Holger Kruse / Karl Popp / Hans-Georg Matuttis / Alexander Schinner

# Behandlung des Schotters als Vielkörpersystem mit wechselnden Bindungen

Mittels der Molekulardynamischen Simulation lässt sich beim Schottergleis jeder einzelne Schotterstein im Modell nachbilden. Es wird untersucht, inwiefern man Kontaktkraftgesetze, Stoffparameter und Geometriegrößen so festlegen kann, dass das resultierende Rechenmodell die wesentlichen Verhaltensweisen des realen Systems wiedergibt. Des Weiteren werden mögliche Einsatzgebiete der Molekulardynamischen Simulation genannt.

Schon sehr früh wurde beim Bau von Schienenfahrwegen Schotter eingesetzt, wie z.B. bei der 1825 fertiggestellten Strecke Stockton-Darlington in England oder bei der 'Bayerischen Ludwigsbahn' im Jahre 1835 [1]. Hauptgrund war damals die gute Entwässerungseigenschaft dieses Materials, wodurch ein Befahren der Eisenbahnstrecken auch bei Regen möglich wurde. Später kamen als weitere Pluspunkte für den Schottereinsatz die niedrigen Investitionskosten, die leichte Korrekturmöglichkeit des Gleisverlaufes sowie das günstige Schallabsorptionsverhalten von Schotter hinzu.

Obwohl sich der Eisenbahnschotter für die damaligen Anforderungen sehr gut bewährt hat, scheint er für die neuen Hochgeschwindigkeitsstrecken nur bedingt geeignet zu sein [2]. Auf diesen Strecken wird eine beschleunigte Verschlechterung der Gleislage beobachtet. Mancherorts treten zudem sogenannte 'weiße Stellen' auf. Das für diese Stellen verantwortliche pulverisierte Gestein ist ebenfalls ein Anzeichen für eine Überlastung des Schotters, und zwar durch zu hohe dynamische Beanspruchungen. Selbst durch eine Reihe von Maßnahmen zur Verringerung der Schotterbelastung, wie z.B. der Optimierung der Stopfverfahren, der Verwendung breiterer Schwellen oder dem Einbau elas-

### Die Autoren

Dipl.-Ing. Holger Kruse und Prof. Dr.-Ing. Karl Popp, Institut für Mechanik der Universität Hannover, Dipl.-Phys. Dr. Hans-Georg Matuttis, Department of Applied Physics, University Tokyo und Dipl.-Phys. Alexander Schinner, Institut für Theoretische Physik, Universität Magdeburg

Der Beitrag basiert auf einem Vortrag, der anlässlich der BahnBau 2000 in Berlin gehalten wurde. tischerer Schienenbefestigungen, können die Probleme voraussichtlich nicht zufriedenstellend behoben werden.

Die Deutsche Bahn AG muss somit die Gleise häufiger durcharbeiten bzw. nachstopfen, was sowohl mit erheblichen Kosten verbunden ist als auch negative Auswirkungen auf die Verfügbarkeit der entsprechenden Gleisabschnitte mit sich bringt. Falls das Schottergleis im Hochgeschwindigkeitsverkehr nicht vollständig von der Festen Fahrbahn verdrängt werden soll, scheinen weitere Anstrengungen



Abb. 1: Eisenbahnschotter als nichtbindiges Granulat

hinsichtlich einer Verbesserung seines konstruktiven Aufbaus notwendig. Ein umfassendes Verständnis des Systemverhaltens ist hierfür außerordentlich wichtig. Nun stellt das Eisenbahngleis aus mechanischer Sicht ein sehr kompliziertes Gebilde dar, bei dem zudem der Einfluss der Schotterschicht die meisten Fragen aufwirft [3]. Zur messtechnischen Erfassung der in ihr ablaufenden Vorgänge werden Schottermesssteine eingesetzt [4]. Sie lassen jedoch kaum Aussagen über das Setzungs- und Verschleißverhalten zu, welches sich sehr langsam im Laufe von Hunderttausenden von Radsatzüberrollungen abspielt: Schottersteine lagern sich um, das Gleisbett verschmutzt, scharfkantige Spitzen schleifen sich ab und einzelne Schottersteine brechen auseinander. Dieses Langzeitverhalten wurde mit speziellen Versuchsreihen analysiert. Die in verschiedenen Ländern gewonnenen Erkenntnisse hat Dahlberg zusammengetragen [5]. Sie weisen erhebliche Unterschiede auf, die deutlich machen, wie schwierig sich solche experimentellen Untersuchungen gestalten.

