

MECHANIKA OŚRODKÓW KOMÓRKOWYCH I GRANULARNYCH Opis wzorowany na formalizmie mechaniki kwantowej

A. Góźdź

Instytut Fizyki, UMCS, pl. M. Curie-Skłodowskiej 1, 20-031 Lublin

S t r e s z c z e n i e. W pracy przedstawiono zarysy metody jednolitego opisu ośrodków granularnych i komórkowych. Formalizm wykorzystuje elementy mechaniki kwantowej chociaż można go zakwalifikować do metod mikroskopowo-makroskopowych. Pozwala on modelować własności ośrodka bazując na znajomości fenomenologicznych oddziaływań pomiędzy jego granulami lub komórkami.

S ł o w a k l u c z o w e: mechanika, ośrodki granularne, ośrodki komórkowe

WSTĘP

Struktura gleby i materiałów biologicznych posiada wiele wspólnych cech pozwalających na jednolity opis tych zdawałoby się różnych ośrodków fizycznych. Zarówno gleba jak i ośrodki komórkowe są złożone z oddziałujących elementów dyskretnych. Natura oddziaływania oraz forma elementów dyskretnych decyduje o statycznych i dynamicznych własnościach ośrodka odróżniając czy jest to materiał granularny czy komórkowy. W poniższym opracowaniu proponowany jest opis wykorzystujący techniki znane z mechaniki kwantowej. Pozwalają one w stosunkowo prosty sposób uwzględnić nieciągłą naturę ośrodków granularnych i komórkowych bez konieczności analizy poszczególnych składników elementarnych ośrodka.

MECHANIKA OŚRODKÓW GRANULARNYCH I KOMÓRKOWYCH

Większość teorii fenomenologicznych nie pozwala na analizę fizycznych własności ośrodków granularnych i komórkowych z mniej lub bardziej podstawowych zasad fizycznych. Można wyróżnić zasadniczo dwie skrajnie różne grupy modeli reprezentujących ośrodki granularne. Pierwszą grupą są proste modele geometryczne, drugą natomiast modele statystyczne. Pośrednią grupę stanowią liczne modele wywodzące się na ogół z teorii ośrodków ciągłych. Pewien przegląd tych modeli, daleki od kompletności, można znaleźć w publikacjach [1-3, 9-11, 13-17].

W pracach [4,5,12] przedstawiona jest natomiast idea opisu interesujących nas ośrodków przy pomocy formalizmu zbliżonego do mechaniki kwantowej. Oczywiście,

*Praca finansowana przez Komitet Badań Naukowych, Nr. 5P 06F 003 10.

ponieważ rozważane układy mają w zasadzie charakter makroskopowy efekty interferencji kwantowej i fluktuacje kwantowe nie grają żadnej roli. Z jednej strony pozwala to na znaczne uproszczenia formalizmu, z drugiej zaś nie pozwala wykorzystać w pełni metod przestrzeni Hilberta oraz niektórych wypracowanych w mechanice kwantowej interpretacji.

Formalizm ten umożliwia stworzenie bardziej jednolitego opisu nieregularnie rozłożonych ziaren lub komórek (wykorzystując wektory stanów) niż klasyczna teoria korzystająca z pomocy sił wymagająca ich analizy na wszelkich granicach nieciągłości ośrodka. Typowe postępowanie poprzez próby mniej lub dokładniejszego uwzględnienia klasycznych sił działających na granicach ziaren praktycznie uniemożliwia efektywną analizę takiego ośrodka.

Pierwszym elementem określającym rodzaj materiału z którego zbudowany jest analizowany ośrodek jest operator Hamiltona reprezentujący energię układu oraz oddziaływania pomiędzy jego składnikami. Właśnie oddziaływania pomiędzy komórkami czy też granulami determinują zasadnicze własności mechaniczne ośrodka oraz jego dynamikę. Oddziaływanie może także pozwolić uwzględnić fakt występowania różnych innych materiałów pomiędzy granulami (w porach) takich jak na przykład często występujące ciecze. W układach komórkowych natomiast oddziaływanie powinno także umożliwić symulację wiązania komórek poprzez ściany komórek.

Drugim podstawowym elementem opisu są wektory stanów reprezentowane na ogół poprzez pewne funkcje związane ściśle z kształtem, rozmiarem, rozkładem masy oraz jej bardziej specyficznymi cechami takimi jak posiadanie lub nie ładunków elektrycznych, momentów magnetycznych i innych własności mogących mieć wpływ na zachowanie się granул lub komórek.

