
for j=1:nn
    %tt(j)=t_log(j); % tt - vektor vremena (sadrzi n tacaka)
    tt(j)=0.5*(t_log(j)+t_log(j+1)); % tt - vektor vremena (sadrzi n tacaka)
end
%--density=zeros(nn,1); % inicijalizacija (ogrubljeni vektor gustine
    % za jedan run)
density1=zeros(nn,1); % inicijalizacija (ogrubljeni vektor gustine
    % za jedan run)
density_runs=zeros(nn,number_of_runs); % matrica vektora gustina
    % za sve run-ove;

for run=1:number_of_runs
disp(run);
rng('shuffle'); % seeds the random number generator based
    % on the current time (ovo mozda nije potrebno!);
%rand('seed',sum(100*clock)); % ... za prethodne verzije Matlab-a!!
conf=conf_0; % pocetna konf. kada su svi objekti u stanju 'up';
t_ind=0; % inicijalizacija !!!
t_trial=0; % inicijalizacija !!!
density_trial=0; % inicijalizacija !!!
t_trial_array=zeros(t_length,1); % vektor vremena tokom jednog run-a;
density_t_trial_array=zeros(t_length,1); % vektor gustina za razna
    % vremena tokom jednog run-a;

while t_trial<=t_trial_max, % dok se se dostigne max. vreme ...
    r_site=unidrnd(N,1); % slucajan izbor site-a (objekta);
    r_event=unifrnd(0,1); % izbor slucajnog broja koji ce odrediti da li
        % treba da se desi dogadjaj 'up <-- down'
        % ili 'down <-- up';
        % alternativa: r_event=random('unif',0,1,1);
    obj_state=conf(r_site); % proverava u kom stanju se nalazi
        % izabrani objekat;
    if r_event <= Omega_c % ako treba da se desi dogadjaj
        % 'up <-- down' ...
        if obj_state == l_down % ako je slucajno izabrani objekat
            % u stanju 'down'...;
            conf(r_site)=l_up; % ...promenicemo njegovo stanje u 'up';
        end
    else % ako treba da se desi dogadjaj 'down <-- up' ...
        if obj_state == l_up % ako je slucajno izabrani objekat
            % u stanju 'up'...;
            conf(r_site)=l_down; % ...promenicemo njegovo stanje u 'down';
        end
    end
end

% Odredjivanje waiting time tau_r::
% - distribuciju slucajne promenjive tau_r odredjuju parametri:
% gama_i=1.0; beta=0-1;
% - PRNG1 (M-L)
%r_nums=unifrnd(0,1,1,2); % dva broja u_r i v_r se biraju iz
% uniformne raspodele;
%u_r=r_nums(1); v_r=r_nums(2);
%tau_r=-gama_i * log(u_r) * (sin(beta*pi)/tan(beta*pi*v_r) ...
- cos(beta*pi)^(1/beta);

```



```

% - PRGN2 (M-L)
tau_r=mlrnd(beta,gama_i); % function: Mittag-Leffler Pseudo-Random
% Number Generator;
% - Pareto distribution
%u_r=unifrnd(0,1,1,1); % broj u_r se bira iz uniformne raspodele;
%tau_r=(1.0/gama_i)*(u_r^(-1.0/beta) - 1.0)/ ...
((gamma(1.0-beta))^(1.0/beta));
% - CONST
%tau_r=1.0; % waiting time: tau_r=const.=1 (alternativa);
%t_trial=t_trial+tau_r/N; % vremenski trenutak u kome se desio
% dogadjaj 'up <-->down';

t_trial=t_trial+tau_r;
density_trial=sum(conf)/L_N; % ... i gustina sistema u tom trenutku;
t_ind=t_ind+1; % brojac (azuriranje index-a vektora
% vremena i gustine);
t_trial_array(t_ind)=t_trial; % formiranje vektora vremena;
density_t_trial_array(t_ind)=density_trial; % formira se vektor
% gustina

