

FAU ERLANGEN NÜRNBERG

BACHELORARBEIT

Athermisches Jamming mit Störungen

Autor:
Jakob HACK

Betreuer:
Prof. Dr. Michael
SCHMIEDEBERG

01. März 2022



Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich die Bachelorarbeit ohne fremde Hilfe und ohne Benutzung anderer, als der angegebenen Quellen angefertigt habe und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen hat. Alle Ausführungen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß übernommen wurden, sind als solche gekennzeichnet.

Erlangen, den

.....
Jakob Hack

Zusammenfassung

Jamming ist ein Übergang, der mit der Erhöhung der Packungsdichte auftritt. Der Jamming-Übergang hat viele Ähnlichkeiten zum Glasübergang. In beiden Übergängen geht das System in eine unbewegliche amorphe Phase über. Beim Jamming-Übergang ist Φ und beim Glasübergang T der Kontrollparameter. In dieser Arbeit untersuchen wir den Jamming-Übergang durch Minimierung der Energie in einem System aus weichen Kugeln ohne der Überschreitung von Energiebarrieren. Insbesondere interessiert uns in dieser Arbeit der Einfluss von Störungen, wie einer Gravitationskraft auf den Jamming-Übergang.

Die Arbeit beginnt mit einer theoretischen Einführung in das Thema und einer Erklärung der Funktionsweise der Simulation.

Des Weiteren werden die Ergebnisse der Simulation diskutiert und Überlegungen zu einer Gleichung, ähnlich der barometrischen Höhenformel, angestellt.

Inhaltsverzeichnis

1	Hintergrund	1
1.1	Athermisches Jamming	1
1.1.1	Isostatik	3
1.2	Potential	3
1.3	Gravitation	3
2	Simulation	5
2.1	Kraftberechnung	5
2.2	Linearch / Newton-Verfahren	5
2.3	Steepest-descent	6
2.4	Conjugate-gradient	6
2.5	Periodische Randbedingungen	6
3	Ergebnisse	7
3.1	Athermisches Jamming ohne Störungen	7
3.2	Gravitationsstörung	8
4	Ausblick	13

1 Hintergrund

1.1 Athermisches Jamming

Ein bekanntes Phänomen ist der Glasübergang, bei dem sich die Dynamik drastisch verlangsamt, wenn die Temperatur verringert wird. Das Jamming-Phänomen, das als eng verknüpft mit dem Glasübergang angesehen wird, wird oft durch die Änderung der mechanischen Eigenschaften von Systemen beschrieben, die aus granularen Materialien, Schäumen oder Emulsionen bestehen[2]. Der Parameter, der die Änderungen der mechanischen Eigenschaften bewirkt, ist die Packungsdichte

$$\Phi = \frac{\sum V_{Teilchen}}{V}. \quad (1.1)$$

V ist hier das Volumen der Box, in der sich das System befindet und $\sum V_{Teilchen}$ ist die Summe aller Volumina der Teilchen des Systems. Vieles weist darauf hin, dass es sich beim Jamming um einen Übergang handelt, der ähnliche Eigenschaften, wie ein Phasenübergang im Gleichgewicht aufweist. Die Erhöhung der Packungsdichte bricht die Ergodizität des Systems und es entsteht, ähnlich wie bei einem Glas, bei dem die Relaxationszeiten (Relaxation in einen Zustand ohne Scherstress) um Größenordnungen über der Beobachtungszeit liegen, ein amorpher Festkörper. Es ist wichtig, dies von einer Kristallisation zu unterscheiden, bei der sich eine geordnete Struktur ausbildet. Neben der Packungsdichte beeinflussen auch die Temperatur T und der Scherstress Σ das Jamming. Dies kann in einem Jamming-Zustandsdiagramm veranschaulicht werden, wie in [2]