Hamiltonian H składa się z zasadniczych dwóch części: jednociałowej H_1 oraz dwuciałowej H_2 . Hamiltonian jednociałowy H_1 określony jest przez energię kinetyczną T oraz możliwe potencjały zewnętrzne (grawitacyjny, elektryczne lub co ważniejsze mechaniczne związane z działającymi zewnętrznymi siłami mechanicznymi pochodzącymi od otoczenia granuli lub komórki). Człon dwuciałowy H_2 jest odpowiedzialny za oddziaływanie pomiędzy granulami co zasadniczo określa własności mechaniczne ośrodka. Hamiltonian można zatem zapisać w postaci sumy części jednociałowej i dwuciałowej:

$$H = H_1 + H_2 \quad (1)$$

Jako całkowity wektor stanu w omawianym formalizmie proponuje się funkcję w postaci iloczynu wektorów stanu poszczególnych granул lub komórek:

$$\left| \nu_1, \dots, \nu_N \right\rangle = \prod_{i=1}^N \phi_{\nu_i}(\vec{r}_i). \quad (2)$$

Oznacza to nieuwzględnienie kwantowomechanicznych efektów interferencyjnych. Ponadto ta forma wektora stanu pozwala tylko na określenie tylko średniej energii układu.

Powinno to być bardzo dobrym przybliżeniem w pełni kwantowomechanicznego wektora stanu ze względu na makroskopowe rozmiary granul i komórek w ośrodku. Indeksy ν_k określają cechy granuli lub komórki. Odpowiadają one tak zwanym liczbom kwantowym w mechanice kwantowej.

Całkowita energia ośrodka złożonego z N granul lub komórek może być zatem wyrażona jako średnia operatora Hamiltona (1) liczona w stanie (2):

$$\begin{aligned}
 E(\nu_1, \dots, \nu_N) &= \langle \nu_1, \dots, \nu_N | H | \nu_1, \dots, \nu_N \rangle = \\
 &= \sum_{k=1}^N \int_{R^3} d^3 \vec{r}_k \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) H_1 \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) + \\
 &+ \sum_{k < n} \int_{R^3} d^3 \vec{r}_k \int_{R^3} d^3 \vec{r}_n \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \phi_{\nu_n}(\vec{r}_n) H_2 \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \phi_{\nu_n}(\vec{r}_n), \quad (3)
 \end{aligned}$$

gdzie $\langle a | b \rangle$ oznacza iloczyn skalarny wektorów stanu a i b w przestrzeni typu $L^2(R^{3N})$. Natomiast całki są liczone po obszarze całej przestrzeni R^3 ponieważ kształty granul lub komórek są jednoznacznie określone przez ich wektory stanów $\phi_{\nu_k}(\vec{r}_k)$.

W wielu zagadnieniach ważna jest znajomość energii pojedynczej granuli czy też komórki w ośrodku. Można ją łatwo otrzymać ekstrahując k -tą granulę lub komórkę z równania (3). Prowadzi to do następującego wyrażenia:

$$\begin{aligned}
 E(\nu_1, \dots, \nu_N) &= \int_{R^3} d^3 \vec{r}_k \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) H_1 \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) + \\
 &+ \sum_{n=1}^N (1 - \delta_{nk}) \int_{R^3} d^3 \vec{r}_k \int_{R^3} d^3 \vec{r}_n \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \phi_{\nu_n}(\vec{r}_n) H_2 \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \phi_{\nu_n}(\vec{r}_n). \quad (4)
 \end{aligned}$$

Chociaż jest możliwe wykorzystanie równania Schrödingera jako równania ruchu, jest to mało praktyczna droga. Proponuje się w opisywanym formalizmie zaniedbanie członu kinetycznego w hamiltonianie H_1 . Człon ten można w następnych krokach odtworzyć na bazie klasycznych równań ruchu, np. równań Newtona. Takie podejście umożliwi zbliżenie formalizmu do klasycznej teorii sprężystości i wykorzystanie jej potężnego aparatu. W takim podejściu do zagadnienia wyrażenie (3) określa statyczną energię materiału granularnego lub komórkowego. Minimum tej energii wyznacza konfigurację równowagową ośrodka.