Als Alternative bieten sich theoretische Betrachtungen an, die jedoch ebenfalls mit einer Reihe von Schwierigkeiten verbunden sind. Der Schotter, welcher ein nichtbindiges Granulat darstellt, kann zum einen als Kontinuum beschrieben werden, eine Beschreibungsform, die hinsichtlich einer Verwendung in FE-Gleismodellen wünschenswert wäre. Zu nennen ist in diesem Zusammenhang das hypoplastische Stoffgesetz mit intergranularer Dehnung [6]. Es ist jedoch zu überprüfen, ob sich im Falle der nur aus wenigen Kornlagen bestehenden Schotterschicht eine solche Abbildung als Kontinuum für die Behandlung sämtlicher Fragestellungen eignet.

Mit einer anderen Beschreibungsform beschäftigt sich dieser Artikel: Bei der sogenannten Molekulardynamischen Simulation (MD-Simulation) treten die einzelnen Schottersteine auch im Modell als diskrete Körper auf. Diese Art der Modellierung ist nicht neu. So benutzte Estradè i Panadès bereits Ende der achtziger Jahre das in Abb. 2 dargestellte Modell für das Schotterbett [7]. Seine Studien wurden jedoch durch die Rechenleistung damaliger Computer beschränkt. Er untersuchte u.a. die Höhe der Kontaktkräfte zwischen den einzelnen Schottersteinen in Abhängigkeit des Reibwertes in den Kontaktstellen sowie in Abhängigkeit der Druckverteilung zwischen Schwelle und Schotter. Für verschiedene Schottermaterialien traf er sodann Aussagen über den Prozentsatz an zerbrechenden Steinen.

Mit den heutigen Rechnern lässt sich das Verhalten sehr viel komplizierterer Modelle bestimmen. Nach einer Erläuterung des hier verwendeten Algorithmus wird das den Simulationen zugrundeliegende Modell detailliert beschrieben. Anschließend werden erste Ergebnisse präsentiert. Sie sollen Hinweise geben, inwiefern sich die MD-Simulation bei der Optimierung des Schottergleises sinnvoll einsetzen lässt und welche Probleme auftreten.

## Molekulardynamische Simulation

Die MD-Simulation fußt auf wissenschaftlichen Arbeiten, die Ende der siebziger Jahre entstanden. Einer der Vorreiter auf diesem Gebiet war Cundall [8]. Er nannte seinen Algorithmus zur Berechnung des dynamischen Verhaltens von Vielkörpersystemen 'distinct element method'. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik verzichtete er auf eine Gesamtsystembeschreibung in Form von Bewegungsgleichungen, da ein solch herkömmliches Vorgehen aus den folgenden Gründen Schwierigkeiten aufwirft:

- Bei den von Cundall untersuchten Systemen konnte es zu einer Neubildung von Kontakten kommen. Ebenso war ein Lösen der Verbindung einzelner Kontaktpartner möglich. Beide Vorgänge würden in der klassischen Mechanik eine Neuformulierung der Bewegungsgleichungen erforderlich machen.
- Die Vielkörpersysteme können sehr viele Kontaktstellen aufweisen. An jeder Kontaktstelle kann ein Übergang vom Haften zum Gleiten erfolgen, ein Phänomen, welches ebenfalls eine Veränderung in der Struktur der Bewegungsgleichungen bedeutet.

Je mehr Teilchen das System enthält, desto überlegener wird die MD-Simulation im Vergleich zu den klassischen Verfahren. Letztere lassen bei den zahlreichen Nichtlinearitäten - z.B. aufgrund der bereits genannten Haft-Gleit-Übergänge oder aufgrund von stark nichtlinearen Kontaktsteifigkeiten – eine Bestimmung des dynamischen Systemverhaltens nur mittels Zeitschrittintegration zu. Eine solche Zeitschrittintegration wird auch bei der MD-Simulation durchgeführt. Die Hauptunterschiede liegen darin begründet, dass es zum einen keine Zwangsbedingungen und somit Blockierungen einzelner Bewegungsfreiheiten gibt und dass zum anderen für jeden einzelnen Körper die Bewegungsgleichungen gesondert aufgestellt werden. Typische Anwendungsfälle dieses Verfahrens zeigt die Abb. 3 [9].

