Statik und Dynamik von Aufschüttungen

Alexander Schinner*

2. Juni 2011

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Kraftnetzwerke	2
	2.1 Wechselwirkungen im Inneren	. 2
	2.2 Experimente	. 2
3	Einfache Modelle	4
	3.1 Federnetzwerke	. 4
	3.2 Diodenmodelle	. 7
4	Molekulardynamische Simulationen	12
	4.1 Normalkomponenten der Kraftnetzwerke	. 13
	4.2 Tangentialkomponenten der Kraftnetzwerke	. 14
	4.3 Spannungen	. 14
	4.4 Nichtrunde Teilchen	. 15
5	Zusammenfassung	17

*Email: schinner@acm.org

1 Einleitung

Granulare Medien verbergen hinter ihrer scheinbaren Einfachheit ("... ist bloß Sand") ein sehr komplexes Verhalten. Typische Eigenschaften von Granulaten sind zum Beispiel der diskrete Aufbau und die Inhomogenität. Dies führt dazu, daß Aufschüttungen wie in Abb. 15 weit entfernt vom thermischen Gleichgewicht doch sehr "stabil" sein können. Es stellt sich nun die Frage, welche Folgen dies für das Verhalten von Sandansammlungen hat.

2 Kraftnetzwerke

2.1 Wechselwirkungen im Inneren

Die Kräfte im Inneren eines Sandhaufens sind kurzreichweitig. Nur Partikel, die in direktem Kontakt mit einem anderen Partikel stehen, erfahren eine Kraft. Langreichweitige Wechselwirkungen haben keinen¹ Einfluß.

Die Kontaktkräfte werden im Allgemeinen durch das Hertzsche Kontaktgesetz beschrieben:

 $F \propto d^m$

wobei d der Überlapp (~ Verformung) der Teilchen ist und $m = \frac{3}{2}$.

Wäre nun die Anordnung unseres Systems perfekt kristallin und alle Kontakte gleich, dann sollte sich bei einem Experiment wie es in Abb. 1 dargestellt ist, wieder ein Gesetz der Form:

 $F \propto h^m$

finden lassen, wobei m wieder den Wert $\frac{3}{2}$ hat. Allerdings fanden Travers et. al [?] für m den Wert $\frac{7}{2}$. Dies legt die Vermutung nahe, daß die Annahme einer perfekten Ordnung mit perfekten Kontakten zu einfach ist und komplexere Modelle notwendig sind. Es ist einsichtig, daß bei Teilchen unterschiedlicher Größe oder Form keine kristalline Packung möglich ist. Selbst wenn alle Partikel gleich sind, so können doch minimale Unterschiede bei den Kontakten zu einem neuen Verhalten führen.

2.2 Experimente

Die Struktur einer Aufschüttung, die diese bei Ausübung einer Kraft stabilisiert, läßt sich mit Partikeln aus Plexiglas studieren. Plexiglas ist photoelastisch, d.h. bei Verformung dreht es die Polarisationsrichtung des Lichts.

¹Ausnahme: Elektrische geladene Granulate, wie sie von T. Scheffler in Duisburg behandelt werden



Abbildung 1: Ein U-förmiger fester Rahmen enthält die Scheiben oder Zylinder. Ein Stempel übt eine uniaxiale Kraft F aus. Die Verschiebung h ist der Kontrollparameter.



Abbildung 2: Skizze des experimentellen Aufbaus zur Darstellung von Spannungen in granularen Medien.

Wird nun eine Versuchsanordnung wie in Abb. 1 aus Plexiglas aufgebaut und zwischen gekreuzte Polarisatoren gebracht, dann werden diejenigen Partikel sichtbar, die verspannt werden. Bilder einer ähnlichen Versuchsapparatur sind in Abb. 3 dargestellt. Was zuerst auffällt ist, daß nicht alle Teilchen gleiche Helligkeit haben, sondern nur wenige Partikel (< 15%) die Hauptlast tragen. Der Rest der Partikel spürt wenig von den außen angreifenden Kräften.



Abbildung 3: Bild eines 2D photoalastischen Experiments. Gegenübergestellt sind die Scherung durch Rotation des inneren Kreises (links) und des äußeren Rings (rechts). (aus [?])

