

Die Physik kohäsionsloser granularer Medien

Habilitationsschrift
eingereicht von:
Dr. Stefan Luding

Institut für Computeranwendungen 1,
Pfaffenwaldring 27,
70569 Stuttgart
e-mail: lui@ica1.uni-stuttgart.de
<http://www.ica1.uni-stuttgart.de/~lui>
23. Juli 1997

*Für
meinen Bruder Andreas
1970–1996*

Inhaltsverzeichnis

I	Einleitung	1
1	Zur Physik granularer Medien	4
1.1	Phänomenologie	4
1.2	Methodik	5
1.3	Granulare Medien in den Ingenieurwissenschaften	7
2	Überblick	9
II	Theorie der Wechselwirkung	11
3	Die Physik des Zwei-Teilchen-Kontaktes	11
3.1	Einführung der Materialparameter	11
3.1.1	Der Restitutionskoeffizient in Normalrichtung	12
3.1.2	Der Coulomb-Reibungskoeffizient	13
3.1.3	Der Tangential-Restitutionskoeffizient	14
3.2	Die Impulserhaltungsgleichungen	14
3.3	Berechnung der Impulsänderung	16
3.3.1	Coulombsche Reibung und Tangentialelastizität	16
3.3.2	Klassifizierung von Stößen	18
3.4	Integration des Zwei-Teilchen-Stoßes	18
3.5	Modellierung des abstoßenden Potentials	19
3.5.1	Das lineare Feder-Dämpfer-Modell in Normalrichtung	19
3.5.2	Das nicht-lineare Feder-Dämpfer-Modell in Normalrichtung	21
3.5.3	Das hysteretische Feder-Modell in Normalrichtung	22
3.6	Modellierung der Tangentialreibung	23
3.6.1	Viskose Tangentialkraft	23
3.6.2	Coulombsche Tangentialkraft	23
3.6.3	Elastische Tangentialkraft	24
3.7	Beispiele für Zwei-Teilchen-Stöße	24
3.7.1	Teilchen-Wand Kollisionen	25
3.7.2	Teilchen-Teilchen Kollisionen	27
3.8	Zusammenfassung	27
4	Die Physik der Vielteilchen-Kontakte	31
4.1	Vielteilchen-Kontakte	31
4.1.1	Die Schallgeschwindigkeit	31
4.1.2	Der „Detachment“ Effekt und der „inelastische Kollaps“	32
4.1.3	Zusammenfassung	35
4.2	Der Spannungstensor	37

5	Der Übergang von Dynamik zu Statik	38
5.1	Methoden zur Vermeidung des inelastischen Kollapses	38
5.2	Anwendung der TC Methode	40
5.3	Viele Teilchen in einem Behälter	41
III	Vibrierte granulare Medien	43
6	Überblick	43
6.1	Phänomenologie	43
6.2	Theorie, Experimente und Simulationen	44
7	Skalierung vibrierter granularer Systeme	46
7.1	Das Modellsystem	47
7.2	Wahrscheinlichkeitsverteilungen	49
7.3	Theorie vibrierter Systeme	50
7.4	Zweidimensionale Simulationen	54
7.4.1	Simulationen mit elastischen Wänden	54
7.4.2	Simulationen mit rauhen, dissipativen Wänden	59
7.4.3	Vergleich von DSMC und ED	62
7.4.4	Unterschiedliche Randbedingungen	63
7.4.5	Vergleich mit Experimenten	64
7.5	Dreidimensionale Simulationen	66
7.6	Zusammenfassung	66
8	Kollektives Verhalten in vibrierten Systemen	68
8.1	Konvektion	68
8.1.1	Überblick	68
8.1.2	Modellierungsergebnisse	68
8.1.3	Zusammenfassung	71
8.2	Größenseparation	72
8.2.1	Überblick	72
8.2.2	Entmischung ohne Konvektion	73
8.2.3	Größenseparation im quasi-statischen Fall	74
8.2.4	Einfluß des Größenverhältnisses Φ auf die Separation	75
8.2.5	Zusammenfassung	77
IV	Übergang von Statik zu Dynamik	79
9	Motivation	79
10	Experimente und Theorie	81
10.1	Experimentelle Untersuchung	81
10.2	Theorie der Fallbewegung in einem Rohr	83

11 Numerische Resultate	86
11.1 Die Anfangsbedingung des Modellsystems	86
11.2 Dichte- und Druckprofile an der Wand	87
11.3 Die Ursachen der Risse	89
11.3.1 Fluktuationsinduziertes „Stick-Slip“-Verhalten	91
11.3.2 Frustration und Spinordnung	92
11.3.3 Wahrscheinlichkeitsverteilung der Kollisionsrate	93
11.4 Parameterstudien	94
12 Zusammenfassung	97
V Musterbildung	99
13 Periodisch angeregte Systeme	99
13.1 Experimente	100
13.2 Numerische Resultate	101
13.2.1 Verfolgung eines Teilchens	103
13.2.2 Korrelationsfunktionen	103
13.2.3 Vergleiche mit Experimenten	107
13.3 Zusammenfassung	110
14 Offene Systeme mit periodischen Rändern	112
14.1 Dichtestabilitäten	113
14.2 Clusterwachstum	121
14.3 Stoßwahrscheinlichkeit und Ereignisfrequenz	122
14.4 Zusammenfassung	123
VI Quasi-statische granulare Packungen	125
15 Entstehung eines Sandhaufens	125
15.1 Ein-Teilchen-Modell für Sandhaufen	126
15.2 Kontinuumsbeschreibung	127
15.2.1 Ein Teilchen auf einer schiefen Ebene	128
15.2.2 Selbstähnliches Oberflächenwachstum	129
15.2.3 Simulationsergebnisse für verschiedene Teilchensorten	129
15.3 Zusammenfassung	130
16 Kraftverteilung in Sandhaufen	132
16.1 Das quasi-statische Modell	133
16.1.1 Anfangs- und Randbedingungen	133
16.1.2 Lösungsverfahren	135
16.2 Rauher Boden	135
16.2.1 Vergleich verschiedener Böschungswinkel	135
16.2.2 Änderung der Systembreite	136
16.2.3 Entfernung von Teilchen	138
16.3 Flacher und glatter Boden	140

16.3.1	Vergleich von Haufen mit unterschiedlicher Steigung	140
16.3.2	Änderung der Systembreite	141
16.4	Zufällige, kleine Änderung der Teilchengröße	141
16.5	Zusammenfassung	144
VII	Numerische Methoden	147
17	Ereignis-Dynamik (ED)	147
17.1	Algorithmus	147
17.2	Die TCED Methode für den quasi-statischen Fall	148
18	Molekulardynamik (MD)	150
19	Alternative Methoden	151
19.1	Direkte Monte-Carlo Simulation (DSMC)	151
19.2	Monte-Carlo mit Volumenausschluß (MC)	152
19.2.1	Der Originalalgorithmus nach Rosato	152
19.2.2	Erweiterung des Rosato-Algorithmus	152
VIII	Zusammenfassung und Ausblick	155
20	Ausblick	159
IX	Anhänge	161
21	Anhang A:	
	Herleitung der Tangential-Restitution	161
22	Anhang E:	
	Berechnung der Energieänderung beim Stoß zweier Teilchen	163
23	Anhang V:	
	Visualisierung der Simulationsdaten	165
24	Anhang S:	
	Verwendete Symbole und Abkürzungen	167
25	Anhang L:	
	Literatur	171
26	Danksagung	195

Teil I

Einleitung

In der Sichtweise der Alchimie bestand die Welt aus den Elementen Erde, Wasser, Luft und Feuer. Heute unterscheidet man zwischen Festkörper, Flüssigkeit, Gas und dem weniger alltäglichen Plasma. Das Verständnis und die Theorie dieser „klassischen“ Medien ist weit entwickelt. Aber eine ganz andere Form der Materie ist ebenso allgegenwärtig: Kaffeepulver, Salz, Zucker, Mehl und Müsli sind in jedem Haushalt zu finden. Aus der Industrie kennt man Erz, Sand, Toner oder Pillen, und Mais, Korn, Reis und Samen sind landwirtschaftliche Produkte. Diese *granularen Medien* lassen sich keinem der klassischen Aggregatzustände eindeutig zuordnen. Die einzelnen Teilchen sind Festkörper, die größer sein können als ein Buch, aber auch kleiner als die Dicke des Papiers. Dennoch kann der Zustand vieler granularer Teilchen nur selten als fest *oder* flüssig bezeichnet werden. Man kann zwar am Strand auf Sand laufen wie auf einem Festkörper, aber man kann auch gleichzeitig etwas Sand in die Hände nehmen und fließen lassen wie eine Flüssigkeit. Granulare Medien lassen sich also nicht in die klassischen Schemata einordnen. Eine umfassende Beschreibung des granularen Zustands ist eine der großen Herausforderungen für die Forschung.

Granulare Medien wie Wüstensand, kosmischer Staub oder Stahlkugeln zeigen interessante Verhaltensweisen, die man teilweise an einem Sandhaufen demonstrieren kann: Läßt man Sand aus einer Flasche auf den Boden eines flachen Behälters rieseln, so bildet sich – anders als bei einer Flüssigkeit – ein konischer Haufen mit typischem Böschungswinkel. Dieser Winkel hängt vom Material ab und bleibt ohne Störung sehr lange Zeit stabil – ähnlich wie ein Festkörper. Betrachtet man den Sandhaufen mikroskopisch, so wird man eine komplizierte, ungleichmäßige Kräfteverteilung in seinem Inneren vorfinden, die man am besten als ein Netzwerk von Kraftlinien veranschaulichen kann. Ein ausgewähltes Korn im mechanischen Gleichgewicht spürt durch seine Nachbarn bestimmte Kräfte. Die Fluktuationen sind so groß, daß man nicht vorhersagen kann wie groß die Kräfte sind, die auf Teilchen wirken, die sich in der Nähe befinden. Unter Umständen findet man direkt neben einem Korn, das starke Kräfte spürt, ein anderes Korn, das nur durch sein Eigengewicht belastet wird.

Neigt man den Behälter leicht und überschreitet dabei der Böschungswinkel des Sandhaufens seinen kritischen Wert, so zerfließt die Böschung. Dies geschieht nicht etwa kontinuierlich, die Böschung wird stattdessen intermittent abgebaut: Lawinen transportieren das Material der Schwerkraft folgend nach unten, solange bis der kri-

tische Winkel unterschritten wird und das Material wieder zur Ruhe kommt. Der Unterschied zwischen dem Böschungswinkel und dem kritischen Winkel beträgt nur wenige Grad und die Lawinen können nur wenige Körner oder aber die gesamte Oberfläche betreffen.

Schüttelt man den Behälter, so wird sich der Böschungswinkel normalerweise langsam abbauen, da immer wieder Lawinen ausgelöst werden und außerdem die innere, stabile Struktur des Sandhaufens zerstört wird. Man erwartet nun, daß sich die Oberfläche – wie bei einer Flüssigkeit – senkrecht zur Gravitationskraft einstellt. Überraschenderweise ist dies nicht immer der Fall. Durch die Vibrationen kann durch die Wandreibung Konvektion ausgelöst werden: Material an den Wänden bewegt sich nach unten und Material fließt nach oben, um Massenerhaltung zu gewährleisten. In seltenen Fällen kann dies auch wieder zur Haufenbildung aus einer anfangs glatten Oberfläche führen.

Mit zunehmender Energiezufuhr können Oberflächenwellen auftreten, ähnlich wie sie in Flüssigkeiten beobachtet werden. Durch die periodische Vibration werden in Flüssigkeiten und auch in granularen Medien Wellen mit typischer Periode und Wellenlänge angeregt. Die Periode ist mindestens doppelt so lang wie die Anregungsperiode, und die Ausdehnung der Muster wird nicht kleiner als zehn Teilchendurchmesser. Diese Wellen sind für Flüssigkeiten gut verstanden, in granularen Medien sind sie nicht selbstverständlich, da keine anziehende Kraft und deshalb keine Oberflächenspannung existiert. In Abb. 1 sind die beschriebenen Verhaltensweisen schematisch dargestellt.

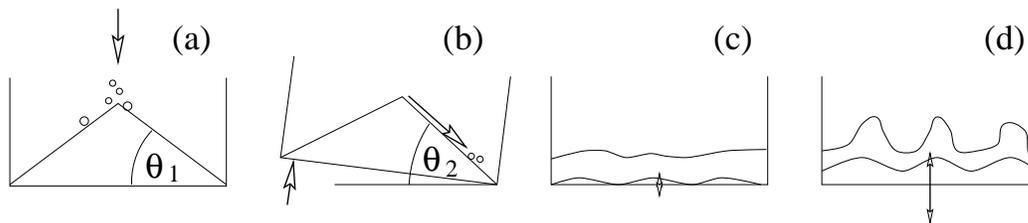


Abbildung 1: (a) Statischer Sandhaufen mit typischem Böschungswinkel θ_1 , (b) Lawinen bei Neigung der Oberfläche über den Winkel $\theta_2 > \theta_1$, (c) Verschwinden des Böschungswinkels bei schwacher Störung und (d) Oberflächenwellen bei stärkerer Störung.

Schüttelt man viel stärker, so kann das granulare Medium in einen gasähnlichen Zustand übergehen. Die Teilchen fliegen mit hoher Geschwindigkeit im Behälter umher und stoßen einander nur nach relativ langen freien Weglängen. Damit wird klar, daß sich granulare Medien, in Abhängigkeit von den Randbedingungen, ähnlich wie Festkörper, Flüssigkeiten oder Gase verhalten können. Zusätzlich gibt es noch zahlreiche weitere Phänomene, die in keinem der drei klassischen Aggregatzustände vorkommen. In der Regel sind granulare Medien nur mit einem Gas oder einer Flüssigkeit gemischt anzutreffen; das freie Volumen wird durch einen oder zwei der klassischen Aggregatzustände ausgefüllt. Vernachlässigt man dieses intergranulare Medium und alle eventuell damit verbundenen attraktiven Wechselwirkungen, kann man das granulare Medium als kohäsionslos bezeichnen.

Kohäsionslose granulare Medien sind klassische Vielteilchen-Systeme, fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht, deren Komponenten durch kurzreichweitige abstoßende und vernachlässigbare anziehende Kräfte wechselwirken. Ein wesentliches Element granularer Medien ist der *Volumenausschluß*: Zwei Teilchen können sich nicht an derselben Stelle befinden. Im Gegensatz zu molekularen Gasen geht bei der Wechselwirkung Energie durch Reibung, plastische Verformung und weitere Effekte verloren, die unter dem Begriff Dissipation zusammengefaßt werden. *Dissipation* bedeutet, daß die Energie irreversibel in andere Moden wie Schall oder Temperatur übergeht, und dadurch für die Dynamik des granularen Mediums nicht mehr existiert.

Eine mögliche Charakterisierung granularer Medien ist ihre Unterscheidung nach der Größe zwischen Puder, Pulver, Sand und Kies, die jedoch nicht alle Eigenschaften berücksichtigt. Mit abnehmender Größe gewinnen Elektrostatik, Kohäsion und das Gas oder die Flüssigkeit zwischen den Teilchen stark an Bedeutung. Alternativ kann man granulare Medien nach ihrem Volumenanteil klassifizieren. Da mit zunehmendem Volumenanteil die Dichte des Systems zunimmt, wird hier der Volumenanteil als Dichte des Systems bezeichnet. In den Fällen, in denen mit Dichte die spezifische Dichte des Materials gemeint ist, wird dies aus dem Zusammenhang deutlich. Mit zunehmender Dichte verhalten sich granulare Materialien ähnlich wie ein Gas, eine Flüssigkeit oder wie ein Festkörper. Da außerdem bei jedem Kontakt zweier Teilchen Energie verloren geht, ist weiterhin wichtig, ob und wieviel Energie dem System zugeführt wird. Bei gleicher Dichte werden sich Systeme mit verschieden starker Energiezufuhr unterschiedlich verhalten. Eine Klassifizierung granularer Medien ist demnach nicht einfach und erfordert ein tiefes Verständnis der Prozesse und Phänomene, die zum spezifischen Verhalten führen.

1 Zur Physik granularer Medien

Die physikalischen Grundlagen granularer Materie sind schon seit über 200 Jahren Gegenstand wissenschaftlicher Untersuchungen. Trotz der Bemühungen solch bedeutender Naturwissenschaftler wie Coulomb [Cou81], Faraday [Far31], Hagen [Hag52], Hertz [Her82], Reynolds [Rey85] oder Raman [Ram18], ist es bisher nicht gelungen, ein umfassendes physikalisches Verständnis der statischen und dynamischen Eigenschaften granularer Materie zu entwickeln, so wie es für Newtonsche Flüssigkeiten oder Festkörper existiert. Diese Tatsache kann angesichts der Komplexität bereits des elementaren Wechselwirkungsprozesses zwischen zwei unregelmäßig geformten Sandkörnern kaum verwundern. In granularen Vielteilchen-Systemen kann man ein breites Spektrum interessanter Effekte beobachten: Bifurkationen, Periodenverdopplung, chaotische Dynamik, seltsame Attraktoren, fraktale Eigenschaften, kritisches Verhalten, nichtlineare Diffusion, Schockwellen und Hysterese.

1.1 Phänomenologie

An dieser Stelle soll ein stichwortartiger Überblick über die reiche Phänomenologie in granularen Medien gegeben werden. Dabei wird auf die entsprechenden Publikationen verwiesen, um einen einfachen Zugang zu detaillierteren Informationen zu erlauben.

Um granulare Medien im Gravitationsfeld in Bewegung zu setzen, oder in Bewegung zu halten, muß man der Dissipation durch Energiezufuhr entgegenwirken, denn ohne Energiezufuhr wird das System einem statischen Zustand zustreben und dort verweilen. Energiezufuhr kann z.B. durch Vibration des Behälters in dem sich das Material befindet realisiert werden. Bei starker Vibration verhält sich das System im Behälter ähnlich wie ein Gas oder eine Flüssigkeit, und man kann einen stationären Zustand erreichen, in dem sich Energiezufuhr und -verlust im Mittel ausgleichen. Abhängig von Füllhöhe, Material und Anregungsenergie wird sich eine bestimmte mittlere Energie einstellen, die *nicht* auf einzelne Freiheitsgrade gleichverteilt ist, wie in klassischen elastischen Systemen [Lud95, DLK95, Mad95, GS95, MB97].

Bei höheren Dichten können kollektive Phänomene wie Konvektion, Entmischung oder Oberflächenwellen auftreten. Bei vertikaler Vibration des Bodens wird Konvektion durch die Reibung des Materials mit den Wänden verursacht. Bei schwacher Anregung bleibt das Material relativ dicht und man kann Haufenbildung durch Wandreibung [ER89, CDR92, Gro97] oder durch die den Sand durchsetzende Luft [PB93, PvDB95] beobachten. Konvektion in dreidimensionalen Systemen konnte erst vor kurzem mit Hilfe von Kernspinresonanz experimentell genauestens untersucht werden [KEJK95, EJK⁺95] und wurde als eine mögliche Ursache für Entmischung identifiziert [KJN93]. Daneben kann Entmischung bei schwacher Energiezufuhr allein durch den Volumenausschluß in einem System verschieden großer Teilchen zustande kommen [DRC93, DMCR94b, DL95]. Sofern der Behälter groß genug ist, kann man in dünnen granularen Schichten Oberflächenwellen und damit verbundene raumzeitliche Muster wie Sechsecke, Streifen oder Quadrate beobachten [MUS95, UMS96,

CVRD96].

Bei hoher Dichte und sehr schwacher Energiezufuhr findet eine langsame Relaxation des Böschungswinkels statt [JLN89], für die eine Vielzahl von möglichen Erklärungen vorgeschlagen wurde [MB91, BCPE95, BCC95]: Phänomenologische, nicht-lineare dynamische Modelle, die auf viskoplastischen Ansätzen und makroskopischen Reibungsgesetzen basieren, können die experimentellen Resultate wenigstens qualitativ erklären [LH94, LH95, BdG96]. Auch die Packungsdichte granularer Systeme unter vertikaler Vibration zeigt eine logarithmisch langsame Relaxation hin zu einer maximalen Dichte [AS66, KFL⁺95], was numerische und theoretische Aussagen zu widerlegen scheint [ME90, HYR⁺92]. Stochastische Ansätze [Lin96], Erweiterungen des Parkproblems [BNKN96] und Analogien zu Spingläsern [NCH97] sind einige der vorgeschlagenen Erklärungen für dieses Phänomen.

Im Bereich der Dynamik an Oberflächen wurden Experimente zu Lawinen in rotierenden Trommeln von verschiedenen Forschern durchgeführt [FDL89, Raj90, JN92]. Rotierende Trommeln eignen sich aber auch, um Mischungs- und Entmischungseffekte quantitativ zu untersuchen [Som79, CDFL93, ZLL⁺94, MSMO95, CB95]. Das Konzept der selbstorganisierten Kritizität (SOK) [BTW87] zur Beschreibung der Lawinendynamik wurde erst kürzlich für einen experimentellen Spezialfall bestätigt [FCMS⁺96, Lud96]: SOK ist nicht universell, sondern hängt vom Mechanismus der Energiedissipation und von der Geometrie der Teilchen ab.

Dichtewellen in Rohrströmungen wurden experimentell nur in Verbindung mit einem Gas zwischen den Teilchen beobachtet [BBFJ89, RHH96], während deutliche Dichtefluktuationen in Systemen großer Teilchen, in denen das Gas eine untergeordnete Rolle spielt, auf lokale Änderungen der Wandrauhigkeit zurückzuführen sind [DML⁺96]. Der Übergang von einem statischen System zu einem System bewegter Teilchen geht mit einer Verdünnung des Systems einher, ein Phänomen, das von Reynolds als Dilatanz bezeichnet wurde [Rey85]. Dabei findet die Verdünnung nicht gleichförmig statt, sondern ist auf „Risse“ lokalisiert [DMCR94a, DML⁺96].

Bereits ein statisches Granulat in einem Silo oder einem Sandhaufen zeigt Unterschiede zu Flüssigkeiten. Füllt man Sand in einen hohen Behälter, so wird der Druck nicht wie in einer Flüssigkeit stetig mit der Tiefe ansteigen, sondern einen Maximalwert erreichen [Jan95]. Die Ursache dafür ist die Reibung zwischen den Teilchen und an den Wänden, die die Bildung von Bögen ermöglicht, welche Vertikalkräfte auf die Wände umleiten, die dann einen Teil des Gewichts tragen. In einem Sandhaufen sind keine Wände, d.h. der Boden trägt das gesamte Gewicht des Materials. Betrachtet man die Kraftverteilung am Boden, so stellt man ein Minimum der Vertikalspannung in der Mitte des Haufens fest [TB80, SN81], ein Phänomen, das noch immer umstritten ist [Sav97]. Bei einer genaueren Betrachtung mit besserer räumlicher Auflösung findet man Kraftnetzwerke. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Kräfte gehorcht bei kleinen Kräften einem Potenzgesetz und nimmt bei großen Kräften exponentiell mit der Stärke ab [EO89b, LNS⁺95, RBR96, WCCB96, WCC97, Lud97a].