% za sva vremena tokom jednog run-a (gustina u trenutku t_trial). ;
end %while
if number_of_runs==1 % ako je samo jedan run ...
    data_out1=[t_trial_array density_t_trial_array]; % vremena, gustine
    save('ascii','one_run_density.mat','data_out1');
end %if
% ogrubljanje vektora gustine:
indexi=find(0<t_trial_array & t_trial_array<=t_trial_max);
% vektor index-a elemenata vektora t_trial_array za koje je
zadovoljen uslov ...
t_trial_array=t_trial_array(indexi);
% vektor vremena koja se nalaze u intervalu [0 t_trial_max];
density_t_trial_array=density_t_trial_array(indexi);
% ... i odgovarajuci vektor gustina.
for j=1:nn
    ind=find(t_log(j)<=t_trial_array & t_trial_array<t_log(j+1));
    % vektor index-a elemenata vektora t_trial_array koji se nalaze
    % u j-tom vremenskom intervalu;
    if isempty(ind)
        if j==1
            density(j)=rho_0;
            density1(j)=rho_0;
        else
            %density(j)=density(j-1); % ako u j-tom vremenskom intervalu
            % nema nijednog trenutka vremena iz vektora t_trial_array,
            % onda je gustina ...
            density1(j)=density1(j-1);
            density(j)=density1(j);
            % ako u j-tom vremenskom intervalu nema nijednog trenutka vremena
            % iz vektora t_trial_array,
            % onda je gustina u j-tom intervalu jednaka poslednjoj gustini
            % iz prethodnog (j-1) intervala;
        end
    end
else
    max_ind=max(ind);
    density(j)=mean(density_t_trial_array(ind));
    % gustine za jedan vremenski interval (j-ti) se usrednjavaju;
    density1(j)=mean(density_t_trial_array(max_ind));
    % poslednja gustina dostignuta u jednom
    % vremenskom intervalu (j-tom);

```

```

    end %if
end %for
% rezultat za jedan run se unosi u matricu gustine:
density_runs(:,run)=density; % formiranje matrice gustina
    % za sve run-ove;

if crtaj==1
figure(1); % graficki prikaz pojedinačnih run-ova;
    semilogx(t_trial_array, density_t_trial_array, ...
    '-xr',tt,density,'-ob'); grid; shg;
    disp('Press any key ...'); pause;
end %if
end %for
% Usrednjavanje gustina po run-ovima:
sum_density=sum(density_runs,2);
mean_density=sum_density./number_of_runs;
if crtaj==1
    figure(2);
    semilogx(tt,mean_density,'-b'); grid; shg;
    disp('Press any key ...'); pause;
end %if
% Poredjenje sa teorijskim rezultatima ...
%--P=6;
% accuracy: 10^(-P)
alpha=1.0; % alpha=const.=1.0 (parametar u generalizovanoj ML funkciji);
Omega_prob_N=Omega_prob/gama_const;
% Omega_prob=Omega_prob_ud+Omega_prob_du = 1.0;
tau=(Omega_prob_N)^(-1/beta); % vreme relaksacije

