

# Zur Modellierung von Schüttgut als Kontinuum und als Diskontinuum

M. Lätzel, H. Besserer, S. Luding

Institut für Computeranwendungen 1  
Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 27, 70569 Stuttgart

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Diskretes mikroskopisches Modell</b>	<b>1</b>
2.1	Anwendungsbeispiele . . . . .	2
2.2	Wechselwirkungskräfte . . . . .	4
2.3	Numerik . . . . .	7
2.4	Eichung . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Makroskopische Kontinuumsgrößen</b>	<b>8</b>
3.1	Mittelungsformalismus . . . . .	8
3.2	Scherzone und Geschwindigkeitsgradient . . . . .	9
3.3	Strukturtensor . . . . .	12
3.4	Spannungstensor . . . . .	13
3.5	Mittleres elastisches Verschiebungsfeld . . . . .	15
3.6	Steifigkeit und Schermodul . . . . .	17
3.7	Rotation und Mikropolare Tensoren . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>21</b>



# Zur Modellierung von Schüttgut als Kontinuum und als Diskontinuum

## 1 Einleitung

Schüttgüter oder granulare Medien, wie Sand, Pulver oder Puder, sind genauer betrachtet, d. h. „mikroskopisch“ gesehen, Vielteilchensysteme, die auf der makroskopischen Beobachtungsebene als materielles Kontinuum mit charakteristischen Materialeigenschaften erscheinen. Die Mikroeigenschaften der Teilchen in Form und Material sowie die Art der zwischen den Körnern wirkenden Kräfte äußern sich in der Praxis im makroskopischen Verhalten des Materials. Die theoretische Ableitung makroskopischer Kontinuumsgrößen und die Vorhersagbarkeit von Materialeigenschaften aus den bestimmten Größen und Eigenschaften des diskreten Mikrosystems sind Gegenstand vielfältiger Forschung [1].

Der hier vorgestellte *Mikro-Makro*-Übergang behandelt das diskrete Schüttgut durch Simulation des mikroskopischen Vielteilchensystems nach Methoden der Molekulardynamik <sup>1</sup> [2–5]. Über spezielle Mittelungsverfahren lassen sich aus diesen Mikrodaten definierende Feldgrößen der Kontinuumsbeschreibung, wie z. B. Spannungstensor und Geschwindigkeitsgradient, berechnen und verwerthen.

Ziel dieses Artikels ist eine kurze Einführung in die mikroskopische Modellierung und die Vorstellung geeigneter Mittelungsverfahren. Dabei werden einige ausgewählte Resultate diskutiert.

## 2 Diskretes mikroskopisches Modell

Wegen der enorm großen Teilchenzahl in realen Systemen (Silo, Schüttung) erscheint es sinnvoll, sich auf die Modellierung von Teil- oder Modellsystemen (Biaxial- oder Ringschergerät) zu beschränken. Bei einer diskreten Modellierung von Einzelteilchen ist die Kenntnis mikroskopischer Wechselwirkungsgesetze erforderlich, die z. B. Reibungskräfte definieren. Die Teilchen werden als starre Körper behandelt, und im ersten Schritt verwendet man nur einfachste Modelle. Beschränkt man sich, als weitere Vereinfachung, nur auf die Untersuchung zweidimensionaler Systeme, so bestehen die Teilchen zumeist

---

<sup>1</sup>Molekulardynamik wird auch als Diskrete-Elemente-Methode bezeichnet.

aus kreisrunden Scheiben.

Die Simulation des Vielteilchensystems erfolgt auf der Grundlage der Molekulardynamik (MD) bzw. Diskrete-Elemente-Methode (DEM). Dies ist ein Verfahren zur numerischen Integration der Bewegungsgleichungen für Vielteilchensysteme. Die MD-Methode wurde ursprünglich zur Modellierung von Flüssigkeiten mit langreichweitigen Wechselwirkungspotentialen benutzt [3]. Für die Beschreibung granularer Medien wird die Methode insofern verändert, als daß nur der kurzreichweitige, abstoßende Anteil des Potentials eingeht und Dissipation sowie Reibung im Modell berücksichtigt werden [5–8].

Zur Simulation der Diskontinua und zur Untersuchung des Mikro-Makro-Übergangs sind bestehende Molekulardynamik-Programme [9–11] weiterentwickelt, an die Randbedingungen für *Biaxialtest* und *Scherzelle* angepaßt und sowohl methodisch als auch algorithmisch verfeinert worden. Im folgenden Abschnitt wollen wir einige Randbedingungen kurz diskutieren.

## 2.1 Anwendungsbeispiele

Als ein fortgeschrittenes Beispiel für die DEM-Simulation und deren Möglichkeiten wird exemplarisch der Fall eines kohäsiven Reibungsmaterials angeschnitten – danach ziehen wir uns wieder auf den einfacheren Fall nichtkohäsiver Materialien zurück. Für die Simulation kohäsiver Reibungsmaterialien kann die Methode des Feder-Balken-Modells zur Behandlung von Beton benutzt werden [8, 12], siehe Bild 1. An diesem Beispiel sind die interessantesten Eigenschaften von Schüttgut illustriert. Durch vertikale Kompression bildet sich unter einem bestimmten Winkel eine Scherzone, in der die kohäsiven Kontakte durch Zug zerstört werden. Gleichzeitig mit der lokalisierten Abnahme der Festigkeit stellt man eine starke Drehbewegung der Teilchen in diesem Bereich fest – ein Phänomen, das noch immer nicht genau verstanden ist und ebensowenig theoretisch befriedigend beschrieben werden kann. Obwohl darauf im Rahmen dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden kann, sei angemerkt, daß neben der Verfeinerung der Kontaktmodelle noch die Implementierung einer Randbedingung für den Biaxialtest mit hydrostatisch belasteten, verformbaren Wänden als große Herausforderung verbleibt – erste Arbeiten für Kugelsysteme haben sich dabei als vielversprechend erwiesen [13]. Als Erweiterung zur Annahme starrer Körner, von der üblicherweise ausgegangen wird, kann auch ein Modell verwendet werden, bei dem große Spannungen zu einem Bruch einzelner Körner führen [14].

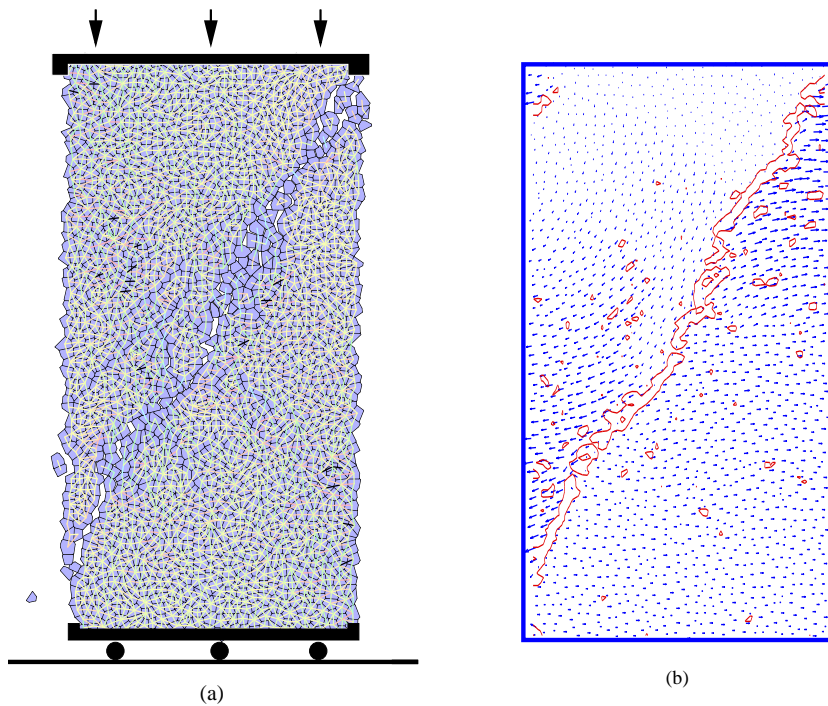


Bild 1: Simulation der Kompression eines kohäsiven Granulates bestehend aus eckigen Teilchen. Helle Striche bezeichnen aktive kohäsive Kontakte, dunkle Striche bedeuten starke Zugspannungen. (a) Scherbandbildung, (b) Trajektorien der Teilchen (blau) mit der Zone starker Rotationen im Scherbandbereich (rot).

Im weiteren beschränkt sich die Diskussion auf nicht-kohäsive Reibungsmaterialien, bestehend aus Scheiben, welche entweder in einer Couette-Scherzelle (siehe Bild 2) oder in einem Biaxialtest (siehe Bild 3) untersucht wurden. Diese beiden Randbedingungen sind zweidimensionale Modelle der Standardexperimente Ringschergerät (zylindrische, axial drehende Wände) und Biaxialbox (glatte, flache Wände die stets ein Rechteck bilden). In Bild 2 ist die Scherzelle schematisch dargestellt. Die Scheiben im Zwischenraum zwischen den beiden Zylindern werden mit leicht unterschiedlicher Größe gewählt, um Kristallisationseffekte zu vermeiden. Die Biaxialbox in Bild 3 ist ebenfalls mit Teilchen unterschiedlicher Größe gefüllt, wobei hier ein wesentlich stärkerer

Größenunterschied gewählt wurde.