1.2 Methodik

Die klassische Thermodynamik und die statistische Physik sind auf Systeme im Gleichgewicht anzuwenden. Dennoch wurde versucht, eine Thermodynamik granularer Medien zu formulieren, in der die Energie durch das freie Volumen und die Tempe-

ratur durch eine sogenannte Kompaktheit ersetzt wird [EO89a, ME89, Her93, SH95]. Erste experimentelle Messungen der Fluktuationen in granularen Systemen, sowie des granularen Äquivalents zur spezifischen Wärme, wurden erst kürzlich durchgeführt [NKP⁺97].

Ein anderer Ansatz basiert auf der klassischen kinetischen Transporttheorie. Die zeitliche Entwicklung des Systems wird durch Kollisionen bestimmt, was zu einer, der kinetischen Gastheorie analogen, Betrachtungsweise (KGT) führt [Sav79, JS83, Haf83, GS95]. Die Anwendung der KGT erfordert zuerst die Herleitung der kinetischen Gleichungen für die Wahrscheinlichkeitsverteilungen und danach die Lösung derselben. Die Herleitung erfolgt oft durch die Benutzung intuitiver Argumente, ähnlich wie sie für die Ableitung der Boltzmann- oder der Enskog-Gleichung verwendet werden. Die Lösung ist nur selten analytisch möglich, aber Rohrfluß und Scherung, oder allgemeiner schnelles Fließen verdünnter Granulate, kann man damit in einigen Parameterbereichen gut beschreiben. Die theoretische Basis ist wegen der nötigen Vereinfachungen und Hypothesen noch immer umstritten.

Ein wichtiges Hilfsmittel zur Untersuchung granularer Medien sind numerische Verfahren und Lösungsmethoden, sowohl für Kontinuumsgleichungen, als auch zur Betrachtung von vielen diskreten Partikeln. Im Bereich der numerischen Modellierung diskreter Teilchen gibt es konzeptionell unterschiedliche Ansätze. Man hat versucht, granulare Materialien mit *stochastischen Simulationsverfahren* wie Zellularautomaten [BJW94, PH94, AH96], Boltzmann-Gittergasen [Puh93, FH93] und Monte-Carlo Methoden [RSP⁺87, DL95] zu modellieren. Das Hauptproblem dabei ist die unklare Bedeutung der Zeit und der Materialparameter im Modell. Dennoch konnten interessante qualitative Erkenntnisse über die dem Rohrfluß und der Entmischung zugrundeliegenden Prozesse gewonnen werden.

Deterministische Simulationsmethoden, die einzelne Teilchen explizit verfolgen, lassen sich in drei Hauptgruppen unterteilen. Die erste Methode baut auf der klassischen Molekulardynamik (MD) auf. Die Bewegungsgleichungen werden mit phänomenologischen Wechselwirkungsgesetzen für Normal- und Tangentialkomponenten numerisch gelöst, so daß man die Trajektorien aller Teilchen erhält. Die zweite Methode, die Ereignis-Dynamik (ED), nimmt nicht-verformbare Teilchen an und verfolgt dann jedes Teilchen von Stoß zu Stoß. Der wesentliche Unterschied der beiden Methoden ist die Dauer eines Stoßes: Bei MD ist die Stoßdauer endlich und von den Materialparametern abhängig, während bei ED die Kontaktdauer, wegen der Nicht-Verformbarkeit der Teilchen, verschwindet. Der eigentliche Anwendungsbereich von MD sind Systeme hoher Dichte, während ED bei niedriger Dichte zu bevorzugen ist. Vergleiche der MD und ED Methoden führten zur Erkenntnis, daß beide Methoden im Bereich niedriger Dichte äquivalent sind [LCB⁺94c, LHB94], während sich bei hoher Dichte deutliche Abweichungen ergeben [LCB⁺94a, LCB⁺94b, SDW96]. Die dritte Methode, die neben den Teilchen auch deren Kontakte explizit behandelt, wird dementsprechend als Kontakt-Dynamik (CD) bezeichnet. Vergleiche von MD und CD wurden an einfachen Modellsystemen vorgenommen [RSDW96] und ergaben im quasi-stationären Bereich gute Übereinstimmung. Für den quasi-statischen Grenzfall können auch außerdem schnellere implizite Lösungsverfahren benutzt werden, mit denen das Gleichungssystem gelöst wird, das man durch die Forderung nach verschwindenden Zeitableitungen erhält [BG91, GDZ95, vB96].

Mit MD wurde der Fluß in zweidimensionalen Trichtern [RH94] und Rohren

[PG96], Konvektion in vibrierten Behältern [Tag92, GHS92, LCB⁺94b, GZBN97], Deformation unter Scherung [CB85, TG91, TH95a], Lawinenströmung entlang granularer Haufen [Cam90, LH93, HKPS95], Entmischung [HW86, RSP⁺87, GHPo96, Ris96] und Teilchentransport auf schrägen Oberflächen [GHo92b, DBW96] erforscht. Weiter wurden mit MD quasi-statische Modell-Sandhaufen [LL94, Lud97a, LM97, ML97a], Kompressionsversuche [GS94, vB96, Sch97] und Scherzellen [CW67, Sav84, vB96, Sch97] untersucht. Ein quantitativer Vergleich mit Experimenten ist nicht immer möglich, was auf unzureichende Rechenleistung, mangelhafte Wechselwirkungsmodelle, aber auch auf das Fehlen von präzisen Meßdaten zurückzuführen sein kann.

Alternativ zu MD wurde die ED Methode für Systeme ohne Gravitation mit periodischen Rändern verwendet [GZ93, GTZ93, MY94, MY96, McN96, MB97, TH95b, MML97]. Die Methode wurde für dissipative Systeme im Gravitationsfeld erweitert [LHB94] und erfolgreich zur Untersuchung des Skalierungsverhaltens der Energie in vibrierten granularen Systemen [LCB⁺94c, LHB94, Lud95] und von Oberflächenwellen [LCRD96] verwendet. Weiter wurden bei der Modellierung des Fließens in Rohren [DML⁺96] dynamische Bogenbildung und Spinselbstordnung entdeckt [LDCR96c]. Die ED Methode wurde auch zur Simulation von Ausschnitten planetarer Ringe verwendet [SHB95, SSK97].

Erweiterungen der oben genannten Methoden berücksichtigen nicht nur Dissipationsmechanismen an der Oberfläche, sondern lassen auch die Anregung korninterner Freiheitsgrade zu [GZ96]. Kombinationen verschiedener Verfahren, die bisher vor allem bei der Simulation von Gas- oder Flüssigkeitsströmungen Anwendung fanden, sind die Direkte Monte-Carlo Methode (DSMC) [Bir94, AGA95a, MLH97] oder die Methode verschmierter Teilchen „Smooth Particle Hydrodynamics“ (SPH) [HK92, Mon92, HPH⁺94, PHK95, HK95b].

1.3 Granulare Medien in den Ingenieurwissenschaften

Die Bodenmechanik und die Geowissenschaften behandeln die vielfältigen Erscheinungsformen kohäsiver Materialien, zu denen neben feinem Sand auch Ton gehört. Erz, Zement und Granulat wiederum sind nur wenige Beispiele für Materialien, mit denen sich die mechanische Verfahrenstechnik beschäftigt, um zu erforschen, wie der beträchtliche Aufwand bei Zerkleinerung, Mischung und Transport vermindert werden kann. Dazu kommen die Astrowissenschaften, die sich mit interstellaren Staubwolken, Planetenringen oder Asteroidengürteln befassen.

Die Notwendigkeit, das Verhalten granularer Materie quantitativ zu beschreiben, hat zu einer gut entwickelten Theorie dieses Aggregatzustandes geführt [Ter43, Sch68, Ned92], die auf die empirische Plastizitätstheorie mit diversen Erweiterungen der Theorien von Jenike und Drucker-Prager aufbaut. Man benutzt vor allem kontinuumsmechanische Ansätze unter der Grundannahme einer homogenisierten Mikrostruktur, womit viele der Fragestellungen aus der Bodenmechanik und der Siloauslegung adäquat zu beantworten sind. Sobald die Mikrostruktur des Materials wichtig wird, sind zusätzliche Annahmen notwendig.

Die Erforschung von Schüttgütern ist traditionell durch ingenieurwissenschaftliche Arbeiten dominiert, die sich z.B. mit der Auslegung und dem Betrieb von Silos befassen [Bug84, SW87, FB90, TG93, Gud96c]. Ein weiterer stark vertretener Bereich ist die Bodenmechanik [Gud96a, Gud96b, DE96, Ehl96, Ver90, SV96], in der

vor allem Kontinuumstheorien zur Beschreibung des granularen Bodens Verwendung finden, während sich bei stärkerer Kohäsion hypoplastische Modelle [Kol91, Gud96b] und zur Berücksichtigung der Rotation der Körner auch Cosserat-Ansätze [TG93, DE96] eignen. In diesem Bereich gibt es einen geschlossenen theoretischen Formalismus, der mit konstitutiven Gesetzen arbeitet, die jedoch Parameter enthalten, die nicht immer einfach abzuleiten sind. Diese Theorien werden von der numerischen „Finite-Elemente-Methode“ (FEM) hervorragend ergänzt. Zur Untersuchung des Verhaltens granularer Medien werden außerdem „Finite Differenzen Methoden“ sowie Labor- und Feldversuche durchgeführt [HS83, HSY86, SH89, GH93, KGH94, HR94, HKPS95, HSR96]. Die windgetriebene Entstehung und Dynamik von Dünen, in all ihren Erscheinungsformen und Größen, sind ebenso Gegenstand aktueller Forschung [Bes83, Bes86, Bes87, PT90, BP93, NO93, Bes95] wie planetare Ringe, granulare Systeme auf einer ganz anderen Größenskala und mit anderen Randbedingungen [BGT85, Wie87, WD88, SHB95, SSK97].

Offene Fragestellungen, die die Forschung auf dem Gebiet granularer Materialien nötig machen, sind z.B. das Versagen von Silos, Lawinen oder Entmischung. Siloversagen ist ein Beispiel für gefährliche Konsequenzen seltener, aber extrem starker Spannungsfluktuationen. Lawinen sind intermittente Phänomene, die unkontrolliert zu großen Schäden führen können und manchmal mit Entmischung verbunden sind, einer Instabilität des granularen Materials.

2 Überblick

Kohäsionslose granulare Medien können auf verschiedene Arten betrachtet werden. Eine Möglichkeit ist, bei dünnen Systemen zu beginnen und sich zu immer größeren Dichten vorzuarbeiten. Da in dieser Arbeit vor allem Vielteilchen-Systeme mit paarweise interagierenden diskreten Einzelkomponenten betrachtet werden, wird zunächst in Teil II die Theorie der Zwei-Körper-Wechselwirkung ausgeführt. Die klassische Stoßmechanik wird auf granulare Partikeln zugeschnitten und um Dissipation und Reibung erweitert. Danach werden Vielteilchen-Effekte anhand von Modellsystemen sowie der Übergang von Dynamik zu Statik bzw. von niedriger zu hoher Dichte diskutiert. Da in dünnen Systemen mit ballistischer Bewegung und kurzen Zwei-Teilchen-Stößen die Teilchengröße, -form und -oberfläche weniger wichtig ist als in dichten Systemen, wird zur Beschreibung granularer Medien vor allem das deterministische Ereignis-Dynamik Modell verwendet.

Experimente, theoretische Ansätze und numerische Simulationen verschiedener granularer Systeme werden im folgenden jeweils zusammen beschrieben. In Teil III werden granulare Systeme in einem vibrierten Behälter untersucht, wobei zwischen verdünnten gasähnlichen und dichteren flüssigkeitsähnlichen Systemen unterschieden wird. Man findet in dünnen, homogenen Systemen interessantes Skalierungsverhalten und bei höherer Dichte kollektive Phänomene wie Konvektion und Entmischung. Die Theorie kann das Skalierungsverhalten, das sowohl im Experiment als auch in der Simulation gefunden wird, nicht erklären. Es stellt sich heraus, daß die Randbedingungen das Verhalten des granularen Mediums im verdünnten Bereich stark beeinflussen. Im dichten Bereich zeichnet die Reibung mit den Wänden verantwortlich für die Konvektion, ist aber weniger bedeutend für die Entmischung. Die Unterschiede zwischen granularen Systemen und klassischen, elastischen Vielteilchen-Systemen ohne Dissipation und die jeweiligen Geschwindigkeitsverteilungen werden diskutiert.

Zwischen dünnen, dynamischen Systemen und dichten, statischen Systemen gibt es zahlreiche intermittente Zustände, in denen sich Bewegung und Stagnation abwechseln können. Beispiele für derartiges intermittentes Verhalten sind Haufenbildung mit Lawinen entlang freier Oberflächen und Strömungsblockaden in Silos und Rohren. Durch Dissipation können dynamische Systeme in einen statischen Zustand gelangen, und diesen, ausreichende Energiezufuhr vorausgesetzt, wieder verlassen. Die zwei konkurrierenden Effekte Energieverlust und Energiezufuhr führen auch zu Instabilitäten, d.h. bei periodischen Anregungen zu Konvektion, Teilchentrennung und Oberflächenwellen. Wie und warum Strömungsblockaden beim Übergang von Statik zu Dynamik entstehen, wird in Teil IV am Beispiel der Bewegung granularer Materialien in Rohren erläutert. Man findet Strömungsblockaden durch dynamische Bogenbildung und Selbstorganisation der Drehrichtung kugelförmiger Teilchen. Sobald das System den homogenen Zustand verläßt, ändert sich die Stoßstatistik, und das granulare Medium versucht, den durch Reibung verursachten Energieverlust zu minimieren.

Die reichhaltige Phänomenologie granularer Medien machte bisher eine geschlossene Beschreibung unmöglich. Einfache Ansätze, Modelle und Theorien sind in der

Regel nur in beschränkten Parameterbereichen gültig und nur selten problemlos erweiterbar. Bei der Entwicklung von Theorien und Modellen müssen vereinfachende Annahmen gemacht werden, und man ist oft auf numerische Verfahren angewiesen, um zu Resultaten zu gelangen. Um Realitätsnähe zu gewährleisten, müssen Simulationsergebnisse mit Experimenten verglichen werden. Wie gut Experimente, Simulationen und theoretische Ansätze miteinander übereinstimmen können, wird in Teil V gezeigt. Die Entstehung und Dynamik periodischer Strukturen mit geschlossenen Randbedingungen und periodischer Anregung kann quantitativ mit Experimenten verglichen werden, und die numerische Simulation erlaubt die Bestimmung der Korrelationsfunktionen und der Dispersionsrelation. In einem periodischen System ohne Wände wird die dissipationsinduzierte Dichtestabilität mit Clusterbildung numerisch untersucht. Der Übergang von homogener Dichte zu inhomogenen Clustern wird durch die Clusteranzahl und -größe beschrieben und zeichnet sich ebenso durch eine Änderung der Stoßstatistik aus, wie die Inhomogenitäten beim Rohrfluß.

Was granulare Medien von einem Festkörper unterscheidet und welche Effekte durch die granulare Natur und das Kontaktnetzwerk verursacht werden, wird in Teil VI für Sandhaufen untersucht. Für den Grenzfall langsamer Schüttung wird aus einem Gittermodell die Kontinuumsgleichung abgeleitet und bei Verwendung verschiedener Teilchensorten wird Entmischung in Form von Streifen (Stratifikation) gefunden. Bei der Simulation ganzer Sandhaufen stellt man fest, daß viele Eigenschaften und Phänomene in granularen Medien mit dem Kontaktnetzwerk zusammenhängen. Die Fluktuationen der Kontaktkräfte und die Verteilungsfunktionen gehorchen Gesetzen, die kaum von der Kornform oder vom Wechselwirkungspotential abhängen.

Schließlich werden die numerischen und algorithmischen Aspekte der verwendeten Simulationsmethoden in Teil VII diskutiert. Neben der hauptsächlich verwendeten Ereignis-Dynamik (ED) und der ebenso deterministischen Molekulardynamik (MD) werden auch die stochastischen Monte-Carlo (MC) und DSMC („Direct Simulation Monte Carlo“) Verfahren vorgestellt.

Teil II

Theorie der Wechselwirkung

Da granulare Medien aus einzelnen Teilchen bestehen, wird besonders auf die Theorie der Teilchen-Teilchen Wechselwirkung wertgelegt. Die klassische Stoßtheorie wird um Energieverlust und Reibung erweitert, und schließlich werden Vielteilchen-Effekte diskutiert.

3 Die Physik des Zwei-Teilchen-Kontaktes

Für die Beschreibung granularer Medien gibt es zwei mögliche Vorgehensweisen. Eine besteht darin, von einer homogenisierten Grundstruktur auszugehen, und das makroskopische Verhalten durch konstitutive Gesetze einzubringen. Die andere Möglichkeit ist die separate Behandlung einzelner Teilchen. Dazu benötigt man eine detaillierte Kenntnis der zugrundeliegenden Gesetze der klassischen Mechanik, die die Dynamik der Teilchenkontakte bestimmen.

In diesem Kapitel wird zuerst der Zwei-Teilchen-Stoß im Fall kugelförmiger Teilchen diskutiert. Danach werden Phänomene beschrieben, die bei Vielteilchen-Kontakten auftreten können. Der Zwei-Teilchen-Stoß ist trotz zahlreicher Experimente, die sich stets auf bestimmte Materialien und Randbedingungen beschränken, noch immer unzureichend mikroskopisch erforscht [Ray06, Ram18, Bri45, Gol64, Ree85, SCB90, DYR94, FLCA94]. Bei der Modellierung des einfachen Zwei-Teilchen-Stoßes führen verschiedene Ansätze zum gleichen Ergebnis, erzeugen aber bei Vielteilchen-Stößen ein unterschiedliches Verhalten des Systems.

3.1 Einführung der Materialparameter

Die theoretische Beschreibung der Kollision zweier Teilchen geht auf die Arbeiten von Mindlin und Deresiewicz, sowie Maw, Barber und Fawcett [Min49, MD53, MBF76, MBF81] und auf ein vereinfachtes Modell von Walton et al. [WB86] zurück. Erst kürzlich wurde von Foerster et al. experimentell nachgewiesen, daß Zwei-Teilchen-Stöße durch solche vereinfachten Modelle hinreichend genau beschrieben werden können [FLCA94]. Vergleiche von Experimenten mit Simulationen, die dieses Modell verwen-

den, sind jedoch noch relativ selten [WB86, Lud95, DML⁺96, LDM⁺96, LDCR96c, LDCR96a, LCRD96].

Mit gegebenen Geschwindigkeiten bei Kontaktbeginn (und damit Wechselwirkungsbeginn) genügen zur Erklärung der experimentellen Daten die drei Parameter ϵ , μ und β_0 , deren Bedeutung im folgenden genauer ausgeführt wird.

3.1.1 Der Restitutionskoeffizient in Normalrichtung

In Normalrichtung \hat{n} , also parallel zur Verbindungslinie der Zentren zweier kugelförmiger Teilchen, beschreibt der Restitutionskoeffizient ϵ (auch Stoßzahl genannt) den Verlust des Relativimpulses im Massenschwerpunktsystem:

$$\epsilon = -\frac{m_1 u_1^{(n)} - m_2 u_2^{(n)}}{m_1 v_1^{(n)} - m_2 v_2^{(n)}} = -\frac{u_1^{(n)} - u_2^{(n)}}{v_1^{(n)} - v_2^{(n)}}. \quad (1)$$

Die Teilchen $i = 1, 2$ haben die Massen m_i und im Massenschwerpunktsystem parallel zum Verbindungsvektor ihrer Zentren die Geschwindigkeiten $v_i^{(n)}$ vor bzw. $u_i^{(n)}$ nach dem Stoß. Der Bereich der möglichen Restitutionskoeffizienten ist $0 \leq \epsilon \leq 1$. Der Grenzfall $\epsilon = 1$ entspricht einem elastischen, der Grenzfall $\epsilon = 0$ einem vollständig inelastischen Stoß. Da der Gesamtimpuls relativ zum Massenschwerpunkt verschwindet, d.h. $|m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2| = |m_1 \vec{u}_1 + m_2 \vec{u}_2| = 0$ ist, geht durch den Verlust des Relativimpulses zwar Energie verloren, der Gesamtimpuls aber bleibt erhalten.

Betrachtet man den Stoß eines Balls mit dem Boden im Gravitationsfeld mit Gravitationsbeschleunigung g , so erhält man aus der Fallhöhe h_i und der Rückprallhöhe h_f jeweils die Stoßgeschwindigkeit $v = \sqrt{2gh_i}$ und die Rückprallgeschwindigkeit $u = -\sqrt{2gh_f}$. Der Massenschwerpunkt wird mit dem Boden identifiziert, so daß der Restitutionskoeffizient nach Gleichung 1 als das negative Verhältnis von Rückprall- und Stoßgeschwindigkeit definiert ist:

$$\epsilon = -\frac{u}{v} = \sqrt{\frac{h_f}{h_i}}. \quad (2)$$

Dabei ist zu beachten, daß der Restitutionskoeffizient nicht nur vom Material, sondern u.a. von der Geschwindigkeit abhängt [Gol64, WB86, LCB⁺94a, SDW96, BSHP96].

Betrachtet man nun ein Teilchen, das auf eine ebene Platte prallt und solange springt bis all seine kinetische Energie verbraucht ist, so ergibt sich das in Abb. 2 dargestellte Bild. Die Rückprallgeschwindigkeit nach dem n -ten Stoß ist $u_n = -\epsilon v_n$, so daß sich die Stoßgeschwindigkeit vor dem $n + 1$ -ten Stoß ergibt als

$$v_{n+1} = \epsilon v_n = \epsilon^{n+1} v_0. \quad (3)$$

v_n ist die Aufprallgeschwindigkeit vor dem Stoß n . Verwendet man z.B. $\epsilon = 0.6$, so ist nach 80 Stößen $v_{80} \approx 1.8 \times 10^{-18} v_0$.

Die Zeit zwischen den Stößen n und $n + 1$ ist $t_{n+1} = 2v_{n+1}/g$, so daß man durch Addition aller Zeiten zwischen den Stößen eine geometrische Reihe erhält, die die Zeit bis zum Liegenbleiben ergibt:

$$t_b = \sum_{n=0}^{\infty} t_{n+1} = \frac{2v_0 \epsilon}{g(1 - \epsilon)}. \quad (4)$$

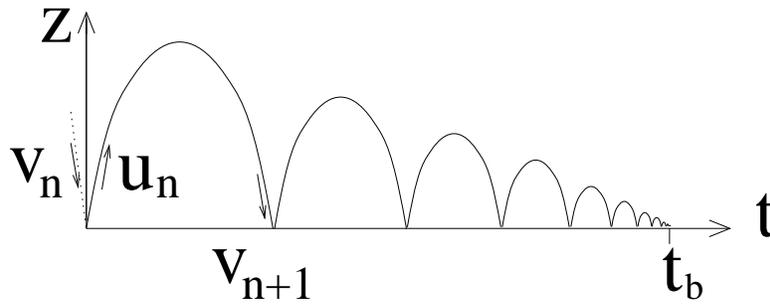


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Flugbahn eines springenden Teilchens auf einer Ebene. Bei jedem Stoß geht ein Teil der Energie verloren bis das Teilchen zur Zeit t_b liegen bleibt.

Mit $v_0 = 6.3\text{m/s}$ und $\epsilon = 0.9$ ergibt sich $t_b \approx 11.6\text{s}$.

