

Krachtenbalans op zandkorrels

Thijs J.H. Vlugt en Rianne van Eerd
Debye Instituut afdeling Scheikunde

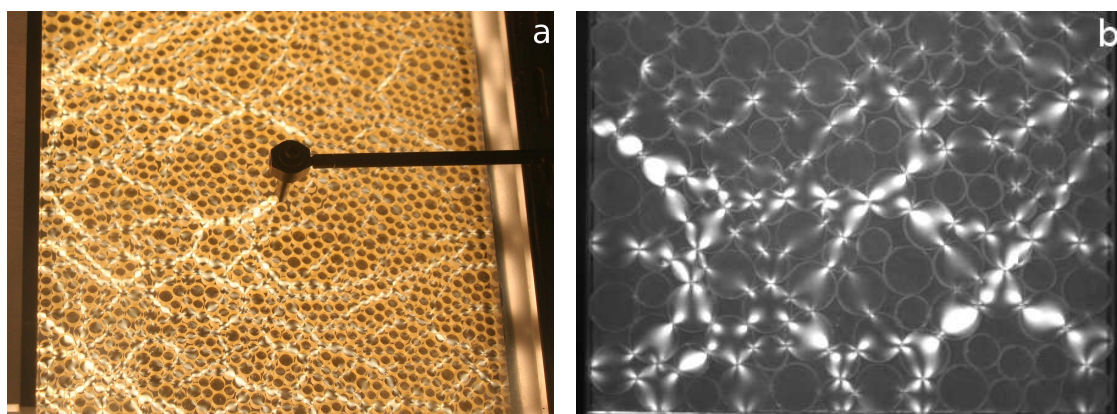
Granulaire materialen zoals zand en graankorrels hebben eigenschappen overeenkomstig met zowel vloeistoffen als vaste stoffen. Zo kan droog zand in een zandloper net als water stromen, terwijl als we op het strand lopen zand juist meer op een vaste stof lijkt. Door deze bijzondere eigenschappen staan granulaire materialen in de belangstelling bij natuurkundigen. Een deel van het onderzoek naar deze materialen richt zich op zogenoemde krachtennetwerken.



Krachtennetwerken zijn netwerken van contactkrachten, die bijvoorbeeld in een zandhoop ontstaan. Worden deze krachten te groot, dan kan de zandhoop verschuiven of omvallen. In een laboratoriumopstelling kunnen deze krachten worden onderzocht door gebruik te maken van het foto-elastische effect (optische eigenschappen die veranderen wanneer krachten veranderen) van plastic schijven, zie Fig. 1.

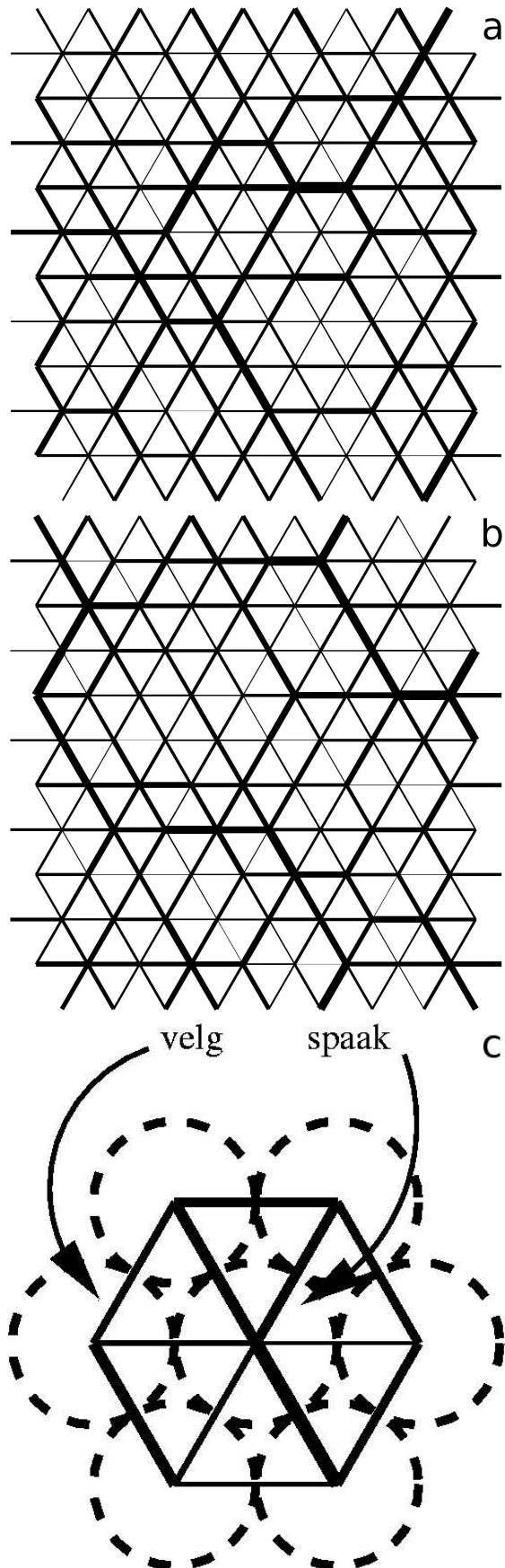
Zoals duidelijk te zien is in Fig. 1 zijn er grote fluctuaties in de krachten: sommige deeltjes ondervinden grote krachten, andere deeltjes niet. De centrale groot-