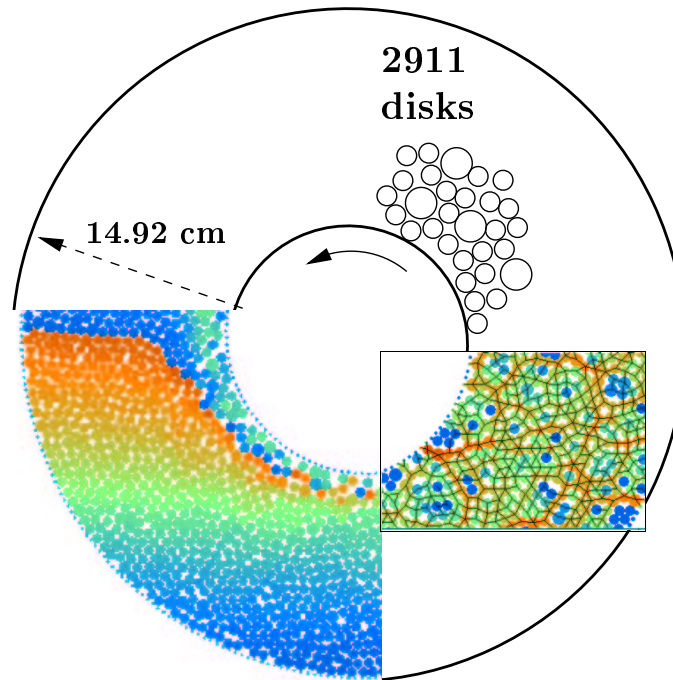


Bild 2: Darstellung der simulierten Couette-Scherzelle. Die Detailbilder zeigen die Entstehung des Scherbandes am inneren Rand (links-unten: die Farben kodieren die vertikale Anfangsposition der Teilchen) sowie die Formierung des Kontaktgerüsts (rechts-unten: schwarze Linien verbinden die Zentren von Kontaktpartnern) und von Spannkettens (rechts-unten: die Farben kodieren die Kontaktenergie, wobei rot, grün und blau jeweils großen, mittleren und kleinen Werten entsprechen).

## 2.2 Wechselwirkungskräfte

Zur Modellierung sind zuerst die Wechselwirkungskräfte zu spezifizieren. In der hier verwendeten Simulationemethode werden die Wechselwirkungen als Kontaktkräfte von Teilchenpaaren beschrieben. Die Teilchenzentren befinden sich an den Orten  $\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) und die Größe der Teilchen wird durch den Radius  $a_i$  bestimmt. Zwei Teilchen  $i$  und  $j$  sind in Kontakt, sobald sich ihre Umrisse überlappen und üben dann gegenseitig eine Kraft aufeinander

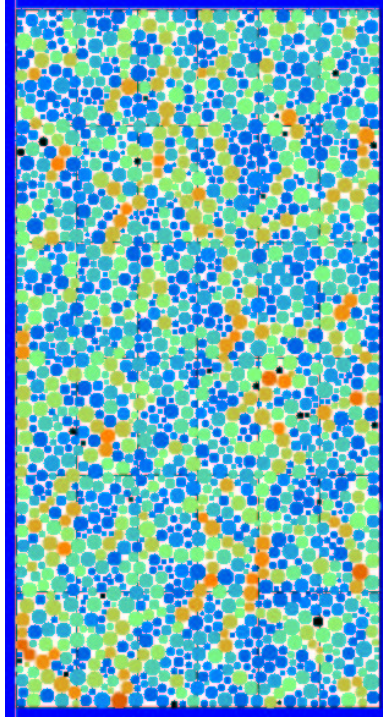


Bild 3: Statische Konfiguration einer bidispersen Probe, mit Radienverhältnis 1 : 3. Die Farben rot, grün und blau entsprechen jeweils großen, mittleren und kleinen Werten der Kontaktenergie. Starke Spannungen sind entlang von Kraftketten organisiert – einige wenige Teilchen (schwarz) sind in stabilen Hohlräumen isoliert.

aus („actio = reactio“). Man zerlegt die Kraft zwischen den Teilchen eines Paares in eine normale Komponente  $\mathbf{f}_n$ , die der Abstoßung und Energie-Dispersion Rechnung trägt, und eine tangential Komponente  $\mathbf{f}_t$ , welche für die Reibung verantwortlich ist.

Sieht man von starken „plastischen“ Verformungen wie Brüchen der Teilchen ab, so läßt sich die Normalkraft in einen elastischen und einen dissipativen Anteil zerlegen. Für die Simulation von Scheiben wird dabei im einfachsten Fall ein lineares Gesetz der Form  $\mathbf{f}_{n,el} = k_n \delta \mathbf{n}$  verwendet, wobei  $\mathbf{n}$  der Einheitsvektor vom Zentrum eines Teilchens zum Zentrum eines Kontaktpartners ist. Die Kraft ist also proportional zum virtuellen Überlapp  $\delta = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - (a_i + a_j)$  der Teilchen. Für Kugeln wäre hier ein Kraftge-

setz nach Hertz die bessere Wahl [15, 16]. Der zweite Anteil der Normalkraft trägt der Dissipation von Energie während des Stoßes Rechnung. Diese wird mittels einer viskosen, dissipativen Kraft  $\mathbf{f}_{n,\text{diss}} = \gamma_n \dot{\delta} \mathbf{n}$  beschrieben und ist proportional zur Normalkomponente  $\dot{\delta} = -\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}$  der Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$  zweier kontaktierender Teilchen [17–20].

Im einfachsten Fall lassen sich die Tangentialkräfte  $\mathbf{f}_t$  definieren als Coulombsche Reibungskräfte  $\mathbf{f}_{t,C}$ , deren Verbindung zu den Normalkräften  $\mathbf{f}_n$  durch die Beziehung  $\mathbf{f}_{t,C} \leq -\mu |\mathbf{f}_n| \mathbf{t}$  hergestellt wird. Dabei ist  $\mu = \tan \theta$  der Reibungskoeffizient und  $\theta$  der Reibungswinkel. Der Tangenteneinheitsvektor  $\mathbf{t} = \mathbf{v}_t / |\mathbf{v}_t|$  ist parallel zur Tangentialkomponente  $\mathbf{v}_t = \mathbf{v}_{ij} - (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}$ , wobei der Einheitsvektor  $\mathbf{n}$  in die Normalenrichtung der gemeinsamen Tangentialebene am Berührungspunkt weist. Da dieser „nicht-glatte“ Ansatz numerische Probleme für kleine  $\mathbf{v}_t$  mit sich bringt, führen wir zusätzlich eine regularisierende viskose Kraft  $\mathbf{f}_{t,\text{visc}} = -\gamma_t \mathbf{v}_t$  ein. Als wirkende Kraft wird schließlich das Minimum dieser beiden Kräfte verwendet,

$$\mathbf{f}_t = -\min(|\gamma_t \mathbf{v}_t|, \mu |\mathbf{f}_n|) \mathbf{t} . \quad (1)$$

Ein wichtiges Element realistischer Simulationen ist die statische Reibung zwischen den Teilchen, die in Glg. (1) nicht enthalten ist. Daher kann eine quasi-statische Reibungskraft implementiert werden, welche als Cundall-Strack-Feder [21] bekannt ist. Hierbei verwendet man als Tangentialkraft  $\mathbf{f}_t = -\min(k_t \xi_t, \mu |\mathbf{f}_n|) \mathbf{t}$  mit  $\xi_t = \left( \int_{t_0}^t \mathbf{v}_t(t') \cdot \mathbf{t}(t) dt' \right)$ , wobei  $\xi_t$  die Länge der imaginären Tangentialfeder ist. Die Steifigkeit der Feder ist  $k_t$  und  $t_0$  ist der Zeitpunkt des Kontaktbeginns. Das Kraftgesetz erwies sich als zuverlässig, stabil und realistisch insofern, als daß statische Packungen erzeugt werden konnten [6]. Zusammenfassend läßt sich die Kraft auf ein Teilchen  $i$  damit als

$$\mathbf{f}_i = \sum_c (\mathbf{f}_{n,\text{el}} + \mathbf{f}_{n,\text{diss}} + \mathbf{f}_t) + \mathbf{f}_b \quad (2)$$

beschreiben, wobei sich die Summe über die Kräfte an allen Kontaktpunkten  $c$  erstreckt und weiterhin eine Volumenkraft  $\mathbf{f}_b$  wie die Gravitation berücksichtigt werden kann. Berechnet man neben den Kräften und daraus entstehenden Beschleunigungen noch die Drehmomente und entsprechende Rotationen, so ist die Dynamik des Systems vollständig beschrieben und die Bewegungsgleichungen können numerisch integriert werden [5].