Jednakże zasadniczą cechą ośrodka granularnego lub komórkowego z punktu widzenia jego własności mechanicznych jest możliwość pojawienia się deformacji i zjawisk z nią związanych. Wynika stąd konieczność wprowadzenia operatorów deformacji działających na wektory stanów pojedynczych granul lub komórek dających w efekcie globalną deformację całego ośrodka [4]. Ze względu na własności wektorów stanów operatory deformacji powinny być operatorami unitarnymi w przestrzeni stanów

pojedynczej granuli lub komórki. Pozwala to, podobnie jak w mechanice kwantowej, na konsekwentne wprowadzenie zasad zachowania będących istotnym czynnikiem ograniczającym możliwości ruchu układu. Operatory deformacji mogą być zdefiniowane w następującej postaci:

$$T(g)\phi(\vec{r}) = \left| \frac{\partial \left(g_1(\vec{\xi}), g_2(\vec{\xi}), g_3(\vec{\xi}) \right)}{\partial (\xi_1, \xi_2, \xi_3)} \right|_{\vec{\xi}=g^{-1}(\vec{r})}^{\frac{1}{2}} \phi \left(g^{-1}(\vec{r}) \right), \quad (5)$$

gdzie $\frac{\partial (g_1(\vec{\xi}), g_2(\vec{\xi}), g_3(\vec{\xi}))}{\partial (\xi_1, \xi_2, \xi_3)}$ oznacza wyznacznik Jakobiego. Operatory tej postaci są dobrze znane z teorii grup przekształceń [6]. W definicji (5) funkcja

$$\vec{r}' = g(\vec{r}) \quad (6)$$

jest iniekcją w R^3 i może być jednoznacznie związana z dobrze znanym z teorii sprężystości wektorem deformacji \vec{u} :

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{u}(\vec{r}) = g(\vec{r}). \quad (7)$$

Deformacja granul lub komórek w ośrodku oczywiście powoduje zmiany zarówno lokalnej, to znaczy w otoczeniu elementów ośrodka, jak i globalnej jego energii. Ta dodatkowa energia może być policzona z równania (3) poprzez podstawienie zamiast niezdeformowanych wektorów stanu ich zdeformowanych odpowiedników:

$$\begin{aligned} E_{def} [g; \nu_1, \dots, \nu_N] = & \\ & = \sum_{k=1}^N \int_{R^3} d^3 \vec{r}_k \left(T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \right) H_1 \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) + \\ & + \sum_{k < n} \int_{R^3} d^3 \vec{r}_k \int_{R^3} d^3 \vec{r}_n \left\{ \left(T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \right) T(g) \phi_{\nu_n}(\vec{r}_n) H_2 T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r}_k) \right. \\ & \left. T(g) \phi_{\nu_n}(\vec{r}_n) \right\} - E(\nu_1, \dots, \nu_N). \end{aligned} \quad (8)$$

Podobnie można uzyskać gęstość energii deformacji będącej podstawową wielkością określającą mechaniczne własności ośrodka. Gęstość energii można otrzymać, co jest całkiem intuicyjne, z wyrażenia (8) w postaci zawartej w nim funkcji podcałkowej:

$$E_{def} [g; \nu_1, \dots, \nu_N] = \int_{R^3} d^3 \varepsilon_{def} (g, \vec{r}; \nu_1, \dots, \nu_N), \quad (9)$$

gdzie gęstość energii deformacji jest dana jako:

$$\begin{aligned}
 E_{def}(g, \vec{r}; \nu_1, \dots, \nu_N) &= \\
 &= \sum_{k=1}^N (T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r})) H_1 T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r}) + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{n,k=1}^N (1 - \delta_{nk}) \int_{R^3} d^3 \vec{r}' \left\{ (T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r})) (T(g) \phi_{\nu_n}(\vec{r}')) \right. \\
 &\left. H_2 T(g) \phi_{\nu_k}(\vec{r}) T(g) \phi_{\nu_n}(\vec{r}') \right\} - \varepsilon(\nu_1, \dots, \nu_N).
 \end{aligned} \tag{10}$$

W powyższej równości $\varepsilon(\nu_1, \dots, \nu_N)$ oznacza gęstość energii dla przypadku braku deformacji. Podobny związek można by otrzymać dla pojedynczej granuli lub komórki znajdującej się w ośrodku.