Wie man sehen kann, ist bei niedrigen Temperaturen und niedrigem Scherstress die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Punkt des Phasenraums im gejammtten Bereich befindet höher, als bei hoher Temperatur und Scherstress. Der Scherstress kann als eine effektive Temperatur angesehen werden, die viele Aspekte mit der echten Temperatur teilt. Die Σ -Achse ist eine Nicht-Gleichgewichtsachse. In der $1/\Phi - T$ Ebene wird eine Temperatur T_g angenommen, die den Übergang von einer unterkühlten Flüssigkeit zu einem Glas markiert. Bei dieser Temperatur überschreitet die Relaxationszeit die Beobachtungsdauer weit. Diese Temperatur bildet die Linie, die den gejammtten vom ungejammtten Zustand trennt. Der Punkt J markiert hier den Punkt, ab dem das System bei $T = 0$ und $\Sigma = 0$ gejammt ist. Man sieht, dass sich dieser Punkt bei einer gewissen Packungsdichte befindet. In dreidimensionalen Systemen liegt diese kritische Packungsdichte bei 0.64[2]. Interessant am Jamming-Phänomen ist, dass das kritische

1 Hintergrund

Verhalten, abgesehen von finite-size Effekten universell ist. In dieser Abbildung ist vereinfacht in zwei Dimensionen der Unterschied zwischen einem gejammtten und einem ungejammtten System dargestellt.

In Abbildung 1.1 sieht man, dass es keine Überlapps zwischen den Teilchen gibt. Die Überlappenergie des Systems beträgt also null. In Abbildung 1.2 sieht man, dass das System so dicht gepackt ist, dass es nicht möglich ist, die Überlapps komplett loszuwerden. Dadurch, dass die Überlapps nicht entfernt werden können, gibt es in dem rechten System eine Scherspannung. Die Systeme sind bidispers, weil in zwei Dimensionen bei der Minimierung von monodispersen Systemen Kristallisationseffekte auftreten.

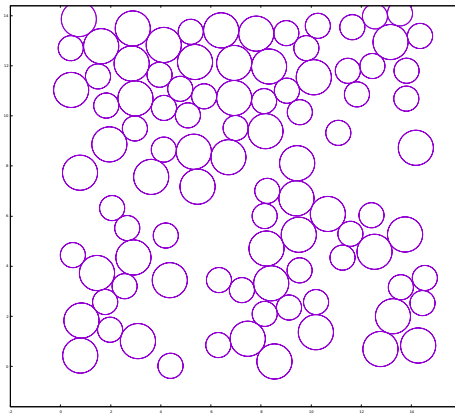


Abbildung 1.1: ungejammtter Zustand

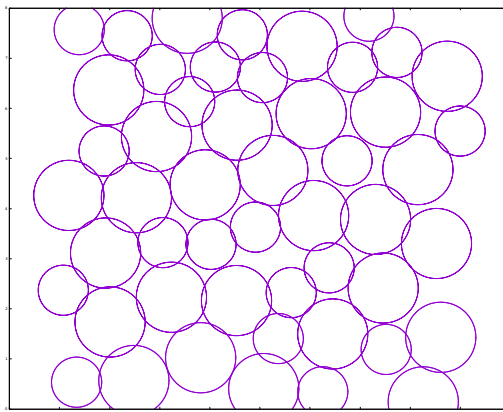


Abbildung 1.2: gejammtter Zustand

1.1.1 Isostatik

Isostatik ist über z , der durchschnittlichen Kontaktzahl pro Teilchen definiert. Ein System wird isostatisch genannt, wenn z genau bei einem gewissen Wert z_{iso} liegt. Liegt z darüber, wird ein System hyperstatisch genannt, darunter hypostatisch. Über diesem Wert ist das System fest, darunter ist das System beweglich. Für Reibungslose Teilchen ist $z_{\text{iso}} = 2d$. Denn die isostatische Konfiguration ist so definiert, dass die Zahl der Kontakte in einem System $NZ/2$ gleich der Anzahl der Gleichungen für Kraftgleichgewicht Nd ist. N ist hier die Zahl der Teilchen und Z die durchschnittliche Anzahl der Kontakte pro Teilchen. In diesem Fall gibt es nämlich eine eindeutige Lösung für die Kräfte zwischen Teilchen[1].