Ausgehend von dem Systemzustand zur Zeit t, beschrieben durch Lage und Geschwindigkeit sämtlicher Körper, ergibt sich der Zustand zur Zeit  $t+\Delta t$  wie folgt:

 Detektion sämtlicher Kontaktstellen. Hier finden verschiedene Suchalgorithmen Anwendung. Es kann auch eine Segmentierung des Aufenthaltsraumes der Teilchen durchgeführt werden.



Abb. 2: Modell der Schotterschicht unterhalb der Schwelle, verwendet von Estradè i Panadès 1989

- Berechnung der Kontaktkräfte mittels geeigneter Kontaktkraftgesetze und Zuordnung dieser Kräfte zu den jeweiligen Kontaktpartnern. Steht ein Körper mit mehreren Nachbarn in Kontakt, so werden die entsprechenden Kräfte addiert.
- Berechnung der Beschleunigung jedes einzelnen Teilchens unter Verwendung von Impuls- und Drallsatz. Aus den Beschleunigungen folgen sodann die gesuchten Positionen und Geschwindigkeiten zur Zeit  $t+\Delta t$ .

Dieses Vorgehen ermöglicht die Behandlung von sehr großen Systemen mit mehreren hunderttausend Teilchen. Die diversen Verfahren unterscheiden sich u.a. in der Art des Such- sowie des Integrationsalgorithmus, in der Form der verwendeten Teilchen und in der Formulierung der Kontaktgesetze.

# Anwendung auf das Schottergleis

Sämtliche weiter unten präsentierten Ergebnisse wurden mit dem in Abb. 4 dargestellten zweidimensionalen Modell einer einzelnen eingeschotterten Schwelle berechnet. Das System wird seitlich durch unbewegliche, aber elastische Berandungswände begrenzt. Zwischen der unteren Berandungswand – der Grundplatte – und den Schottersteinpartikeln befinden sich sogenannte Untergrundsteine. Mit ihnen soll die Energiedissipation in den Baugrund an die Realität angepasst werden. Die Schottersteine selbst erscheinen als in Ellipsen eingeschriebene Polygone. Die Größe der Ellipsen, das Verhältnis ihrer Halbachsen sowie die Eckenanzahl der Polygone streuen.

Der Aufbau der in Abb. 4 dargestellten Struktur geschieht in mehreren Schritten, die in Abb. 5 veranschaulicht werden.

In den im folgenden wiedergegebenen Studien sind der Drehfreiheitsgrad und die Lateralverschiebung der Schwelle blockiert. Als Integrationsalgorithmus findet das Prädiktor-Korrektor-Verfahren fünfter Ordnung nach Gear Einsatz [10]. Das Herzstück ist die Formulierung der Kontaktkraftgesetze. Sie ergeben sich aus einer Auswertung der Geometrie der Überlappfläche A zweier Schottersteine. Die Situation ist in Abb. 6 skizziert.

Die Kontaktkraft  $\vec{F}$ ergibt sich als Summe einer Kraft  $\vec{F}_N$  in Richtung des Normalenvektors  $\vec{e}_N$  und einer Tangentialkraft  $\vec{F}_T$  in Richtung von  $\vec{e}_T$ . Für  $\vec{F}_N$  gilt:

$$[\vec{F_N}] = F_{N,C} + F_{N,D} \tag{1}$$

(2)

mit dem elastischen Anteil

 $F_{N,C} = E/I \cdot A$ und dem dissipativen Anteil

$$F_{N,D} = \begin{cases} \gamma \cdot \sqrt{E \cdot m_{red}} / | \cdot dA/dt & \text{für dA/dt} > 0 \\ \max(\gamma \cdot \sqrt{E \cdot m_{red}} / | \cdot dA/dt_{-} - F_{N,C}) & \text{für dA/dt} < 0 \end{cases}$$
(3)

Hierbei steht *E* für den Elastizitätsmodul des Schottermaterials, *t* symbolisiert die Zeit und  $\gamma$  ist eine dimensionslose Konstante, mit der der Energieverlust bei zentralem Stoß reguliert werden kann. Die charakteristische Länge *l* berechnet sich zu  $l = 4 \cdot l_i \cdot l_j \cdot (l_i + l_i)^{-1}$ . (4)