## 2.3 Numerik

Für die numerische Integration der Bewegungsgleichungen kommen verschiedene Algorithmen in Frage, welche in Lehrbüchern diskutiert werden [3, 22]. Zur stabilen Integration sollte der Integrationszeitschritt deutlich kleiner sein als die typische Einschwingdauer eines Kontaktes [17, 18, 23]. Mit einem Verhältnis von 1 : 50 erzielt man in der Regel befriedigende Resultate.

Der Hauptanteil der Rechenzeit wird für die Kraftberechnung verbraucht. Zwei der eingesetzten Verfahren zur Beschleunigung der Nachbarschaftssuche sind Verlet-Tafeln und „Linked-Cell“-Strukturen [3]. Bei nicht allzugroßen Teilchenzahlen ( $N < 1000$ ) sind Verlet-Tafeln eine einfache Alternative zur komplexeren „Linked-Cell“-Struktur. Man speichert die Nachbarn jedes Teilchens innerhalb einer Kugel, d.h. die möglichen Kollisionspartner, und kontrolliert die Maximalgeschwindigkeit aller Teilchen. Hat das schnellste Teilchen eine bestimmte Entfernung zurückgelegt, kann es die Nachbarschaft verlassen haben und die Verlet-Tafeln müssen neu erstellt werden. Diese Erstellung ist bei großen Teilchenzahlen der rechenzeitaufwendigste Teil. In einer „Linked-Cell“-Struktur sind alle Teilchen in Zellen sortiert und bei der Nachbarschaftssuche muß man lediglich die benachbarten Zellen eines jeden Teilchens nach möglichen Kollisionspartnern durchsuchen. Dieses Verfahren ist in der Regel dem Verlet-Tafel-Algorithmus vorzuziehen, da beliebig große Teilchenzahlen effektiv simuliert werden können.

## 2.4 Eichung

Die Methode der diskreten Simulation wurde am Beispiel eines Ringschergeräts mit Experimenten [24–27] verglichen. Dabei konnte eine Eichung insofern erfolgen, als daß eine gute Reproduktion der Experimente erzielt wurde [25]. Bei Scherung der inneren, zylinderförmigen Wand bildet sich eine Scherzone, wobei die Scherrate im Bereich weniger Teilchenradien exponentiell abfällt. Sowohl in Simulationen als auch im Experiment findet man immer Züge des Kontaktgerüsts entlang derer starke Kräfte vorherrschen, die sog. „Kraftketten“, siehe Bild 3. Im übrigen Bereich stellt man wesentlich schwächere, isotrop verteilte Kräfte fest [28–30]. Erhöht man die Dichte des Systems indem man beispielsweise bei festem Volumen neue Teilchen zugibt, so findet sich eine maximale Dichte oberhalb der das System unter Spannung „einfriert“ und die innere Wand nur rutscht – die Scherzone verschwindet. Bei Dichteverringern verlieren die Teilchen unterhalb eines anderen kri-

tischen Wertes den Kontakt mit der inneren Wand und das System bleibt stehen, diesmal aber spannungsfrei. Der Einfluß von Bodenreibung sowie von unterschiedlichen Tangentialsteifigkeiten wurde mit Hilfe von Parameterstudien genauer betrachtet. Eine Zusammenfassung dieser Untersuchungen im Hinblick auf den quantitativen Vergleich mit den Experimenten findet sich in [31].

### 3 Makroskopische Kontinuumsgrößen

Das übergeordnete Ziel von diskontinuierlichen, „mikro“- oder mesoskopischen Simulationsverfahren, wie sie in Kapitel 2 vorgestellt wurden, ist letztendlich das Verständnis des Materialverhaltens, auch auf makroskopischer Ebene. Der Übergang von diskreten Simulationen zu einer makroskopischen Kontinuumsbeschreibung und die damit verbundene Vorhersagbarkeit des für praktische Anwendungen interessierenden Materialverhaltens wird im folgenden skizziert. Derartige „Mikro-Makro“-Übergänge sind Gegenstand vielfältiger aktueller Forschung [32–42].

In die diskreten Modelle unserer Simulationen werden nur vektorielle Größen wie Ortsvektoren, Kräfte oder Drehmomente eingebracht. Damit ist eine deterministische, diskrete Beschreibung des Systems möglich. Die für den Vergleich mit den Kontinuumstheorien entscheidenden Größen wie Verzerrungs- und Spannungstensoren (und im allgemeineren Fall auch Krümmungs- und Momentenspannungstensoren) stehen dabei nicht als diskrete Variablen zur Verfügung. Ihre Berechnung ist Gegenstand der Homogenisierung oder Mittelwertbildung, welche die Nahtstelle zwischen Mikro- und Makrobeschreibung bildet.

#### 3.1 Mittelungsformalismus

Um von der diskreten Methode zu Kontinuumsgrößen zu gelangen, muß zunächst ein Mittelungsformalismus definiert werden, mit dem sich neben skalaren Größen (wie Dichte oder Koordinationszahl) auch vektorielle und tensorielle Felder (wie Geschwindigkeit, Spannung oder Geschwindigkeitsgradient) ortsabhängig ermitteln lassen. Ausgangspunkt ist die naheliegende

Definition des lokalen Volumenanteils

$$\nu = \frac{1}{V} \sum_{p \in V} w_V^p V^p, \quad (3)$$

den man aus der allgemeinen Beziehung

$$Q = \langle Q^p \rangle = \frac{1}{V} \sum_{p \in V} w_V^p V^p Q^p, \quad (4)$$

erhält, indem man  $Q^p = 1$  setzt.  $V^p$  ist dabei das Teilchenvolumen und  $w_V^p$  der Bruchteil des Teilchens  $p$ , der im Mittelungsvolumen  $V$  liegt.

Für die Wahl von  $w_V^p$  gibt es mehrere Möglichkeiten: Man kann eine teilchenzentrierte Mittelung durchführen, oder man kann die zu mittelnde Größe gleichmäßig über das Teilchen verschmieren und nur den im Mittelungsvolumen  $V$  liegenden Anteil des Teilchen berücksichtigen [43]. Die zweite Methode erwies sich als wesentlich robuster und führte zu realistischen Resultaten. Interessanterweise stimmen beide Mittelungsverfahren gerade dann besonders gut überein, wenn die Dicke  $\Delta r$  des Kreisrings in etwa so groß wie ein Teilchendurchmesser gewählt wird. Die Untersuchungen hierzu und Vergleiche mit allgemeineren Formulierungen [44, 45] müssen jedoch weitergeführt werden, um endgültig sicherzustellen, daß durch die Wahl der Mittelungsmethode keine Artefakte entstehen.

In Bild 4 ist die nach Gleichung (3) gewonnene Dichte für alle Teilchen ( $\nu_0$ ) bzw. für Teilchen mit  $m$  oder mehr Kontakten ( $\nu_m$ ) dargestellt. Man erkennt, daß relativ viele Teilchen nur jeweils wenig Kontakte haben, d. h. nicht zum stabilen Kontaktgerüst beitragen. Der Anteil dieser losen Teilchen ist in der Scherzone, in der sowieso niedrige Dichte (Dilatanz) herrscht, am höchsten. An den glatten Wänden stellt man außerdem Ordnungseffekte in Form von Schichtbildung fest.

Eine beliebige Größe  $Q^p$ , die für ein Teilchen  $p$  definiert ist, läßt sich mit Glg. (3) in das zugehörige Volumen-Mittel überführen. Dabei kann die Teilcheneigenschaft  $Q^p$  ein Tensor beliebiger Stufe sein – die gemittelte makroskopische Größe  $Q = \langle Q^p \rangle$  besitzt dann die entsprechende Tensorstufe. Die untersuchten makroskopischen Größen sind in Tabelle 1 zusammengefaßt. Für eine eingehendere Diskussion sei auf [43, 46, 47] verwiesen.

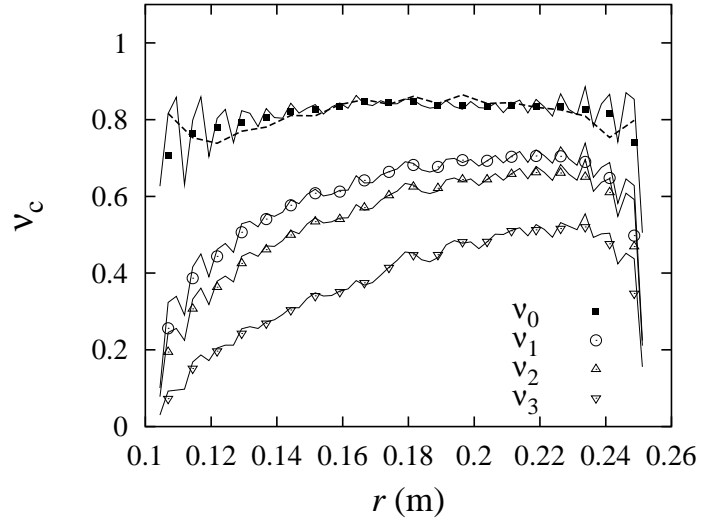


Bild 4: Dichteprofile als Funktion des Abstands vom inneren Ring. Die Bezeichnung  $\nu_m$  entspricht dem Volumenanteil aller Teilchen mit  $m$  oder mehr Kontakten. Die Symbole entsprechen einer niedrigen Auflösung, die Linien wurden mit hoher Auflösung berechnet. Die Schwankungen der Dichte bei hoher Auflösung spiegeln eine Schichtbildung des Materials an der glatten Wand wider.