Offensichtlich bilden sich im Inneren Kraftnetzwerke, die das Granulat stabilisieren. Es läßt sich feststellen, daß

- die Fluktuationen über mehrere Größenordnungen gehen
- die Korrelationslängen des Kraftnetzwerkes deutlich größer als die Teilchendurchmesser sind
- sich im Experiment bei Änderung der Belastung eine schnelle Reorganisation zeigt.

Zuverlässige Modelle müssen also das Kraftnetzwerk berücksichtigen, einfache Mittelwerte sind wohl nicht ausreichend.

3 Einfache Modelle

3.1 Federnetzwerke

Um die Komplexität normaler Kraftnetzwerke zu umgehen, kann man versuchen, sie mit einfachen central-force Modellen nachzubilden. Dabei werden die Kontakte durch Federn repräsentiert. Die Enden der Federn können sich um die Befestigungspunkte, die anfänglich wiederum in einem regelmäßigen Gitter angeordnet sind, frei drehen.



Abbildung 4: Ausschnitt aus einem elastischen Gitter auf dem das centralforce Perkolation definiert wird. Jeder Bond ist eine lineare Feder deren Enden sich frei um die Kontaktpunkte drehen können.

Dann ist die Kraft zwischen zwei Punkten i und j durch

$$F_{ij} = k[(u_i - u_j)n]n$$

gegeben. Dabei ist u ein Verschiebungsvektor und n der normalisierte Verbindungsvektor zwischen den unverschobenen Endpunkten.

Man muß nun modellieren, daß im Grenzfall geringer Belastungen in einem Granulat immer weniger Kontakte am Kraftnetzwerk beteiligt sind. Dies kann man erreichen, indem man im Federmodell das Aufbrechen eines Kontakts durch das Entfernen einer Feder simuliert. Dann stellt sich natürlich die Frage, ab welchem Anteil $q_c = 1 - p_c$ von gebrochenen Federn sich das Verhalten signifikant ändert.

Es zeigt sich, daß es zwei Schwellwerte gibt. Ab dem Wert $p_c = 0.35$ hat man eine Verbindung zwischen der oberen und der unteren Platte, sehr ähnlich den klassischen Perkolationsproblemen. Allerdings kann dieses Netzwerk noch ohne Kraftaufwand verformt werden. Erst ab einem Schwellwert von $p_c = 0.642$ hat man den Steifigkeitsübergang, das System hat eine endliche Elastizität. Nur der zweite Übergang (siehe Abb. 5) ist hier von Interesse.

Es ist zu erwarten, daß am Ubergang die Elastizität des Gitters mit

$$E \propto (p - p_c)^{\tau}$$

skaliert, wobe
i τ der kritische Exponent ist. Wir nehmen nun an, daß die Korrelationsläng
e ξ mit



Abbildung 5: Backbone des Gitters an Steifigkeitsschwelle. Auf Boden und Deckel wird Zug ausgeübt. In horizontaler Richtung wurden periodische Ränder implementiert. Die Bonds sind nur eine kleine Teilmenge des gesamten Gitters. (aus [?])

$$\xi \propto (p - p_c)^{\nu}$$

divergiert. Nun wollen wir den finite-size Effekt berücksichtigen. Wir schreiben die Elastizität in der Form

$$E \propto (p - p_c)^{\tau} \varphi(\frac{\xi}{L}),$$

wobe
i φ die finite-size Effekte beschreiben soll und
 Ldie Systemgröße ist. Dann können wir 2 Grenzfälle trennen.

Im Fall, daß die Korrelationslänge sehr viel kleiner als die Systemgröße ist, erscheint das Gitter als elastisches Kontinuum, der Elastizitätsmodul konvergiert gegen einen festen Wert, $\varphi(\frac{\xi}{L}) = \mathcal{O}(x^0)$

Im anderen Fall wird die Korrelationslänge sehr viel größer als die Systemgröße. Dann kann eine kleine Änderung der Abweichung $(p - p_c)$ von der Perkolationsschwelle keine Einflus auf die Elastizität E haben da das

Gittern zu klein ist um einen Unterschied der Korrelationslängen zu merken. Damit ist $\frac{\partial E}{\partial p} = 0$. Für große $\frac{\xi}{L}$ ist dann $\varphi(\frac{\xi}{L}) \propto \left(\frac{\xi}{L}\right)^{\frac{\tau}{\nu}}$. Damit ergibt sich, daß der Elastizitätsmodul an der Perkolationsschwelle

(Nr. 2) des Gitters größenabhängig ist

$$E \propto L^{\frac{-\tau}{\nu}}$$

Da die Abhängigkeit von der Systemgröße in diesem Fall nicht verschwindet, läßt sich sagen:

- Es existiert kein äquivalentes homogenes Medium oder ein repräsentatives Volumenelement.
- Nahe des Schwelle wird das Kraftnetzwerk verschwindend klein.
- Außerdem bildet der Backbone ein Fraktal mit der Dimension $1.64 \pm$ 0.03 (in 2 Dimensionen)

Dieses Modell hat aber das Problem, daß Kräfte auch negativ werden können. Dies führt dazu, daß der Übergang von 2. Ordnung ist, während der Übergang in einem Modell, das nur positive Kräfte erlaubt, 1. Ordnung ist. Ebenso ist das zufällige Ausdünnen der Federn etwas fragwürdig.

In einem erweiterten Modell sind Zugkräfte verboten. Unbelastete Federn werden entfernt. Dann haben wir einen Phasenübergang 1. Ordnung, wie man an Abb. 6 demonstrieren kann. Der nächste zu entfernende Bond ist markiert. Wird er gelöscht, werden sukzessive alle anderen Bonds entlastet und somit entfernt. Der Backbone verschwindet schlagartig. Diese diskontinuierliche Anderung ist typisch für einen Phasenübergang 1. Ordnug.

3.2Diodenmodelle

Von großem Interesse ist die Frage, wir wir das langsame Nachlassen der Belastung ohne die extremen Vereinfachungen der Federnetzwerke simulieren können. Sehr einfach gelingt dies mit einer Analogie aus der Elektrizitätslehre.

Die Kennlinie einer Diode (Abb. 3.2) sieht der von uns erwarteten Kennlinie für die Kontaktkraft sehr ähnlich. Ab einem gewissen Schwellwert nimmt die Kontaktkraft (bzw. Spannung) zu, ansonsten ist sie 0. Wir betrachten also folgende Analogie:



Abbildung 6: Ein Beispiel zur Ausdünnung eines Dreiecksgitters, wobei 81% der Bonds zu Beginn aktiv waren. Das Gitter ist periodisch an beiden Rändern, mehrere Perioden sind dargestellt. Der nächste zu entfernende Bond (siehe Ausschnitt) führt zu einem vollständigen Kollaps des ganzen Gitters, alle Bonds verschwinden. (aus [?])



Abbildung 7: Schematische Kennlinie einer Diode.

Hookesches Gesetz	\equiv	Ohmsches Gesetz
Lamé–Gleichung	$\stackrel{\wedge}{=}$	Laplace-Gleichung
Verschiebung	$\stackrel{\wedge}{=}$	Spannung
Kraft/elast. Spannung	$\stackrel{\wedge}{=}$	Strom

Scheibenradius r
$$\stackrel{\wedge}{=} V_{c}$$

Die Kennlinie der Diode bzw. des Kontakts hat dann die Form:

$$j = \begin{cases} 0 & v \le v_g \\ g(v - v_g) & v > v_g \end{cases}$$



Abbildung 8: Die Anordnung von Scheiben (links) mit dem eingezeichneten Kontaktnetzwerk läßt sich durch die Diodenschaltung (rechts) darstellen.

Man betrachtet nun die Pfade \mathcal{P} , die beide Elektroden des Gitters verbinden. Damit ein Strom fließt, ist es notwendig, daß der Spannungsabfall über dem Gitter größer ist als die Summe der kritischen Spannungen V_g entlang des Pfades. Für den Pfad minimaler Spannung gilt dann

$$V_g = \sum_{i \in P} v_{gi} = \|P\|$$



Abbildung 9: Ein periodisches Quadratgitter der Größe 100 (2 Perioden). Schwarz dargestellt sind die Dioden, die an der leitenden Verbindung der oberen und unteren Begrenzung beteiligt sind. Eine deutliche Anisotropie bei den Längenskalen der Strukturen ist zu erkennen.(aus [?])

Das Problem ist aus der Perkolationstheorie wohl bekannt und läßt sich auf verschiedene andere Modelle wie die Burgers-Gleichung mit Noise, ein Polymer in einem zufälligen Medium oder spezielle Isingmodellen abbilden.