Abb. 5: Ablauf der Simulationen

- (a) Positionieren der Untergrund- und Schottersteine. Zwischen den Schottersteinen bestehen noch keine Kontakte.
- (b) Herabfallenlassen der Steine aufgrund des Schwerkrafteinflusses. Es bildet sich ein Kontaktnetzwerk aus.
- (c) Einebnen der Schotteroberfläche durch Entfernen einzelner Steine an der Oberfläche.
- (d) Hinzufügen der Schwelle samt weiterer seitlicher Schottersteine, Vorgehen analog Schritt (a) und Schritt (b).
- (e) Nachbildung von Stopfvorgängen (optional, bei den Ergebnissen in diesem Artikel weggelassen).
- (f) Nachbildung von Radsatzüberrollungen. Dieses geschieht durch Aufbringen einer Vertikalkraft in Schwellenmitte.

Mit der in Gleichung (3) angegebenen Schranke für  $F_{N,D}$  wird sichergestellt, dass es beim Lösen des Kontaktes zweier Schottersteine niemals zu anziehenden Kräften und hieraus resultierenden Oszillationen kommt. Die Tangentialkraft  $\vec{F_T}$  wirkt der Tangentialgeschwindigkeit  $v_T$  der Kontaktpartner entgegen. Ihr Betrag ergibt sich aus der Beziehung

$$\begin{aligned} |\overline{F_T}| &= F_T = \min(\mu \cdot F_N(t), \\ F_T(t - \Delta t) + 2/7 \cdot Ev_T \Delta t + 0.05 \sqrt{m_{eff} \cdot 2/7E} \cdot v_T). \end{aligned} \tag{5}$$

Da  $F_T$  je nach Richtung von  $v_T$  inkrementell erhöht bzw. erniedrigt wird, kann ein Haftvorgang problemlos wiedergegeben werden. Der erste Anteil des Inkrementes resultiert aus einer im Kontaktpunkt befindlichen Tangentialfeder, der zweite Anteil gewährleistet eine geschwindigkeitsabhängige Dämpfung von Tangentialschwingungen. Beim Gleiten gilt nach Gleichung (5) das Coulombsche Gesetz  $F_T = \mu \cdot F_N$ .

Für die geometrischen Abmessungen, die Gesteinsdichte p sowie den Elastizitätsmodul E werden in den Rechnungen - wenn nicht anders angegeben - die realen Werte verwendet. Des Weiteren wird eine fiktive Tiefe von 1m angenommen, wodurch die Zahlenwerte für p und E erhalten bleiben. Lediglich ihre Einheiten verändern sich um den Faktor 1m. Die Zeit t in der Simulation entspricht ebenfalls der realen Zeit, der Reibwert  $\mu$  wird auf den relativ hohen Wert  $\mu = 0.6$  gesetzt, wodurch die Scharfkantigkeit des Materials grob Berücksichtigung findet. Für eine genauere Festlegung von  $\mu$  ist eine Parameteradaption durch Vergleich des Modellverhaltens mit dem Verhalten des realen Systems erforderlich. Das gleiche gilt für den Wert von  $\gamma$ , der zu  $\gamma$  = 0.5 gesetzt wird. In der Tabelle 1 sind die wichtigsten Stoffparameter noch einmal zusammengestellt.

Als weitere Eingangsgröße ist der zeitliche Verlauf der auf die Schwelle wirkenden Vertikalkraft  $F_R$  zu spezifizieren. Er wird mittels der am Institut für Mechanik der Universität Hannover entwickelten Software TTI bestimmt [11]. Einen typischen Verlauf zeigt die Abb. 7, wobei ein konstanter zeitlicher Abstand zwischen den einzelnen Radsatzüberrollungen angenommen wird. Der Betrag der Zwischenlagenkraft muss anschließend noch auf eine auf  $I_s = 1$ m verkürzte Schwellenlänge umgerechnet werden.

Für die benötigte Rechenzeit ist der Zeitschritt  $\Delta t$  ausschlaggebend. Er kann grob mit Hilfe der Formel

 $\Delta t < 0.3 \cdot \sqrt{m_{min}/E}$  (6) nach oben abgeschätzt werden, wobei  $m_{min}$  für die Masse des kleinsten Partikels steht. Da der E-Modul des Schottergesteins sehr hoch liegt, ergibt sich  $\Delta t < 2 \mu s$ . Aufgrund der hieraus resultierenden langandauernden Simulationsläufe empfiehlt es sich, bei jeder Rechnung eine ganze Reihe von Daten abzuspeichern. Hierzu zählen u.a.