heid om deze krachtfluctuaties te karakteriseren is de kansverdeling $P(f)$ van de contactkracht f tussen twee deeltjes. In het algemeen heeft $P(f)$ een maximum voor een kracht ongeveer gelijk aan de gemiddelde kracht $\langle f \rangle$. Het gedrag van deze functie voor grote krachten staat momenteel ter discussie; experimenten vinden bijna altijd een exponentiële verdeling terwijl veel theoretische modellen iets tussen een exponentiële verdeling en een Gaussische verdeling vinden. In een recent nummer van Nature (23 juni 2005) besteden maar liefst 3 artikelen aandacht aan dit vraagstuk [1].



Figuur 1: Krachtennetwerken gevisualiseerd met behulp van foto-elastische schijven. Afhankelijk van de contactkrachten op deze schijven veranderen de optische eigenschappen, waardoor de krachtennetwerken kunnen worden gevisualiseerd. Grote contactkrachten tussen deeltjes worden zichtbaar als witte banden. (a) ca. 2000 plastic schijven met een diameter van ca. 4 mm en (b) ca. 100 plastic schijven met een diameter van ca. 1 cm. Deze experimenten zijn afkomstig van Manuela Popescu uit de groep van Martin van Hecke (Universiteit Leiden).

Een simpel theoretisch model om deze krachtennetwerken te bestuderen kan op de volgende manier geconstrueerd worden. Beschouw een systeem van N deeltjes die ingeklemd zijn in een bepaalde geometrie. Deeltjes oefenen alleen krachten op elkaar uit als ze elkaar raken (f_{ij} is de kracht tussen deeltje i en j). Net zoals bij bijvoorbeeld biljartballen zijn deze krachten altijd repulsief. Wanneer deeltjes elkaar raken worden ze in principe een heel klein beetje gedeformeerd. We nemen aan dat de lengteschaal van deformaties van de deeltjes veel kleiner is dan de grootte van de deeltjes zelf. Dit is een goede benadering voor bijvoorbeeld biljartballen. Op het oog identieke systemen van deeltjes kunnen totaal verschillende krachtennetwerken hebben. Zo is het onmogelijk om te voorspellen hoe de krachten tussen ballen in een “snooker-driehoek” zijn verdeeld aan het begin van een partijtje biljart. Daarom nemen we in het theoretische model aan dat de contactkrachten tussen deeltjes onafhankelijk zijn van de posities van de deeltjes. Oftewel, bij een constante topologie van het systeem (vaste posities van alle deeltjes), kunnen we de contactkrachten f_{ij} beschouwen als vrijheidsgraden. Deze dienen zodanig gekozen te worden dat (1) de netto kracht op elk deeltje nul is (de krachtenbalans op elk deeltje is dan te schrijven als een lineaire vergelijking in de krachten), (2) de gemiddelde contactkracht $\langle f \rangle$ gelijk is aan 1 (alle contactkrachten worden dus genormaliseerd met de gemiddelde kracht) en (3) alle contactkrachten repulsief zijn ($f_{ij} \geq 0$). Voor een 2D systeem bestaande uit N deeltjes met coördinatiegetal z (het gemiddelde aantal burenen van een deeltje) zijn er dus $2N + 1$ lineaire constraints (krachtenbalans op elk deeltje en $\langle f \rangle = 1$) en $zN/2$ vrijheidsgraden (f_{ij}).



Figuur 2: (a) en (b) Krachtennetwerken voor een hexagonaal systeem ($z = 6$) met periodieke randvoorwaarden. Voor dezelfde posities van de deeltjes zijn er verschillende krachtennetwerken mogelijk die tot krachtenbalans op elk deeltje leiden. De dikte van de lijn is evenredig met de kracht. (c) Door aan een “wiel” te draaien (6 krachten van de spaken elk met Δf vergroten en de krachten van de velg met Δf te verkleinen) kunnen krachtenverdelingen efficiënt worden berekend. De netto kracht op elk deeltje blijft steeds nul, en ook de gemiddelde kracht $\langle f \rangle$ verandert niet.