t_tau=tt./tau;
z=(t_tau).^beta;
ml_funct=mlf(beta,alpha,z,P); % vrednosti ML funkcije;
%--%rho_0
je pocetna gustina kada su svi objekti u stanju 'up';
%rho_inf je steady-state gustina;
rho_ml = rho_inf - (rho_inf-rho_0)*ml_funct;
% teorijska zavisnost gustine od vremena;
%---
if crtaj==1
    figure(3);
    semilogx(tt,mean_density,'-b',tt,rho_ml,'-r'); grid; shg;
    disp('Press any key ...'); pause;
end %if
%--%
Output:
data_out=[tt' mean_density rho_ml']; % vremena, gustine, ML funkcija, ...
save('-ascii','all_runs_density.mat','data_out');
disp('Done.');
```

12. Literatura

- Arévalo, R., D. Maza, and L. A. Pugnaloni, 2006, Phys. Rev. E 74, 021303.
- Arsenović, D., S.B. Vrhovac, Z.M. Jakšić, L. Budinski-Petković, and A. Belić, 2006, Phys. Rev. E 74, 061302.
- Aste, T., 2005, J. Phys.: Condens. Matter 17, S2361 .
- Aste, T., M. Saadatfar, and T. J. Senden, 2005, Phys. Rev. E 71, 061302 .
- Aste, T., 2006, Phys. Rev. Lett. 96, 018002.
- Aurenhammer, F., 1991, ACM Computing Surveys 23, 345.
- Barrat, A., and V. Loreto, 2000, J. Phys. A: Math. Gen. 33, 4401.
- Barrat, A., and V. Loreto, 2001, Europhys. Lett. 53, 297.
- Bartelt, M. C., and V. Privman, 1990, J. Chem. Phys. 93, 6820.
- Berardi, C. R., K. Barros, J. F. Douglas, and W. Losert, 2010, Phys. Rev. E 81, 041301.
- Bernu, B., F. Delyon, and R. Mazighi, 1994, Phys. Rev. E 50, 4551.
- Bonnier, B., 2001, Phys. Rev. E 64, 066111.
- Boutreux, T., and P. G. de Gennes, 1997, Physica A 244, 59.
- Bratberg, I., F. Radjai, and A. Hansen, 2002, Phys. Rev. E 66, 031303.
- Brey, J. J., A. Prados, and B. Sanchez-Rey, 1999, Phys. Rev. E 60, 5685.
- Brey, J. J., and A. Prados, 2001, Phys. Rev. E 63, 061301.
- Brey, J. J., and A. Prados, 2003, Phys. Rev. E 68, 051302.
- Budinski-Petković, Lj., M. Petković, Z. M. Jakšić, and S. B. Vrhovac, 2005, Phys. Rev. E 72, 046118.
- Budinski-Petković, Lj., and S. B. Vrhovac, 2005, Eur. Phys. J. E 16, 89.
- Budinski- Petković, Lj., and U. Kozmidis-Luburić, 1997, Phys. Rev. E 56, 6904.
- Budinski- Petković, Lj., and U. Kozmidis-Luburić, 1997, Physica A 236, 211.
- Budinski- Petković, Lj., and U. Kozmidis-Luburić, 2001, Physica A 301, 174.
- Cadilhe, A., N. A. M. Araújo, and V. Privman, 2007, J. Phys.: Condens. Matter 19, 065124.
- Cleef, J. V., 1991, Am. Sci. 79, 304.
- Divoux, T., H. Gayvallet, and J.-C. Géminard, 2008, Phys. Rev. Lett. 101, 148303.
- Drew, B., „Hough transform,” From MathWorld–A Wolfram Web Resource, created by Eric W. Weisstein. <http://mathworld.wolfram.com/HoughTransform.html>.

Edwards, S. F., and D. V. Grinev, 1998, *Phys. Rev. E* 58, 4758.

Ennis, B. J., J. Green, and R. Davies, 1994, *Chem. Eng. Prog.* 90, 32.

Evans, J. W., 1993, *Rev. Mod. Phys.* 65, 1281.

Feder, J., 1980, *J. Theoret. Biol.* 87, 237.

Fierro, A., M. Nicodemi, and A. Coniglio, 2002, *Phys. Rev. E* 66, 061301.

Foerster, S. F., M. Y. Louge, H. Chang, and K. Allia, 1994, *Phys. Fluids* 6, 1108.

Fraser, D. P., M. J. Zuckermann, and O. G. Mouritsen, 1990, *Phys. Rev. A* 42, 3186.

Fulger, D., E. Scalas, and G. Germano, 2008, *Phys. Rev. E* 77, 021122.

Ghaskadvi, R. S., and M. Dennin, 2000, *Phys. Rev. E* 61, 1232.

Goldman, D., M. D. Shattuck, C. Bizon, W. D. McCormick, J. B. Swift, and H. L. Swinney, 1998, *Phys. Rev. E* 57, 4831.