1.2 Potential

In dieser Arbeit werden Teilchen mit dem Potential der Form

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{\epsilon}{\alpha} \left(1 - \frac{r_{ij}}{\sigma_{ij}}\right)^\alpha & , r_{ij} \leq \sigma_{ij} \\ 0 & , r_{ij} > \sigma_{ij} \end{cases} \quad (1.2)$$

betrachtet. Dieses Potential ist von granularen Materialien motiviert, die einen festen Radius haben und keine Interaktion aufweisen, bis auf die Kraft, die ein zu starkes Verformen verhindert. Der Parameter ϵ legt die Skalierung der Energie fest. Der Parameter α legt die Art der Wechselwirkung fest. Für $\alpha = 2$ erhält man ein harmonisches, abstoßendes Potential. Für $\alpha = 5/2$ bekäme man beispielsweise ein abstoßendes, hertzsches Potential. Die Größe r_{ij} bezeichnet den Abstand zwischen den Mittelpunkten zweier Teilchen und σ_{ij} ist die Summe der Radien der beteiligten Teilchen. Das Potential ist null, wenn zwei Teilchen weiter voneinander entfernt sind, als die Summe ihrer Radien. Ist der Abstand geringer, als die Summe der Radien, steigt das Potential quadratisch mit dem Überlapp.

1.3 Gravitation

In dieser Arbeit wird das Jamming-Phänomen in Abhängigkeit von Störungen, wie der Gravitationskraft untersucht. Deshalb befindet sich ein Teilchen jeweils zusätzlich zu dem Potential der anderen Teilchen in einem Gravitationspotential

$$V_{\text{Grav}}(z) = mgz. \quad (1.3)$$

Hierbei bezeichnet m die Masse eines Teilchens, g eine Gravitationskonstante und z die Höhe des Teilchens.

2 Simulation

Zur Simulation wurde ein Programm in der Programmiersprache C++ geschrieben. Die Hauptaufgabe des Programms ist es, mittels der Conjugate-gradient-Methode die Energie eines Teilchensystems zu minimieren.

2.1 Kraftberechnung

Zu Beginn der Simulation werden Teilchen zufällig im 3-dimensionalen Raum platziert. Das entspricht einem System bei $T = \infty$, da der Ort eines Teilchen überall gleich wahrscheinlich ist. Daraufhin wird der Gradient des Potentials bzw. die Kraft auf die einzelnen Teilchen im System berechnet. Die Kraft hat die Form

$$\mathbf{F}_{ij} = \epsilon(\sigma_{ij} - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)^{\alpha-1} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.1)$$

Mit \mathbf{r} den Positionen der Teilchen. Die Gesamtkraft des Systems wird durch Summation über alle Teilchen berechnet.

$$\mathbf{F}_{\text{Gesamt}}(\mathbf{r}) = \sum_i^N \sum_{j=i+1}^N \mathbf{F}_{ij} \quad (2.2)$$

Der Kraftvektor ist also ein $d \cdot N$ - dimensionaler Vektor. In diesem Fall (mit $d = 3$ Dimensionen und N der Teilchenzahl) ist die Kraft ein $3N$ -dimensionaler Vektor. Daraufhin werden die Teilchenpositionen \mathbf{r} jeweils virtuell um ϵ verschoben und an dieser Position die Kraft berechnet.

$$F(\epsilon) = \mathbf{F}_{\text{Ges}} \cdot \mathbf{F}_{\text{Ges}}(\mathbf{r} \cdot \epsilon) \quad (2.3)$$

Dadurch, dass wir ϵ eingeführt haben, haben wir ein $3N$ -dimensionales Problem in ein eindimensionales Problem in Abhängigkeit von ϵ vereinfacht.

2.2 Linesearch / Newton-Verfahren

Um $F(\epsilon) = 0$ zu finden, also den Punkt, an dem die Kraft minimal wird, wird das Newton-Verfahren verwendet.

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n - \frac{F(\epsilon)}{F'(\epsilon)} \quad (2.4)$$

Das Newton-Verfahren wird so lange iteriert, bis ϵ kleiner als 10^{-6} ist.