Bisher wurde impliziert, daß ein Stoß instantan erfolgt. Für eine Aluminiumkugel mit Durchmesser $d = 1\text{mm}$ ergibt sich jedoch eine Kontaktdauer $t_c \approx 1\mu\text{s}$ [LCB⁺94a], so daß man bei zu kleinen Zeiten zwischen den Stößen $t_{n+1} \leq t_c$ nicht mehr von Einzelstößen sprechen kann; das Teilchen liegt bereits nach $n_{\text{max}} = \log[gt_c/(2v_1)]/\log \epsilon$ Stößen auf dem Boden [Lud97b]. Eine ausführliche Diskussion der Konsequenzen dieser Tatsache ist in Kapitel 5 zu finden.

Bewegt man die Bodenplatte sinusförmig auf und ab, so führt man dadurch dem System Energie zu, was bereits für ein perfekt inelastisches Teilchen mit Restitutionskoeffizient $\epsilon \approx 1$ ein breites Spektrum an interessanten Effekten ergibt: Man kann Bifurkationen, Periodenverdopplung und Chaos schon an einem solch einfachen „granularen“ System eines einzelnen Teilchens demonstrieren [Pie83, LM93].

3.1.2 Der Coulomb-Reibungskoeffizient

In Tangentialrichtung gibt der Reibungskoeffizient μ das Verhältnis von Tangential- und Normalkräften an. Man verwendet hier üblicherweise das Coulombsche Reibungsgesetz [Cou81]. In Abb. 3 sind die Gewichtskraft f_N , die Reibungskraft f_R und die Zugkraft f , die an einem auf einer Ebene liegenden Quader wirken, schematisch dargestellt.

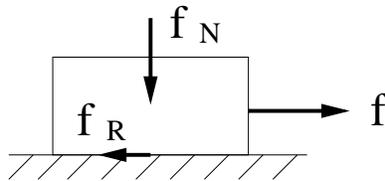


Abbildung 3: Darstellung der Kräfte, die an einem Block auf einer schiefen Ebene wirken.

Generell unterscheidet man zwischen Haftreibung $f_R^{\text{Haft}} \leq \mu_0 f_N$, Gleitreibung $f_R^{\text{Gleit}} = \mu f_N$ und Rollreibung $f_R^{\text{Roll}} \leq \mu_r f_N$, wobei in allen Fällen die Reibung unabhängig von der Berührungsfläche angenommen wird. In der Regel ist $\mu_0 > \mu \gg \mu_r$, so daß man in vielen Fällen die Haft- und Gleitreibungskoeffizienten gleichsetzt

($\mu_0 = \mu$) und den Rollreibungskoeffizienten vernachlässigt ($\mu_r = 0$). Man beachte dabei, daß das Coulombsche Gesetz nur eine gute Näherung an die Wirklichkeit ist, keineswegs jedoch für alle Situationen richtig sein kann. Als eine Übersicht zu den offenen Fragestellungen zur Reibung sei hier ein Konferenzband aus dem Jahre 1997 empfohlen [WG97].

3.1.3 Der Tangential-Restitutionskoeffizient

Analog zum Normal-Restitutionskoeffizienten läßt sich die Tangential-Restitution β definieren, die aber, wie später gezeigt wird, keine Konstante ist und anders als ϵ auch negative Werte annehmen kann. Der Tangential-Restitutionskoeffizient β_0 begrenzt die Reibungskräfte und damit die Tangentialgeschwindigkeit der Kontaktpunkte nach dem Stoß.

Da die Reibung entgegen der Tangentialgeschwindigkeit wirkt und Energie dissipiert, muß die aus der Tangentialgeschwindigkeit resultierende Energie nach dem Stoß kleiner sein als vor dem Stoß (siehe auch Anhang E). Um dies in allen Sonderfällen zu gewährleisten, müssen die bei beinahe zentralen Stößen entstehenden sehr starken Tangentialkräfte begrenzt werden. Physikalisch bedeutet das, daß die Coulombsche Reibung nur für gleitende Kontakte gilt, während der Tangential-Restitutionskoeffizient für haftende Kontakte Anwendung findet. Haftend bedeutet, daß sich die Kontaktstellen kaum gegeneinander bewegen. Interessanterweise kann die Tangentialgeschwindigkeit der Kontaktpunkte nicht nur verschwinden, sondern sich, wie experimentell bewiesen [FLCA94], durch elastische Effekte umkehren.

Das im folgenden genauer beschriebene Modell, das die drei Parameter ϵ , μ und β_0 verwendet, bedingt, daß gleitende und haftende Kontakte nicht gleichzeitig vorkommen. Diese Annahme ist zwar nicht immer richtig, aber für die meisten gemessenen Materialien und Stoßparameter eine sehr gute Näherung [FLCA94].

3.2 Die Impulserhaltungsgleichungen

Man betrachte zwei Teilchen mit den Durchmessern d_i , den Geschwindigkeiten im Laborsystem $\vec{v}_i^L = \vec{v}_{cm} + \vec{v}_i$, sowie den Massen m_i ($i = 1, 2$) im Massenschwerpunktsystem mit der Geschwindigkeit

$$\vec{v}_{cm} = (m_1 \vec{v}_1^L + m_2 \vec{v}_2^L) / (m_1 + m_2). \quad (5)$$

Der Einheitsvektor in Normalrichtung ist, wie in Abb. 4 dargestellt,

$$\hat{n} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (6)$$

wobei \vec{r}_i die Position des Zentrums des Teilchens i ist. Die Relativgeschwindigkeit der Kontaktpunkte ist vor dem Stoß

$$\vec{v}_c = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 - \left(\frac{d_1}{2} \vec{\omega}_1 + \frac{d_2}{2} \vec{\omega}_2 \right) \times \hat{n}, \quad (7)$$

wobei \vec{v}_i und $\vec{\omega}_i$ die lineare und die Winkelgeschwindigkeit von Teilchen i sind.

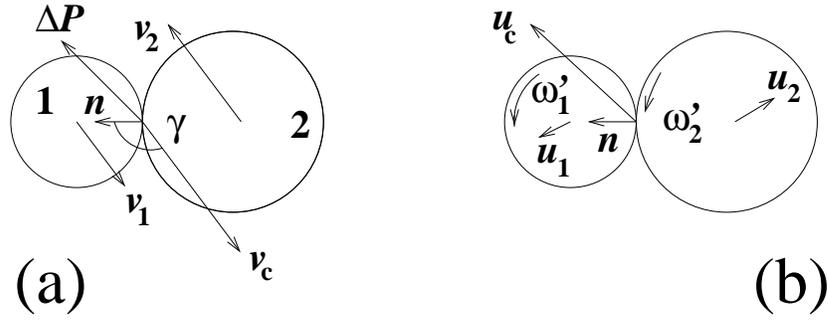


Abbildung 4: Darstellung der Geschwindigkeiten zweier Teilchen vor (a) und nach (b) einem Stoß.

Man beachte, daß die beiden Geschwindigkeiten \vec{v}_1 und \vec{v}_2 im Schwerpunktsystem parallel sind. Dies läßt sich leicht zeigen, indem man das Kreuzprodukt $\vec{v}_1 \times \vec{v}_2$ berechnet. Hier sei außerdem bemerkt, daß die Änderung des Drehimpulses für beide Stoßpartner in die selbe Richtung erfolgt. \vec{v}_c hat die Normalkomponente $\vec{v}_c^{(n)} = \hat{n}(\vec{v}_c \cdot \hat{n})$ und die Tangentialkomponente $\vec{v}_c^{(t)} = \vec{v}_c - \vec{v}_c^{(n)}$. Der Vektor $\vec{v}_c^{(t)}$ definiert damit den Einheitsvektor in Tangentialrichtung $\hat{t} = \vec{v}_c^{(t)} / |\vec{v}_c^{(t)}|$. Der Stoßwinkel γ ist als der Winkel zwischen \hat{n} und \vec{v}_c definiert, und er kann damit nur Werte im Bereich $\pi/2 < \gamma \leq \pi$ annehmen.

Die Erhaltungsgleichungen werden nun mit der Impulsänderung $\Delta\vec{p}$ des ersten Teilchens $i = 1$ ausgedrückt. Kennt man die Kraft $\vec{f}(t)$ als Funktion der Zeit t , so ergibt sich die Impulsänderung in einem infinitesimal kleinen Zeitschritt dt aus dem Kraftstoß $d\vec{p} = \vec{f}(t)dt$. Für verschwindende Kontaktdauer $t_c \rightarrow 0$ oder für konstante Kräfte $\vec{f}(t) = \text{const.}$ ist die Schreibweise mit Impulsänderungen $\Delta\vec{p}$ äquivalent zur Schreibweise mit Kräften $\vec{f}(t)dt$. Der Austausch der beiden Symbole führt zu äquivalenten Gleichungen.

Die Impulserhaltung erfordert die gleiche Impulsänderung für beide Teilchen

$$\Delta\vec{p} = m_1(\vec{u}_1 - \vec{v}_1) = -m_2(\vec{u}_2 - \vec{v}_2), \quad (8)$$

wobei \vec{u}_i die noch unbekannte Geschwindigkeit von Teilchen i nach dem Stoß ist. Die Normalkomponente der Impulsänderung $\Delta\vec{p}^{(n)}$ beeinflusst die Winkelgeschwindigkeiten nicht. Die Tangentialkomponente $\Delta\vec{p}^{(t)}$ führt zu einer Änderung der Winkelgeschwindigkeit, sobald die Oberflächen nicht ideal glatt sind. Da $\Delta\vec{p}^{(t)}$ am Kontaktpunkt wirkt, ergibt sich die Drehimpulsänderung als Vektorprodukt des Kraftarms $-(d_1/2)\hat{n}$ und der Impulsänderung $\Delta\vec{p}$:

$$-\hat{n} \times \Delta\vec{p} = \frac{2I_i}{d_i}(\vec{\omega}'_i - \vec{\omega}_i). \quad (9)$$

In Gleichung 9 ist I_i das Trägheitsmoment des Teilchens bei Rotation um den Massenschwerpunkt, und $\vec{\omega}'_i$ ist die unbekannte Winkelgeschwindigkeit nach dem Stoß.

Mit gegebenem $\Delta\vec{p}$ kann man aus den Gleichungen 8 und 9 alle Geschwindigkeiten nach dem Stoß berechnen, d.h.

$$\vec{u}_1 = \vec{v}_1 + \Delta\vec{p}/m_1, \quad (10)$$

$$\vec{\omega}'_1 = \vec{\omega}_1 - \frac{d_1}{(2I_1)} \hat{n} \times \Delta \vec{p}, \quad (11)$$

$$\vec{u}_2 = \vec{v}_2 - \Delta \vec{p}/m_2, \text{ und} \quad (12)$$

$$\vec{\omega}'_2 = \vec{\omega}_2 - \frac{d_2}{(2I_2)} \hat{n} \times \Delta \vec{p}. \quad (13)$$

Man beachte, daß sich aus Gleichung 9 für beide Teilchen eine Änderung der Winkelgeschwindigkeiten in die gleiche Richtung ergibt, d.h. beim Stoß rauher Teilchen ändert sich die Komponente des Drehimpulses, die von der Rotation der beiden Teilchen herrührt. Es muß sich also auch die Komponente ändern, die von der Nicht-Zentralität des Stoßes stammt. Mit anderen Worten: bei inelastischen Stößen rauher Teilchen kann sich der Stoßparameter

$$\vec{b} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \frac{\vec{v}_1 - \vec{v}_2}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|} \quad (14)$$

beim Stoß ändern. Im vereinfachten Fall gleich großer und gleichschwerer Teilchen ist der Kontaktpunkt mit dem Massenschwerpunkt identisch, was mit dem Beitrag des Bahndrehimpulses den Gesamtdrehimpuls

$$\vec{L}_{ges} = I(\vec{\omega}_1 + \vec{\omega}_2) + \frac{1}{2} m \vec{b} |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = m q (d/2)^2 (\vec{\omega}_1 + \vec{\omega}_2) + \frac{1}{2} m (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \quad (15)$$

ergibt, wobei $d = d_1 = d_2$, $m = m_1 = m_2$ und $I = qm(d/2)^2$ verwendet wurde.

3.3 Berechnung der Impulsänderung

Mit den Gleichungen 10-13 verbleibt die Berechnung der Impulsänderung beim Stoß. Da die Normal- und die Tangentialkomponenten bei kugelförmigen Teilchen entkoppeln, berechnet man zuerst die Normalkomponente $\Delta \vec{p}^{(n)}$ mit Hilfe der Definition des Restitutionskoeffizienten in Gleichung 1. Setzt man die Gleichungen 10 und 12 in die Normalkomponente der Differenz der Geschwindigkeitsänderungen $\Delta \vec{p}/m_1 + \Delta \vec{p}/m_2$ ein, ergibt sich

$$\Delta \vec{p}^{(n)} = -m_{12}(1 + \epsilon) \vec{v}_c^{(n)}, \quad (16)$$

wobei $m_{12} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ die reduzierte Masse ist.

3.3.1 Coulombsche Reibung und Tangentialelastizität

Coulombs Gesetz beschreibt das Verhältnis von Normal- und Tangentialkräften, was man auch als Verhältnis der Impulsänderung in Normal- und Tangentialrichtung interpretieren kann: $|\Delta \vec{p}^{(t)}| \leq \mu |\Delta \vec{p}^{(n)}|$, wobei der Reibungskoeffizient positiv ist $\mu \geq 0$. Da die Reibung entgegen der Relativgeschwindigkeit $\vec{v}_c^{(t)}$ wirkt, muß $\Delta \vec{p}^{(t)}$ parallel zu $-\hat{t}$ sein, was zu einer Ungleichung für die Tangentialkomponente der Impulsänderung führt:

$$\Delta \vec{p}^{(t)} \leq \mu m_{12} (1 + \epsilon) v_c \cos \gamma \hat{t}. \quad (17)$$

In Gleichung 17 ist der Betrag der Normalgeschwindigkeit $v_c^{(n)} = |\vec{v}_c^{(n)}| = -v_c \cos \gamma$, da $\cos \gamma \leq 0$ für alle möglichen γ ist. Zusammen mit dem Einheitsvektor in Tangentialrichtung $\hat{t} = \vec{v}_c^{(t)} / (v_c \sin \gamma)$ ergibt Gleichung 17 die Änderung der Tangentialkomponente des Impulses:

$$\Delta \vec{p}^{(t)} = m_{12} \mu (1 + \epsilon) \cot \gamma \vec{v}_c^{(t)}. \quad (18)$$

An der Grenze des Wertebereichs $\gamma \rightarrow \pi$ ergibt sich $\cot \gamma \rightarrow -\infty$, wobei $\gamma = \pi$ einen zentralen Stoß identifiziert. In diesem Fall kleiner Tangentialgeschwindigkeiten kann $\Delta \vec{p}^{(t)}$ in Gleichung 18 sehr groß werden, so daß sich riesige Geschwindigkeiten $|\vec{u}^{(t)}|$ ergeben könnten, würde man einfach Gleichung 18 in die Gleichungen 10-13 einsetzen. Dies würde zu einem Energiegewinn führen (siehe Anhang E) und ist deshalb zu verhindern. Coulombs Gesetz, mit der Tangentialrestitution β_1 , die in Anhang A berechnet wird, darf also nur bei hinreichend kleinen Stoßwinkeln oder großen Tangentialgeschwindigkeiten angewandt werden. Physikalisch gesehen führt eine zu starke Kraft zu einer Änderung des Kontaktverhaltens: Ein gleitender Kontakt wird zu einem haftenden Kontakt. Um diesen Sonderfall zu behandeln, schlugen Walton und Braun [WB86] vor, einen Tangential-Restitutionskoeffizienten einzuführen, der die maximale Tangentialgeschwindigkeit nach dem Stoß begrenzt. Dieser Tangential-Restitutionskoeffizient muß im Bereich $-1 \leq \beta_0 \leq 1$ liegen und wird für große γ oder analog kleine Tangentialgeschwindigkeiten aktiv.

Formt man die Gleichungen 16 und 18 so um, daß die Koeffizienten ϵ und β in analoger Weise vorkommen, so erhält man schließlich die Impulsänderung

$$\Delta \vec{p} = -m_{12}(1 + \epsilon)\vec{v}_c^{(n)} - m_{12} \left(\frac{q}{1 + q} \right) (1 + \beta)\vec{v}_c^{(t)}. \quad (19)$$

Der Faktor $q/(1 + q)$ kommt daher, daß eine Änderung der linearen Tangentialgeschwindigkeit bei rauhen Oberflächen mit einer Änderung der Winkelgeschwindigkeit verknüpft ist. In Gleichung 19 hat man die Tangential-Restitution $\beta = \min[\beta_0, \beta_1]$, was bei großen Stoßwinkeln $\beta = \beta_0$ und bei kleinen Stoßwinkeln zu $\beta = \beta_1 = -1 - \frac{1+q}{q}\mu(1 + \epsilon)\cot \gamma$ ergibt. Letztere Beziehung in Gleichung 19 eingesetzt, führt wieder zu Gleichung 18. Die Tangential-Restitution β ist das Äquivalent zu ϵ und wird in Appendix A genauer diskutiert und hergeleitet. In Abb. 5(a) sind β , β_0 und β_1 schematisch als Funktion von γ dargestellt.

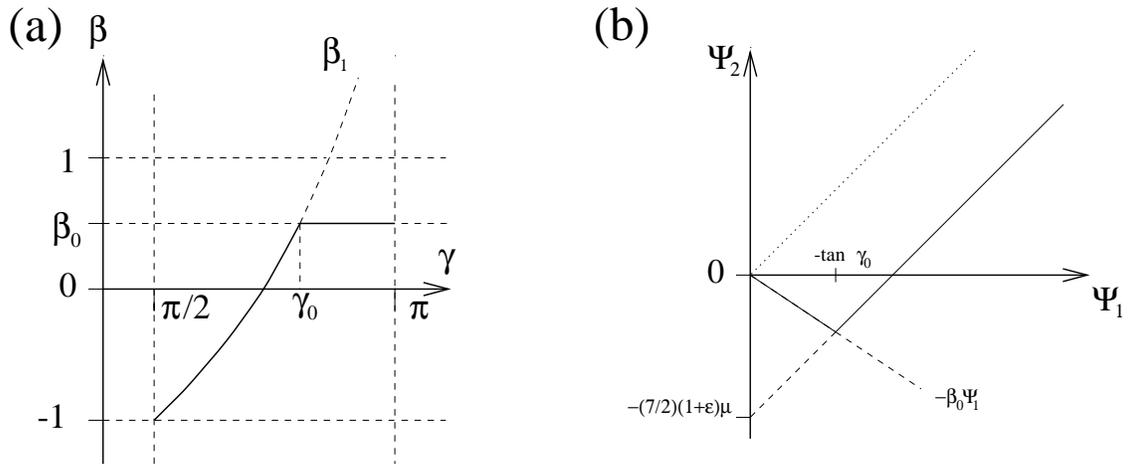


Abbildung 5: (a) Die Tangential-Restitution β als Funktion des Stoßwinkels γ . (b) $\Psi_2 = u_c^{(t)}/v_c^{(n)}$ als Funktion von $\Psi_1 = v_c^{(t)}/v_c^{(n)}$.

3.3.2 Klassifizierung von Stößen

Um Stöße quantitativ klassifizieren zu können, haben verschiedene Autoren [FLCA94, Lud95, SDW96] das von Mindlin und Deresiewicz [Min49, MD53] und Maw, Barber und Fawcett [MBF76, MBF81] eingeführte Verhältnis von Tangential- und Normalgeschwindigkeit vor dem Stoß $\Psi_1 = v_c^{(t)}/v_c^{(n)} = -\tan\gamma$ und nach dem Stoß $\Psi_2 = u_c^{(t)}/v_c^{(n)} = \epsilon \tan\gamma'$, verwendet, wobei γ' der Winkel zwischen \vec{u}_c und \hat{n} ist. Mit Gleichung 19 ist

$$\Psi_2 = \begin{cases} \Psi_1 - \frac{1+q}{q}(1+\epsilon)\mu & \text{für } \gamma < \gamma_0 \\ -\beta_0\Psi_1 & \text{für } \gamma \geq \gamma_0. \end{cases} \quad (20)$$

In Abb. 5(b) ist das Verhalten von Ψ_2 schematisch dargestellt. Die gepunktete Linie stellt den Fall glatter Oberflächen $\mu = 0$ dar, und die durchgezogene Linie stellt Gleichung 20 dar. Bei gegebenen Materialparametern ϵ , μ und β_0 wird jede Kollision für beliebige Stoßparameter b der Gleichung 20 gehorchen.

3.4 Integration des Zwei-Teilchen-Stoßes

Ersetzt man in obigen Gleichungen $\Delta\vec{p}$ durch den Kraftstoß $\vec{f}dt$, so erhält man Differentialgleichungen für die Geschwindigkeiten der Teilchen, die man in einigen einfachen Fällen analytisch lösen kann. Es erweist sich als geschickt, die Überlappung

$$\delta = \frac{1}{2}(d_1 + d_2) - (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\hat{n} \quad (21)$$

und die Tangentialgeschwindigkeit des Kontaktpunkts

$$\frac{d}{dt}\vartheta = \vec{v}_c\hat{t} \quad (22)$$

mit der Tangentialverschiebung ϑ zu definieren. Man beachte, daß $\frac{d}{dt}\delta = \dot{\delta} = -\vec{v}_c\hat{n}$ vor dem Stoß positiv und nach dem Stoß negativ ist, während $\dot{\vartheta} = \vec{v}_c\hat{t}$ wegen der Definition von \hat{t} immer positiv ist.

Da $\ddot{\delta} = \frac{d^2}{dt^2}\delta = -\frac{d}{dt}\vec{v}_c\hat{n}$ ist, folgt $\ddot{\delta} = -f_1^{(n)}/m_1 - f_2^{(n)}/m_2$, wobei $f_i^{(n)} = m_i\ddot{r}_i\hat{n}$ die Kraft in Normalrichtung ist, die auf Teilchen i wirkt. Da Impulserhaltung gefordert wird („actio=reactio“), setzt man $f_2^{(n)} = -f_1^{(n)}$ und erhält damit für die Änderung der Normalgeschwindigkeit

$$\ddot{\delta} = -\frac{d}{dt}\vec{v}_c\hat{n} = -\frac{1}{m_{12}}f_1^{(n)}. \quad (23)$$

Diese Differentialgleichung kann man für einfache Kräfte $f^{(n)}(\delta, \dot{\delta}, t)$ lösen [LCB⁺94a] und hat damit eine analytische Darstellung der Teilchenbewegung in Normalrichtung.