### 3.2 Scherzone und Geschwindigkeitsgradient

Aus den Simulationsdaten erhält man durch Mittelung die Stromdichte

$$\nu \mathbf{v} = \frac{1}{V} \sum_{p \in V} w_V^p V^p \mathbf{v}^p . \quad (5)$$

In der Radialsymmetrie des Ringschergerätes (siehe Bild 2) untersucht man die Tangentialgeschwindigkeit  $v_\phi$  und die Radialgeschwindigkeit getrennt. (Im Quasi-Gleichgewicht ist die Radialgeschwindigkeit  $v_r$  der Teilchen vernachlässigbar klein.) In Bild 5 ist die tangentielle Stromdichte als Funktion des Abstands vom inneren Ring dargestellt. Die gestrichelte Linie gibt einen exponentiellen Fit an die Daten wieder. Aus ihm läßt sich eine Scherzonenbreite von  $s \approx 0.0127$  m ablesen. Auf der Länge etwa  $3s$ , also 5-6 Teilchendurchmessern, fällt die Geschwindigkeit um den Faktor  $1/10$  ab, in Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten zur Breite von Scherzonen.

Tabelle 1: Makroskopische Größen, die nach dem von Gleichung (4) ausgehenden Mittelungsverfahren berechnet wurden.

Größe	$Q^p$
Volumenanteil $\nu$	1
Stromdichte $\nu \mathbf{v}$	$\mathbf{v}^p$
Fabric-Tensor $\mathbf{F}$	$\sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{n}^c \otimes \mathbf{n}^c$
Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$	$\frac{1}{V^p} \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{f}^c \otimes \mathbf{l}^{pc}$
Verschiebungsgradient $\boldsymbol{\epsilon}$	$\frac{\pi h}{V^p} \sum_{c=1}^{c^p} \Delta^{pc} \otimes \mathbf{l}^{pc} \cdot \mathbf{F}^{-1}$

Aus dem gemittelten Geschwindigkeitsfeld  $\mathbf{v}$  erhält man durch räumliches Differenzieren den Geschwindigkeitsgradienten  $\text{grad } \mathbf{v}$ . Sein symmetrischer Anteil ist die Deformationsrate des makroskopischen Kontinuums, der antisymmetrische Anteil beschreibt die Kontinuumsdrehung [46, 47]. Diese und die Eigenrotation der Teilchen, siehe auch Abschnitt 3.7, sind die Größen, auf der ein mikropolares Cosserat-Kontinuumsmodell aufbauen kann [48].

Der Geschwindigkeitsgradient hat in Zylinderkoordinaten die zwei Einträge

$$[\nabla \mathbf{v}]_{r\phi} = \frac{\partial v_\phi}{\partial r} \quad \text{und} \quad [\nabla \mathbf{v}]_{\phi r} = -\frac{v_\phi}{r}, \quad (6)$$

von denen sich sowohl die Deformationsrate als symmetrischer Anteil

$$D_{r\phi} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial v_\phi}{\partial r} - \frac{v_\phi}{r} \right], \quad (7)$$

als auch die Rotationsrate als antisymmetrischer Anteil

$$W_{r\phi} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \right] \quad (8)$$

ableiten lassen.

Ausgehend vom Geschwindigkeitsfeld in Bild 5 lassen sich Deformations- und Rotationsrate von der an die Daten angepaßten Exponentialkurve ableiten:

$$D_{r\phi} = D_{\phi r} = -\frac{v_0}{2} \exp\left(-\frac{r - R_i}{s}\right) \left[ \frac{1}{s} + \frac{1}{r} \right]. \quad (9)$$

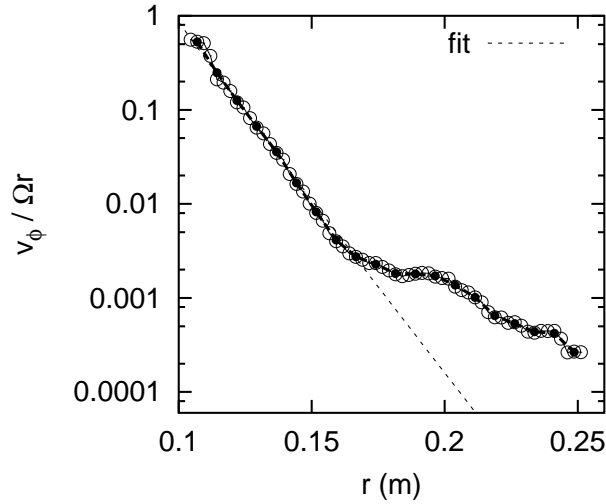


Bild 5: Skalierte Geschwindigkeit  $v_\phi/\Omega r$  bezogen auf Festkörperrotation, als Funktion des Abstands  $r$  vom inneren Ring. Die schwarzen und weißen Symbole wurden mit jeweils 20 und 60 Mittelungsintervallen gewonnen. Die gestrichelte Linie gibt die angepaßte Exponentialkurve  $v_\phi(r) = v_0 \exp(-(r - R_i)/s)$ , mit  $v_0/(\Omega R_i) = 0.645$  und  $s = 0.0127$  m, wieder.

Für die Rotationsrate ist lediglich das positive Vorzeichen vor dem zweiten Term der Summe in Glg. (9) durch ein negatives zu ersetzen.

### 3.3 Strukturtensor

Bei diskreten Systemen ist offensichtlich das Kontaktgerüst, entlang dessen die Kräfte propagieren, von herausragender Bedeutung. Eine Größe, die die Struktur des Kontaktgerüsts beschreibt, ist der sog. „Fabric“-Tensor, siehe Tabelle 1. Der Fabric-Tensor ist ein Tensor zweiter Stufe und gibt in erster harmonischer Näherung an, mit welcher Wahrscheinlichkeit man einen Kontakt in einer bestimmten Richtung finden kann. Diese richtungsabhängige Kontaktdichte ist in Bild 6 für die in Bild 3 gegebene Situation als Polarkurve dargestellt. Man stellt fest, daß die Kontakte in allen Richtungen mit ähnlicher Wahrscheinlichkeit vorkommen – dies rührt von den isotropen Randbedingungen her und ist z. B. bei Scherung nicht mehr der Fall, eine Randbedingung, bei der stark anisotrope Kontaktnetzwerke zu beobachten sind [43].

Eine interessante Fragestellung lautet: Wie hängt die Kontaktanzahldichte und die Steifigkeit des Systems von der Dichte ab und wie wirken sich unterschiedlich große Teilchen darauf aus? Der zweite Teil der Frage, wie sich das Verhalten des Materials bei unterschiedlichen Korngrößenverteilungen verändert, soll hier kurz erläutert werden. Nachdem Lätzel et al. [43] herausgefunden hatten, daß bei ähnlich großen Teilchen die Spur von  $\mathbf{F}$  linear mit der Dichte (und somit dem Volumenanteil  $\nu$ ) und der Koordinationszahl (Kontaktzahl)  $\mathcal{C}$  zusammenhängt, konnten Madadi et al. [49] einen analytischen Zusammenhang zwischen der Spur des Fabric-Tensors, der mittleren Anzahl der Kontakte pro Teilchen und der Größenverteilungsfunktion herstellen (vgl. Bild 6). Das Resultat ist

$$\text{tr}\mathbf{F} = g_2\nu\mathcal{C} , \quad (10)$$

wobei  $g_2$  nur von den ersten drei Momenten der Teilchengrößen-Verteilungsfunktion abhängt und  $g_2 = 1$  im Fall gleichgroßer Teilchen ist. Bei den in Bild 6 gezeigten Daten war der Korrekturfaktor stattdessen  $g_2 = 1.223$ . Die Dichteabhängigkeit von  $\mathcal{C}$  und der damit verbundene kritische Übergang von einem stabilen zu einem fragilen Korngerüst ist eine noch verbleibende Aufgabe [26, 27].