2.3 Steepest-descent

Die Steepest-descent-Methode funktioniert so, dass jedes Teilchen in einem Minimierungsschritt entlang des Gradienten des Potentials, in dem es sich befindet bis zum Potentialminimum verschoben wird. Dieser Gradient ist bis auf das Vorzeichen äquivalent zur Kraft nach Gleichung 2.1. Eine Minimierung mit steepest descent würde man also über

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + \varepsilon \mathbf{g}_n \quad (2.5)$$

durchführen. Hier ist \mathbf{g} der Gradient. \mathbf{r}_{n+1} ist die aktualisierte Position eines Teilchens.

2.4 Conjugate-gradient

In besonders schmalen und länglichen Energieminima kann bei der Steepest-descent-Methode ein Zickzack-Weg der Minimierungsschritte auftreten, was dazu führt, dass die Minimierung lange dauert. Die conjugate-gradient-Methode will dies verhindern, indem für die Aktualisierung der Teilchenpositionen

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + \varepsilon \mathbf{d}_n \quad (2.6)$$

mit der Richtung der Aktualisierung

$$\mathbf{d}_n = \begin{cases} -\mathbf{g}_n & , n = 1 \\ -\mathbf{g}_n + \beta_n \mathbf{d}_{n-1} & , n > 1 \end{cases} \quad (2.7)$$

die Richtung \mathbf{d} um einen Faktor β korrigiert wird. β ist gegeben durch [3]

$$\beta_n = \frac{\mathbf{g}_n^T (\mathbf{g}_n - \mathbf{g}_{n-1})}{\mathbf{g}_{n-1}^2}. \quad (2.8)$$

2.5 Periodische Randbedingungen

In der Simulation werden periodische Randbedingungen verwendet, um Finite-size-Effekte zu vermeiden. Bei der Einschaltung von Gravitationsstörung werden die periodischen Randbedingungen in z -Richtung ausgeschaltet, um zu verhindern, dass die Teilchen durch den Boden der Box hindurchfallen.

3 Ergebnisse

3.1 Athermisches Jamming ohne Störungen

Die oben beschriebene Simulation wurde auf ein System aus 500 monodispersen Teilchen angewendet. Dafür wurde für Packungsdichten zwischen $\phi = 0.54$ und $\phi = 0.7$ der Algorithmus jeweils 1000 mal iteriert.

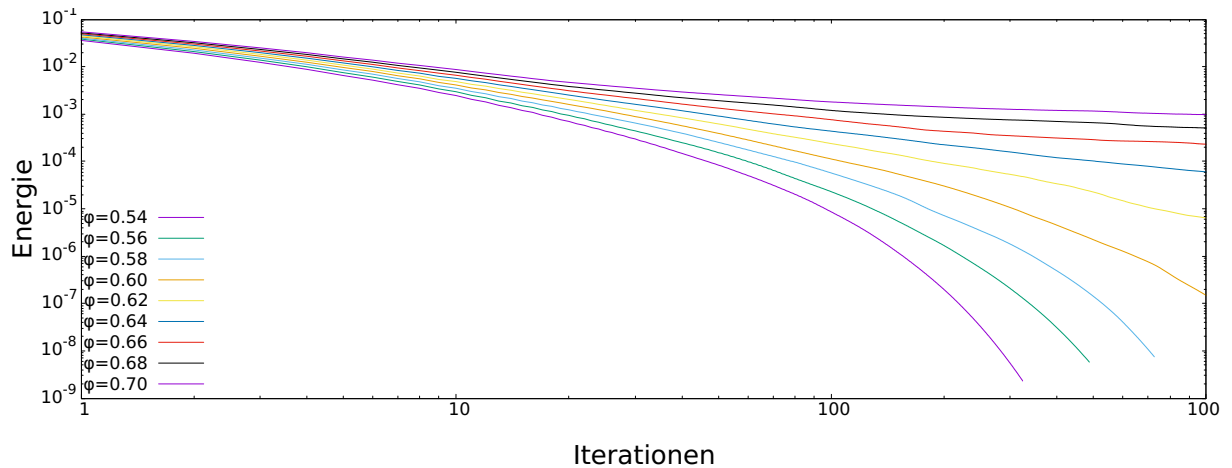


Abbildung 3.1: Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von Minimierungsschritten