In Tangentialrichtung ergibt sich aus den Gleichungen 10-13 und 22 eine ähnliche Beziehung für die Änderung der Tangentialgeschwindigkeit der Kontaktpunkte der Teilchen

$$\ddot{\vartheta} = \frac{d}{dt}\vec{v}_c\hat{t} = \frac{1}{m_{12}}\left(1 + \frac{1}{q}\right)f_1^{(t)}. \quad (24)$$

Im Fall von Kugeln ist das Trägheitsmoment um den Schwerpunkt $I_i = q_i m_i (d_i/2)^2$ mit $q_i = 2/5$, und das verschachtelte Kreuzprodukt $[\hat{n} \times \vec{f}_1^{(t)}] \times \hat{n}$, das man im Laufe der Berechnung von Gleichung 24 erhält, reduziert sich zu $f_1^{(t)}$. Auch diese Differentialgleichung läßt sich für einfache Kräfte $f_1^{(t)}$ lösen, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

Die Kenntnis dieser Kräfte ist die Voraussetzung für die Lösung der Bewegungsgleichungen. Während es für die abstoßende Kraft wenigstens einige Experimente gibt [Gol64], sind genauere Messungen der Tangentialkraft sehr schwierig. Üblicherweise werden nur die Geschwindigkeiten vor und nach dem Stoß gemessen, woraus man die gesamte Impulsänderung berechnet. Eine solche Messung hilft nicht immer bei der Entscheidung, welches Kraftgesetz zu bevorzugen ist, da verschiedene Gesetze zum gleichen Ergebnis führen können. Die im folgenden durchgeführten Rechnungen sollen verdeutlichen, wie sich verschiedene Kräfte während des Stoßes auf die Dynamik auswirken können.

3.5 Modellierung des abstoßenden Potentials

Um Teilchen zu modellieren, die sich nicht durchdringen dürfen, benötigt man zuerst ein abstoßendes Potential. Die abstoßende Kraft und damit das Potential ist eine Funktion des Elastizitätsmoduls und der Querdehnungszahl. Diese Werte sind materialabhängig und bestimmen die Kontaktdauer t_c für eine Kollision. Ein linearer Ansatz beinhaltet eine Federkonstante k und eine Kraft proportional zur Überlappung. Ein allgemeinerer Ansatz, basierend auf der Elastizitätstheorie [Her82], führt zu einer komplizierteren Funktion k , die auch von der Stoßgeschwindigkeit abhängt [LCB⁺94a]. Mit der Abhängigkeit $k \propto \delta^{1/2}$ erhält man das Hertzsche Kontaktgesetz $f_{1/2}^{(n)} \propto \delta^{3/2}$ und kann damit die Kontaktdauer eines ungedämpften Stoßes exakt berechnen [LCB⁺94a]. Diese Stoßdauer wächst mit abnehmender Stoßgeschwindigkeit, abnehmender Materialsteifigkeit und zunehmendem Teilchenradius, wie im folgenden gezeigt wird.

3.5.1 Das lineare Feder-Dämpfer-Modell in Normalrichtung

Im einfachsten Fall modelliert man die abstoßende Kraft, die auf das Teilchen $i = 1$ wirkt, als eine Hooksche Feder mit der Federkonstante k , woraus die Normalkraft

$$f_{el}^{(n)} = k\delta \quad (25)$$

folgt, die nur wirkt, solange die Überlappung positiv ist ($\delta \geq 0$). Um den Energieverlust beim Stoß zu modellieren, benutzt man eine dämpfende, der Geschwindigkeit $\vec{v}_c^{(n)}$ entgegengerichtete Kraft

$$f_{diss}^{(n)} = \nu\dot{\delta}, \quad (26)$$

was mit Gleichung 23 die Differentialgleichung

$$\ddot{\delta} + 2\eta\dot{\delta} + \omega_0^2\delta = 0 \quad (27)$$

ergibt. In Gleichung 27 ist $\omega_0 = \sqrt{k/m_{12}}$ die Schwingungsfrequenz eines ungedämpften Oszillators zweier Teilchen, die über eine Feder der Stärke k miteinander wechselwirken, und $\eta = \nu/(2m_{12})$ ist die Dämpfungskonstante des Oszillators. Die Lösung

von Gleichung 27 ist

$$\delta(t) = (v_0/\omega) \exp(-\eta t) \sin(\omega t) \quad (28)$$

mit der entsprechenden Geschwindigkeit

$$\dot{\delta}(t) = (v_0/\omega) \exp(-\eta t) [-\eta \sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)]. \quad (29)$$

In den Gleichungen 28 und 29 ist $v_0 = \dot{\delta}(0)$ die Relativgeschwindigkeit vor dem Stoß und $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \eta^2}$ die Schwingungsfrequenz des gedämpften Oszillators. Solange die Bedingung $\eta < \omega_0$ erfüllt ist, ist die Dauer eines Kontaktes

$$t_c = \pi/\omega, \quad (30)$$

da der Kontakt endet, sobald die Überlappung negativ wird $\delta(t) < 0$. Aus Gleichung 1 ergibt sich der Restitutionskoeffizient

$$\epsilon = \exp(-\pi\eta/\omega), \quad (31)$$

und aus den Gleichungen 28 und 29 ergibt sich die maximale Überlappung δ_{\max} zur Zeit t_{\max} durch die Bedingung $\dot{\delta}(t_{\max}) = 0$. Damit ergibt sich aus Gleichung 29 die Phase der maximalen Überlappung $\omega t_{\max} = \arctan(\omega/\eta) = \arcsin(\omega/\omega_0)$, und damit

$$\delta_{\max} = (v_0/\omega) \exp(-\eta t_{\max}) \sin(\omega t_{\max}) = (v_0/\omega_0) \exp[(-\eta/\omega) \arcsin(\omega/\omega_0)]. \quad (32)$$

Eine alternative Regel um zu entscheiden wann ein Kontakt vorüber ist, kann man anstatt durch die Überlappung durch die am Kontaktpunkt wirkende Kraft formulieren: Da die Teilchen keine anziehende Wechselwirkung haben, muß der Kontakt enden, sobald die Kraft das Vorzeichen wechselt, d.h. $f_1^{(n)}(t_c^f) = 0$. Setzt man die Gleichungen 28 und 29 in diese Regel ein, erhält man:

$$0 = (v_0/\omega) \exp(-\eta t_c^f) \left[(k - 2m_{12}\eta^2) \sin(\omega t_c^f) + 2m_{12}\eta\omega \cos(\omega t_c^f) \right], \quad (33)$$

was zur Lösung

$$t_c^f = \frac{1}{\omega} \left(\pi - \arctan \frac{2\eta\omega}{\omega^2 - \eta^2} \right) = \frac{1}{\omega} \left(\pi - 2 \arctan \frac{\eta}{\omega} \right) \quad (34)$$

führt. Die letzte Umformung ist ein Additionstheorem für $(\eta/\omega)^2 < 1$ und die Lösung ist im Intervall $-\pi/2 < \omega t_c^f < 3\pi/2$ gültig. Im elastischen Grenzfall sind $\eta = 0$ und $\omega = \omega_0$, womit die beiden Definitionen der Kontaktdauer (siehe Gleichung 30 und 34) äquivalent sind. Für $\omega > \eta > 0$ weichen die beiden Definitionen dagegen voneinander ab. Das Maß für die Abweichung ist das Verhältnis $\tau_f = t_c/t_c^f$ der beiden Kontaktdauern.

Die Kontaktdauer, die sich aus der zweiten Definition des Kontaktes und Gleichung 34 ergibt, ist immer kürzer als die Kontaktdauer, die man durch die erste Definition und Gleichung 30 erhält. Bei schwacher Dämpfung und damit $\tau_f \approx 1$ ist die Wahl der Definition der Kontaktdauer nicht wichtig, während bei starker Dämpfung die zweite Definition zu bevorzugen ist, da attraktive Kräfte explizit ausgeschlossen werden.

3.5.2 Das nicht-lineare Feder-Dämpfer-Modell in Normalrichtung

Anstatt einer linearen Feder (Gleichung 25) kann man einen allgemeineren nichtlinearen Ansatz

$$f_\alpha^{(n)} = Yd^2 \left(\frac{\delta}{d} \right)^{1+\alpha}, \quad (35)$$

mit dem effektiven Teilchendurchmesser $d = (2d_1d_2)/(d_1 + d_2)$, dem effektiven, geometrieabhängigen Elastizitätsmodul $Y^{-1} = \frac{3}{2} \left(\frac{1-\sigma_1^2}{E_1} + \frac{1-\sigma_2^2}{E_2} \right)$ und damit der Federkonstante $k(\delta) = Yd(\delta/d)^\alpha$ verwenden. Hier ist σ_i die Querdehnungszahl und E_i das Elastizitätsmodul des Teilchens i . Im Fall $\alpha = 0$ ergibt sich Gleichung 25, und im Fall $\alpha = 1/2$ ergibt sich die bekannte Formel für Hertzsche Kontakte [Her82, LL89, LCB⁺94a].

Um den Energieverlust beim Stoß zu modellieren, benutzt man eine allgemeinere, der Geschwindigkeit $\vec{v}_c^{(n)}$ entgegengerichtete Kraft

$$f_{\zeta_0, \zeta_1}^{(n)} = \eta d \dot{\delta} \left(\frac{\delta}{d} \right)^{\zeta_0} \left(\frac{\dot{\delta}}{\dot{\delta}_0} \right)^{\zeta_1} \quad (36)$$

mit der Viskosität η und einer typischen Geschwindigkeit $\dot{\delta}_0$.

Zur exakten Berechnung der Kollisionsdauer t_c muß man den Dämpfungsterm vernachlässigen, d.h. man setzt $\eta = 0$. Die maximale Überlappung δ_{\max} erhält man für $\dot{\delta} = 0$ aus der Energiebilanzgleichung $e_k(t) + e_p(t) = e_k(0)$, wobei die kinetische Anfangsenergie $e_k = m_{12}v_0^2/2$ ganz in potentielle Energie $e_p = Yd^{1-\alpha}\delta_{\max}^{2+\alpha}/(2+\alpha)$ umgewandelt wird. Nach δ_{\max} aufgelöst ergibt sich

$$\delta_{\max} = \left(1 + \frac{\alpha}{2} \right)^{1/(2+\alpha)} \left(\frac{m_{12}}{Yd^{1-\alpha}} \right)^{1/(2+\alpha)} v_0^{2/(2+\alpha)}. \quad (37)$$

Durch Separation der Variablen δ und t in der Energieerhaltungsgleichung läßt sich die halbe Kontaktdauer $t_c/2$ als Integral von $\delta = 0$ bis $\delta = \delta_{\max}$ berechnen und ergibt

$$t_c = J(\alpha) \frac{\delta_{\max}}{v_0} = J(\alpha) \left(1 + \frac{\alpha}{2} \right)^{1/(2+\alpha)} \left(\frac{m_{12}}{Yd^{1-\alpha}} \right)^{1/(2+\alpha)} v_0^{-\alpha/(2+\alpha)}. \quad (38)$$

Die Funktion

$$J(\alpha) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2+\alpha}\right)}{\left(1 + \frac{\alpha}{2}\right) \Gamma\left(\frac{4+\alpha}{4+2\alpha}\right)} \quad (39)$$

enthält die Gamma-Funktion $\Gamma(x)$, was zu $J(0) = \pi$ und $J(1/2) = 2.94$ als Vorfaktor in Gleichung 38 führt. Man erkennt, daß die Kontaktdauer für $\alpha \neq 0$ von der Nicht-Linearität des Kraftgesetzes abhängt, d.h. $t_c \propto v_0^{-\alpha/(2+\alpha)}$. Eine ausführlichere Rechnung findet sich in Lehrbüchern [LL89] und eine Diskussion der Konsequenzen dieser Beziehungen in diversen Publikationen [LCB⁺94a, BSHP96].

Um den Restitutionskoeffizienten wenigstens im Grenzfall schwacher Dämpfung abzuschätzen, kann man annehmen, daß die dissipierte Energie proportional zur dissipativen Kraft $f_{\zeta_0, \zeta_1}^{(n)}$ und proportional zum Weg δ_{\max} ist:

$$e_{diss} \propto f_{\zeta_0, \zeta_1}^{(n)} \delta_{\max} = \eta d^{1-\zeta_0} \delta_{\max}^{1+\zeta_0} v_0^{1+\zeta_1} \propto v_0^{\frac{4+2(\zeta_0+\zeta_1)+\alpha(1+\zeta_1)}{2+\alpha}}. \quad (40)$$

Damit ergibt sich die Abhängigkeit des Restitutionskoeffizienten von der Geschwindigkeit v_0

$$1 - \epsilon \propto v_0^{\frac{2(\zeta_0 + \zeta_1) - \alpha(1 - \zeta_1)}{2 + \alpha}}, \quad (41)$$

was z.B. für $\alpha = 1/2$, $\zeta_0 = 1/2$ und $\zeta_1 = 0$ zu $1 - \epsilon \propto v_0^{1/5}$ führt [KK87, LCB⁺94a, BSHP96]. Setzt man in Gleichung 35 $\dot{\delta}_0 = v_0$, entfallen die nichtlinearen Terme die ζ_1 enthalten und man erhält

$$1 - \epsilon \propto v_0^{\frac{2\zeta_0 - \alpha}{2 + \alpha}}. \quad (42)$$

Um einen von v_0 unabhängigen Restitutionskoeffizienten zu erhalten, muß die Bedingung $2(\zeta_0 + \zeta_1) + \alpha(\zeta_1 - 1) = 0$ erfüllt sein, was für Hertzsche Kontakte mit $\alpha = 1/2$ als die Regel $4\zeta_0 + 5\zeta_1 = 1$ formuliert werden kann.

3.5.3 Das hysteretische Feder-Modell in Normalrichtung

Eine Alternative zu der viskosen Dämpfung in Abschnitt 3.5.1 und zu den komplizierten nichtlinearen Kräften in Abschnitt 3.5.2 ist eine hysteretische Kraft-Weg-Beziehung, die eine mögliche plastische Verformung des Materials berücksichtigt. Neben komplizierteren nichtlinearen Regeln [WB86, ZSS91, STS93] kann das hier vorgestellte linear-hysteretische Modell verwendet werden [WB86]. Man benutzt bei Belastung eine schwächere Feder als bei Entlastung. Die abstoßende Kraft ist

$$f_{\text{hys}}^{(n)} = \begin{cases} k_1 \delta & \text{für Belastung und} \\ k_2(\delta - \delta_0) & \text{für Entlastung,} \end{cases} \quad (43)$$

wobei $k_1 < k_2$ ist. Die abstoßende Kraft in Normalrichtung ist in Abb. 6 schematisch dargestellt.

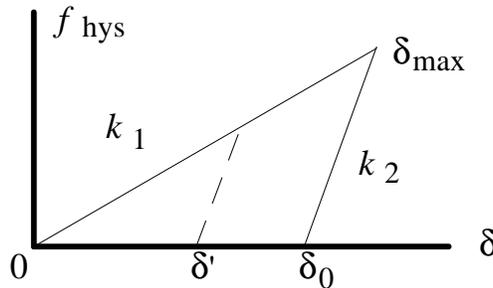


Abbildung 6: Schematische Darstellung der hysteretischen, abstoßenden Kraft in Gleichung 43. Bei Belastung folgt f_{hys} dem Pfad $0\text{-}\delta_{\text{max}}$, bei Entlastung dem Pfad $\delta_{\text{max}}\text{-}\delta_0$. Eine Wiederbelastung kann von δ' ausgehend, der gestrichelten Linie folgend bis zum Erstbelastungspfad führen und dann dort weiterlaufen.

Während der Erstbelastung nimmt die Kraft linear mit δ und der Federkonstante k_1 zu, bis die maximale Überlappung δ_{max} erreicht wurde. Bei Entlastung ergibt sich die Überlappung δ_0 , bei der der Kontakt beendet wird aus der Kontinuität der Kraft $k_1 \delta_{\text{max}} = k_2(\delta_{\text{max}} - \delta_0)$. Die Kontaktdauer

$$t_c = \frac{\pi}{2\omega_1} + \frac{\pi}{2\omega_2} = \pi \sqrt{\frac{m_{12}}{2} \left(\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2} \right)} \quad (44)$$

folgt aus Gleichung 30 als Summe der halben Kontaktdauern mit den Federkonstanten k_1 und k_2 . Aus der verrichteten Arbeit läßt sich leicht der Restitutionskoeffizient

$$\epsilon = \sqrt{\frac{k_1}{k_2}} \quad (45)$$

berechnen. Der Kontakt ist eigentlich beendet, sobald die Kraft bei der Überlappung δ_0 verschwindet, die Überlappung wird aber erst nach der Zeit $t_c + \delta_0/v(t_c)$ zu Null, da die Teilchen sich noch mit der Geschwindigkeit $v(t_c) = \epsilon v_0$ voneinander trennen müssen. Nach vollständiger Trennung der beiden Teilchen wird die plastische Verformung vernachlässigt (z.B. wegen einer Drehung der Teilchen) und ein erneuter Kontakt findet wieder wie oben beschrieben statt. Nimmt die Überlappung bereits vor dem Ende des Kontaktes bei δ' wieder zu, so erfolgt die Zunahme entlang des steileren Entlastungspfad $k_2(\delta - \delta')$ bis zum Erstbelastungspfad. Mit vorgegebenem ϵ und t_c aus den Gleichungen 44 und 45 lassen sich $k_1 = m_{12}\pi^2(1 + \epsilon^2)/(4t_c^2)$ und $k_2 = k_1/\epsilon$ einfach berechnen.

3.6 Modellierung der Tangentialreibung

Die folgenden Berechnungen der Tangentialbewegung werden nur mit dem linearen Feder-Dämpfer-Modell in Normalrichtung durchgeführt, d.h. in $\alpha = \zeta_0 = \zeta_1 = 0$.

3.6.1 Viskose Tangentialkraft

Das wohl einfachste Modell der Tangentialreibung ist eine einfache viskose Kraft in Tangentialrichtung

$$f_v^{(t)} = -\nu_t \dot{\vartheta}, \quad (46)$$

mit der Tangentialviskosität ν_t und der relativen Tangentialgeschwindigkeit der Kontaktpunkte $\dot{\vartheta}$. Eingesetzt in Gleichung 24 erhält man nach einfacher Integration von $t = 0$ bis $t = t_c$ als Tangentialgeschwindigkeit am Ende des Kontaktes

$$v_c^{(t)}(t_c) = v_c^{(t)}(0) \exp(-2\eta_t t_c), \quad (47)$$

wobei $\eta_t = (1 + \frac{1}{q})\nu_t/(2m_{12})$ analog zur Viskosität in Normalrichtung definiert wurde. Eingesetzt in die Definition von Ψ_2 ergibt sich

$$\Psi_2 = \Psi_1 \exp(-2\eta_t t_c). \quad (48)$$

Die viskose Tangentialkraft führt bei konstantem t_c zu einer Verringerung der Tangentialgeschwindigkeit und ist damit nur für negative β_0 im Bereich $\gamma \geq \gamma_0$ anwendbar (siehe Gleichung 20), entspricht aber nicht dem experimentell gefundenen Ψ_2 in Gleichung 20.

3.6.2 Coulombsche Tangentialkraft

Das Coulombsche Modell der Tangentialreibung

$$f^{(t)} = -\mu f^{(n)}, \quad (49)$$

erfordert zur Berechnung der Tangentialgeschwindigkeit nach dem Stoß die Kenntnis der Normalkraft zu jedem Zeitpunkt. Integriert man nun die Geschwindigkeitsänderung in Tangentialrichtung, so ergibt sich

$$u_c^{(t)} = v_c^{(t)} + \mu \left(1 + \frac{1}{q}\right) (1 + \epsilon) v_c^{(n)}, \quad (50)$$

was nach Division durch $v_c^{(n)}$ genau $\Psi_2(\gamma < \gamma_0)$ in Gleichung 20 entspricht. Dabei ist zu beachten, daß eine numerische Integration von Gleichung 49 bei kleinen Tangentialgeschwindigkeiten zu unerwünschten Oszillationen führen kann, da die Tangentialkraft dann ständig das Vorzeichen wechselt [SDW96].

3.6.3 Elastische Tangentialkraft

Zur Berücksichtigung der Materialelastizität in Tangentialrichtung wurde vorgeschlagen [MBF76, MBF81, WB86], eine Tangentialfeder am Kontaktpunkt anzubringen, deren Federkonstante zum gewünschten Tangentialrestitutionskoeffizienten führt.

Analog zur linearen Feder in Normalrichtung definiert man

$$f^{(t)} = -k_t \vartheta, \quad (51)$$

was eingesetzt in Gleichung 24 in differentieller Schreibweise

$$d\dot{\vartheta} = dv_c^{(t)} = -\frac{1}{m_{12}} \left(1 + \frac{1}{q}\right) k_t \vartheta(t) dt \quad (52)$$

ergibt. Mit dem Ansatz $\vartheta(t) = (v_c^{(t)}/\omega_t) \sin(\omega_t t)$ ergibt sich mit $\omega_t^2 = (k_t/m_{12})(1+1/q)$ durch Integration über die Dauer des Kontaktes die Geschwindigkeit nach dem Stoß

$$u_c^{(t)} = v_c^{(t)} \cos(\omega_t t_c), \quad (53)$$

was nach Division durch $v_c^{(n)}$ genau $\Psi_2(\gamma \geq \gamma_0)$ in Gleichung 20 entspricht. Der Tangentialrestitutionskoeffizient $\beta_0 = -\cos(\pi \omega_t / \omega)$ ergibt sich somit, indem man t_c durch π/ω ersetzt. Fordert man ein bestimmtes β_0 (z.B. wurde $\beta_0 \approx 0.5$ für verschiedene Materialien gemessen [FLCA94]), so ergibt sich eine Beziehung für die Tangentialschwingungsfrequenz

$$\omega_t = \sqrt{\frac{k_t}{m_{12}}} \left(\frac{1+q}{q}\right) = \frac{1}{t_c} \arccos(-\beta_0) \quad (54)$$

und damit das Verhältnis Federkonstanten

$$\frac{k_t}{k} = \left(\frac{q \arccos(-\beta_0)}{(1+q)\pi}\right)^2 \quad (55)$$

als Funktion von β_0 .

3.7 Beispiele für Zwei-Teilchen-Stöße

Zur qualitativen Verdeutlichung der Bedeutung der Parameter in Tangentialrichtung μ und β_0 ist es günstig, zuerst einfache Stöße zwischen zwei Teilchen oder zwischen einem Teilchen und einer Wand zu untersuchen. Dazu ändert man schrittweise die Tangentialgeschwindigkeit und damit den Stoßwinkel γ .

3.7.1 Teilchen-Wand Kollisionen

Zuerst wird der Einfluß des Wandreibungskoeffizienten μ_w auf Teilchen-Wand Kollisionen untersucht. Dazu ändert man die Geschwindigkeitskomponente $v_0^{(t)}$ parallel zur Wand bei konstanter Normalkomponente $v_0^{(n)}$. Die Wahl der Kombination von $v_0^{(n)}$ und $v_0^{(t)}$ entspricht bestimmten Ψ_1 Werten, womit aus der Tangentialkomponente $u^{(t)}$ nach dem Stoß Ψ_2 mit Gleichung 20 berechnet werden kann. Beim Stoß mit einer rauhen Wand, d.h. $\mu_w > 0$, wird ein Teil der Relativgeschwindigkeit in Rotation umgewandelt, wobei das Teilchen abgebremst wird.