### 3.4 Spannungstensor

Der mikromechanische Spannungstensor ist ähnlich definiert wie z. B. in [50–54]. Dabei wird der statische Anteil des Spannungstensors durch Volumenintegration über Einzelteilchen und die nachfolgende Mittelung lediglich über die im Mittelungsvolumen liegenden Teilchen berechnet [43], da die Spannung innerhalb des leeren Porenraumes verschwindet. Die Spannungen innerhalb eines Teilchens  $\boldsymbol{\sigma}'$  werden somit als über das Teilchen „verschmiert“ betrachtet. Das ergibt für ein Teilchen den transponierten Spannungstensor

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}^p)^T &= \frac{1}{V^p} \int_{V^p} dV' \text{div} (\mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\sigma}') \\ &= \frac{1}{V^p} \int_{\partial V^p} dS (\mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\sigma}') \cdot \mathbf{n} , \end{aligned} \quad (11)$$

nach Anwendung des Gaußschen Satzes. In dieser Gleichung repräsentiert  $dS$  das Oberflächenelement von  $V^p$  auf dem Rand  $\partial V^p$  und  $\mathbf{n}$  ist der nach außen gerichtete Normalenvektor. Mit der Definition der Cauchy-Spannung

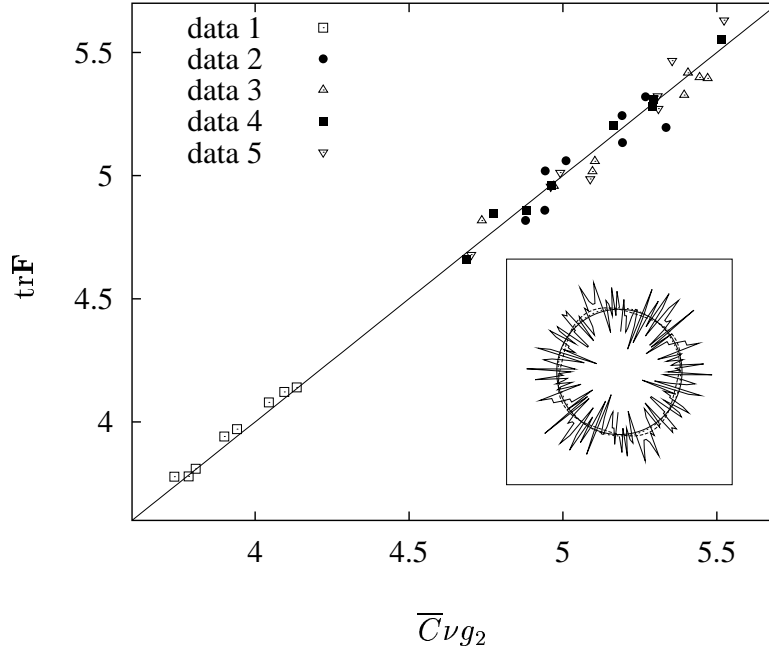


Bild 6: Zusammenhang zwischen der Spur des *Fabric*-Tensors und der mittleren Zahl der Kontakte für unterschiedliche uniform-disperse Systeme (gleiche Wahrscheinlichkeit für Teilchenradien in einem Intervall). Die Abweichungen von der Geraden sind auf statistische Schwankungen der Resultate in Teilsystemen mit lediglich 200 Teilchen zurückzuführen. In der Figur ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Kontakte in Polar-Darstellung zu sehen. Die Linien sind dabei jeweils die isotrope, die erste und die zweite harmonische Näherung an die Daten.

$\mathbf{t}_n = \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{n}$  erhält man

$$(\boldsymbol{\sigma}^p)^T = \frac{1}{V^p} \int_{\partial V^p} dS \mathbf{x} \otimes \mathbf{t}_n . \quad (12)$$

Greift nun eine Kraft  $\mathbf{f}^c$  an einem Kontakt  $c$  auf der Fläche  $\delta s^c$  an, erhält man einen Spannungsvektor  $\mathbf{t}^c = \mathbf{f}^c / \delta s^c$ . Konzentriert man die Angriffsflächen auf Punkte, so läßt sich das Integral als Summe

$$(\boldsymbol{\sigma}^p)^T = \frac{1}{V^p} \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{x}^c \otimes \mathbf{f}^c \quad (13)$$

schreiben. Nach Transponieren ergibt sich schließlich die mittlere Spannung innerhalb eines Teilchens  $p$  zu

$$\boldsymbol{\sigma}^p = \frac{1}{V^p} \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{f}^c \otimes \mathbf{x}^c . \quad (14)$$



Auf den ersten Blick scheint dieser Ausdruck über  $\mathbf{x}^c$  vom Bezugsrahmen abzuhängen. Zerlegt man  $\mathbf{x}^c = \mathbf{x}^p + \mathbf{l}^{pc}$  jedoch in den Positionsvektor  $\mathbf{x}^p$  und den sogenannten *branch*-Vektor  $\mathbf{l}^{pc}$ , der vom Teilchenzentrum zum Kontakt  $c$  weist, so läßt sich Glg. (14) umformen zu

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}^p &= \frac{1}{V^p} \left( \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{f}^c \right) \otimes \mathbf{x}^p + \frac{1}{V^p} \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{f}^c \otimes \mathbf{l}^{pc} \\ &= \frac{1}{V^p} \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{f}^c \otimes \mathbf{l}^{pc} .\end{aligned}\tag{15}$$

Der erste Summand verschwindet im statischen Gleichgewicht, da hier die Summe aller Kräfte auf ein Teilchen verschwinden muß. Für die Spannung ergibt sich unter Verwendung des Mittelungsformalismus

$$\boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma}^p \rangle = \frac{1}{V} \sum_{p \in V} w_V^p \sum_{c=1}^{c^p} \mathbf{f}^c \otimes \mathbf{l}^{pc} .\tag{16}$$

Die Abweichungen von den verschiedenen Varianten aus der Literatur [50–54] kann mit einer leicht unterschiedlichen Wahl der *Ränder* des Mittelungsvolumens begründet werden, siehe [43].

Die in Bild 7 dargestellte Spannung hat neben dem isotropen Anteil (Druck) auch einen deviatorischen Anteil. Der isotrope Anteil des Spannungstensors ist im Gleichgewicht im gesamten System fast konstant und nimmt mit der Gesamtdichte zu. Der deviatorische, anisotrope Anteil ist am stärksten in der Scherzone und nimmt nach außen hin ab, wobei das Verhalten des anisotropen Anteils kaum von der Gesamt-Dichte  $\bar{\nu}$  abhängt.

### 3.5 Mittleres elastisches Verschiebungsfeld

Bei der Beschreibung der Materialeigenschaften eines Granulates spielt die Spannungs-Dehnungs-Beziehung eine entscheidende Rolle. Um aus der diskreten Vielteilchenbewegung in einfacher Weise ein räumliches Dehnungsfeld abzuleiten, wird häufig die „Voigt-Hypothese“ eingesetzt.

Eine einfache und häufig eingesetzte Methode, um die Dehnung zu erhalten, ist die Anwendung der „Voigt-Hypothese“. Dabei wird angenommen, daß die Dehnung bezüglich eines spannungsfreien Referenzzustands gleichförmig ist und daß jede Einzelteilchenverschiebung dem mittleren Verschiebungsfeld folgt [33]. Die zu erwartende Verschiebung an einem Kontakt  $c$  des

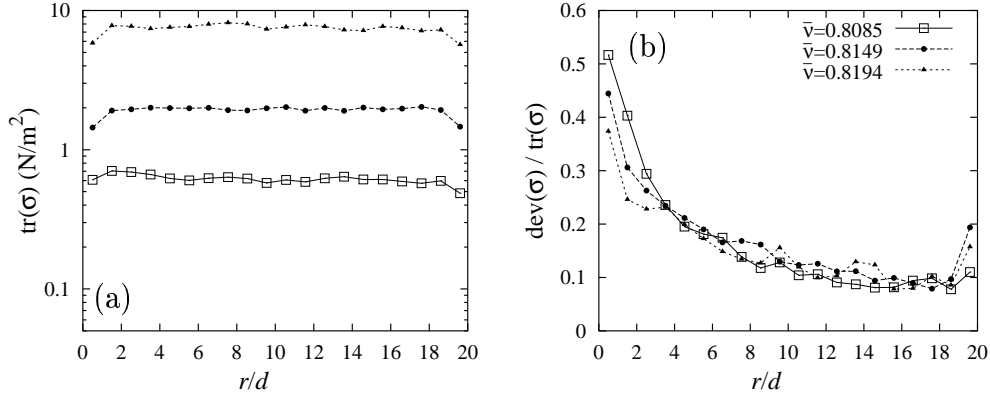


Bild 7: Isotroper (a) und deviatorischer (b) Anteil des Spannungstensors für die im Bild angegebenen, globalen Volumenfraktionen  $\bar{v}$ .

Teilchens  $p$ , welche mit einem Verschiebungsgradienten  $\epsilon$  relativ zur kraftfreien Referenzkonfiguration einhergeht, berechnet sich dann als  $\epsilon \cdot \mathbf{l}^{pc}$ , mit  $\mathbf{l}^{pc} = a_p \mathbf{n}^c$ . Es sei hier darauf hingewiesen, daß die lineare, symmetrische Dehnung  $\epsilon = \frac{1}{2}(\epsilon + \epsilon^T)$  nicht notwendiger Weise mit dem Verschiebungsgradienten identisch ist.

Analog zur Vorgehensweise von Liao et al. [34] gehen wir davon aus, daß das lokale Verschiebungsfeld nicht mit dem mittleren Verschiebungsfeld übereinstimmt, sondern um dieses fluktuiert [43]. Der Unterschied zwischen der lokalen Verschiebung  $\Delta^{pc}$  und der erwarteten Verschiebung läßt sich dann als

$$\chi^{pc} = \epsilon \cdot \mathbf{l}^{pc} - \Delta^{pc} \quad (17)$$

darstellen. Die lokale Verschiebung ergibt sich direkt aus den Simulationen als  $\Delta^{pc} = \delta^c \mathbf{n}^c$ , wobei  $\delta^c$  die Kontaktverformung ist.