• die Schwellenkraft *F<sub>R</sub>* und die Schwellenauslenkung in Vertikalrichtung,



Abb. 6: Geometriegrößen bei der Kontaktkraftberechnung

Teilchengröße (Radien) I <sub>i</sub> ,I <sub>j</sub> [m]	1.0.10 <sup>-2</sup> 3.2· 10 <sup>-2</sup>
Eckenanzahl [-]	5 8
Gesteinsdichte $\rho$ [kg/m <sup>2</sup> ]	5000.0
Elastizitätsmodul E [N/m]	6.0 · 10 <sup>10</sup>
Gleit-/Haftreibwert $\mu$ [-]	0.6
Dämpfungszahl γ [-]	0.5

**Tabelle 1: Systemparameter** 



Abb. 7: Auf die Schwelle wirkende Kraft in einer der beiden Zwischenlagen





Abb. 9: Abhängigkeit des Systemverhaltens von der Steifigkeit der Berandungswände



Abb. 10: Kontaktkräfte zwischen den Schottersteinen

- der Schwelle während der ersten Radsatzüberrollungen
- die mittlere Partikelgeschwindigkeit sowie die Gesamtlageveränderung der Schottersteine,
- der Gesamtverschleiß aller Schottersteine,
- die in den Schottersteinen enthaltene kinetische und potentielle Energie, letztere aufgespalten in Lageenergie und Deformationsenergie in den Kontakten,
- die über die Schwelle dem System zugeführte Energie und
- Maximal- und Mittelwert f
  ür die zwischen den Schottersteinen auftretenden Kontaktkr
  äfte.

# Ergebnisse

Die im folgenden gezeigten Ergebnisse sollen Aufschluss darüber geben, ob sich die MD-Simulation für die Analyse des Schotterverhaltens und eine sich anschließende Systemoptimierung eignet. Um zu prüfen, ob eine ausreichend genaue Nachbildung des realen Schotterschichtverhaltens erreicht werden kann, sind eine Vielzahl von Parameterstudien erforderlich. In einem ersten Schritt beschränken sich die Untersuchungen auf qualitative Merkmale. Aufgrund der Zweidimensionalität des Modells ist eine quantitative Übereinstimmung voraussichtlich nur unter Verwendung von Umrechnungsfaktoren möglich, deren Bestimmung sehr aufwendig sein kann.

## Einfluss der Anfangsbedingungen

Selbst bei exakt gleichen Eingangsparametern ergibt sich für jede einzelne Simulation ein anderes System mit unterschiedlichen Eigenschaften. Dieses liegt im speziellen Vorgehen beim Aufbau der Schotterschicht begründet, siehe Abb. 5. Die Form der Schottersteine wird hierbei durch einen Zufallszahlengenerator festgesetzt, weshalb sich stets andere Packungsdichten und Hohlraumverteilungen ausbilden.

Im ersten Rechenlauf lassen wir auf zehn solche Systeme, die nicht durch eine Stopfsimulation vorverdichtet wurden, die in Abb. 7 beschriebenen Belastungszyklen einwirken. Die Zuggeschwindigkeit beträgt 100 km/h. Die resultierenden Vertikalverschiebungen der Schwelle sind in Abb. 8 wiedergegeben. Zu Beginn sind die bleibenden Setzungen sehr hoch. Sie klingen jedoch erwartungsgemäß rasch ab. Auffallend sind die großen Streuungen: Nach ca. 20 Überrollungen hat sich bei der einen Simulation eine Absackung der Schwelle um 20 mm eingestellt, bei einer zweiten Simulation ist der Wert bereits doppelt so hoch. Hieraus folgt,

 dass das Modell ein Verhalten wiederspiegelt, welches auch am realen System beobachtet wird und dem wahrscheinlich eine wichtige Bedeutung bei der ungleichmäßigen Setzung zukommt und

 dass eine Einzelsimulation für die Charakterisierung des Systems bei gegebenen Eingangsparametern wenig aussagekräftig ist.
 Deshalb werden im weiteren Verlauf über mehrere Simulationen gemittelte Ergebnisse gezeigt.