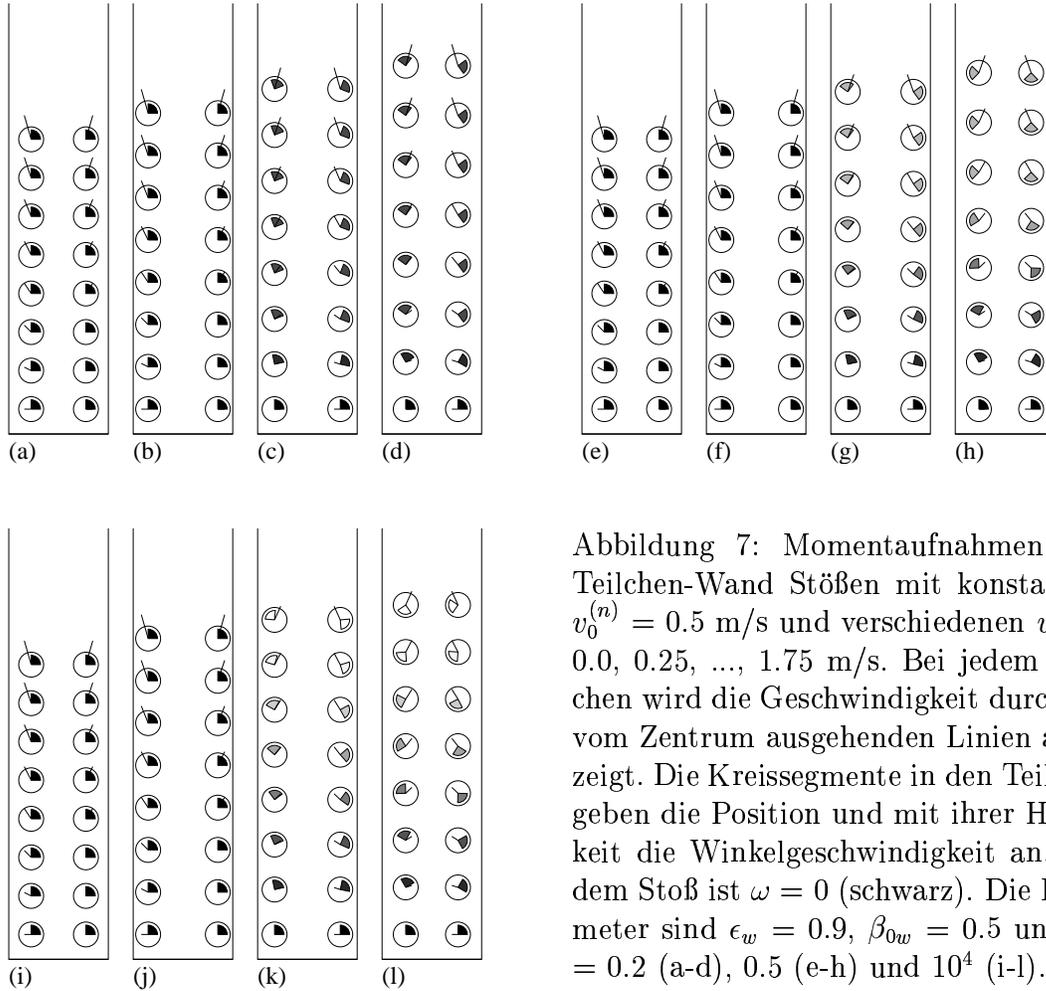


Abbildung 7: Momentaufnahmen von Teilchen-Wand Stößen mit konstantem $v_0^{(n)} = 0.5$ m/s und verschiedenen $v_0^{(t)} = 0.0, 0.25, \dots, 1.75$ m/s. Bei jedem Teilchen wird die Geschwindigkeit durch die vom Zentrum ausgehenden Linien angezeigt. Die Kreissegmente in den Teilchen geben die Position und mit ihrer Helligkeit die Winkelgeschwindigkeit an. Vor dem Stoß ist $\omega = 0$ (schwarz). Die Parameter sind $\epsilon_w = 0.9$, $\beta_{0w} = 0.5$ und $\mu_w = 0.2$ (a-d), 0.5 (e-h) und 10^4 (i-l).

In Abb. 7 sind vier Momentaufnahmen von jeweils acht Teilchenpaaren, die mit den Seitenwänden kollidieren, dargestellt. Die Teilchen fliegen symmetrisch auseinander und stoßen dementsprechend mit den Wänden. Der Zeitschritt zwischen zwei der vier Momentaufnahmen [z.B. (a), (b), (c) und (d)] ist hier 6 ms, bei einer Anfangsgeschwindigkeit von $v_0^{(n)} = 0.5$ m/s und, von unten nach oben betrachtet, $v_0^{(t)} = 0.0, 0.25, \dots, 1.75$ m/s. Diese Geschwindigkeiten entsprechen $\Psi_1 = 0, 0.5, \dots, 3.5$. Die Teilchen haben anfangs keine Winkelgeschwindigkeit, wie durch die schwarzen Kreissegmente angedeutet. Die Helligkeit der Kreissegmente entspricht der Winkelgeschwindigkeit, d.h. schwarz bedeutet $\omega' = 0$ und weiß $\omega' \geq 720$ rad/s. Der momentane Winkel der

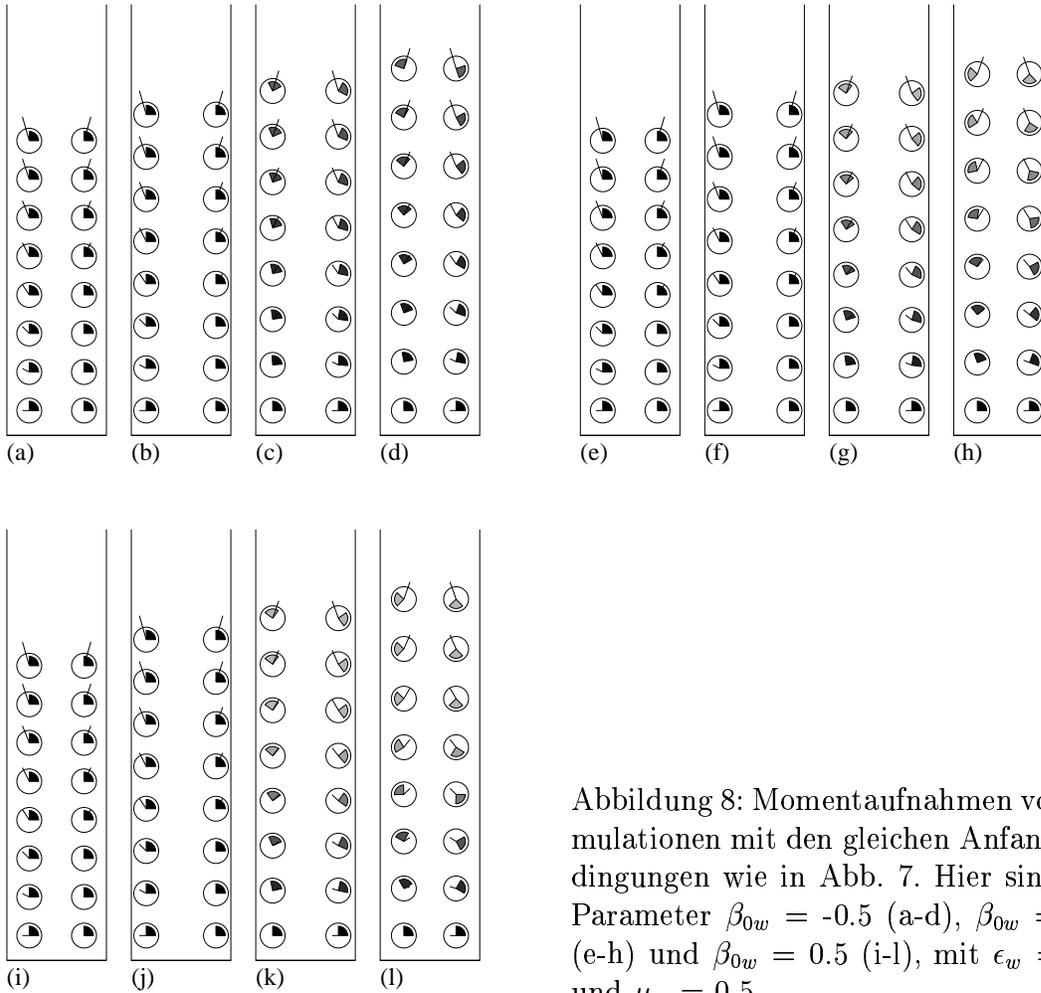


Abbildung 8: Momentaufnahmen von Simulationen mit den gleichen Anfangsbedingungen wie in Abb. 7. Hier sind die Parameter $\beta_{0w} = -0.5$ (a-d), $\beta_{0w} = 0.0$ (e-h) und $\beta_{0w} = 0.5$ (i-l), mit $\epsilon_w = 0.9$ und $\mu_w = 0.5$.

Teilchen ist durch die Orientierung der Kreissegmente gegeben. Der Reibungskoeffizient ist $\mu_w = 0.2$ (a-d), $\mu_w = 0.5$ (e-h) und $\mu_w = 10^4$ (i-l), der Restitutionskoeffizient ist $\epsilon_w = 0.9$ und der Tangential-Restitutionskoeffizient ist $\beta_{0w} = 0.5$.

Man lernt aus diesen Bildern, daß große Tangentialgeschwindigkeiten in der Regel zu großen Rotationsgeschwindigkeiten führen. Die Übertragung von linearer Bewegung zu Rotationsbewegung wächst mit dem Reibungskoeffizienten μ_w an. Man muß jedoch beachten, daß bei sehr großen Tangentialgeschwindigkeiten die Drehimpulsübertragung beim Stoß wieder abnimmt. Dies kommt daher, daß die Drehimpulsübertragung proportional zu μ und zur Impulsübertragung in Normalrichtung ist. Wird einer von beiden kleiner, so nimmt auch die Tangentialimpulsübertragung und somit die Drehimpulsübertragung ab. [vgl. Abb. 7(d) mit $\mu_w = 0.2$ und Abb. 7(h) mit $\mu_w = 0.5$]. Für sehr große μ_w tritt dieser Fall nicht mehr ein und die Rotationsgeschwindigkeit nimmt mit der Tangentialgeschwindigkeit zu [vgl. Abb. 7(l)].

Um die Bedeutung des Tangential-Restitutionskoeffizienten β_{0w} zu verstehen, ändert man diesen, während man die anderen Parameter festhält. Mit derselben Anfangsbedingung wie zuvor in Abb. 7 sind hier $\mu_w = 0.5$, $\epsilon = 0.9$ und $\beta_{0w} = -0.5$ (a-d),

0.0 (e-h) und 0.5 (i-l). Diese β_{0w} Werte entsprechen $-\tan \gamma_0 = 6.65, 3.33$ und 2.22 , womit Ψ_1 fast immer kleiner als $-\tan \gamma_0$ ist (siehe Gleichung 120). Dies bedeutet, daß außer den drei oberen Kollisionen in Abb. 8(i-l) alle Stöße im haftenden Bereich stattfinden. Negative β_{0w} Werte führen einfach zu einer Reduktion der tangentialen Relativgeschwindigkeit der Oberflächen am Kontaktpunkt. $\beta_{0w} = 0$ bedeutet, daß die Geschwindigkeit der Oberflächen gleichgesetzt wird und positive β_{0w} Werte führen zu einer Umkehr der Relativgeschwindigkeit. Damit erhält man eine wachsende Rotationsgeschwindigkeit mit zunehmendem β_{0w} .

3.7.2 Teilchen-Teilchen Kollisionen

In Abb. 9 sind Momentaufnahmen von drei Zeitserien mit jeweils zehn Teilchenpaaren dargestellt. Hier ist der Zeitschritt zwischen den Aufnahmen 4 ms. Die Anfangsgeschwindigkeiten sind $v_x = \pm 0.5$ m/s, $v_y = 0$ m/s und $\omega = 0$. Das Verhältnis von Normal- zu Tangentialgeschwindigkeit wird durch den Stoßparameter bestimmt. Die Werte $b = 0, 0.1d, \dots$ und $0.9d$ entsprechen $\Psi_1 = 0, 0.1005, 0.204, 0.314, \dots, 1.333$ und 2.065 . Verwendet man $\epsilon = 0.9$ und $\beta_0 = 0.5$ mit unterschiedlichen Reibungskoeffizienten $\mu = 0.0$ (a-d), $\mu = 0.2$ (e-h) und $\mu = 0.5$ (i-l), so kann man einfach den Übergang von gleitenden zu haftenden Kontakten berechnen: Mit $\mu = 0.0, 0.2$ und 0.5 ist $-\tan \gamma_0 = 0, 0.89$ und 1.33 . Der Gesamtimpuls muß nach den Stoßgesetzen erhalten bleiben, der Relativimpuls jedoch nimmt einerseits ab, da $\epsilon < 1$ ist, und ändert andererseits seine Richtung. Bei bestimmten Stoßparametern kann der Relativimpuls um einen rechten Winkel gedreht werden (siehe z.B. Abb. 9(b) und (c), das dritte Paar von oben mit $b = 0.7d$). Ist $\mu > 0$, so findet auch eine Übertragung von linearem Impuls zu Drehimpuls statt. In Abb. 9(e-l) ist die Übertragung für mittlere Stoßparameter und damit für mittlere Tangentialgeschwindigkeiten maximal. Bei kleinen Stoßparametern ist die Tangentialgeschwindigkeit zu klein, bei größeren Stoßparametern ist die Impulsübertragung in Normalrichtung zu klein, so daß auch die Drehimpulsübertragung klein bleibt. Bei stark nicht-zentralen Stößen wird die Drehimpulsübertragung also durch Coulombs Gesetz begrenzt, sobald $\Psi_1 > -\tan \gamma_0$ ist.

Mit denselben Anfangsbedingungen wie in Abb. 9 werden analoge Momentaufnahmen in Abb. 10 dargestellt. Die Parameter sind $\mu = 0.2, \beta_0 = 0.5$ und $\epsilon = 0.2$ (a-d), $\epsilon = 0.6$ (e-h) und $\epsilon = 0.99$ (i-l). Die Normalgeschwindigkeit nach dem Stoß hängt direkt von ϵ ab, d.h. bei kleinem ϵ geht viel Relativimpuls verloren. Bei größeren Stoßparametern kann man die Tendenz zu großer Drehimpulsübertragung bei großem Restitutionskoeffizienten feststellen.

3.8 Zusammenfassung

In diesem Teil wurden Zwei-Teilchen-Stöße diskutiert, und anhand von Beispielen wurden die drei Parameter Restitutionskoeffizient, Reibungskoeffizient und Tangential-Restitutionskoeffizient vorgestellt, die zur Klassifizierung von Stößen verwendet werden können. Das oben beschriebene Modell beinhaltet wesentliche Vereinfachungen der Stoßdynamik, ist aber dennoch eine gute Beschreibung von Zwei-Teilchen-Stößen.

In Normalrichtung werden so unterschiedliche Effekte wie Viskosität, plastische

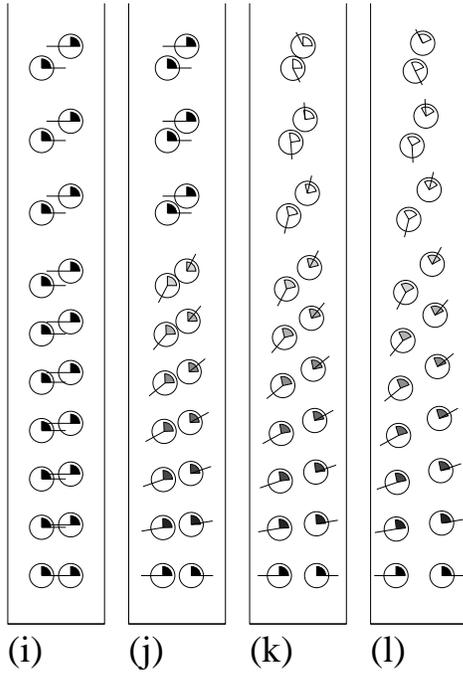
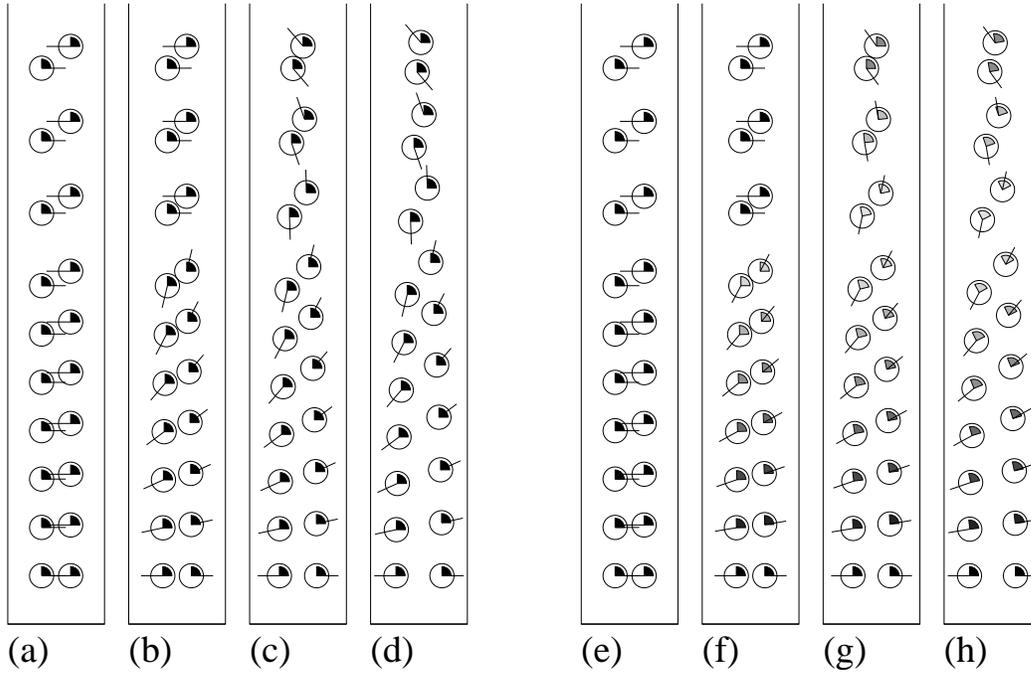


Abbildung 9: Momentaufnahmen von zehn Teilchenpaaren mit $v_x = \pm 0.5$ m/s, $v_y = 0$ m/s und $\omega = 0$. Der Stoßparameter ist, von unten nach oben betrachtet, $b = 0, 0.1d, \dots 0.9d$, und die Restitutionskoeffizienten sind $\epsilon = 0.9$ und $\beta_0 = 0.5$. Der Reibungskoeffizient ist $\mu = 0.0$ (a-d), $\mu = 0.2$ (e-h) und $\mu = 0.5$ (i-l).

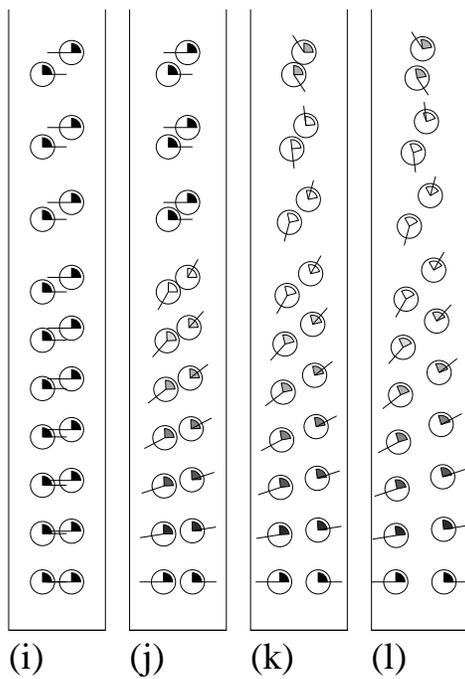
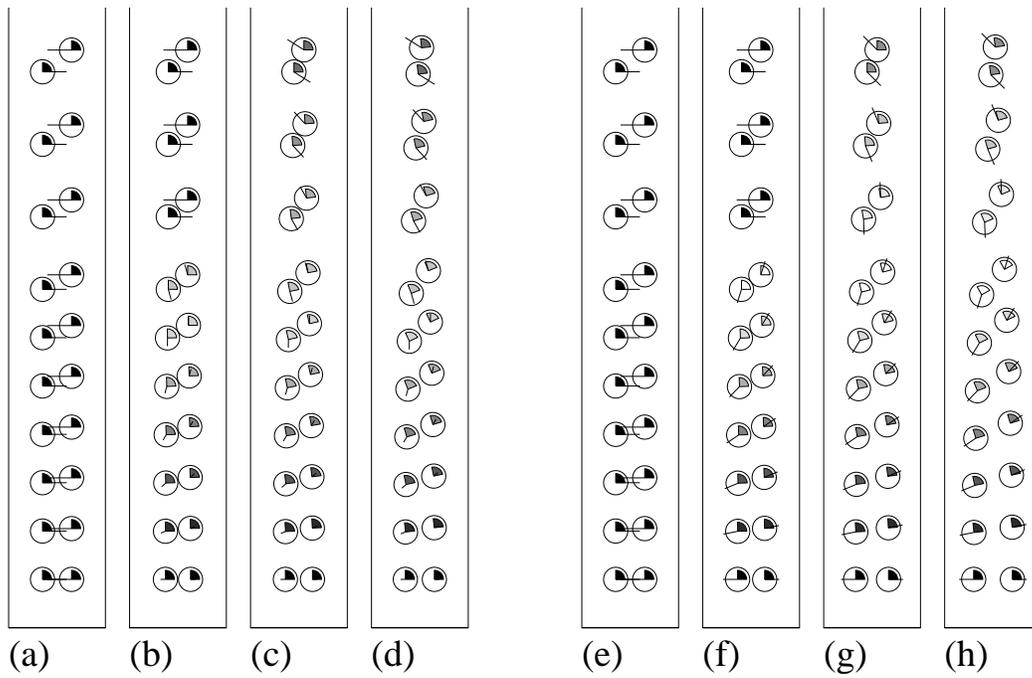


Abbildung 10: Momentaufnahmen mit denselben Anfangsbedingungen wie in Abb. 9. Hier ist der Restitutionskoeffizient variabel, $\epsilon = 0.2$ (a-d), $\epsilon = 0.6$ (e-h) und $\epsilon = 0.99$ (i-l), wobei $\beta = 0.5$ und $\mu = 0.2$.

Verformung und Dissipation in dem Restitutionskoeffizienten ϵ zusammengefaßt, welcher u.a. von der Stoßgeschwindigkeit abhängen kann [LCB⁺94a, SDW96, BSHP96]. Da die Abhängigkeit von der Geschwindigkeit schwach ist, wird der Restitutionskoeffizient meistens als Konstante angenommen.

In Tangentialrichtung werden gleitende und haftende Kontakte unterschieden, können also nicht zusammen auftreten. In der Natur kann ein gleitender Kontakt zu einem haftenden werden, sobald die kinetische Energie in Tangentialrichtung aufgebraucht wurde. Der Reibungskoeffizient μ beschreibt bei gleitenden Kontakten die Materialrauigkeit und den damit verbundenen Energieverlust und die Drehimpulsübertragung. Der Tangential-Restitutionskoeffizient drückt bei haftenden Kontakten die Materialelastizität aus und kann damit eine in Experimenten festgestellte Umkehr der Tangential-Relativgeschwindigkeit der Kontaktpunkte erklären. Neben der Relativgeschwindigkeit ändert sich beim nicht-zentralen Stoß von Teilchen mit rauher Oberfläche auch der Drehimpuls, der Stoßparameter und die Energie.