In Abbildung 3.1 sieht man die Minimierungskurven der Energien für die verschiedenen Packungsdichten. Nach [2] erwartet man, dass die Energiekurven ab einer Packungsdichte von $\phi = 0.64$ nicht mehr gegen null gehen. Diese Packungsdichte wird Φ_{rcp} genannt (Random close packed). Diese Zufälligkeit der Packungsdichte ist so definiert, dass die Entropie im Ausgangszustand maximal ist [2]. Dass die Energie ab einer Packungsdichte von 0.64 nicht mehr gegen null geht, liegt daran, dass ab dieser Packungsdichte im lokalen Minimum, das ausgehend von einem zufälligen Startpunkt erreicht wurde, nicht ausreichend Platz für die Teilchen vorhanden ist, sich so zu positionieren, dass alle Überlapps entfernt werden. Im globalen Minimum läge das System in der geordneten, energetisch günstigsten Form eines Kristalls vor.

3 Ergebnisse

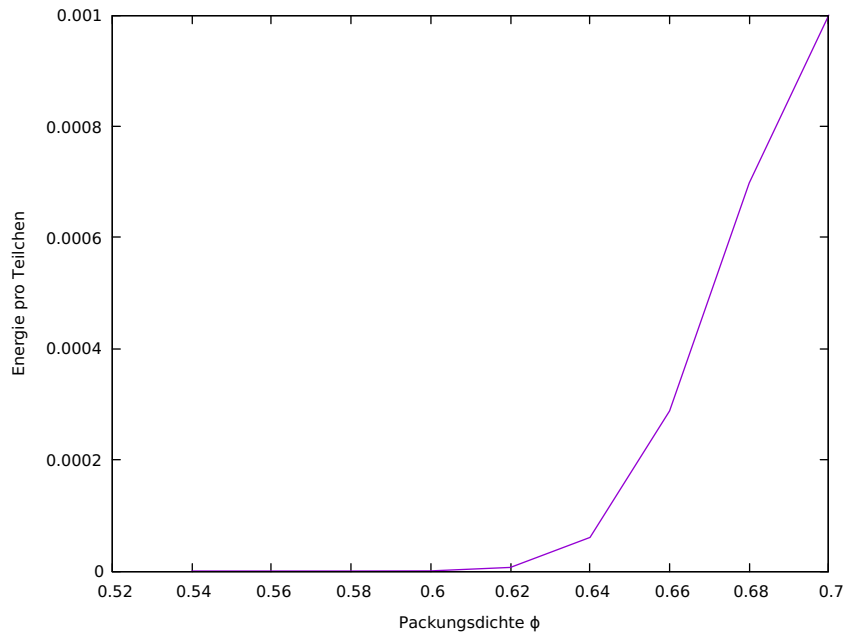


Abbildung 3.2: Überlappenergie pro Teilchen über der Packungsdichte

Man sieht in Abb. 3.1, dass für Packungsdichten unter 0.62 die Energie deutlich gegen null geht. Bei $\phi = 0.62$ fällt die Energie in 1000 Minimierungsschritten nicht deutlich auf null ab. Um zu verifizieren, dass die Energie auch bei einer Packungsdichte von 0.62 gegen null geht, müsste man die Minimierung weiter laufen lassen und numerische Ungenauigkeiten, wie die des Newton-Verfahrens, verringern. Betrachtet man in Abbildung 3.2 die Überlappenergie pro Teilchen am Ende der 1000 Minimierungsschritte, sieht man, dass die Gleichgewichtsenergie bei einer Packungsdichte von ca. 0.64 einen Wert ungleich null annimmt. Nach [2] würde man erwarten, dass es hier in Bezug auf die Anzahl der Kontakte einen diskreten Sprung von null auf einen endlichen Wert gibt.