Goldshtein, A., and M. Shapiro, 1995, *J. Fluid Mech.* 282, 75.

Gravish, N., S. V. Franklin, D. L. Hu, and D. I. Goldman, 2012, *Phys. Rev. Lett.* 108, 208001.

Heinsalu, E., M. Patriarca, I. Goychuk, G. Schmid, and P. Hänggi, 2006, *Phys. Rev. E* 73, 046133.

Heinsalu, E., M. Patriarca, I. Goychuk, and P. Hänggi, 2007, *J. Phys.: Condens. Matter* 19, 065114.

Herbst, O., M. Huthmann, and A. Zippelius, 2000, *Granular Matter* 2, 211.

Hilfer, R., and L. Anton, 1995, *Phys. Rev. E* 51, R848.

Hilfer, R., 2002, *J. Non-Cryst. Solids* 305, 122.

Huerta, A., and G. G. Naumis, 2003, *Phys. Rev. Lett.* 90, 145701.

Jaeger, H. M., and S. R. Nagel, 1996, *Rev. Mod. Phys.* 68, 1259.

Jakšić, Z.M., S. B. Vrhovac, B. M. Panić, Z. Nikolić, and B. M. Jelenković, 2008, *Eur. Phys. J. E* 27, 345.

Janicki, A., and A. Weron, 1994, *Stat. Sci.* 9, 109.

Johnson, K. L., 1985, *Contact Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, U.K.)

Josserand, C., A. Tkachenko, D. M. Mueth, and H. M. Jaeger, 2000, *Phys. Rev. Lett.* 85, 3632.

Kadanoff, L. P., 1999, *Rev. Mod. Phys.* 71, 435.

Knight, J.B., C.G. Fandrich, C.N. Lau, H.M. Jaeger, and S.R. Nagel, 1995, *Phys. Rev. E* 51, 3957.

Kolan, A. J., E. R. Nowak, and A. V. Tkachenko, 1999, *Phys. Rev. E* 59, 3094.

Kozubowski, T. J., and S. T. Rachev, 1999, *Int. J. Comput. Numer. Anal. Appl.* 1, 177.

Krapivsky, P. L., and E. Ben-Naim, 1994, *J. Chem. Phys.* 100, 6778.

Lončarević, I., Lj. Budinski-Petković, S. B. Vrhovac, and A. Belić, 2009, *Phys. Rev. E* 80, 021115.

Lubachevsky, B. D., 1991, *J. Comput. Phys.* 94, 255.

Luding, S., E. Clement, A. Blumen, J. Rajchenbach, and J. Duran, 1994, *Phys. Rev. E* 50, R1762.

Lumay, G., and N. Vandewalle, 2005, *Phys. Rev. Lett.* 95, 028002.

Lumay, G., and N. Vandewalle, 2005, *Phys. Rev. Lett.* 95, 205502.

Lumay, G., and N. Vandewalle, 2006, *Phys. Rev. E* 74, 021301.

Mainardi, F., 1996, *Chaos, Solitons & Fractals* 7, 1461.

Mainardi, F., and R. Gorenflo, 2000, *J. Comput. Appl. Math.* 118, 283.

Manna, S. S., and N. M.Švrakić, 1991, *J. Phys. A: Math. Gen.* 24, L671.

Marty, G., and O. Dauchot, 2005, *Phys. Rev. Lett.* 94, 015701.

McNamara, S., and W.R. Young, 1994, *Phys. Rev. E* 50, R28.

McNamara, S., and E. Falcon, 2005, *Phys. Rev. E* 71, 031302.

Meerschaert, M. M., and H. -P. Scheffler, 2004, *J. Appl. Probab.* 41, 623.

Mehta, A., G. C. Barker, and J. M. Luck, 2004, *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* P10014.

Metzler, R., and J. Klafter, 2000, *Phys. Reports* 339, 1.

Miller, S., and S. Luding, 2004, *Phys. Rev. E* 69, 031305.

Moučka, F., and I. Nezbeda, 2005, *Phys. Rev. Lett.* 94, 040601.

Mueggenburg, N., 2012, *Phys. Rev. E* 85, 041305.

Nicodemi, M., and A. Coniglio, 1999, *Phys. Rev. Lett.* 82, 916.

Nicolas, M., P. Duru, and O. Poulighen, 2000, *Eur. Phys. J. E* 3, 309.

Nielaba, P., V. Privman, and J. S. Wang, 1990, *J. Phys. A: Math. Gen.* 23, L1187.

Nowak, E. R., J. B. Knight, M. L. Povinelli, H. M. Jaeger, and S. R. Nagel, 1997, *PowderTechnology* 94, 79.

Nowak, E. R., J. B. Knight, E. Ben-Naim, H. M. Jaeger, and S. R. Nagel, 1998, *Phys. Rev. E* 57, 1971.

Philippe, P., and D. Bideau, 2001, *Phys. Rev. E* 63, 051304.

Philippe, P., and D. Bideau, 2002, *Europhys. Lett.* 60, 677.