Es wurden zwei deterministische Möglichkeiten beschrieben, um den Kontakt zweier diskreter granularer Teilchen zu modellieren. Das erste Verfahren benutzt nur die drei oben genannten Parameter, wendet Impulserhaltung auf die zwei harten kugelförmigen Teilchen an und gelangt so direkt zu den Geschwindigkeiten der Teilchen nach dem Stoß. Das zweite Verfahren ist die Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichungen für weiche, verformbare Teilchen unter der Annahme, daß die Teilchenüberlappung zu einer Verformung analog ist. Verschiedene Kraftmodelle für Normal- und Tangentialrichtung können zu gleichen Ergebnissen führen. Im Fall von Zwei-Teilchen-Kontakten ist die Wahl der Wechselwirkung von untergeordneter Bedeutung.

Die Mindestanforderung an diskrete, deterministische Modelle ist die Eichung des Wechselwirkungsmodells an Experimenten. Da bisher nur Zwei-Teilchen-Stöße experimentell quantitativ untersucht wurden, ist die genaue Kenntnis des verwendeten Modells für Zwei-Teilchen-Kontakte wichtig. Im Fall von Vielteilchen-Kontakten spielt die Wahl der Wechselwirkung für das Verhalten des Systems eine wichtige Rolle, wie im nächsten Kapitel gezeigt wird.

4 Die Physik der Vielteilchen-Kontakte

Die in Kapitel 3 beschriebenen Wechselwirkungen sind für Zwei-Teilchen-Kontakte definiert. Verschiedene Modelle beschreiben mit den geeigneten Parametern Zwei-Teilchen-Stöße hinreichend genau. Befinden sich jedoch viele Teilchen zur selben Zeit in Kontakt miteinander, so verhält sich das Vielteilchen-System je nach verwendetem Zwei-Teilchen-Gesetz unterschiedlich [LCB⁺94a, LCB⁺94b, LCB⁺95]. Im folgenden wird beschrieben, inwiefern verschiedene Modelle zu unterschiedlichem Systemverhalten führen können.

4.1 Vielteilchen-Kontakte

Es ist wichtig, die unterschiedlichen Zeitskalen, die im System vorkommen, aufeinander zu beziehen. Die Dauer t_c eines Stoßes (siehe Abschnitt 3.5) ist sehr viel länger als atomare Zeitskalen und dennoch in den meisten Fällen die kürzeste Zeitskala von Interesse. Neben externen Zeitskalen, wie z.B. der Anregungsperiode T , gibt es eine für das System typische Zeit t_n zwischen den Kollisionen oder Ereignissen. Zusätzlich kann man noch weitere Zeitskalen identifizieren, die mit den kollektiven Eigenschaften des Systems zusammenhängen: Verhindert man jegliche Energiezufuhr und überläßt das System sich selbst, so wird die Energie innerhalb einer typischen Zeitspanne dissipiert. Führt man dem System Energie zu, so ergibt das Verhältnis von Systemenergie e und verrichteter Arbeit durch Energiezufuhr w_b die typische Antwortzeit des Systems $\tau_D = e/w_p$, d.h. die Zeit in der sich das System auf veränderte Randbedingungen einstellen kann.

Vergleicht man die Dauer eines Kontaktes mit der Zeit zwischen den Kontakten, so erhält man das dimensionslose Verhältnis

$$\tau = \frac{t_n}{t_c}. \quad (56)$$

Die Zahl τ zeigt an, ob vor allem Zwei-Teilchen- oder ob überwiegend Vielteilchenkontakte im System vorkommen. Ist $\tau \gg 1$, so ist die Dauer eines Stoßes kleiner als die Zeit zwischen Stößen und man kann Zwei-Teilchen-Stöße erwarten. Ist andererseits $\tau \ll 1$, findet man Vielteilchen-Stöße, da die Dauer eines Stoßes länger ist als die Zeit zwischen Stößen.

Anstatt der Zeitskalen kann man auch Längenskalen wie Teilchendurchmesser d , Systemgröße l und mittlere freie Weglänge λ benutzen, um das System zu klassifizieren. Ist die Zeit zwischen Kontakten viel größer als die Dauer eines Kontaktes, so ist die Dichte niedrig und Vielteilchen-Kontakte sind sehr unwahrscheinlich. Umgekehrt, wenn die Dauer eines Kontaktes länger ist als die Zeiten zwischen Kontakten oder im Extremfall, wenn ein Kontakt nicht mehr endet, dann sind Vielteilchen-Kontakte wichtig.

4.1.1 Die Schallgeschwindigkeit

Als Modell betrachte man N identische, auf einer Linie angeordnete Kugeln mit Abstand s_0 , Durchmesser d und Kontaktdauer t_c , wie in Abb. 11 dargestellt.

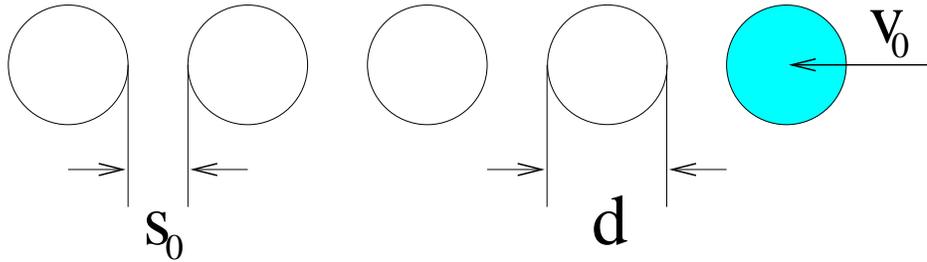


Abbildung 11: Schematische Darstellung einer eindimensionalen Kette mit Teilchenabstand s_0 , Teilchendurchmesser d und einer Geschwindigkeit v_0 eines Teilchens.

Ein Teilchen erhält nun die Geschwindigkeit v_0 , mit der es seinen Nachbarn trifft. Der Stoß dauert eine bestimmte Zeit t_c , während der der Impuls des stoßenden Teilchens auf das vorher ruhende Teilchen übertragen wird. In dieser Zeitspanne wird der Impuls um die Entfernung $d + \delta_c$ transportiert, da sich der Massenschwerpunkt der beiden Teilchen mit der Geschwindigkeit $v_0/2$ um die Entfernung $\delta_c = t_c v_0/2$ weiterbewegt. Ist $s_0 > \delta_c$, so ist die Entfernung, die das getroffene Teilchen bis zum nächsten Stoß zurücklegt, $l_0 = s_0 - \delta_c$. Die Zeit, in der Information um die Distanz $d + s_0$ weitertransportiert wird, ist damit $t_c + l_0/v_0$, woraus sich die Schallgeschwindigkeit

$$c = \frac{d + s_0}{t_c + l_0/v_0} = v_0 \frac{d + s_0}{s_0 + t_c v_0/2} = v_0 \frac{1 + d/s_0}{1 + 1/(2\tau)} = \frac{v_0/\varrho}{1 + 1/(2\tau)} \quad (57)$$

ergibt, wenn man $\tau = s_0/(v_0 t_c)$ und den Volumenanteil $\varrho = s_0/(s_0 + d)$ einsetzt. Im Grenzfall $d/s_0 \rightarrow \infty$ ist $c = 2d/t_c$ und im Fall $d/s_0 \rightarrow 0$ ist $c = v_0$. Benutzt man harte Teilchen mit $t_c = 0$, so findet die Impulsübertragung instantan statt und $c = v_0(1 + d/s_0)$, was für $d/s_0 \rightarrow \infty$ unendlich hohe Schallgeschwindigkeiten zuläßt.

Erweitert man die einfache Kette auf zwei Dimensionen und läßt auch Unordnung zu, so kann man die Schallausbreitung in granularen Materialien modellieren [Mel94, Lei94] und mit Experimenten [LJN91] vergleichen. Theorien zur Schallausbreitung in granularen Medien [Nes83, GS95, GSMF95, GSG95] wurden bisher kaum mit Simulationen oder Experimenten verglichen.

4.1.2 Der „Detachment“ Effekt und der „inelastische Kollaps“

Die Schallgeschwindigkeit nimmt mit zunehmender Kontaktdauer ab, während die Relaxationszeit eines Systems zunimmt. Dies wird wichtig, wenn die Relaxationszeit mit einer externen Anregungsperiode vergleichbar wird. Ist die Relaxationszeit sehr klein, kann das System innerhalb jeder Periode relaxieren, ist die Relaxationszeit jedoch groß, so wird sich das Systemverhalten ändern, da nicht mehr alle Energie innerhalb einer Periode dissipiert werden kann. Da geringere Dissipation zu einer höheren Energie und damit zu einer niedrigeren Dichte führen kann, wurde dieses Phänomen als Trennungseffekt (engl. „Detachment-effect“) bezeichnet

[LCB⁺94b, LCB⁺94a, LCB⁺95]. Mit abnehmendem freiem Volumen zwischen den Teilchen nimmt die Zeit zwischen den Stößen ab und für $t_c = 0$ kann die Kollisionsrate divergieren. Da jeder Kontakt dissipativ ist wird deshalb außer dem Relativabstand auch die Relativgeschwindigkeit der beteiligten Teilchen verschwinden. Dieses Phänomen wurde als „inelastischer Kollaps“ bezeichnet, da die Teilchen zu dichten Clustern kollabieren [BM90, GZ93].

Das Materialverhalten hängt u.a. vom Elastizitätsmodul und der Querdehnungszahl ab, und in der Regel findet man bei weicherem Material eine längere Kontaktdauer (siehe Abschnitt 3.5). Modelliert man Teilchenkontakte mit einer viskosen Dämpfung, so kann man eine weitere Facette des „Detachment“ Effekts beobachten. Da die Dissipation in diesem Fall von der Relativgeschwindigkeit der Teilchen abhängt, diese aber in einem dichten System sehr klein werden kann, nimmt mit zunehmender Dichte die Dissipation im System ab [LCB⁺94b, LCB⁺94a]. Dies kann zu einem kuriosen Oszillationsverhalten führen: Bei stetiger Energiezufuhr, wie z.B. in einem vibrierten Behälter, wird sich ein dichtes System in einer Periode verdünnen, weil die Dissipation ineffektiv wird. Das verdünnte System kann sich in der nächsten Periode verdichten, da bei niedriger Dichte die effektive Dissipation viel stärker ist. Somit kann man bei periodischer Anregung auch periodische Dichteschwankungen feststellen [LCB⁺94a].

Der wesentliche Unterschied zwischen „harten“ und „weichen“ Teilchen ist die Kontaktdauer: Bei einem unendlich steifen Potential verschwindet die Kontaktdauer, während ein realer Kontakt immer eine endliche Zeit andauert. Um die Konsequenzen der Kontaktdauer für die effektive Dissipation im System zu untersuchen, wird eine Reihe von Kugeln, wie oben beschrieben, mit Separation s_0 vorbereitet. Anstatt eines Teilchens nähert sich eine Wand mit konstanter Geschwindigkeit v_0 . Die Masse der Teilchen sei vernachlässigbar gegenüber der Wandmasse, d.h. der Massenschwerpunkt liegt in der Wand. Die effektive Restitution ist dann

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{e_f}{e_i}}, \quad (58)$$

mit der Anfangsenergie $e_i = \frac{Nm}{2}v_0^2$ und der Endenergie $e_f = \frac{m}{2}\sum_{i=1}^N v_i^2$ im Schwerpunktsystem.

In Abb. 12 ist ε_{eff} als Funktion von $\tau = s_0/(v_0 t_c)$ für verschiedene MD und ED Simulationen dargestellt. In dieser Simulation werden $N = 10$ Teilchen mit $\epsilon = 0.9$ verwendet. Im Fall des linearen Feder-Dämpfer-Modells (LSD) und der hysteretischen Wechselwirkung (HYS) ist $t_c = 8.4 \times 10^{-6}$ s und im Fall traditioneller ED ist $t_c = 0$ [LCB⁺95]. Die Anfangsgeschwindigkeit ist $v_0 = 0.5$ m/s und die Anfangssepation variiert zwischen $s_0 = 10^{-9}$ m und $s_0 = 3.2 \times 10^{-3}$ m. Anstatt die Anfangssepation zu variieren kann auch v_0 oder t_c variiert werden, was nichts an der erhaltenen Kurve ändert.

Alle Werte ε_{eff} hängen nur von τ und nicht direkt von den Werten von s_0 , v_0 oder t_c ab [LCB⁺94a]. Die beiden Modelle LSD und HYS zeigen eine deutliche Zunahme des effektiven Restitutionskoeffizienten ε_{eff} falls $\tau < 1$ wird. Das Verhältnis der Zeitskalen τ wird mit zunehmender Kontaktdauer t_c bzw. Relativgeschwindigkeit v_0 oder abnehmender Separation s_0 kleiner. Für $\tau > 1$ hängt die effektive Dissipation nicht vom Wechselwirkungsmodell ab. ED und MD (mit LSD oder HYS) führen zum

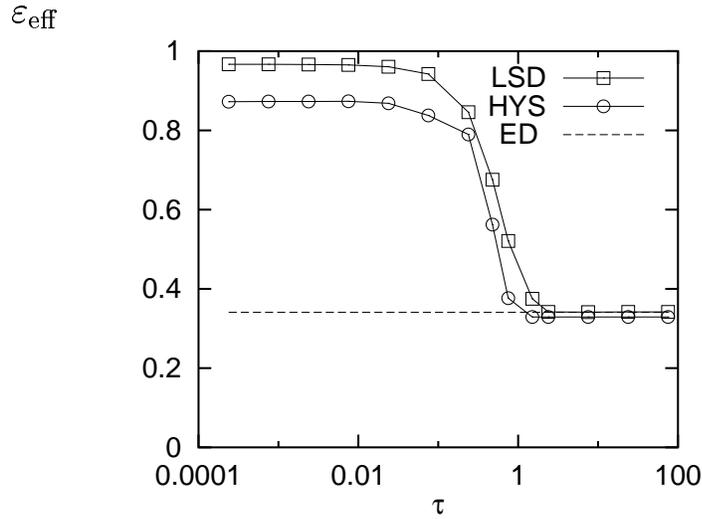


Abbildung 12: Linear-logarithmische Darstellung des effektiven Restitutionskoeffizienten ε_{eff} als Funktion von $\tau = s_0/v_0 t_c$. Mit verschiedenen Wechselwirkungsmodellen wurden $N = 10$ Teilchen mit $\epsilon = 0.9$ simuliert.

gleichen Wert $\varepsilon_{\text{eff}} \approx 0.34$ für $\tau > 2$. Die ED Methode führt, unabhängig von s_0 und v_0 , immer zum Ergebnis $\varepsilon_{\text{eff}} = 0.341 \pm 0.002$, während MD für $\tau < 1$ zu Ergebnissen führt, die vom Wechselwirkungsmodell abhängen.

Nun soll für $s_0 = 0$ m die Abhängigkeit von ε_{eff} von der Teilchenzahl untersucht werden. In Abb. 13 ist ε_{eff} als Funktion von N für verschiedene Wechselwirkungsmodelle (LSD, HYS und HKK) dargestellt. HKK bedeutet das Hertz-Kuwabara-Kono

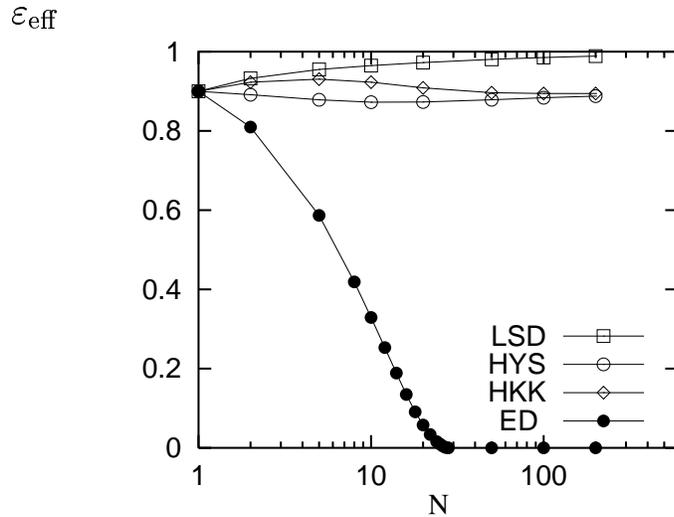


Abbildung 13: ε_{eff} als Funktion der Teilchenzahl N für $\epsilon = 0.9$, $s_0 = 0$ und $v_0 = 0.5$ m/s. Die verschiedenen Wechselwirkungsmodelle sind im Text genauer erläutert.

Modell [KK87] mit den Potenzen $\alpha = \zeta_0 = 1/2$ und $\zeta_1 = 0$ in den Gleichungen 35 und 36. Das LSD Modell mit $\alpha = \zeta_0 = \zeta_1 = 0$, $Yd/m_{12} = 8 \times 10^{10} \text{ s}^{-2}$ und $\eta d/m_{12} = 9.48 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$, führt zu einer mit der Teilchenzahl zunehmenden effekti-

ven Restitution. Das HKK Modell, mit $\alpha = \zeta_0 = 1/2$, $\zeta_1 = 0$, $Y\sqrt{d}/m_{12} = 2 \times 10^{12} \text{ m}^{-1/2}\text{s}^{-2}$ und $\eta\sqrt{d}/m_{12} = 3.5 \times 10^4 \text{ m}^{-1/2}\text{s}^{-1}$, führt ebenso wie das HYS Modell mit $k_1/m_{12} = 1.78 \times 10^{11} \text{ s}^{-2}$ und $k_2/m_{12} = 2.2 \times 10^{11} \text{ s}^{-2}$, zu einer beinahe von N unabhängigen effektiven Restitution. Der „Detachment“ Effekt ist also für kleine τ vom Wechselwirkungsmodell abhängig. Verwendet man weiche Teilchen, so nimmt die Dissipation pro Teilchen *nicht* mit der Teilchenzahl bzw. der Systemgröße zu: ein unintuitives Ergebnis.

Verwendet man stattdessen das ED Modell mit $t_c = 0$, so nimmt die Dissipation mit der Teilchenzahl zu, bis bei $N \approx 30$ alle Energie dissipiert wurde. Man beachte, daß der Wert von $\xi = N(1 - \epsilon) \approx 3.0$ mit der Vorhersage $\xi_c = \pi$ für den inelastischen Kollaps in eindimensionalen Systemen gut übereinstimmt [BM90, LCB⁺94c].

Der Unterschied zwischen den verschiedenen Wechselwirkungsmodellen wird auch deutlich, wenn man den Anteil $1 - e_{\text{rel}}/e_f$ der kinetischen Energie betrachtet, der in der Teilchenschwerpunktsbewegung steckt. Die kinetische Energie relativ zum Teilchenschwerpunkt ist $e_{\text{rel}} = (m/2)\sum_{i=1}^N (v_i - v_{c.m.})^2$ mit der Geschwindigkeit des Teilchenschwerpunktes $v_{c.m.}$ (e_{rel} wird oft als die granulare Temperatur des entsprechenden Systems bezeichnet). Ist $1 - e_{\text{rel}}/e_f$ groß, so bewegt sich das Material nach dem Stoß schnell von der Wand weg. In Abb. 14 ist $1 - e_{\text{rel}}/e_f$ von den Simulationen aus Abb. 13 als Funktion von N dargestellt. Die linearen Modelle LSD und HYS führen zu einem starken Rückprall, das nichtlineare HKK Modell zeigt schwächeren, kaum von N abhängigen Rückprall, und das ED Modell erlaubt für $N > 30$ keinen Rückprall.

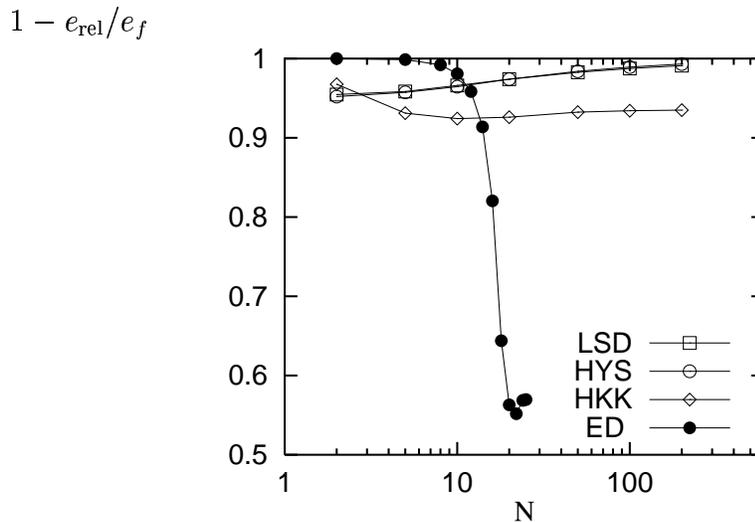


Abbildung 14: Anteil der Energie des Teilchenschwerpunktes nach dem Stoß mit der Wand, als Funktion von N für die Simulationen aus Abb. 13.

4.1.3 Zusammenfassung

Beim Vergleich verschiedener Wechselwirkungsmodelle zeigt sich, daß für Vielteilchen-Kontakte wesentliche Unterschied zwischen harten und weichen Potentialen bestehen. Die üblicherweise für MD Simulationen verwendeten Modelle (LSD, HYS oder HKK) zeigen eine nur schwach von der Teilchenzahl abhängige effektive Restitution. Eine

Zunahme der Teilchenzahl führt nicht zu einer Zunahme der effektiven Dissipation. Der Effekt ist für die linearen Wechselwirkungsmodelle am deutlichsten, besteht aber auch bei nichtlinearer Hertzscher Wechselwirkung. Bei kleinerem ϵ , d.h. stärkerer Dissipation, ist der Effekt in der gleichen Deutlichkeit vorhanden, während ED bereits für $N = 10$ und $\epsilon = 0.6$ zum inelastischen Kollaps führt, d.h. $\epsilon_{\text{eff}} = 0$.

Dieses Auftreten einer abnormal schwachen Dissipation im System hängt vom Verhältnis der Zeitskalen τ ab. Für große τ , d.h. niedrige Dichte, hohe Energie, steife Teilchen und damit kurze Kontaktdauern, ist die Dissipation effektiv und das Ergebnis einer Simulation ist beinahe modellunabhängig. Für kleine τ , d.h. hohe Dichte, kleines freies Volumen, niedrige kinetische Energie und lange Kontaktdauern, ist der „Detachment“ Effekt aktiv: Das System verhält sich trotz inelastischer Zwei-Teilchen-Stöße beinahe wie ein elastisches Material; es geht kaum Energie verloren und nach dem Stoß mit der Wand findet man große Relativenergie, d.h. die Teilchen lösen sich voneinander.

Da bei der ED Methode $t_c = 0$ ist, hängt das Resultat einer ED Simulation des Modellsystems nicht direkt von der Dichte oder der Energie ab. Man findet allerdings eine deutliche Abhängigkeit vom Restitutionskoeffizienten ϵ und der Teilchenzahl N , die sich in einer effektiven Dissipation $\xi = N(1 - \epsilon)$ ausdrücken läßt.