Podstawową relacją termodynamiczną teorii sprężystości jest związek pomiędzy gęstością energii wewnętrznej ε_{int} i pracą W wykonaną przez siły napięć wewnętrznych \vec{F} [7]:

$$d\varepsilon_{\text{int}} = TdS - dW, \tag{11}$$

gdzie T i S oznaczają odpowiednio temperaturę bezwzględną i entropię. W większości przypadków, w pierwszym przybliżeniu można zaniedbać zmianę entropii i utożsamić energię deformacji z energią wewnętrzną ciała. Tym sposobem gęstość energii wewnętrznej staje się funkcjonalem deformacji reprezentowanej przez funkcję deformacji g albo przez tradycyjny wektor deformacji $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3) = (u_x, u_y, u_z)$.

Jak pokazano powyżej energia deformacji (8) jest funkcjonalem od wektora deformacji ośrodka \vec{u} . Wariacja energii deformacji (dla uproszczenia notacji pominięte są liczby kwantowe charakteryzujące poszczególne granule lub komórki) jest dana następującym wyrażeniem:

$$\begin{aligned}
 \delta E_{def}[\vec{u}] &= \delta E_{def}[\vec{u}; \nu_1, \dots, \nu_N] = \delta E_{def}[g^{-1}; \nu_1, \dots, \nu_N] = \\
 &= E_{def}[\vec{u} + \delta \vec{u}] - E_{def}[\vec{u}] = \int_{R^3} d^3 \vec{r} \sum_{k=1}^3 \frac{\delta E_{def}[\vec{u}]}{\delta u_k(\vec{r})} \delta u_k(\vec{r}).
 \end{aligned} \tag{12}$$

Z drugiej strony, jak było już wspomniane, energię deformacji można utożsamić z energią wewnętrzną ośrodka której wariacja reprezentuje pracę sił wewnętrznych układu z przeciwnym znakiem (patrz równość (11)):

$$F_k = - \frac{\delta E_{def} [\vec{u}]}{\delta u_k(\vec{r})} \quad (13)$$

Równania (8-10) oraz (13) są podstawowymi równaniami proponowanej mechaniki ośrodków granularnych i komórkowych. Część jednociągowa jest określona przez potencjał $V_1(\vec{r})$ opisujący możliwe siły zewnętrzne działające na poszczególne granule lub komórki. Człon dwuciągowy określony przez oddziaływania pomiędzy granulami lub komórkami $V_2(\vec{r}, \vec{r}')$ jest natomiast odpowiedzialny za wewnętrzne własności mechaniczne ośrodka. Chociaż tego typu ośrodki mogą zmieniać swoje własności dosyć gwałtownie przechodząc od jednego punktu ciała do drugiego wyrażenie (13) jest funkcją w miarę gładką i pozwala kontrolować zachowanie się każdej granuli lub komórki oddzielnie. Należy także zauważyć, że wektor deformacji \vec{u} jest funkcją ciągłą pomimo występowania nieciągłości na granicach granul lub komórek. Obie własności wynikają z możliwości wyrażenia stanów granul poprzez funkcje ciągłe. Fizycznie jest niemożliwością odróżnienie wektora stanu (funkcji) posiadającego „skok” w postaci nieciągłości, od gwałtownie zmieniającej się funkcji ciągłej. Ta własność formalizmu daje mu przewagę na innymi bardziej klasycznymi podejściami.

OGÓLNE CECHY MODELI OŚRODKÓW GRANULARNYCH I KOMÓRKOWYCH

Określone w poprzedniej części podstawowe równania mechaniki ośrodków granularnych i komórkowych dopuszczają wiele modeli tych ośrodków. Określenie modelu wymaga sprecyzowania oddziaływań pomiędzy granulami lub komórkami oraz cech samych granul lub komórek poprzez podanie postaci ich wektorów stanu.

Oddziaływania pomiędzy granulami lub komórkami teoretycznie mogłyby być wyliczone z molekularnej struktury granul lub komórek. Jednakże jest to heroiczne zadanie, praktycznie niemożliwe do zrealizowania przy obecnych możliwościach technicznych i stopniu rozwoju metod matematycznych. Skazani jesteśmy zatem na oddziaływania fenomenologiczne, których ogólne cechy można stosunkowo łatwo podać. Oddziaływanie takie powinno zawierać zarówno człony prowadzące do odpychania się granul lub komórek jak i ich przyciągania.