Philippe, P., and D. Bideau, 2003, *Phys. Rev. Lett.* 91, 104302.

Prados, A., and J. J. Brey, 2002, *Phys. Rev. E* 66, 041308.

Privman, V., (Ed.), 2000, *Adhesion of Submicron Particles on Solid Surfaces*, *Colloids Surf. A* 165, 1.

Pomeau, Y., 1980, *J. Phys. A: Math. Gen.* 13, L193.

Pouliquen, O., M. Belzons, and M. Nicolas, 2003, *Phys. Rev. Lett.* 91, 014301.

Pugnaloni, L. A., and G. C. Barker, 2004, *Physica A* 337, 428.

Pugnaloni, L. A., M. G. Valluzzi, and L. G. Valluzzi, 2006, *Phys. Rev. E* 73, 051302.

Reis, P. M., R. A. Ingale, and M. D. Shattuck, 2006, *Phys. Rev. Lett.* 96, 258001.

Ribièrè, P., P. Philippe, P. Richard, R. Delannay, and D. Bideau, 2005, *J. Phys.: Condens. Matter* 17, S2743.

Ribièrè, P., P. Richard, R. Delannay, and D. Bideau, 2005, *Phys. Rev. Lett.* 95, 268001.

Ribièrè, P., P. Richard, D. Bideau, and R. Delannay, 2005, *Eur. Phys. J. E* 16, 415.

Ribièrè, P., P. Richard, P. Philippe, D. Bideau, and R. Delannay, 2007, *Eur. Phys. J. E* 22, 249.

Richard, P., L. Oger, J. P. Troadec, and A. Gervois, 1999, *Phys. Rev. E* 60, 4551.

Richard, P., J. P. Troadec, L. Oger, and A. Gervois, 2001, *Phys. Rev. E* 63, 062401.

Richard, P., P. Philippe, F. Barbe, S. Bourles, X. Thibault, and D. Bideau, 2003, *Phys. Rev. E* 68, 020301(R).

Richard, P., M. Nicodemi, R. Delannay, P. Ribièrè, and D. Bideau, 2005, *Nature Materials* 4, 121.

Saxena, R. K., A. M. Mathai, and H. J. Haubold, 2004, *Physica A* 344, 657.

Sokolov, I. M., A. Blumen, and J. Klafter, 2001, *Europhys. Lett.* 56, 175.

Sokolov, I. M., A. Blumen, and J. Klafter, 2001, *Physica A* 302, 268.

Sokolov, I. M., 2006, *Phys. Rev. E* 73, 067102.

Stadler, P. F., J. M. Luck, and A. Mehta, 2001, *Europhys. Lett.* 57, 46.

Stanislavsky, A. A., 2003, *Phys. Rev. E* 67, 021111.

Stanislavsky, A. A., 2003, *Acta Physica Polonica B* 34, 3649.

Swendsen, R., 1981, *Phys. Rev. A* 24, 504.

Talbot, J., G. Tarjus, and P. Viot, 1999, *J. Phys. A: Math. Gen.* 32, 2997.

- Talbot, J., G. Tarjus, and P. Viot, 2000, Phys. Rev. E 61, 5429.
- Talbot, J., G. Tarjus, and P. Viot, 2001, Eur. Phys. J. E 5, 445.
- Tarjus, G., and P. Viot, 2004, Phys. Rev. E 69, 011307.
- To, K., P. Y. Lai, and H. K. Pak, 2001, Phys. Rev. Lett 86, 71.
- Vargas, W. L., and J. J. McCarthy, 2007, Phys. Rev. E 76, 041301.
- Villarruel, F. X., B. E. Lauderdale, D. M. Mueth, and H. M. Jaeger, 2000, Phys. Rev. E 61, 6914.
- Walton, O.R., and R. L. Braun, 1986, J. Rheol. 30, 949.

Biografija

Kandidat MSc Svetlana Živković-Radeta rođena je 08.07.1970.godine u Beogradu. Osnovnu i srednju školu završila je u Beogradu. Osnovne studije završila je na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu 2006.godine sa srednjom ocenom 8,18 i ocenom 10 na diplomskom ispitu. Naziv teme diplomskog rada, koji je priznat kao master rad je bio „Uticaj ubrzanog starenja na dielektrične relaksacije polietilena visoke gustine (PEVG)”, u Laboratoriji za fiziku čvrstog stanja Fizičkog fakulteta pod rukovodstvom prof. dr Jablana Dojčilovića. Diplomске akademske studije – studije drugog stepena (master), odsek Opšta fizika, završila je 2007. godine na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu sa srednjom ocenom 8,39. Iste godine upisuje Doktorske studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu iz naučne oblasti Fizika kondenzovanog stanja materije.