Einfluss der Randbedingungen

Die Randbedingungen des Systems können durch Wahl der Elastizität der Berandungswände und durch Vorgabe der Verspannung der Untergrundsteine variiert werden. Die Abb. 9 zeigt, dass das Systemverhalten bei ausreichend hoher Wandsteifigkeit und geringer Verspannung der Untergrundsteine kaum vom Elastizitätsmodul der Wände abhängt. Die Bedingungen sind sodann vergleichbar mit denen bei einem Schotterkastenversuch, bei dem sich das Schottergestein in einer als nahezu starr anzusehenden Stahlkiste befindet. Für Abb. 9 wurden drei verschiedene Wandelastizitäten gewählt, die sich jeweils um den Faktor 20 unterscheiden. Die über mehrere Simulationen gemittelten Kurven für die vertikale Schwellenauslenkung weichen nur geringfügig voneinander ab.

# Kontaktkraftnetzwerk

Die Abb. 10 veranschaulicht die Lastabtragung in der Schotterschicht. Die Dicke der Verbindungslinien der Schwerpunkte zweier Schottersteine ist hierbei proportional zu der zwischen ihnen auftretenden Kraft. Es fällt auf, dass bei der nach 20 Überrollungen noch relativ lockeren Steinanordnung viele Steine während einer Radsatzüberfahrt fast unbelastet bleiben. Folglich bilden sich spezielle Kraftpfade aus. Die in Abb. 10 gewählte Darstellungsform ist für das Verstehen des Systemverhaltens sehr hilfreich, weil Phänomene wie ein Oszillieren einzelner Schottersteine oder eine größere Umlagerung aufgrund des Aufbrechens einer Kraftkette erkannt werden können.

## Quasistatisches Verhalten

Simulationen von mehreren hundert Überrollungen haben gezeigt, dass die Setzungen rasch abklingen. Dennoch kommt es bei einigen Rechenläufen selbst hier zu einem sehr langsamen Versacken der Schwelle im Schotter. Je langsamer die Be- und Entlastungsgeschwindigkeit ist, desto häufiger tritt dieser Effekt auf. In Abb. 11 ist die Situation für drei dreieckförmige Lastwechsel von jeweils zwei Sekunden Dauer, dem etwa zehnfachen Wert aus Abb. 7, dargestellt. Am Ende der Simulation hat sich die Schotterschichtdicke unterhalb der Schwelle bereits um nahezu 25 Prozent reduziert.



Abb. 11: Langsame Be- und Entlastung: Kraft in der Zwischenlage sowie Setzungsverhalten der Schwelle

Das reale System zeigt ein entsprechendes Verhalten nicht. Deshalb wurden eine Reihe von Veränderungen am Modell vorgenommen, wie z.B. eine Erhöhung der Eckigkeit der Partikel durch Verringerung der durchschnittlichen Eckenanzahl, eine Verkleinerung der Steine oder ein Nachbilden der Rauhigkeit der Schottersteinoberfläche mittels einer Reibwerterhöhung. Bisher konnte hierdurch die unbefriedigende Situation jedoch nicht behoben werden. Studien mit einer vorverdichteten Schotterschicht und stärker abgeplatteten Partikeln stehen noch aus. Es hat sich des Weiteren gezeigt, dass das Setzungsverhalten sensibel auf eine Veränderung der in Abschnitt 3 beschriebenen Kontaktkraftgesetze reagiert. Evtl. gelingt es, die Stabilität der Steinanordnung durch eine Vergrößerung der Dämpfung zu erhöhen. Destabilisierend wirkt mit Sicherheit die Beschränkung auf konvexe Polygone bei der Steinform. Solche Polygone lassen keine Ausbildung von Mehrpunktkontakten zwischen zwei Partikeln zu. Mehrpunktkontakte würden zu Kraftketten führen, die nicht so leicht durch ein gegenseitiges Abrollen der Teilchen zerstört werden können.

#### Behandelbare Fragestellungen

Falls es durch eine Veränderung des Modells gelingt, die Realität sowohl für schnelle als auch für langsame Belastungen gut nachzubilden, ermöglicht die MD-Simulation eine große Vielzahl interessanter Studien. Hinsichtlich des Setzungsverhaltens der Schwelle kann neben einer Berücksichtigung der Kornumlagerung und des Abriebs auch das Zerbrechen einzelner Steine erfasst werden. Unter anderem wären die folgenden Einflussgrößen zu untersuchen: Achslast, Zuggeschwindigkeit, Schwellenauf-Reibwert lagefläche, (Feuchtigkeit, Verschmutzung), Untergrundsteifigkeit, Steinform Schotterschichtdicke. und Außerdem könnte die MD-Simulation bei einer Vielzahl weiterer Studien Finsatz finden, die sich z.B. mit den Auswirkungen von Schwellenhohllagen, dem Nutzen von Schwellenbesohlungen oder Unterschottermatten oder einer Optimierung von Stopfverfahren beschäftigen.