Betrachtet man Abb. 3.2, dann sieht man eine stark ausgeprägte Anisotropie der Längenskalen.

$$\xi_{\parallel} \propto (V - V_g)^{-\nu_{\parallel}} \qquad \nu_{\parallel} = \frac{3}{2}$$
$$\xi_{\perp} \propto (V - V_g)^{-\nu_{\perp}} \qquad \nu_{\perp} = 1$$

Die Exponenten ν_{\parallel} und ν_{\perp} sind universell und unabhängig von der Gittergeometrie oder der Verteilung der Grenzspannungen V_g .



Abbildung 10: Ungeordnete Ansammlung von Teilchen (links) in einem Behälter, simuliert mit gc2d. Rechts das entsprechende Kraftnetzwerk, wobei die Dicke der Linien proportional zur Größe der Kraft ist.



Abbildung 11: Normalkomponenten der Kräfte aus Probe A. Dicke der Linien und Farbintensität sind proportional zur Kraft. (aus [?])

4 Molekulardynamische Simulationen

Bei den bisher beschriebenen Modellen wurde versucht, Granulat nachzubilden, ohne die einzelnen Partikel selbst zu berücksichtigen. Durch aufwendige Computersimulationen ist es möglich, die Newtonschen Bewegungsgleichungen für mehrere tausend Partikel direkt zu lösen. Damit ist es möglich, Unordnung in Aufschüttungen zu beobachten, die durch unterschiedliche Teilchengrößen und -formen entsteht.

In Abb. 10 ist ein typisches Beispiel einer MD-Simulation dargestellt. Es wurden Teilchen unterschiedlicher Größe, Eckenzahl und Form in einen Behälter gefüllt. Sobald das System zur Ruhe gekommen ist, wird aus den Kräften zwischen den Partikeln das Kraftnetzwerk berechnet und dargestellt². Bei der Darstellung der Kraftnetzwerke wird im Allgemeinen so verfahren, daß die Liniendicke *und* die -farbintensität proportional zur Größe der Kraft ist.

Was schon in diesem Beispiel auffällt sind, wie bei den Experimenten, gewisse Pfade ausgezeichnet. Ebenso spüren verschiedene Teilchen (linker Rand, Mitte) keine Belastung durch die über ihnen liegenden Partikel.

Radjai beschreibt in seinen Arbeiten [?] die Eigenschaften dieser Kraftnetzwerke. Er simuliert Scheiben in einem Behälter ohne Gravitation. Die Wände des Behälters üben einen definierten Druck auf die eingeschlossenen Partikel aus. Nach Bestimmung der Kraftnetzwerk teilt er dieses in zwei Teilnetzwerke ein. Das "starke" Netzwerk trägt die Hauptlasten, das "schwache" Netzwerk dient zur Stabilisierung des starken Netzwerkes, trägt aber kaum Lasten. Es zeigt sich, daß diese zwei Netzwerke unterschiedliche phyikalische Eigenschaften haben.

Die weiteren Aussagen beziehen sich auf drei seiner Simulationen:

- A 4012 Teilchen biaxiale Kompression
- B 4025 Teilchen auf dem Weg ins Gleichgewicht
- C 4098 Teilchen uniaxiale Kompression

 $^{^2\}mathrm{Zum}$ Einsatz kamen gc2d und selbstgeschriebene <code>MatLab-Skripten</code>

4.1 Normalkomponenten der Kraftnetzwerke



Abbildung 12: (a) Einfachlogarithmischer und (b) doppeltlogarithmischer Plot der Wahrscheinlichkeitsverteilung P_N der Normalkraft N (aus [?])

Trägt man die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Normalkomponenten der Kräfte einfach- und doppeltlogarithmisch auf, dann sieht man, daß das starke und das schwache Netzwerk verschiedenen Gesetzen folgen. Das starke Netzwerk ($\frac{N}{\langle N\rangle}>1$) zeigt einen exponentiellen Abfall. Für das schwache Netzwerk ($\log\frac{N}{\langle N\rangle}<0$) findet man ein power-law.

$$P_n \propto \begin{cases} \left(\frac{N}{\langle N \rangle}\right)^{-\alpha} & N < \langle N \rangle \\ e^{\beta(1-\frac{N}{\langle N \rangle})} & N > \langle N \rangle \end{cases}$$

4.2 Tangentialkomponenten der Kraftnetzwerke



Abbildung 13: Einfachlogarithmischer und (b) doppeltlogarithmischer Plot der Wahrscheinlichkeitsverteilung P_T der Tangentialkraft $T(aus \cite{eq:tau})$