Nimmt man nun an, daß das mittlere Verschiebungsfeld eine gute Näherung der lokalen Verschiebung ist, so läßt sich ein „least square fit“ auf die Fluktuationen

$$S = \frac{1}{V} \sum_{p \in V} f_V^p \sum_{c=1}^{C^p} (\chi^{pc})^2 \quad (18)$$

anwenden, indem  $S$  bezüglich des Verschiebungsgradienten minimiert wird,

$$\frac{\partial S}{\partial \epsilon} \stackrel{!}{=} \mathbf{0} \quad (19)$$

$$= \frac{2}{V} \sum_{p \in V} f_V^p \sum_{c=1}^{c^p} (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{l}^{pc} - \Delta^{pc}) \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{l}^{pc} - \Delta^{pc}) .$$

Diese vier Gleichungen für die vier Komponenten von  $\boldsymbol{\epsilon}$  (in 2D) lassen sich in eine Beziehung für das mittlere Verschiebungsfeld als Funktion der Kontaktdeformationen und der Vektoren  $\boldsymbol{l}^{pc}$  umformen. Unter der Annahme, daß  $\partial \Delta^{pc} / \partial \boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{0}$ , kann man  $\boldsymbol{\epsilon}$  aus der Summe ziehen und nach Multiplikation der Gleichung mit dem inversen Fabric-Tensors, ergibt sich

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{\pi h}{V} \left( \sum_{p \in V} f_V^p \sum_{c=1}^{c^p} \Delta^{pc} \otimes \boldsymbol{l}^{pc} \right) \cdot \mathbf{F}^{-1} . \quad (20)$$

Die isotrope Deformation in Bild 8 ist in der Scherzone am stärksten, da dort die Dichte niedrig ist (Dilatanz) und nimmt mit zunehmender Gesamt-Dichte zu. Der deviatorische Anteil der Verformung ist in der Scherzone lokalisiert und nimmt nach außen hin stark ab.

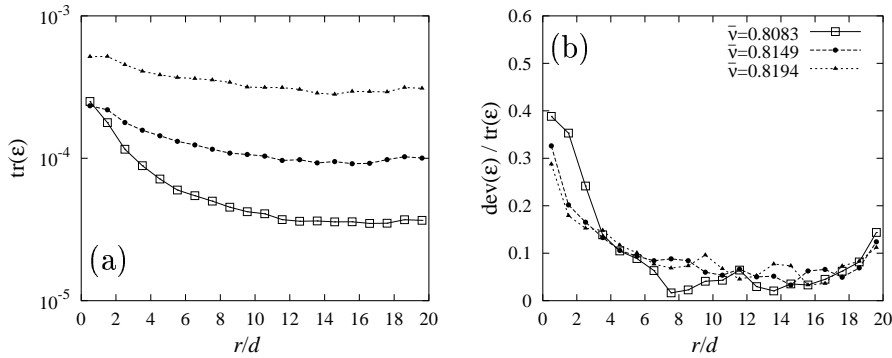


Bild 8: Isotroper (a) und deviatorischer (b) Anteil des elastischen Deformationsgradienten für die im Bild angegebenen, globalen Volumenfraktionen  $\bar{v}$ .

### 3.6 Steifigkeit und Schermodul

Der Fabric-Tensor  $\mathbf{F}$ , der das Kontaktnetzwerk und die innere Struktur des Materials beschreibt, verdient eine eingehendere Diskussion, obwohl er eigentlich nicht explizit in der klassischen Kontinuumstheorie vorkommt.  $\mathbf{F}$  ist allerdings nur die erste Näherung eines allgemeineren Tensors vierter Stufe, welcher mit dem Steifigkeitstensor  $\mathbf{C}$  in Verbindung gebracht werden kann

[33]. Das hat zur Folge, daß im allgemeinen Fall einer anisotropen Beschreibung des Materials der Steifigkeitstensor eine funktionale Abhängigkeit von Zeit, Deformation und Spannung beinhalten müßte. Diese Erkenntnis wird fundiert durch unsere Mittelungsergebnisse und tritt besonders beim Vergleich der Orientierungen der Tensoren  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\epsilon}$  und  $\mathbf{F}$  zutage. Die angeführten Tensoren sind *nicht* ko-linear, wie für eine einfache isotrop-elastische Theorie angenommen wird. Nichtsdestotrotz konnten die makroskopischen Materialparameter Steifigkeit  $E$  (siehe Bild 9) und Schermodul (siehe Bild 10) identifiziert werden – die Anisotropie wurde dabei jedoch nicht berücksichtigt. Ein interessantes Ergebnis ist, daß die Steifigkeit unabhängig von der globalen Dichte  $\bar{\nu}$  nur von der Kontaktanzahldichte, d. h. der Spur des Fabric-Tensors  $\text{tr}\mathbf{F}$ , abzuhängen scheint. Verschiedene Simulationen mit unterschiedlichen Gesamtdichten skalieren, d. h. werden durch die gleiche Beziehung beschrieben.

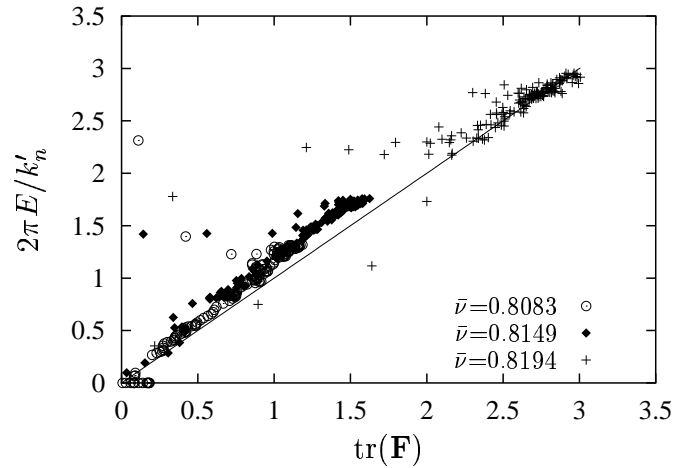


Bild 9: Skalierte Steifigkeit  $2\pi E/k'_n = \text{tr}\boldsymbol{\sigma}/\text{tr}\boldsymbol{\epsilon}$ , über  $\text{tr}\mathbf{F}$  aufgetragen, für verschiedene Simulationen. Jeder Datenpunkt gehört zu einem von 150 ringförmigen Mittelungsvolumina mit Dicke  $\Delta r \approx (1/8)d$ .

Beim Schermodul  $G$ , skaliert dargestellt in Bild 10, stellt man für niedrige Dichten, also kleinen Werten von  $\text{tr}\mathbf{F}$ , ein ähnliches Verhalten fest. Bei einem mit der Dichte zunehmenden Schwellwert findet man jedoch eine Divergenz von  $G$ , die der Tatsache, daß ein zu dicht gepacktes Schüttgut nicht mehr

gesichert werden kann, Rechnung trägt.

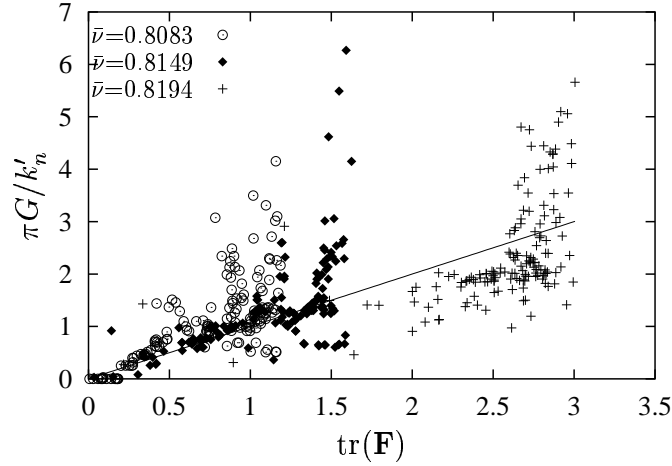


Bild 10: Skaliertes Schermodul  $\pi G/k'_n = \text{dev}(\boldsymbol{\sigma})/\text{dev}(\boldsymbol{\epsilon})$  aufgetragen über  $\text{tr}\mathbf{F}$  für verschiedene Simulationen mit jeweils verschiedenen Dichten  $\bar{\nu}$ , wie im Bild angegeben.

### 3.7 Rotation und Mikropolare Tensoren

Um die besonders in der Scherzone auftretenden Rotationen der Teilchen, vgl. Bild 1 und 11, in eine makroskopische Theorie mit einzubinden, eignet sich die Theorie des Cosserat-Kontinuums. Dabei werden jedem Materiepunkt zusätzlich zu den translatorischen auch rotatorische Freiheitsgrade zugeordnet. Die Teilchenrotation (Spindichte), siehe Tabelle 2, sowie die durch Subtraktion der Kontinuumsrotation gewonnene Teilchenzusatzrotation  $\omega^*$  sind in Bild 11 dargestellt.