In het algemeen ligt z tussen 4 en 6 voor een $2D$ systeem, dus is het aantal vrijheidsgraden groter dan het aantal constraints en zijn er voor een gegeven topologie dus verschillende realisaties van het krachtennetwerk mogelijk (Fig. 2a en 2b). Door aan te nemen dat elke realisatie van het krachtennetwerk die aan alle regels voldoet even waarschijnlijk is, krijgen we het zogenaamde krachtenensemble van Snoeijer *et al.* [2]. Voor een hexagonaal systeem is het mogelijk om krachtennetwerken in dit ensemble te genereren met een zogenaamde Monte Carlo simulatie [3]. Deze simulatie start met alle $f_{ij} = 1$. Telkens wordt er een willekeurig deeltje gekozen. Rondom dit deeltje bevinden zich 6 “spaken” en een “velg” die bestaat uit 6 bindingen (Fig. 2c). Door de krachten langs alle spaken met Δf te vergroten en alle krachten langs de velg met Δf te verkleinen wordt een nieuwe realisatie van het krachtennetwerk gegenereerd waarin de netto kracht op alle deeltjes nog steeds gelijk is aan nul. Deze nieuwe realisatie wordt verworpen indien één van de krachten kleiner zou worden dan nul. Door dit proces een zeer groot aantal keer te herhalen wordt uiteindelijk de distributie $P(f)$ verkregen.

In Fig. 3a staat de functie $P(f)$ volgens het krachtenensemble voor hexagonale roosters van verschillende grootte. Inderdaad blijkt deze functie een maximum te hebben voor $f = \langle f \rangle = 1$. Op

het eerste gezicht lijkt de grootte van het hexagonale rooster er niet toe te doen. Bovendien is het erg lastig om te bepalen of $P(f)$ voor grote krachten ($f > 5$) gelijk wordt aan een Gaussische functie of een exponentiele functie. Grote krachten komen immers niet vaak voor en daarom is de statistiek van de krachtenverdeling slecht voor grote f .

Echter, met een truc kunnen we de statistiek voor grote krachten verbeteren. Deze truc heet *Umbrella Sampling* en is al in de jaren '70 van de vorige eeuw door Torrie en Valleau en bedacht [4]. Het idee is om in een Monte Carlo simulatie het systeem in een bepaalde richting te dwingen, in ons geval het systeem zodanig te sturen dat er veel grote krachten zijn. Echter, dit levert niet de echte $P(f)$ op, dus in feite wordt een verkeerde krachtenverdeling uitgerekend. Het blijkt mogelijk te zijn om deze fout op een *exacte* manier te corrigeren, waardoor toch de correcte functie $P(f)$ kan worden verkregen.

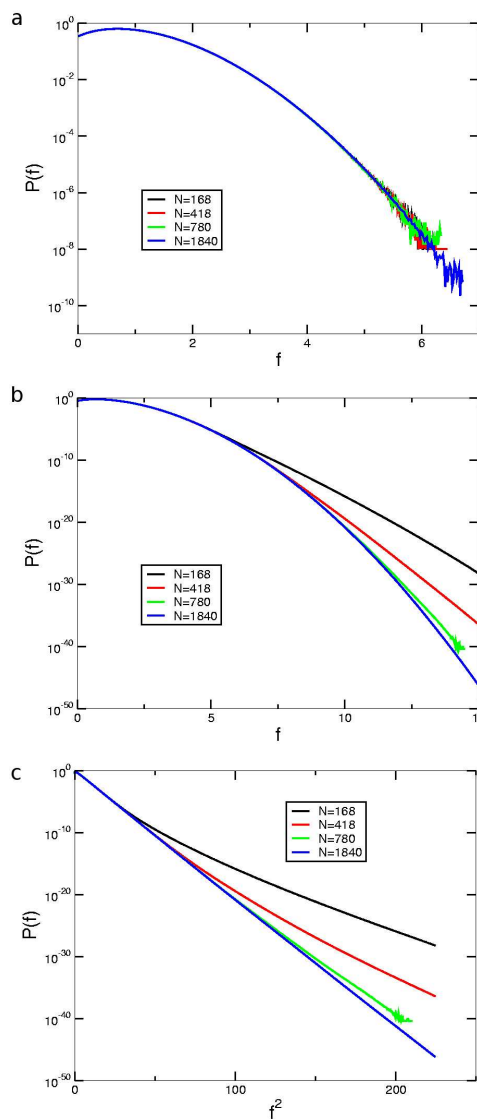
Het resultaat van deze berekening staat in Figs. 3b en 3c. Voor kleine f komt $P(f)$ exact overeen met Fig. 3a. Inderdaad blijkt de nu berekende $P(f)$ veel nauwkeuriger voor grote krachten. Pas nu is het effect van de systeemgrootte duidelijk: hoe groter het systeem des te dichter komt $P(f)$ in de buurt van een Gaussische verdeling ($\ln P(f) \propto f^2$). Dit suggereert dat het krachtenensemble in principe Gaussische krachtenverdelingen voorspelt, maar dat voor te kleine systemen de verdeling ergens tussen een exponentiele ($\ln P(f) \propto f$) en een Gaussische ($\ln P(f) \propto f^2$) verdeling in ligt. Dit is een interessant resultaat, omdat dit een van de weinige systemen is waarbij de krachtverdeling voor grote krachten nauwkeurig te bepalen is. Interessant is om te onderzoeken hoe dit van het coördinatiegetal z afhangt en of dit resultaat ook voor niet-hexagonale sys-