Hier zeigt sich dasselbe Bild wie bei den Normalkomponenten der Kraft. Starkes und schwaches Netzwerk folgen wiederum verschiedenen Gesetzen. Man kann sagen, daß eine Wechselwirkung zwischen zwei Partikeln dann zum starken Netzwerk gehört, wenn die Kraft größer als der Mittelwert ist.

$$T_n \propto \begin{cases} \left(\frac{N}{\langle N \rangle}\right)^{-\alpha'} & N < \langle N \rangle \\ e^{\beta'(1-\frac{N}{\langle N \rangle})} & N > \langle N \rangle \end{cases}$$

4.3 Spannungen

Bestimmt man die mechanische Spannung im Inneren der Aufschüttungen, wobei man jetzt das starke und das schwache Netzwerk getrennt aufträgt,



Abbildung 14: Beiträge des starken und schwachen Netzwerkes zum Spannungstensor in Probe A. (aus [?])

zeigt sich, daß auch hier die Netzwerke unterschiedliche Eigenschaften haben. Die mittleren Spannugen in einem Gebiet Ω werden über

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V(\Omega)} \sum_{c \in \Omega} f_i^c d_j^c$$

berechnet. Das Gebiet hat das Volumen $V(\Omega)$. f_i^c ist die *i*-te Komponente (i = x, y, z) der Kraft am Kontaktpunkt c. d_j^c ist die *j*-te Komponente des Verbindungsvektors der Teilchen. Es zeigt sich, daß das starke Netzwerk sehr viel mehr zur Anisotropie der Gesamtspannungen beiträgt. Das schwache Netzwerk spürt offensichtlich von der angelegten uniaxialen Kraft sehr wenig.

4.4 Nichtrunde Teilchen

Es stellt sich aber weiterhin immer noch die Frage, welchen Einfluß die Teilchenform auf die Kraftnetzwerke haben. Dazu sind bisher keine Untersuchungen bekannt. Erste Simulationsergebnisse mit gc2d sind in Abb. 16 zu sehen. Bei der ersten Simulation wurden monodisperse, runde Teilchen³ verwendet. Man sieht, daß sich zum Teil ein hexagonales Gitter ausbilden konnte. In diesen Bereichen ist eine Aufteilung in ein starkes und schwaches Netzwerk nicht zu erwarten. Die zweite Simulation arbeitet mit polydispersen Scheiben. Starke Ähnlichkeiten zu den Modellen von F. Radjai sind zu erkennen. Auch

 $^{^3\}mathrm{Da}\ \mathrm{gc2d}\ \mathrm{nur}\ \mathrm{mit}$ Polygonen arbeitet, sind dies regelmäßige 30-Ecke



Abbildung 15: Ein einfacher 2-dimensionaler Sandhaufen, aufgeschüttet durch eine Punktquelle. Simuliert wurde mit dem Programm gc2d, die Farbe der Partikel ist von ihrem Alter abhängig.



Abbildung 16: gc2d-Simulation der Kraftnetzwerke von vier verschiedenen Teilchensorten und -mischungen

die dritte Simulation, die mit polydispersen, regelmäßigen 7-Ecken durchgeführt wurde, fügt sich in das Bild ein. Beim letzten Programmlauf wurden die Ecken der Polygone zufällig verschoben, jedes Teilchen hat eine eigene Form. Hier scheint das starke Kraftnetzwerk nicht so deutlich ausgeprägt zu sein, eine genauere Auswertung liegt allerdings noch nicht vor.

5 Zusammenfassung

Mit Hilfe photoelastischer Methoden kann nachgewisen werden, daß im Inneren von granularen Aufschüttungen Kraftnetzwerke existieren. Der Einfluß dieser Kraftnetzwerke auf die Elastizität wurde mit einem Federmodell beschrieben. In Bereichen sehr kleiner Kräfte wurde das Verscwinden des Kraftnetzwerkes mit Hilfe einer Analogie aus der Elektrizitätslehre modelliert. Dieses Diodenmodell zeigte eine starke Anisotropie bei den Längenskalen. Aufwendige Molekulardynamiksimulationen zeigen, daß sich das Kraftnetzwerk in zwei Teilnetzwerke mit unterschiedlichem Verhalten unterteilen läßt. Starkes und schwaches Netzwerk haben unterschiedliches Skalierungsverhalten bei den Normal- und Tangetialkräften, außerdem trägt das starke Netzwerk hauptsächlich zur Anisotropie der Gesamtspannung bei.