Bei der Durchführung von Computersimulationen granularer Medien muß man sich der Empfindlichkeit der Ergebnisse gegenüber der Wahl des Modells bewußt sein. Vor allem im Bereich hoher Dichte hängt das Resultat einer numerischen Untersuchung stark vom benutzten Modell ab. Deshalb ist ein kritischer Vergleich numerischer Ergebnisse mit Laborexperimenten immer zu empfehlen. Neben der Wahl des Modells ist auch die korrekte Einstellung der Parameter von Bedeutung, da z.B. die Materialsteifigkeit die Kontaktdauer beeinflusst, welche wieder den „Detachment“ Effekt kontrolliert.

Die Tatsache, daß sich Methoden mit weichem Wechselwirkungspotential so stark vom anderen Extrem des sehr steifen Potentials unterscheiden können, macht Experimente zu Vielteilchen-Effekten nötig. Der inelastische Kollaps ist ebenso wie der „Detachment“ Effekt ein Artefakt des Modells, und beide Effekte treten dann auf, wenn das jeweilige Modell seine Gültigkeit verliert. Der inelastische Kollaps tritt auf, sobald die physikalische Kontaktdauer wichtig ist, welche aber nicht im ED Modell enthalten ist. Den „Detachment“ Effekt findet man bei Vielteilchen-Kontakten, wenn die üblichen Modelle, die lediglich auf Elastizität, Viskosität und Plastizität basieren, fraglich werden. Die Frage nach der Gültigkeit von Wechselwirkungsmodellen und Computersimulationen ist für Vielteilchen-Kontakte noch immer unbeantwortet.

4.2 Der Spannungstensor

Zur Beschreibung des lokalen Zustands in einem System ist außer den Kräften auch der Spannungstensor σ geeignet [God86, BR88]. Der Spannungstensor σ kann bei bekannten Kräften und bekannter Kontaktgeometrie durch die Mittelung über alle Kontakte j der Teilchen i in einem Probevolumen V_c gewonnen werden:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V_c} \left[\sum_j r_\alpha f_\beta - \sum_i m_i v_\alpha v_\beta \right]. \quad (59)$$

Die Indizes α und β bezeichnen die orthogonalen Koordinaten, r_α sind die Komponenten des Vektors vom Schwerpunkt eines Teilchens zum Kontaktpunkt j , und f_β sind die Komponenten der an diesem Punkt wirkenden Kraft. $m_i v_\alpha$ und v_β sind die entsprechenden Impuls- und Geschwindigkeitskomponenten des Teilchens i .

Man kann ein festes Gitter über das System legen und durch Mittelung über die Zellen einen diskretisierten Spannungstensor auf einem homogenen Gitter erhalten, oder man kann jedes Teilchen als eine Zelle betrachten, wodurch man einen diskontinuierlichen Spannungstensor auf einem ungeordneten Gitter erhält (siehe Teil VI).

Von den Komponenten des Spannungstensors in 2D: σ_{xx} , σ_{zz} , σ_{xz} und σ_{zx} definiert man $\sigma^+ = (\sigma_{xx} + \sigma_{zz})/2$, $\sigma^- = (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})/2$ und $\sigma^* = \sigma_{xz}$. Im statischen Fall ohne Tangentialkräfte an den Kontakten ist der Spannungstensor symmetrisch, d.h. drehmomentfrei mit $\sigma_{zx} = \sigma_{xz}$. Die Eigenwerte sind $\sigma_{\max,\min} = \sigma^+ \pm \sqrt{(\sigma^-)^2 + (\sigma^*)^2}$, wobei der größere der beiden Eigenwerte um den Winkel

$$\phi(1) = \arctan \left(\frac{\sigma_{\max} - \sigma_{xx}}{\sigma_{xz}} \right) = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2\sigma_{xz}}{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}} \right) \quad (60)$$

von der Horizontalen gegen den Uhrzeigersinn gedreht ist.

Außer einer Betrachtung der einzelnen Komponenten des Spannungstensors, seiner Eigenwerte und seiner Orientierung kann man den Spannungstensor auch in seiner Hauptachsenform darstellen. Entlang des Winkels $\phi(1)$ wird eine Linie proportional zu σ_{\max} gezeichnet, die zweite Linie proportional zu σ_{\min} wird senkrecht dazu durch das Zentrum des Probevolumens gelegt, was ein Kreuz ergibt, von dem man das Verhältnis der Eigenwerte und die Orientierung des Spannungstensors direkt ablesen kann.

Um ein dichtes System der Länge $l = Ld$ zu beschreiben, muß man außer der Schallgeschwindigkeit $c \approx 2d/t_c$ auch die typische Zeit $\tau_s = l/c = Lt_c$ berücksichtigen. Dimensionslose Parameter können nun in Einheiten dieser typischen Größen ausgedrückt werden.

In einem quasi-statischen linear-elastischen Material sind typische Verformungen x/l das Verhältnis von lokaler Kraft (siehe Gleichung 25) und kl . Da die lokale Kraft mit dem Gewicht und der Gravitationskonstanten g skaliert, kann man die Beziehung $Lmg \propto kl$ bzw. $x \propto k/(mg)$ verwenden.

5 Der Übergang von Dynamik zu Statik

Das Verhältnis $\tau = t_n/t_c$ der Zeit zwischen Stößen t_n und der Kontaktdauer t_c wurde im vorigen Abschnitt eingeführt, und die Konsequenzen für Vielteilchen-Systeme wurden diskutiert. Solange $\tau \gg 1$ ist, spielt die Kontaktdauer eine untergeordnete Rolle, das entsprechende System ist relativ dünn, und es geschehen fast ausschließlich Zwei-Teilchen-Stöße. Für solche dynamischen Systeme ist die Simulationsmethode ED besonders geeignet, da die Kontaktdauer bei ED intrinsisch $t_c = 0$ ist. Andererseits ist die Kontaktdauer eine physikalische Materialeigenschaft und deshalb kann man ED Simulationen im Bereich $\tau < 1$ nicht mehr mit Experimenten vergleichen. In diese Klasse fallen alle statischen Probleme.

Bei der numerischen Simulation von granularen Systemen inelastischer, harter Kugeln führt die Clusterbildung zum „inelastischen Kollaps“, einer Divergenz der Kollisionsfrequenz, an dem in der Regel nur ein kleiner Anteil der Teilchen im System beteiligt ist. Diese Zunahme ist ein Artefakt des Harte-Kugel-Potentials, das unphysikalisch große Kräfte und damit unphysikalisch kurze Kontaktdauern zuläßt. Jeder physikalische Kontakt zweier Teilchen dauert eine endliche Zeit. Im statischen Grenzfall divergiert diese Zeit, und die Kollisionsfrequenz kann nicht höher sein als die inverse Kontaktdauer. Beim inelastischen Kollaps finden aber im Zeitintervall t_c möglicherweise viel mehr als nur wenige Kollisionen eines bestimmten Teilchens statt. Der inelastische Kollaps führt also zu einem starken Energieverlust, da die Teilchen bei jeder Kollision Energie dissipieren.

Auch aus alternativen Überlegungen zur Energie im System hat das Harte-Kugel-Potential keinen physikalischen statischen Grenzfall. Neben der potentiellen Energie im Gravitationsfeld gibt es keine potentielle Energie durch Teilchenkontakte. Durch Dissipation nimmt die kinetische Energie stetig ab, so daß im statischen Grenzfall die Energie vollkommen verschwindet [MY96, Lud97b].

Im folgenden wird beschrieben, wie man die zwei Hauptprobleme der ED Methode, nämlich die unphysikalisch kurze Kontaktdauer und die Divergenz der Ereignisrate beim inelastischen Kollaps verhindern kann. Durch die Einführung eines variablen, von der Kollisionsrate abhängigen Restitutionskoeffizienten wird der inelastische Kollaps umgangen und das Modell beinhaltet damit auch die fehlende Zeitskala.

5.1 Methoden zur Vermeidung des inelastischen Kollapses

Eine Möglichkeit, den inelastischen Kollaps zu umgehen, ist, Teilchen, die kaum mehr Relativenergie haben, zusammenzufassen und die Relativgeschwindigkeit zu Null zu setzen. Impulsausbreitung in einer solchen Ansammlung von sich berührenden Teilchen wird mit dem „Largest Relative Velocity“ Algorithmus (LRV) durchgeführt [LCB⁺94c]. Innerhalb des Clusters erfolgt demnach die Impulsausbreitung nach der Reihenfolge der größten Relativgeschwindigkeit. Diese Methode erlaubt sowohl Clusterbildung als auch Clusterauflösung bei genügend starker Energiezufuhr. Nachteile sind, daß das Modell bisher nur in einer Dimension angewendet werden konnte, daß Impulsausbreitung unendlich schnell erfolgen kann und daß der statische Grenzfall

keine Energie hat (abgesehen von der potentiellen Energie in einem evtl. vorhandenen Gravitationsfeld).

Die alternativen Methoden ähneln sich insofern, daß auf verschiedene Weise eine Restenergie im System gehalten wird. Man kann lokal zufällige Translations- oder Rotationsenergie zuführen, falls die Relativenergie bei einem Stoß unter einen bestimmten Schwellwert führt [DB97, Gro97]. Diese Methode verhindert den inelastischen Kollaps in den untersuchten Parameterbereichen. Die physikalische Bedeutung der zugeführten Fluktuationsenergie wurde bisher allerdings noch nicht diskutiert und die Fähigkeit der Methode, den inelastischen Kollaps unter allen Umständen zu vermeiden, ist fraglich. Identifiziert man die Fluktuationsenergie mit einer potentiellen Energie durch Kompression, so widerspricht eine konstante Kompression im System den experimentellen Befunden. Eine ähnliche Methode benutzt ein anderes Kriterium, das Energie zuführt, wenn eine kritische Distanz zwischen den Teilchen ständig unterschritten wird.

Eine deterministische Methode zur Vermeidung des inelastischen Kollapses vermeidet die unbegründete zufällige Energiezufuhr und deaktiviert stattdessen die Dissipation. Das Kriterium für elastische statt inelastischer Kontakte ist die Zeit seit dem letzten Kontakt. Unterschreitet diese die Kontaktdauer t_c , ist der folgende Kontakt elastisch. Diese Methode wird im folgenden auch als TC Methode abgekürzt. Die TC Regel beinhaltet keine Langzeiterinnerung, sondern nur ein „Gedächtnis“ in der Größenordnung der Kontaktdauer. Damit ist ein elastischer Grenzfall auch ohne artifizielle Energiezufuhr wohldefiniert [LCRD96, Lud97b]. Diese im folgenden genauer beschriebene Methode wurde erstmals zur Simulation von Oberflächenwellen verwendet, bei der die herkömmliche ED versagt [LCRD96]. Anstatt die Energie durch aufgesetzte Fluktuationen umzuverteilen, wird die Dissipation einfach abgeschaltet sobald die Kollisionsrate eines Teilchens einen bestimmten Wert überschreitet. Dadurch kann man verhindern, daß die Energie unter einen bestimmten Wert absinkt, die Teilchen kommen allerdings auch nie ganz zur Ruhe. Da die Zeitskala t_c bei „harten“ Kugeln ganz fehlt, scheint es gerechtfertigt, die kritische Kollisionsrate durch die Kollisionsdauer festzulegen, so daß die Kollisionen elastisch sind falls

$$f_c \geq 1/t_c \tag{61}$$

ist. Diese Methode hat mehrere interessante Aspekte: Erstens wird dadurch die fehlende Zeitskala t_c in die Methode übernommen, die genaue Bedeutung von f_c ist allerdings noch genauer zu untersuchen. Ein mögliches Gegenargument zur TC Methode, nämlich daß es Systeme gibt, bei denen alle kinetische Energie verschwunden ist, läßt sich am Beispiel des springenden Teilchens widerlegen (Abschnitt 3.1.1). Als Gedankenexperiment betrachte man einen Ball, der solange im Gravitationsfeld springt, bis all seine kinetische Energie dissipiert wurde. Allerdings ist damit nicht alle Energie verlorengegangen. Abgesehen von der, bis auf eine additive Konstante bestimmten, potentiellen Energie gibt es auch die im Kontakt gespeicherte Energie des abstoßenden Potentials. Angenommen es wäre möglich die Gravitation abzuschalten, so wird man in diesem Fall feststellen, daß sich der Ball mit endlicher Geschwindigkeit vom Boden wegbewegt. Die endliche kinetische Energie nach dem Abschalten der Gravitation kann als die im Kontakt gespeicherte potentielle Energie identifiziert werden. Da ein hartes Teilchen keine potentielle Energie hat, ist die nach Abschalten der

Dissipation verbleibende kinetische Energie einer potentiellen Energie des Kontaktes gleichzusetzen.

Die oben genannten Methoden zur Vermeidung des inelastischen Kollapses wurden noch nicht theoretisch untersucht. Bisherige Forschung auf numerischem bzw. theoretischem Gebiet war stets auf dynamische Systeme mit relativ schwacher Dissipation und hoher kinetischer Energie bzw. Systeme mit stetiger und starker Energiezufuhr beschränkt. Die Berücksichtigung obiger Regeln erlaubt auch die Beschreibung quasi-statischer Systeme mit Hilfe der kinetischen Gastheorie und besonders die Wahl der deterministischen TC Regel erlaubt die die Anwendung der Theorie ohne Zusatzannahmen.

5.2 Anwendung der TC Methode

Da die ED Methode jedes Ereignis separat behandelt, führt eine divergierende Kollisionsfrequenz zwangsläufig zu divergierender Rechenzeit. Da andererseits kein reales Teilchen verschwindende Kontaktdauer besitzt, löst man durch Einführung der kritischen Kollisionsfrequenz mit der TC Methode diese zwei Probleme gleichzeitig. Ist die Zeit zwischen Kontakten unter t_c gesunken, verliert außerdem der Restitutionskoeffizient ϵ , der für Zwei-Teilchen-Kontakte definiert wurde, seine Bedeutung. Deshalb wird im folgenden der von der Vorgeschichte des Teilchens abhängige Restitutionskoeffizient $\epsilon_n^{(i)}$ eingeführt. Ist die Zeit $t_n^{(i)}$ seit dem letzten Ereignis, an dem Teilchen i beteiligt war, kleiner als t_c , so findet keine Dissipation statt, d.h.

$$\epsilon_n^{(i)} = \begin{cases} \epsilon & \text{für } t_n^{(i)} > t_c \\ 1 & \text{für } t_n^{(i)} \leq t_c. \end{cases} \quad (62)$$

Die Erinnerung geht nur bis zum letzten Ereignis zurück, und ist außerdem auf eine Maximalzeit t_c beschränkt. Besitzen die Kollisionspartner eine Tangentialkomponente der Geschwindigkeit, so darf auch in Tangentialrichtung keine Dissipation stattfinden. Setzt man deshalb $\beta = -1$, bleibt die Tangentialkomponente der Energie erhalten (siehe Anhang E), man verliert allerdings alle Effekte der Reibung. Setzt man andererseits $\beta = 1$, so bleibt ebenso die Energie erhalten, man verliert aber den Parameter μ . Im folgenden wird $\beta = -1$ gesetzt, sobald in Gleichung 62 die Bedingung $t_n^{(i)} \leq t_c$ erfüllt und damit $\epsilon = 1$ ist. Die Form des Übergangs von dissipativen zu elastischen Kontakten ist weder theoretisch noch experimentell bekannt, so daß die einfache funktionale Abhängigkeit in Gleichung 62 nur eine mögliche Variante ist.

Betrachtet man das einzelne, springende Teilchen am Boden, das die Schwelle f_c bereits überschritten hat, und mittelt über mehrere Kollisionen mit dem Boden in einem Zeitintervall Δt , so kann man die Kraft f_1 berechnen, die das Teilchen auf den Boden ausübt. Bei einer Kollision mit Geschwindigkeit v_1 findet eine Impulsübertragung von $2mv_1$ statt und die Zeit zwischen zwei Stößen ist $t_1 = 2v_1/g$. Die Kraft auf den Boden ist $f_1 = (1/t_1)2mv_1 = mg$, wie von einem Teilchen der Masse m , das am Boden liegt, erwartet wird. Durch Einführung von $\epsilon_n^{(i)}$ wurde also der statische Grenzfall für ein Teilchen erreicht, wobei sogar die Kraft korrekt im Modell enthalten ist.

5.3 Viele Teilchen in einem Behälter

Um zu prüfen, ob der vorgeschlagene Restitutionskoeffizient $\varepsilon_n^{(i)}$ auch mit vielen Teilchen zum statischen Grenzfall führt, wird nun eine Simulation von N Teilchen mit Durchmesser d in einem sehr schmalen Behälter mit $l = 2.001d$ durchgeführt. Durch diese Geometrie bedingt, wird sich ein Endzustand von je zwei Teilchen nebeneinander und einer Füllhöhe von $N/2$ einstellen. Die Restitutionskoeffizienten sind $\epsilon = \epsilon_w = \epsilon_b = 0.6$, und alle Oberflächen sind glatt $\mu = \mu_w = \mu_b = 0$. Die Teilchen befinden sich im Gravitationsfeld mit $g = 9.81 \text{ m/s}^2$, die Simulation dauert $t = 1 \text{ s}$, und die Teilchenzahl und die kritische Zeit werden geändert. In Abb. 15(a) ist $C_c = n_c t_c / N$ die Anzahl der Ereignisse pro Teilchen innerhalb der Zeit t_c gegen die Zeit aufgetragen. Die Gesamtzahl der Ereignisse n_c nimmt mit zunehmender Teilchenzahl stark zu, weshalb auch der Rechenaufwand pro Teilchen mit der Teilchenzahl zunimmt. Bei Änderung von t_c in Abb. 15(b) verhält sich die Gesamtzahl der Ereignisse wie $n_c \propto 1/t_c$.

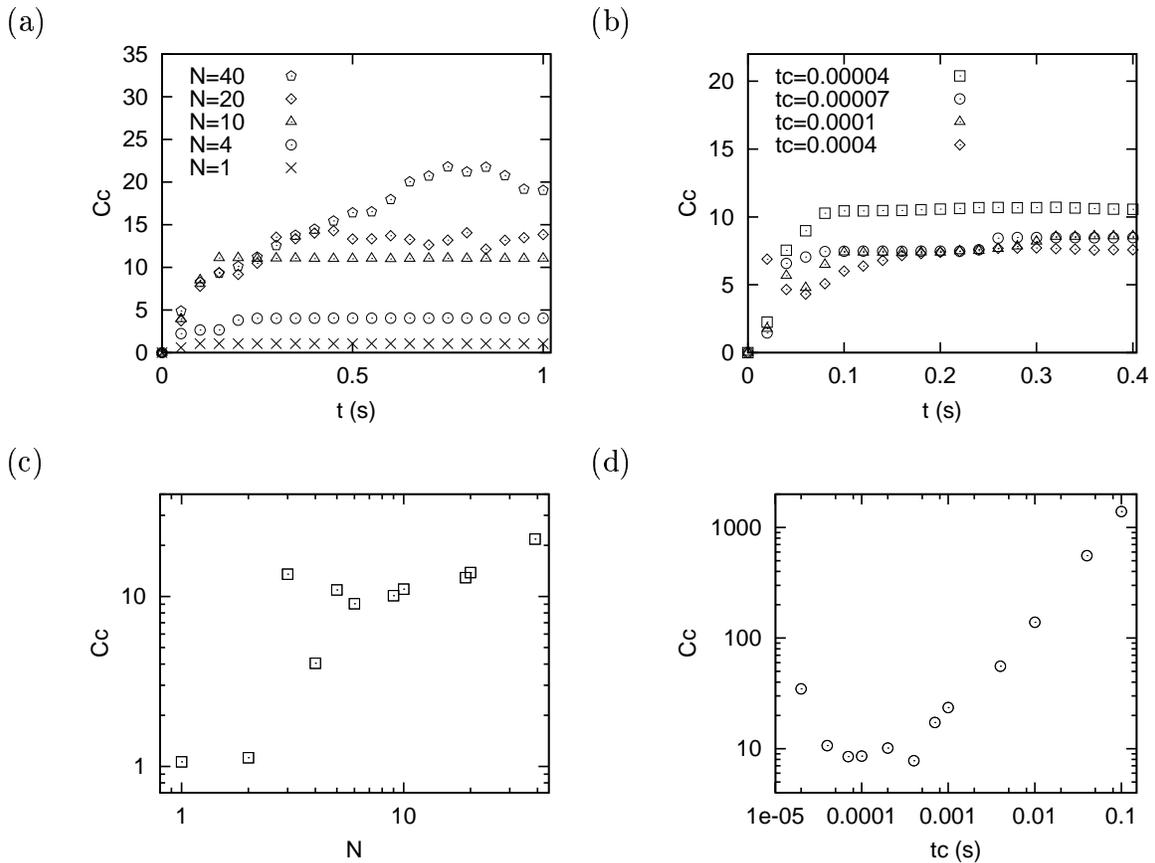


Abbildung 15: Anzahl der Ereignisse $C_c = n_c t_c / N$ pro Teilchen in der Zeit t_c , als Funktion der Simulationszeit t . Die Parameter sind $L = 2.001$, $\epsilon = 0.6$ und $\mu = 0$. (a) $t_c = 0.0001 \text{ s}$ mit verschiedenen N , (b) $N = 10$ mit verschiedenen t_c . (c) Anzahl der Kollisionen C_c im statischen Grenzfall ohne Dissipation mit (c) $t_c = 10^{-4} \text{ s}$ für verschiedene N und (d) $N = 10$ für verschiedene t_c .

In Abb. 15(c) und (d) sind die Werte von C_c für lange Zeiten als Funktion von N und t_c aufgetragen. C_c nimmt mit zunehmendem N deutlich zu. Dabei bemerkt

man, daß C_c für ungerade Teilchenzahlen höher liegen kann als für die nächsthöhere gerade Zahl. Andererseits gibt es einen optimalen Bereich von t_c Werten, in dem sich C_c nicht wesentlich ändert. Unterhalb und oberhalb dieses Bereichs kann C_c stark zunehmen.

Eine Vorhersage für das Auftreten des „inelastischen Kollapses“ bei der klassischen ED Methode [LCB⁺94b] ist die Regel $n_h(1 - \epsilon) > 3$, wobei $n_h = Nd/l$ die dimensionslose Füllhöhe bzw. die Anzahl der Lagen im Ruhezustand ist. Nach dieser Abschätzung müßte eine Simulation mit $N = 40$ Teilchen, d.h. $n_h(1 - \epsilon) = 8$ zum „inelastischen Kollaps“ führen. Dank der Einführung des Restitutionskoeffizienten in Gleichung 62 wurde das verhindert – ED Simulationen sind nun auch in Bereichen möglich, die vorher nicht zugänglich waren. Es stellt sich im Grenzfall langer Zeiten ein quasi-stationärer Zustand ein, in dem sich die Energie und die Kollisionsrate der Teilchen nicht mehr ändert.

Teil III

Vibrierte granulare Medien

Um zu verhindern, daß granulare Medien im Gravitationsfeld zur Ruhe kommen wird Energie durch Vibration des Behälters zugeführt. Der sich einstellende Gleichgewichtszustand wird untersucht und kollektive Effekte wie Konvektion und Entmischung werden modelliert.

6 Überblick

Füllt man granulares Material im Gravitationsfeld in einen Behälter und beginnt diesen vertikal zu schütteln, wird man, je nach Anregungsamplitude und -frequenz, verschiedene Phänomene entdecken. Für eine Vorhersage dieser breiten Klasse von möglichen Effekten muß man wissen, wie hoch der Container mit welchem Material gefüllt ist und wie stark und schnell das Schütteln erfolgt. Man findet unterschiedliche Verhaltensweisen für wenige Teilchen, dünne Schichten oder tiefe Füllungen. Anstatt einer Änderung der Füllhöhe, wird ein ähnlicher Effekt durch ein Material mit stärkerer Dissipation erzielt.