Die konstituierenden Gleichungen müssen dann um eine Beziehung zwischen den Momentenspannungen und den Krümmungen erweitert werden. Jene erhält man aus den Definitionen von  $\boldsymbol{\sigma}$  und  $\boldsymbol{\epsilon}$  durch Analogieüberlegungen, wobei Kräfte bzw. zugehörige Überlappungen jeweils durch Drehmomente bzw. Kreuzprodukte ersetzt werden [55], siehe Tabelle 2.

Die genannten Größen bilden den Kern mikropolarer Theorien und die analytische Herleitung sowie das bessere Verständnis ihrer Eigenschaften sind

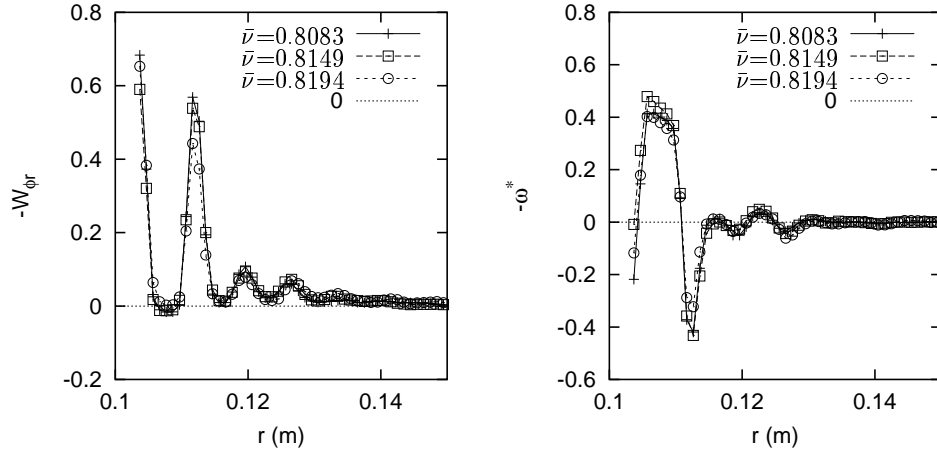


Bild 11: Spindichte der Teilchen in der Scherzone (links) und oszillierende Teilcheneigen- oder -zusatzrotation  $\omega^* = \omega - W_{r\phi}$  (rechts).

Voraussetzung dafür, die interne Länge in der Cosserat-Theorie mit entsprechenden Längenskalen anderer Modelle vergleichen zu können.

Das erste vielversprechende Resultat hierzu betrifft den Quotienten der Momentenspannung und der korrespondierenden Krümmung, der angibt, wie stark ein Material auf eine kleine Rotationsbewegung reagieren wird – er stellt also eine Rotationssteifigkeit (in Analogie zur Steifigkeit  $E$ ) dar. Die Ergebnisse in Bild 12 zeigen, daß die Rotationssteifigkeit in der Scherzone abnimmt (durch abnehmende Dichte und dadurch abnehmende Frustration) und, aus ähnlichen Gründen, mit zunehmender Materialdichte systematisch

Tabelle 2: Mikropolare Größen, die mit dem Volumen-Mittelungsverfahren bestimmt wurden. Für eine ausführliche Diskussion sei auf [43, 46, 47] verwiesen.

Größe	$Q^p$
Spindichte $\nu\omega$	$\omega_p$
Momentenspannungen $\mathbf{M}$	$\frac{1}{V^p} \sum_{c=1}^{C^p} (\mathbf{l}^{pc} \times \mathbf{f}^c) \otimes \mathbf{l}^{pc}$
Krümmungen $\boldsymbol{\kappa}$	$\frac{\pi h}{V^p} \sum_{c=1}^{C^p} (\mathbf{l}^{pc} \times \boldsymbol{\Delta}^{pc}) \otimes \mathbf{l}^{pc} \cdot \mathbf{F}^{-1}$

zunimmt. Ein dichtes Material setzt also einem Drehmoment mehr Widerstand entgegen als ein dünneres.

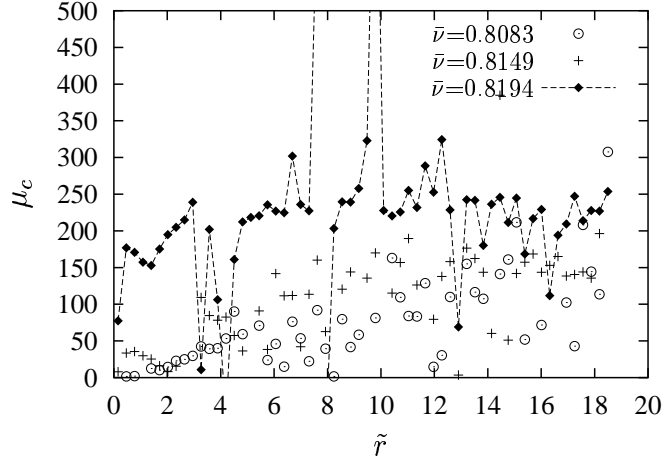


Bild 12: Rotationssteifigkeit  $\mu_c$  über  $\tilde{r}$  aufgetragen für Simulationen mit unterschiedlicher Dichte.  $\mu_c$  ist der Quotient aus den Komponenten der Momentenspannung und der Krümmung aus der mikropolaren Theorie,  $\tilde{r}$  der mit dem mittleren Teilchendurchmesser reskalierte Abstand vom inneren Ring.

## 4 Zusammenfassung

Die hier vorgestellte diskrete Modellierung von granularen Medien ermöglicht einen Vergleich mit Scher- und Biaxial-Versuchen, wobei auch quantitativ Übereinstimmung mit Referenzexperimenten erzielt wird. Bei der Simulation von Scherzonen ist ein exponentielles Abklingen der Schergeschwindigkeit weg von der Scherzone und eine alternierende Zusatzrotation der Teilchen festzustellen. Diese Phänomene werden auch in Biaxial-Simulationen beobachtet und beweisen, daß in einer Scherzone die Teilchenrotation von großer Wichtigkeit ist.

Um den Mikro-Makro-Übergang von einer „mikroskopischen“ zu einer kontinuumstheoretischen Beschreibung möglich zu machen, ist ein konsistenter Mittelungsformalismus entwickelt worden. Damit können neben der Dichte

und dem Geschwindigkeitsfeld auch tensorielle Größen wie der Geschwindigkeitsgradient, der Spannungstensor, der elastisch-reversible Deformationsgradient und der Struktur-Tensor berechnet werden. Aus der Teilchenrotation und der Kontinuumsdrehung erhält man die Teilchenzusatzrotation im Sinne einer mikropolaren Kontinuumstheorie. In Analogie zu den klassischen Größen Spannungstensor und Deformationsgradient sind der Momentenspannungstensor und die Krümmung bestimmt worden.

Die Dichteabhängigkeit der gemittelten Größen ist vorerst am Beispiel des Struktur tensors für verschiedene Größenverteilungsfunktionen untersucht worden. Weiterhin erhält man Aufschlüsse über die Anisotropie des Materials, die sich dynamisch während der Simulation durch die Scherung ergibt. Alle Tensoren haben unterschiedliche Eigenrichtungen, d. h. eine auf Isotropie basierende Beschreibung kann nur eine schwache Näherung der Realität sein.

Aus den tensoriellen Größen lassen sich verschiedene Materialparameter wie z. B. die isotrope Steifigkeit oder das Schermodul berechnen. Als neue Größe kommt die „Rotationssteifigkeit“ hinzu, die den Widerstand eines Materials gegenüber Drehungen einzelner Teilchen beschreibt und die aus den mikropolaren Tensoren bestimmt werden kann.

Gegenstand aktueller Forschung ist neben der Weiterentwicklung der Mittelungsmethoden auch die Verbesserung der Kontaktgesetze, um unter anderem kohäsive Teilchenkontakte und beliebige Teilchenformen einzubeziehen. Während die diskrete Simulation realistischerer Teilchen bereits fortgeschritten ist, bedarf der Mikro-Makro-Übergang im allgemeinen Fall noch weiterer Forschungsarbeit.