Predmet istraživanja S. Živković je analiza procesa kompaktifikacije granularnog sistema pod uticajem vertikalnih vibracija. Do sada je objavila četiri rada u međunarodnim časopisima i jedan rad koji je saopšten na međunarodnoj konferenciji.

Radovi objavljeni u međunarodnim časopisima:

- (M21)

1. S. Živković, Z. M. Jakšić, D. Arsenović, Lj. Budinski-Petković, S. B. Vrhovac "Structural characterization of two-dimensional granular systems during the compaction", *Granular Matter*, **13**, 493 - 502, (2011), DOI: 10.1007/s10035-011-0261-8.

2. S. Živković, Z. M. Jakšić, I. Lončarević, Lj. Budinski-Petković, S. B. Vrhovac and A. Belić "Optimization of the monolayer growth in adsorption-desorption processes ", *Physical Review E*, **88**, 052131, (2013), DOI: 10.1103/PhysRevE.88.052131.

- (M22)

1. S. Živković, Z. M. Jakšić, J. R. Šćepanović, I. Lončarević, Lj. Budinski-Petković, S. B. Vrhovac "Fractional kinetic model for granular compaction", *The European Physics Journal B*, **86**, 461, (2013), DOI: 10.1140/epjb/e2013-40455-x.

- (M23)

1. S. Živković, Z. M. Jakšić, D. Arsenović, Lj. Budinski-Petković, S. B. Vrhovac
"Structural characterization and statistical properties of two-dimensional granular
systems during the compaction", *Acta Physica Polonica A*, **120**, 246 - 251, (2011), DOI:
<http://przyrbwn.icm.edu.pl/APP/PDF/120/a120z2p09.pdf>

Rad saopšten na međunarodnoj konferenciji:

1. S. Živković, Z. M. Jakšić, D. Arsenović, S. B. Vrhovac
"Structural characterization and statistical properties of two-dimensional granular
systems during the compaction",
Twelfth Annual Conference Materials Research Society of Serbia and Institute of
Technical Sciences of the Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade; under the
auspices of FEMS and MRS (YUCOMAT - 2010), 2010 Herceg Novi, Montenegro,
Book of Abstracts p. 126.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Светлана Живковић- Радета

број индекса 9/2007

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Структуралне промене у грануларном материјалу током процеса
компактификације

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, 03.04.2014. године

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Светлана Живковић- Радета

Број индекса 9/2007

Студијски програм Физика кондензованог стања материје

Наслов рада Структуралне промене у грануларном материјалу током процеса компактификације

Ментор Др. Зорица Јакшић

Потписани/а Светлана Живковић-Радета

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис докторанда

У Београду, 03.04.2014. године

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Структуралне промене у грануларном материјалу током процеса
компактификације

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство
2. Ауторство - некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, 03.04.2014. године

1. Ауторство - Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.

2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.

3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.

4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.

5. Ауторство – без прераде. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.

6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.