# Zusammenfassung

An interessanten Anwendungsmöglichkeiten für die MD-Simulation auf dem Gebiet der Schottergleisoptimierung mangelt es nicht. Es muss jedoch vorher sorgfältig geprüft werden, ob das dynamische Verhalten des Modells die Realität ausreichend genau wiedergibt. Hierbei ist zu beachten, dass Modellierungsfehler, obwohl sie sich in der Kurzzeitdynamik nur schwach niederschlagen, starke Veränderungen im Langzeitverhalten zur Folge haben können. Erste Rechenläufe haben gezeigt, dass die Simulationsergebnisse stark streuen und somit statistisch aufbereitet werden müssen. Bei den gewählten räumlichen Abmessungen und Materialparametern des Modells sind sie allerdings nahezu unabhängig von den Randbedingungen. Die Wände können als annährend starr angesehen werden. Des Weiteren wurde deutlich, dass die auf die Schwelle einwirkende Vertikalkraft über einige wenige Schottersteinketten abgetragen wird. Viele Steine bleiben somit nahezu unbelastet. Schwierigkeiten treten bislang bei quasistatischer Belastung der Schotterschicht auf. Ob die in den Simulationen beobachtete Instabilität der sich ausbildenden Kraftketten eine Folge der Konvexität der Schottersteinpolygone ist, muss noch geklärt werden.

#### Literatur

- [1] Leykauf, G.: "Schotteroberbau und Feste Fahrbahn im Vergleich", ETR 48 (1999), S. 265-273
- [2] Leykauf, G.; Mattner, L.: "Moderne Fahrweg-Systeme", ETR 47 (1998), S. 133-138
- [3] Kruse, H.; Popp, K.: "Zur Modellierung der Gleisdynamik", El 50 (1999), S. 39-43
- [4] Leykauf, G.; Mattner, L.; Steinbeißer, L.: "Schwingungsmessungen mittels Schotter-Meßsteinen", ETR 47 (1998), S. 37-41
- [5] Dahlberg, T.: "Some railroad settlement laws a critical review", Submitted for international publication, 2000
- [6] Gudehus, G.: "A comprehensive constitutive equation for granular material", Soils and Foundation 36 (1996), pp. 1-12
- [7] Estrade i Panades, J.-M.: "Contribucion al conocimiento del macanismo de deterioro de la geometria de la via por el analisis del comportamiento en rotura de los materiales que forman la capa de balasto", Dissertation, Barcelona, 1989
- [8] Cundall, P. A.; Strack, O. D. L.: "A discrete numerical model for granular assemblies", Geotechnique 29 (1979), pp. 47-65
- [9] Internet: http://itp.nat.uni-magdeburg.de/~schinner/granular/movies.shtml
- [10] Press, W. H.; Flannery, B. P.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T.: "Numerical Recipes in C", Cambridge University Press, 1989
- [11] Kruse, H.; Popp, K.: "Fahrwegmodelle als periodische Strukturen mit gestörten Parametern", Zweiter Zwischenbericht zum DFG-Forschungsvorhaben Po 136/20, Institut für Mechanik, Universität Hannover, 1999

### Summary / Resumé

#### Treating ballast as a multiple body system with changing conditions

Molecular dynamic simulation enables each individual pebble in ballast track to be modelled. The article investigates how far contact forces, materials parameters and geometric variables can be specified so that the resulting model reproduces the major behavioural characteristics of the real system. The article also looks at potential applications of molecular dynamic simulation.

#### Traitement du ballast en tant que système à corps multiples à liaisons variables

La simulation dynamique moléculaire permet, dans le cas de la voie ballastée, de simuler chaque pierre du ballast. L'on a examiné dans quelle mesure les lois des forces de contact, les paramètres des matières et les grandeurs géométriques pouvaient être déterminés de telle façon que le modèle de calcul résultant reflète les comportements essentiels du système réel. En outre, l'article mentionne les domaines d'utilisation possibles de la simulation dynamique moléculaire.