Odpychanie jest konieczne aby cały ośrodek nie uległ kolapsowi do pojedynczego punktu, co jak łatwo zaobserwować nie ma miejsca w przyrodzie. W większości przypadków wydaje się, że ten człon oddziaływania powinien reprezentować siły raczej krótkozasięgowe gdyż w zasadzie większość materiałów nie zapada się dzięki bezpośredniemu, kontaktowemu oddziaływaniu granul lub komórek, a nie poprzez pola sił (np. poprzez silne pola elektryczne).

W przeciwieństwie do odpychania, którego działanie jest wymagane aby ośrodek się nie zapadał, dla istnienia ośrodka granularnego nie jest konieczne występowanie dwuciałowych sił przyciągających. Jako przykład wystarczy wspomnieć pryzmę suchego piasku gdzie występuje znikome, nie mające znaczenia w opisie jego własności przyciąganie wzajemne ziaren, natomiast rolę sił wiążących odgrywa zewnętrzny potencjał (grawitacyjny). Jednakże w przypadku biologicznych materiałów komórkowych bez istnienia dwuciałowych sił wiążących nie można by mówić o ich istnieniu. Jak widzimy z powyższego wywodu relacja pomiędzy siłami odpychania i przyciągania wzajemnego dyskretnych elementów z których zbudowany jest ośrodek decyduje o jego rodzaju i zasadniczych własnościach.

Wektory stanu pojedynczych granul lub komórek w reprezentacji położeniowej są funkcjami opisującymi przestrzenny rozkład materii granul lub komórki oraz zależności opisujące inne stopnie swobody związane z dodatkowymi (np. ładunek elektryczny, momenty magnetyczne i inne) własnościami posiadanymi przez elementy ośrodka. Przez analogię do mechaniki kwantowej wydaje się, że wygodnie byłoby interpretować funkcję stanu tak jak to się robi w opisie mikroświata jako amplitudę prawdopodobieństwa znalezienia odpowiednich cech granul lub komórki w ośrodku. W najprostszym przypadku, przyjmując, że funkcje $\phi_\nu(\vec{r})$ opisują w sensie wspomnianym wyżej rozkład masy granul lub komórki, kwadrat modułu tych funkcji przemnożony przez całkowitą masę granul lub komórki reprezentuje gęstość jej masy. Znając wektory stanów poszczególnych granul lub komórek ośrodka, korzystając ze wzoru (2), poprzez minimalizację energii można znaleźć jego stan podstawowy. Odpowiednio parametryzując wektory stanów, gdzie np. zmiana parametrów odpowiada zmianie kształtów lub rozkładu masy minimalizacja energii całkowitej do pewnego stopnia określa także wektor stanu.

Cechą charakterystyczną ośrodków granularnych jest występowanie porów pomiędzy granulami. W opisywanym formalizmie pory występują w obszarach zerowania się (w praktyce bliskich zeru) wartości wektorów stanów w reprezentacji położeniowej. Pory te nie mają swojego wkładu w gęstość energii i ich rozkład w istotny sposób wpływa na własności mechaniczne ośrodka. Także dwie granule lub komórki których wektory stanu się nie przekrywają w sensie iloczynu skalarnego określonego w przestrzeni stanów (w szczególności oznacza to, że są geometrycznie rozdzielone w przestrzeni) mogą być poza zasięgiem oddziaływania co sprawia, że odczuwają tylko wpływ najbliższych sąsiadów a nie wzajemne oddziaływanie. Cecha ta, która wydaje się także być charakterystyczną dla ośrodków granularnych i komórkowych, wynika bezpośrednio z konstrukcji przedstawionego formalizmu. Ma to swoje konsekwencje dla jednej z najbardziej fascynujących własności ośrodków granularnych i komórkowych jakim jest pęknięcie. Jakościowa analiza równań poprzedniego paragrafu wskazuje na możliwość opisanie przez nie tego procesu. Zaczyna on zachodzić w tym miejscu gdzie dwie sąsiednie granule lub komórki mają nie przekrywające się wektory stanów i wychodzą poza zasięg oddziaływania przyciągającego. Przyczyną powodującą takie

zachowanie się wektorów stanu może być potencjał zewnętrzny doprowadzający do określonej deformacji ośrodka lub rozchodząca się w nim np. fala naprężeń mechanicznych.