## Literatur

- [1] P. A. Vermeer, S. Diebels, W. Ehlers, H. J. Herrmann, S. Luding und E. Ramm, Hrsg., *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials*, Lecture Notes in Physics 658, Springer (Berlin) 2001.
- [2] P. A. Cundall und O. D. L. Strack, "A discrete numerical model for granular assemblies," *Géotechnique*, Vol. 29, Nr. 1, S. 47, 1979.
- [3] M. P. Allen und D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Oxford University Press, 1987.
- [4] C. S. Campbell und C. E. Brennen, "Computer simulation of granular shear flows," *J. Fluid. Mech.*, Vol. 151, S. 167, 1985.
- [5] H. J. Herrmann und S. Luding, "Modeling granular media with the computer," *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, Vol. 10, S. 189, 1998.
- [6] H.-G. Matuttis, S. Luding und H. J. Herrmann, "Discrete element methods for the simulation of dense packings and heaps made of spherical and non-spherical particles," *Powder Technology*, Vol. 109, S. 278, 2000.
- [7] F. Kun und H. J. Herrmann, "A study of fragmentation processes using a discrete element method," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 138, S. 3, 1996.
- [8] F. Kun, G. A. D'Addetta, E. Ramm und H. J. Herrman, "Two-dimensional dynamic simulation of fracture and fragmentation of solids," *Comp. Ass. Mech. Engrg.*, Vol. 6, S. 385, 1999.
- [9] F. Kun und H. J. Herrmann, "Fragmentation of colliding discs," *Int. J. Mod. Phys. C*, Vol. 7, Nr. 6, S. 837, 1996.
- [10] S. Luding, "Stress distribution in static two dimensional granular model media in the absence of friction," *Phys. Rev. E*, Vol. 55, Nr. 4, S. 4720, 1997.
- [11] S. Schöllmann, "Simulation of a two-dimensional shear cell," *Phys. Rev. E*, Vol. 59, Nr. 1, S. 889, 1999.

- [12] F. Marroquin und H. J. Herrmann, "Simulation of cohesive, non-spherical particles." in Vorbereitung, 2001.
- [13] J. A. Astrøm, H. J. Herrmann und J. Timonen, "Granular packings and fault zones," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 84, Nr. 4, S. 638, 2000.
- [14] J. A. Astrøm und H. J. Herrmann, "Fragmentation of grains in a two-dimensional packing," *EuroS. Phys. J. B*, Vol. 5, S. 551, 1998.
- [15] H. Hertz, "Über die Berührung fester elastischer Körper," *J. für die reine u. angew. Math.*, Vol. 92, S. 136, 1882.
- [16] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Elasticity Theory*. Oxford: Pergamon Press, 1975.
- [17] H. J. Herrmann, J.-P. Hovi und S. Luding, Hrsg., *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E 350*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.
- [18] S. Luding, "Collisions & contacts between two particles," in [17], S.285.
- [19] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang und K. Allia, "Measurements of the collision properties of small spheres," *Phys. Fluids*, Vol. 6, Nr. 3, S. 1108, 1994.
- [20] L. Labous, A. D. Rosato und R. Dave, "Measurements of collision properties of spheres using high-speed video analysis," *Phys. Rev. E*, Vol. 56, S. 5715, 1997.
- [21] P. A. Cundall und O. D. L. Strack, "Modeling of microscopic mechanisms in granular materials," in *Mechanics of Granular Materials: New Models and Constitutive Relations* (J. T. Jenkins und M. Satake, Hrsg.), S. 137, Elsevier, Amsterdam, 1983.
- [22] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, UK, 1995.
- [23] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran, "Anomalous energy dissipation in molecular dynamics simulations of grains: The "detachment effect"," *Phys. Rev. E*, Vol. 50, S. 4113, 1994.
- [24] C. T. Veje und P. Dimon, "Power spectra of flow in an hourglass." 1998.

- [25] C. T. Veje, D. W. Howell, R. P. Behringer, S. Schöllmann, S. Luding, and H. J. Herrmann, “Fluctuations and flow for granular shearing,” in [17], S. 237.
- [26] D. Howell und R. P. Behringer, “Fluctuations in a 2d granular Couette experiment: A critical transition,” *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 82, S. 5241, 1999.
- [27] D. W. Howell, R. P. Behringer und C. T. Veje, “Fluctuations in granular media,” *Chaos*, Vol. 9, Nr. 3, S. 559, 1999.
- [28] F. Radjai und D. E. Wolf, “The origin of static pressure in dense granular media,” *Granular Matter*, Vol. 1, S. 3, 1998.
- [29] F. Radjai, D. E. Wolf, M. Jean und J.-J. Moreau, “Bimodal character of stress transmission in granular packings,” *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 80, Nr. 1, S. 61, 1998.
- [30] F. Radjai, S. Roux und J. J. Moreau, “Contact forces in a granular packing,” *Chaos*, Vol. 9, Nr. 3, S. 544, 1999.
- [31] M. Lätzel, S. Luding und H. Herrmann, “Kinematic properties of a 2d granular Couette shear-cell.” in Vorbereitung, 2001.
- [32] C. S. Chang, S. J. Chao und Y. Chang, “Estimates of elastic moduli for granular material with anisotropic random packing structure,” *Int. J. Solids & Structures*, Vol. 32, Nr. 14, S. 1989, 1995.
- [33] C.-L. Liao und T.-C. Chang, “A generalized constitutive relation for a randomly packed particle assembly,” *Computers and Geotechnics*, Vol. 20, Nr. 3/4, S. 345, 1997.
- [34] C.-L. Liao, T.-P. Chang, D.-H. Young und C. S. Chang, “Stress-strain relationship for granular materials based on the hypothesis of best fit,” *Int. J. Solids & Structures*, Vol. 34, S. 4087, 1997.
- [35] N. P. Kruyt und L. Rothenburg, “Micromechanical definition of strain tensor for granular materials,” *ASME Journal of Applied Mechanics*, Vol. 118, S. 706, 1996.
- [36] F. Emeriault und C. S. Chang, “Interparticle forces and displacements in granular materials,” *Computers and Geotechnics*, Vol. 20, Nr. 3/4, S. 223, 1997.

- [37] F. Dedecker, M. Chaze, P. Dubujet und B. Cambou, “Specific features of strain in granular materials,” *Mech. Coh.-Fric. Mat.*, Vol. 5, Nr. 3, S. 174, 2000.
- [38] J. D. Goddard, “Continuum modeling of granular assemblies,” in [17], S. 1.
- [39] A. K. Didwania, K. Ledniczky und J. D. Goddard, “Kinematic diffusion in quasi-static granular flow.” 1998.
- [40] F. Darve und O. Pal, “A new incrementally non-linear constitutive relation with 5 material constants.” 1998.
- [41] A. Zervos, I. Vardoulakis, M. Jean und P. Lerat, “Numerical investigation of granular interfaces kinematics,” *Mech. Coh.-Fric. Mat.*, Vol. 5, S. 305, 2000.
- [42] H.-B. Mühlhaus, R. de Borst und B. Sluys, “Gradient and Cosserat models: Theory and computation.” 1998.
- [43] M. Lätzel, S. Luding und H. J. Herrmann, “Macroscopic material properties from quasi-static, microscopic simulations of a two-dimensional shear-cell,” *Granular Matter*, Vol. 2, Nr. 3, S. 123, 2000. cond-mat/0003180.
- [44] I. Goldhirsch, “Note on the definition of stress for discrete systems.” Vorabdruck, 2000.
- [45] C. Goldenberg und I. Goldhirsch, “Elasticity of microscopically inhomogeneous systems: The one-dimensional case.” Vorabdruck, 2000.
- [46] S. Luding, M. Lätzel und H. J. Herrmann, “From discrete element simulations towards a continuum description of particulate solids,” in *Handbook of Conveying and Handling of Particulate Solids* (H. Kalman et al., Hrsg.), Elsevier, Amsterdam, in Druck 2001.
- [47] S. Luding, M. Lätzel, W. Volk, S. Diebels und H. J. Herrmann, “From discrete element simulations to a continuum model,” *ComS. Meth. Appl. Mech. Engng.*, in Druck 2001. in Druck.
- [48] A. C. Eringen und C. B. Kafadar, “Polar field theories,” in *Continuum Mechanics* (A. C. Eringen, Hrsg.), Vol. VI, S. 1, Academic Press, 1976.

- [49] M. Madadi, O. Tsoungui, M. Lätzel und S. Luding, “On the fabric tensor of static, polydisperse granular materials.” in Vorbereitung, 2001.
- [50] L. Rothenburg und A. P. S. Selvadurai, “A micromechanical definition of the Cauchy stress tensor for particulate media,” in *Mechanics of Structured Media* (A. P. S. Selvadurai, Hrsg.), S. 469, Elsevier, Amsterdam, 1981.
- [51] J. D. Goddard, “Microstructural origins of continuum stress fields - a brief history and some unresolved issues,” in *Recent Developments in Structered Continua. Pitman Research Notes in Mathematics No. 143* (D. DeKee und P. N. Kaloni, Hrsg.), S. 179, Longman, J. Wiley, New York, 1986.
- [52] M. M. Mehrabadi, S. Nemat-Nasser, H. M. Shodja und G. Subhash, “Some basic theoretical and experimental results on micromechanics of granular flow,” in *Micromechanics of granular media*, Elsevier, Amsterdam, 1988.
- [53] S. C. Cowin, “A simple theory of instantaneously induced anisotropy,” in *Micromechanics of Granular Materials* (J. T. Jenkins und M. Satake, Hrsg.), S. 71, Elsevier, Amsterdam, 1988.
- [54] C. S. Chang, “Micromechanical modelling of constitutive relations for granular media,” in *Micromechanics of granular media*, Elsevier, Amsterdam, 1988.
- [55] M. Lätzel, S. Luding und H. J. Herrmann, “From discontinuous models towards a continuum description,” in [1], S. 215.