3.2 Gravitationsstörung

Um den Einfluss einer Gravitationskraft auf ein System zu untersuchen, habe ich 800 Teilchen mit einem Radius von σ in einer quadratischen Box bei einer Packungsdichte von $\phi = 0.314$ erzeugt. Die Gravitationskraft beträgt hier $0.001 \frac{\sigma}{\epsilon}$. Als Vergleich sei gesagt, dass zwischen zwei Teilchen mit Radius σ und einem Abstand gleich dem Radius eine Kraft von $1 \frac{\sigma}{\epsilon}$ wirkt.

Nachdem sich das Gleichgewicht des Systems eingestellt hat, habe ich die Packungs-

3.2 Gravitationsstörung

dichte, die Zahl der Kontakte und die Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Höhe untersucht. Diese habe ich so bestimmt, indem ich als erstes das System in Schichten eingeteilt habe. Um das Histogramm zu erhalten, habe ich die jeweilige Größe in jeder Schicht der Box gemessen. Dann habe ich die gemessene Größe durch die Zahl der Teilchen in einer Schicht geteilt.

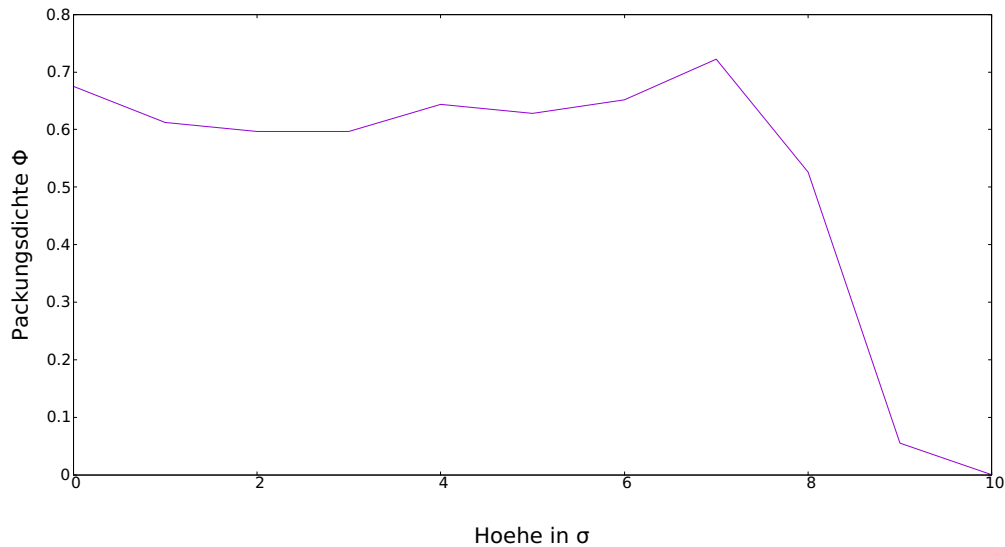


Abbildung 3.3: Packungsdichte in Abhängigkeit von der Höhe

Der Unterschied zum klassischen Jamming ohne Störungen ist, dass sich das Jammingverhalten nicht in erster Linie mit der Packungsdichte, sondern mit der Höhe ändert. Ein System kann also, wie man in Abbildung 3.3 sieht (hier ist die Packungsdichte bei der Höhe $> 9\sigma$ kleiner, als die kritische Packungsdichte), an der Oberfläche des Systems ungejammt sein und weiter unten gejammt. Man beobachtet also, dass sich ein System durch eine Störung von einem homogenen System, wo die Teilchendichte ortsunabhängig ist, in ein inhomogenes System ändert. Besonders interessant ist die Stufe. Man sieht, dass die Packungsdichte unterhalb der Stufe konstant ist, was bedeutet, dass hier das System im Gleichgewicht ist.

Die obige Beobachtung gilt für eine Gravitationskraft von $0.001 \frac{\epsilon}{\sigma}$. In Abbildung 3.4 sieht man hingegen, dass sich bei einer Erhöhung der Gravitation die Stufe nach unten verschiebt und die Packungsdichte unterhalb der Stufe steigt.