Powyżej wymienione są tylko niektóre ogólne własności wynikające z przedstawionego formalizmu. Różnorodność zjawisk i zachowań się ośrodków granularnych i komórkowych jest tak wielka, że nie ma możliwości przeanalizowania większości z nich w ogólnej postaci. Należy w tym celu rozważyć konkretne modele i zbadać ich zachowania rozwiązując odpowiednie dla nich równania. Oczywiście, należy sobie zdawać sprawę z konieczności dalszego rozwoju samego formalizmu.

PIŚMIENNICTWO

1. **Czachor H.:** Geometria fazy stałej i przestrzeni porów w rolniczych ośrodkach granularnych na przykładzie gleby mineralnej. *Acta Agrophysica*, 7, 1997.
2. **Edwards S.F., Mehta A.:** Dislocations in amorphous material. *J.Phys. France*, 2489, 50, 1989.
3. **Edwards S.F., Oakeshott R.B.S.:** Theory of powders. *Phys.*, A 1080, 157, 1989.
4. **Gózdź A., Czachor H.:** Modelling of the Granular and Cellular Materials. preprint No. 983170 An ASAE Meeting, 1998.
5. **Gózdź A., Pietrow M.:** Quantum mechanical approach to randomly-packed beds of spheres in the container. *Int. Agrophysics*, 13, 185-189, 1999.
6. **Hamermesh M.:** Group theory and its application to physical problems. Pergamon Press, London-Paris (in Polish), PWN, Warszawa, 1968.
7. **Landau L.D., Lifszyc E.M.:** Teoria Sprężystości. PWN, Warszawa, 1993.
8. **Mehta A.:** The physics of powders. *Correlations and Connectivity*, 88, 1990.
9. **Mehta A., Edwards S.F.:** Statistical mechanics of powder mixtures. *Phys.*, A 1091, 157, 1989.
10. **Molenda M., Horabik J., Ross I.J.:** Effect of filling method on load distribution in model grain bins. *Trans. ASAE*, 219, 39(1) 1996.
11. **Panayiotopoulos K.P.:** Packing of sands-A review. *Soil and Tillage Research*, 101, 13, 1989.
12. **Pietrow M., Gózdź A.:** Quantum mechanical approach to the beds of spheres in the container-packing fractions and radial distribution function. *Int. Agrophysics*, 14, 2000, (w druku).
13. **Rintoul M.D., Torquat S.:** Computer simulations of dense hard-sphere systems. *J. Chem. Phys.*, 9258, 105(20), 1996.
14. **Ridgway K., Tarbuck K.J.:** Voidage fluctuations in randomly-packed beds of spheres adjacent to a containing wall. *Chem. Engng. Sci.*, 1147, 23, 1968.
15. **Scott G.D.:** Packing of spheres. *Nature*, 908, 188, 1960.
16. **Scott G.D., Kilgour D.M.:** The density of random close packing of spheres. *Brit. J. Appl. Phys.*, (J. Phys. D), 863, 2(2), 1969.
17. **Zallen R.:** *Fizyka Ciał Amorficznych*. PWN, Warszawa, 1994.

MECHANICS OF GRANULAR AND CELLULAR MATERIALS

A. Gózdź

Institute of Physics, UMCS, M. Curie-Skłodowska Sqr. 1, 20-031 Lublin

SUMMARY

Elements of new approach to the unified description of granular and cellular agrophysical materials is proposed. The idea is based on a quantum mechanical type formalism allowing to introduce the state vector for

the individual cell. It allows to construct the total state vector in the form of the simple product of the single cell state vectors by minimization of the total energy of the cellular (granular) medium. In principle the energy should be determined from microscopical interactions among cells. In practice one can postulate the more simple phenomenological interactions describing the most important features of the agrobiological media under considerations.

As first step widely analysed the geometrical limit of the granular materials (the model of hard spheres) is considered. It is usefull for simple analysis of some porous materials and flow of the water through it. This limit can be also obtained from the more general approach mentioned above. Depending on the form of the single cell state vector, describing the probability amplitude of finding a given mass distribution in the cell, and the interactions within cells one can simulate and calculate different mechanical properties of the media.

The real granular or cellular media are arranged by a stochastic or nearly stochastic mechanism. To construct the models of the media one need to use the computer simulation with the appropriate random number generator. In this way one can obtain the appropriate geometry of the medium and its mechanical properties like stress-strength relations. This powerful tool seems to be flexible enough to reproduce, for example, the distributions either grains in the container or cells in a biological material.

K e y w o r d s: mechanics, granular media, cellular media