temen geldt. Bovendien is het met dit model mogelijk om de verandering van het krachtennetwerk te onderzoeken als er een bepaalde afschuifspanning op het systeem staat en bij welke afschuifspanning er geen krachtennetwerk meer mogelijk is waarbij de netto kracht op elk deeltje gelijk is aan nul.

Het leuke is dat het hele idee van het krachtenensemble van Snoeijer *et al.* ook wordt toegepast in een hele andere context, namelijk in de biologie [5,6]. In een zogenaamd metabolisch netwerk is er een groot aantal biochemische reacties mogelijk, waarin de metaboliet concentraties en fluxen van de reacties de belangrijkste variabelen zijn. In het algemeen regelt een organisme dit reactienetwerk zodanig dat b.v. de productie van biomassa optimaal is. In principe bepalen de fluxen van de chemische reacties de concentraties van de metabolieten, maar in de praktijk is er een scheiding in tijdschalen. De concentraties van de metabolieten passen zich zeer snel aan aan veranderingen in het netwerk. Een succesvol toegepaste strategie om het biochemisch netwerk van een eenvoudig organisme te begrijpen is om de reactiefluxen te zien als onafhankelijke variabelen die zodanig gekozen moeten worden dat het systeem zich in een steady-state bevindt (alle concentraties zijn constant). Omdat het aantal reactiefluxen groter is dan het aantal metabolieten en reactiefluxen nooit negatief kunnen zijn, is het oplossen van dit probleem mathematisch identiek aan het krachtenensemble van Snoeijer *et al.* voor granulaire materialen.

Het grote verschil is echter dat het onderliggende netwerk (de posities van de deeltjes, danwel het complete metabolische netwerk van alle mogelijke chemische reacties) een verschillende structuur heeft. Daarom zal de verdeling van de reactiefluxen in biochemische netwerken

anders zijn dan die van de krachten in het krachtenensemble. Hoe dit precies met de onderliggende netwerkstructuur samenhangt, is echter nog niet geheel duidelijk.



Figuur 3: (a) Krachtenverdeling $P(f)$ als functie van de systeemgrootte (aantal deeltjes N), (b) en (c) zelfde als (a), maar nu uitgerekend met behulp van *Umbrella Sampling*. Een rechte lijn in (b) is een exponentiële verdeling ($\ln P(f) \propto f$), terwijl een rechte lijn in (c) een Gaussische verdeling ($\ln P(f) \propto f^2$) voorstelt. Alle krachten die niet tot het “wiel” van het centrale deeltje behoren zijn hier weggelaten.

Met dank aan Manuela Popescu en Martin van Hecke voor het beschikbaar stellen van Fig. 1 en Jacco Snoeijer voor het doorlezen van de tekst.

Referenties

- [1] van Hecke, M. *Nature* **2005**, *435*, 1041–1042.
- [2] Snoeijer, J.H.; Vlugt, T.J.H.; van Hecke, M.; van Saarloos, W. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *92*, 054302.
- [3] Tighe, B.P.; Socolar, J.E.S.; Schaeffer, D.G.; Mitchener, W.G.; Huber, M.L. *Phys. Rev. E* **2005**, *72*, 031306.
- [4] Torrie, G.M.; Valleau, J.P. *J. Comp. Phys.* **1977**, *23*, 187–199.
- [5] Snoeijer, J.H.; Vlugt, T.J.H.; Ellenbroek, W.G.; van Hecke, M. ; van Leeuwen, J.M.J. *Phys. Rev. E* **2004**, *70*, 061306.
- [6] Almaas, E.; Kovács, B.; Vicsek, T.; Oltvai, Z.N.; Barabási, A.L. *Nature* **2005**, *427*, 839–843.