3 Ergebnisse

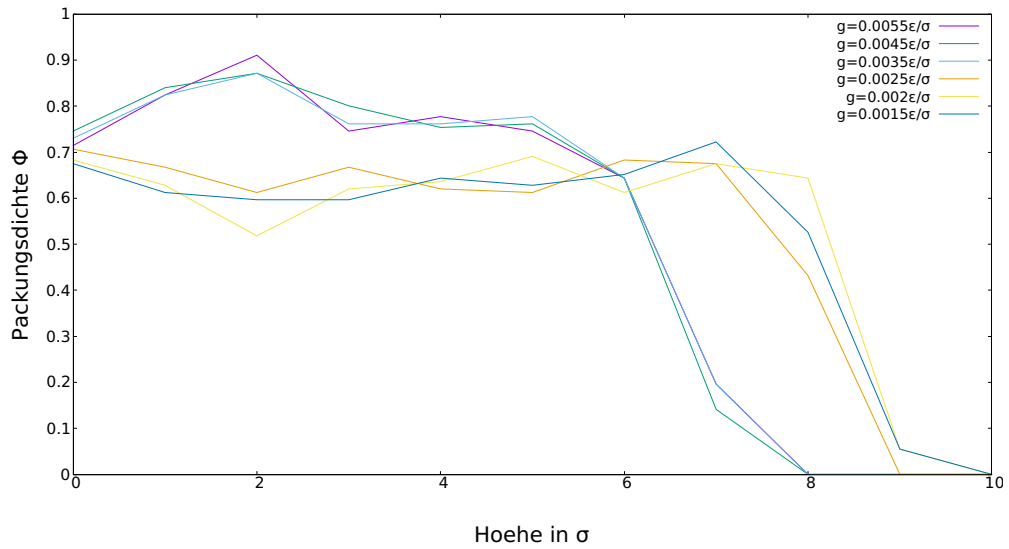


Abbildung 3.4: Packungsdichten in Abhängigkeit von der Höhe für verschiedene Gravitationsstärken

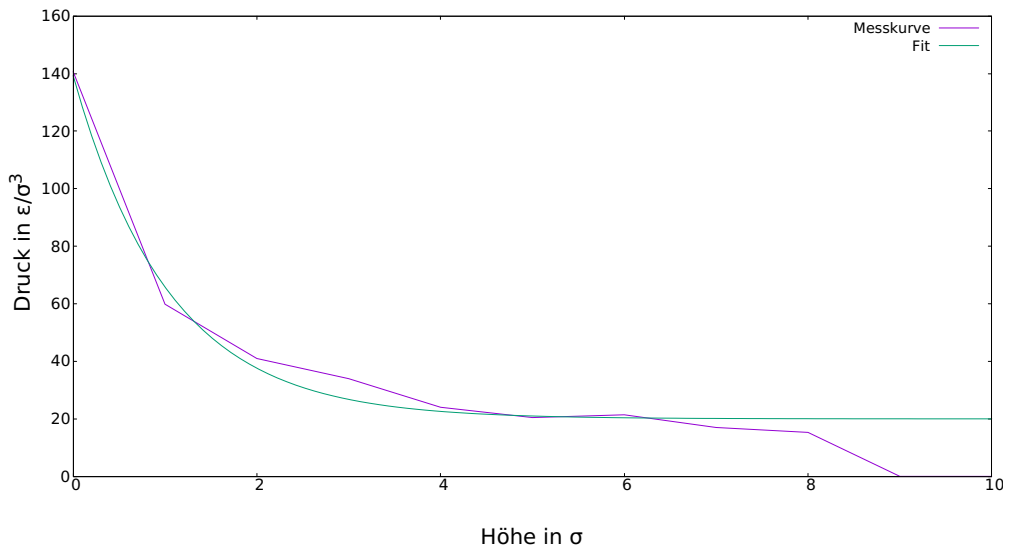


Abbildung 3.5: Druck in Abhängigkeit von der Höhe

In Abbildung 3.5 sieht man den Druck in Abhängigkeit von der Höhe, den ich wie in [2] berechnet habe. Man erkennt ein exponentielles Verhalten bis zur Höhe, bei der auch in der Packungsdichte 3.3 eine Stufe auftritt. Über der Stufe fällt der Druck auf

3.2 Gravitationsstörung

null. Besonders interessant hieran ist, dass sich das System nicht im Gleichgewicht befindet.

Für die Herleitung einer Formel für den Druck in Abhängigkeit von der Höhe geht man vom Kräftegleichgewicht aus. Somit ist die Kraft von unten auf ein Volumenelement pA gleich der Gewichtskraft eines Volumenelements $\rho g A dh$ und der Kraft von oben auf das Volumenelement $(p + dp)A$. p ist hier der Druck, A die Fläche eines Volumenelements, ρ die Dichte, g die Gravitationsbeschleunigung und h die Höhe eines Volumenelements.

$$pA - \rho g A dh - (p + dp)A = 0 \quad (3.1)$$

Vereinfachen und Umformen ergibt

$$dp = -m\rho g dh \quad (3.2)$$

Anders als bei der barometrischen Höhenformel für ideale Gase, bei der $\rho = \frac{pM}{RT}$ gilt, verwendet man wegen des Potenzgesetzes in der Nähe des Jamming-Übergangs [2]

$$\frac{p}{p_0} = (\Phi - \Phi_C)^{\alpha-1} \quad (3.3)$$

(Φ_C ist die Packungsdichte zu einem Druck p_0) und der Packungsdichte

$$\Phi = \frac{4\rho\pi\sigma^3}{3} \quad (3.4)$$

mit dem Radius σ die Formel

$$\rho = \left(\left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}} + \Phi_C \right) \frac{3}{4\pi\sigma^3}. \quad (3.5)$$

in diesem Fall der harmonischen Wechselwirkung ist $\alpha = 2$. Einsetzen in 3.2 ergibt

$$dp = -\frac{3}{4\pi\sigma^3} \left(\frac{p}{p_0} + \Phi_C \right) mg dh \quad (3.6)$$

Daraus folgt

$$p = p_0 (e^{-\frac{3}{4\pi\sigma^3} mg \Delta h} - \Phi_C) \quad (3.7)$$

4 Ausblick

In dieser Arbeit wurde durch ein eigenes Programm das Ergebnis von [2] reproduziert. Es wurde der Wert für Random-close-packing von 0.64 bestätigt. Außerdem wurde in der Arbeit der Einfluss von Gravitation auf ein System aus reibungsfreien Teilchen mit harmonischem Potential untersucht. Hierbei wurde festgestellt, dass sich eine Inhomogenität der Packungsdichte in Form einer Stufe ausbildet. Insbesondere wurde beobachtet, dass sich das System nicht im Gleichgewicht befindet.

Außerdem wurde eine Formel für die Höhenabhängigkeit des Drucks hergeleitet.

Bei der Untersuchung verschiedener Gravitationsstärken wurde beobachtet, dass sich bei höheren Gravitationskräften die Stufe zu niedrigeren Höhen verschiebt und sich die Packungsdichte unterhalb der Stufe erhöht.

Ein weiterer Ansatz zur Untersuchung des Jamming-Phänomens unter Störungen wäre, Jamming unter Scherprofilen zu betrachten.

Literatur

- [1] M van Hecke. “Jamming of soft particles: geometry, mechanics, scaling and isotaticity”. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 22.3 (Dez. 2009), S. 033101. DOI: [10.1088/0953-8984/22/3/033101](https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/3/033101). URL: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/3/033101>.
- [2] Corey O’Hern u. a. “Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder”. In: *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics* 68 (Aug. 2003), S. 011306. URL: [10.1103/PhysRevE.68.011306](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.011306).
- [3] Jonathan Richard Shewchuk. *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain*. Carnegie Mellon University. DOI: <https://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf>.