6.1 Phänomenologie

Wenige Teilchen im Behälter sind beinahe unabhängig voneinander und wechselwirken meist mit den Behälterwänden. Bei zu schwacher Vibration des Behälters bleiben die Teilchen einfach am Boden liegen. Übersteigt die Anregungsbeschleunigung den Wert der Gravitationsbeschleunigung, so beginnen die Teilchen zu springen, stoßen mit den Wänden und selten auch untereinander. Erhöht man die Anregungsenergie weiter, wird schließlich ein gasartiger Zustand erreicht. Dieses System entspricht am ehesten einem eindimensionalen, einzelnen Teilchen auf einer vibrierenden Platte [SSJ81, Pie83, PKF85, PB85a, PB85b, Eve85, TMC⁺86, GZ87, Pie88, SCB90, ML90, LM93, WH95, Pie97b, Pie97a], an dem man bereits solch interessante Phänomene wie Bifurkationen, Periodenverdopplung und Chaos demonstrieren kann.

Dünne Schichten sind schon mit niedriger Anregungsenergie in einen fluidisierten Zustand zu überführen bzw. können mit sehr schwacher Anregung in diesem Zustand gehalten werden [OUO80, SF88, CZ92, ZC92, CLB⁺93, LCB⁺94c, LHB94, Lud95, WHJ95, WH96, GSMF95]. Fluidisiert bedeutet, daß die Teilchen relativ dicht ge-

packt sind, sich aber dennoch leicht gegeneinander bewegen können. Die mittlere freie Weglänge ist dabei kleiner als die Teilchengröße. Bei entsprechend stärkerer Vibration wird wieder ein gasartiger Zustand auftreten, bei dem die mittlere freie Weglänge deutlich größer werden kann als die Größe einzelner Teilchen [LCB⁺94c, LCB⁺94b, LHB94, LCB⁺94a]. In einem engen Parameterbereich kann man in breiten Behältern mit Füllhöhen von wenigen Teilchen – ähnlich wie bei Flüssigkeiten – die Bildung von Oberflächenwellen beobachten [DFL89, PB93, MUS94, MUS95, UMS96, CVRD96, LCRD96, Was97, Lud97b, MKJ97, Shi97]. Erfolgt die Vibration zu schnell, haben die Wellen keine Zeit sich auszubilden, ist die Anregung zu schwach bzw. die Dissipation zu hoch, so reicht die zugeführte Energie nicht aus, um das Material zu fluidisieren, geschweige denn Oberflächenwellen herbeizuführen. Ist andererseits die Vibrationsenergie zu hoch bzw. die Dissipation zu schwach, so wird man den gasartigen Zustand erreichen, in dem kollektive Phänomene wie Oberflächenwellen wegen der niedrigen Dichte nicht möglich sind (siehe Kapitel 13). Schockwellen im granularen System sind dagegen in allen vibrierten Systemen festzustellen [SJF84, Lee95, AA95, GSMF95, GSG95, LD96, McN96, WH96].

Schüttelt man Behälter mit *tiefen Füllungen*, so wird es schwerfallen, den gasartigen Zustand zu erreichen. Dennoch ist es interessant zu beobachten, wie der Übergang von Statik zu Dynamik stattfindet und wie sich das Material im Behälter verhält. Überschreitet man mit der Anregungsbeschleunigung einen kritischen Wert, der nicht unbedingt genau der Erdbeschleunigung entsprechen muß, so löst sich der Block granularer Materials etwas vom Boden. Das Material kann kurzzeitig leicht verdünnt werden [DMCR94a, DML⁺96], um beim nächsten Stoß mit dem Boden wieder verdichtet zu werden. Eine genaue Untersuchung der Verdünnung, d.h. der Übergang von Statik zu Dynamik, wird in Teil IV beschrieben. Nach sehr vielen Stößen kann manchmal eine Netto-Verdichtung des Materials festgestellt werden [AS66, KFL⁺95, OR95, BNKN96, Lin96, NCH97]. Die Relativbewegung der Teilchen zu den Wänden kann durch die Teilchen-Wand-Reibung zu „Rissen“ im Material führen, und im Mittel werden die Teilchen in der Nähe der Wand stärker nach unten beschleunigt als Teilchen in der Mitte des Systems. Dies führt über viele Vibrationszyklen gemittelt zu Konvektion [Far31, LDF89, Raj91, CDR92, GHS92, Tag92, LCB⁺94b, BM95, EJK⁺95, HYH95, PH95, Gro97]. Die Konvektion in granularen Materialien hängt, im Gegensatz zu Flüssigkeiten, wesentlich von der Beschaffenheit der Wände ab (siehe Abschnitt 8.1). Begleiterscheinungen von Konvektion können Haufenbildung [LDF89, CDR92] oder Entmischung sein [AS73, SB78, HW86, RPS⁺86, RSP⁺87, JM88, JM90, Dev90, AL90, BG90, ABS91, JM92b, DRC93, BMG93, BM93, JMP93b, KJN93, OTH⁺93, DMCR94b, CWHB96, DL95, PH95, GHPo96, VRD97]. Entmischung kann allerdings auch eine Vielzahl anderer Ursachen haben [Mat65, Wil76, Som79, RLW91, Cho95, LDCR96b] und tritt auch in anderen Geometrien wie z.B. rotierenden Trommeln oder Silos auf.

6.2 Theorie, Experimente und Simulationen

Granulare Systeme in vibrierten Behältern wurden anhand quasi-ein- und quasi-zweidimensionaler Modellsysteme experimentell [CR91, CLB⁺93, LCB⁺94c, WHJ95], theoretisch [Haf83, Sav88, GSMF95, LD96] und numerisch [GHo92a, Her92, CLB⁺93, LCB⁺94c] untersucht.

Theoretische Ansätze, analog zur kinetischen Gastheorie [Sav79, Haf83, JS83, GS95], sind wegen des komplexen Randwertproblems einer bewegten Wand nur schwer anzuwenden und konnten bisher nur für wenige Randbedingungen gelöst werden [GSMF95, MB97]. In einer Dimension wurde die Boltzmann-Gleichung um die dissipative Wechselwirkung erweitert [MBD94] und konnte für die Grenzfälle starker und schwacher Dissipation gelöst werden.

Der experimentelle Zugang zu einem realen dreidimensionalen System ist schwierig, da das Material in der Regel nicht durchsichtig ist. Deshalb ist man darauf angewiesen, Modellsysteme mit reduzierter Dimension zu untersuchen oder auf modernste technische Geräte, wie z.B. Kernspintomatographen, zurückzugreifen. In zweidimensionalen Modellsystemen verwendet man üblicherweise Hochgeschwindigkeits-Video-Kameras mit anschließender digitaler Bilderfassung [WHJ95, WJH94, FLCA94], womit man die Trajektorien und die Rotation der Teilchen erfassen und auswerten kann.

Numerische Simulationen solcher Systeme sind ein hilfreiches Instrument, um detailliertere Informationen und Einsichten zu erhalten. Die Mehrzahl der Simulationen vibrierter granularer Systeme wurde mit der klassischen Molekulardynamik (MD) durchgeführt [WB86, Tag92, GHS92, LCB⁺94b, LCB⁺94a, Koh94], während die Ereignis-Dynamik (ED) nur selten verwendet wurde [AT87, LCB⁺94c, LHB94, MBD94, DLK95, Lud95]. Ein Vergleich von MD und ED Simulationen zeigte bei Anwendung auf vibrierte Systeme [LHB94, LCB⁺94a, Lud95], daß beide Methoden im Bereich geringer Dichte äquivalent sind. Dies ist einfach zu verstehen, wenn man berücksichtigt, daß der wesentliche Unterschied der beiden Methoden die Wechselwirkungsdauer der einzelnen Teilchen ist. Bei niedrigen Dichten ist die Zeit zwischen den Stößen sehr viel größer als die Dauer eines Stoßes, so daß ein Unterschied in der Kontaktdauer nicht ins Gewicht fallen kann. Wird die Zeit zwischen Kontakten vergleichbar oder gar kleiner als die Dauer eines Stoßes, so liefern beide Methoden stark unterschiedliche Ergebnisse [LCB⁺94a]. Die „harten“ Teilchen in der ED Methode können in der gleichen Zeit viel mehr Stöße ausführen als die „weichen“ Partikeln der MD Methode, was zu einer schwächeren Dissipation in Systemen weicher Teilchen führt (siehe Kapitel 4). Die effektive Dissipation eines Systems ist also eine Funktion der Steifigkeit der Teilchen: ein Tausch des Materials, bei gleichzeitigem Festhalten aller anderen Parameter, kann also zu einer massiven Veränderung des Systemverhaltens führen. Dieses Phänomen wurde als „Detachment“ Effekt, also Trennungseffekt, bezeichnet [LCB⁺94a], da verringerte Dissipation zu einer Verdünnung, also einer stärkeren Trennung der Teilchen, führt. Da das Systemverhalten stark von der Dichte abhängt, hängt es indirekt auch von den Materialparametern ab. Konvektion in vibrierten Behältern konnte mit der Steifigkeit moduliert werden: Hartes Material unterdrückt, weiches Material begünstigt die Entstehung von Konvektion [LCB⁺94b].

7 Skalierung vibrierter granularer Systeme

Experimentelle und numerische Untersuchungen zu vibrierten Granulaten wurden in 1D [CLB⁺93, LCB⁺94c, MBD94] und auch in 2D [BGW93, RL93, LHB94] vorgenommen. In den Arbeiten zu zweidimensionalen Systemen wurde der Übergang vom fluidisierten zum gasartigen Zustand untersucht – die numerischen Arbeiten vernachlässigten dabei jedoch den Rotationsfreiheitsgrad. Bei kleiner Anregungsbeschleunigung und hoher Dichte wurde erkannt, daß das Systemverhalten im wesentlichen von der maximalen Beschleunigung des Behälters beeinflußt wird [BGW93]. Bei stärkerer Beschleunigung findet ein Übergang vom relativ dichten Zustand zu einem dünneren Zustand statt, dessen Energie aber mit der typischen Anregungsenergie bzw. -geschwindigkeit $V = a\omega$ mit Amplitude a und Frequenz $f = \omega/(2\pi)$ skaliert. Skalierung bedeutet, daß die Meßgrößen des Systems nur von V abhängen und nicht von den Parametern, die V bestimmen. Gemessen wurden die typische Ausdehnung bzw. die Höhe des Massenschwerpunktes h_c und die typischen Energien im System [LHB94]. Das interessante und unerwartete Ergebnis der numerischen Simulationen war nicht, daß die potentielle Energie mit der typischen Geschwindigkeit V der Vibrationsbewegung des Behälters skaliert, sondern daß ein Potenzgesetz der Form $h_c \propto V^\kappa$ gefunden wurde. Kinetische Theorien sagen eine Potenz von $\kappa = 2$ unabhängig von der Dimension voraus [Lee95, WHJ95]. Simulationen führen nur in einer Dimension zu $\kappa = 2$ [CLB⁺93, LCB⁺94c], in zwei Dimensionen jedoch zu $\kappa \approx 1.5$ [LHB94]. Dieses Resultat numerischer Simulationen wurde ein Jahr später experimentell bestätigt [WHJ95], wobei Potenzen zwischen $\kappa = 1.3$ und $\kappa = 1.4$ gefunden wurden. Im gleichen Zeitraum wurden weitere Simulationen vorgenommen, die sich an dem experimentell bestätigten Kollisionsmodell [FLCA94] orientieren (siehe Abschnitt 3), und eine Rotation der Teilchen zulassen [Lud95]. Gleichzeitig wurde mit einer anderen Simulationsmethode (MD) das Skalierungsverhalten mit $\kappa < 2$ bestätigt und Vergleiche mit der kinetischen Gastheorie wurden vorgenommen [Haf83, Lee95]. Auch dieser theoretische Ansatz führte zur Potenz $\kappa = 2$, wobei Aussagen nur über den dichten und den hochverdünnten Grenzfall getroffen werden konnten. Die Frage, ob $\kappa < 2$ nur ein zweidimensionales Artefakt ist, wurde kürzlich verneint. Mit unterschiedlichen dreidimensionalen numerischen Methoden wurde eine Potenz $\kappa < 2$ nachgewiesen [MLH97]. Die offenen Fragen, ob die seltsame Potenz $\kappa < 2$ nur in einem Übergangsbereich auftritt und ob die Potenz von der sinusförmigen Anregung herrührt, sind Gegenstand aktueller Forschung. Erste Untersuchungen zu granularen Materialien in geschlossenen vibrierten Behältern ohne Gravitation zeigen eine deutliche Abhängigkeit der mittleren Energie von der Form der Anregungsbewegung. Symmetrische und asymmetrische Anregungen bedingen unterschiedliche Energie und unterschiedliches Skalierungsverhalten [MB97]. Diese Erkenntnis ist wichtig, da für kinetische Theorien üblicherweise eine zufällige, im Mittel positive Anregungsenergie angenommen wird, ohne die Form genauer zu spezifizieren.

Neben der Skalierung mit der Anregungsgeschwindigkeit V wurde festgestellt, daß die potentielle Energie des Systems im angeregten Zustand umgekehrt proportional zur Füllhöhe ist, d.h. $h_c \propto N^{-\varphi}$. Numerische Rechnungen mit reibungsfreien Teilchen zeigen $\varphi \approx 1$ [LHB94], wohingegen Experimente zu Potenzen $0.3 < \varphi < 1$ führen [WHJ95]. Da Simulationen mit Rotation keine derart kleinen Potenzen φ zeigen, kann dieser Unterschied z.B. von den Wänden in der dritten Dimension herrühren,

welche in den Simulationen bisher vernachlässigt wurden.

Im folgenden wird das Modellsystem genauer beschrieben, und zweidimensionale numerische Simulationen von vibrierten mit granularem Material gefüllten Behältern werden durchgeführt. Nach der Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für den Stoßparameter, die Dichte und die Geschwindigkeit wird ein vereinfachter theoretischer Ansatz vorgestellt, der die Skalierung mit den Parametern V und N bis auf die Potenzen erklärt. Für verschiedene Materialparameter und Randbedingungen werden weitere Ergebnisse diskutiert und abschließend werden die gewonnenen Erkenntnisse zusammengefaßt und die weiterhin offenen Fragen formuliert.

7.1 Das Modellsystem

Das Modellsystem besteht aus einem rechteckigen Behälter der Breite l und der dimensionslosen Breite $L = l/d_0$ bei einer mittleren Teilchengröße d_0 . Der Behälter hat unendlich hohe Wände und keine Abdeckung. Dies erlaubt, im Gegensatz zu Experimenten, eine wesentlich breitere Variation der Anregungsparameter. Die Anregung wird durch die vertikale Position der Bodenplatte des Behälters

$$z_0(t) = a \sin(2\pi ft), \quad (63)$$

zur Zeit t eindeutig festgelegt, und die vertikalen Wände können von dieser Bewegung entkoppelt werden. In Gleichung 63 sind a die Amplitude und f die Frequenz der Schwingung. Die typische Geschwindigkeit der Bodenplatte ist $V = a\omega$, mit $\omega = 2\pi f$, und die typische dimensionslose Beschleunigung ist $\Gamma = a\omega^2/g$.

Der Behälter wird mit N Kugeln des Durchmessers d_i ($i = 1, \dots, N$) gefüllt. Wenn nicht besonders erwähnt, ist d_i gleichverteilt im Intervall $d_0(1-w_0) \leq d_i \leq d_0(1+w_0)$, wobei hier $d_0 = 1$ mm und $w_0 = 0.1$ verwendet wird. Die Materialeigenschaften dieser Kugeln werden, wie in Abschnitt 3 beschrieben, durch die Parameter Restitutionskoeffizient ϵ , Reibungskoeffizient μ und Tangentialrestitutionskoeffizient β_0 festgelegt. Die möglicherweise unterschiedlichen Parameter bei Wechselwirkung mit den Wänden oder mit der Bodenplatte werden entsprechend durch den Index w oder b gekennzeichnet. Zur Vereinfachung wird in den meisten Simulationen ein elastischer Boden benutzt ($\epsilon_b = 1$), der perfekt glatt ist ($\mu_b = 0$).

In Abb. 16 sind Momentaufnahmen typischer Simulationen mit verschiedenen Γ Werten dargestellt. Mit zunehmender Beschleunigung und damit ebenso zunehmender Anregungsgeschwindigkeit wird das System immer dünner. Abb. 17 zeigt eine Zeitserie über eine Periode der Simulation in Abb. 16(b). Die Phase ist in einer Periode $\phi = tf$, wobei $0 < t \leq 1/f$ ist. Man bemerkt, daß die Dichte von der Phase abhängt: Während sich die Bodenplatte nach oben bewegt wird das Material komprimiert (k,l,a), bei Erreichen einer genügend starken Beschleunigung löst sich das Material von der Bodenplatte (c,d) und beschreibt eine Wurfparabel, wobei die Dichte stetig abnimmt (e-i), solange bis das Material wieder auf die Bodenplatte trifft (j).

Zur Klassifizierung des Systemzustands werden in der Regel drei Meßgrößen bestimmt: die reduzierte Höhe des Massenschwerpunktes h_c , die Translationsenergie K und die Rotationsenergie R . Die Mittelung wird zur der Phase $\phi = 0$ vorgenommen, d.h. wenn sich die Bodenplatte gerade mit der maximalen Geschwindigkeit $V = a\omega$ nach oben bewegt. Die reduzierte Höhe des Massenschwerpunktes ist definiert als

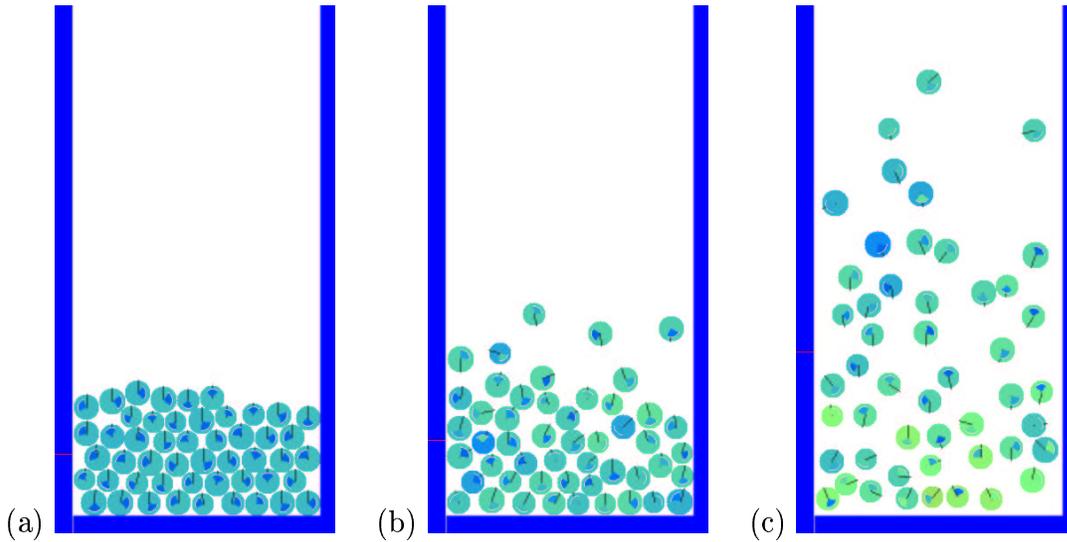


Abbildung 16: Vibrierte Behälter mit $N = 50$ Kugeln mit $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.5$ und $\beta_0 = 0.5$ bei einer Anregungsfrequenz von $f = 20$ Hz und verschiedenen Beschleunigungen (a) $\Gamma = 1.5$, (b) $\Gamma = 2$ und (c) $\Gamma = 4$ zur Phase $\phi = 0$. Die kinetische Energie nimmt in der Reihenfolge blau-grün-rot zu.

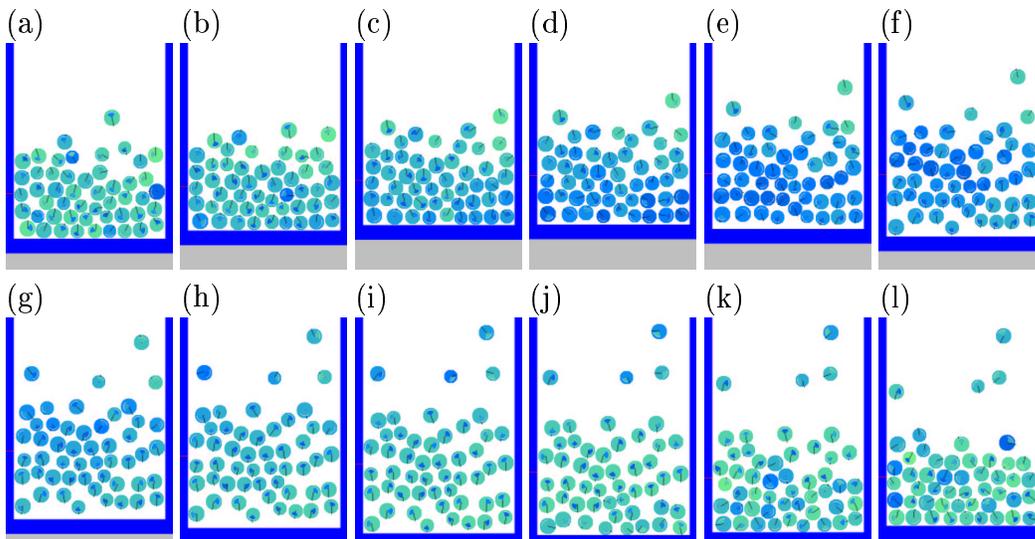


Abbildung 17: Zeitserie der Simulation eines vibrierten Behälters mit $N = 50$ Kugeln mit $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.5$ und $\beta_0 = 0.5$ bei einer Anregungsfrequenz von $f = 20$ Hz mit Beschleunigung $\Gamma = 2$, während einer Periode an den Phasen $\phi =$ (a) $1/12$, (b) $2/12$, (c) $3/12$, (d) $4/12$, (e) $5/12$, (f) $6/12$, (g) $7/12$, (h) $8/12$, (i) $9/12$, (j) $10/12$, (k) $11/12$ und (l) 1 .

$h_c = h_{c.m.} - h_{c.m.0}$, wobei $h_{c.m.} = (1/M) \sum_{i=1}^N m_i z_i$ die momentane Höhe ist, von der die Höhe $h_{c.m.0}$ im Ruhezustand abgezogen wird. M ist die Gesamtmasse der Teilchen im System $M = \sum_{i=1}^N m_i$ mit der Masse m_i und der Vertikalkoordinate z_i des Teilchens i . Im Ruhezustand kann für $w_0 = 0$ die Höhe des Massenschwerpunktes im Ruhezustand exakt berechnet werden:

$$h_{c.m.0} = \frac{Ld_0}{2N} \left[(1 - \sqrt{3}/2)H + \sqrt{3}/2H^2 \right] + \frac{N_0 d_0}{2N} \left[1 + \sqrt{3}H \right]. \quad (64)$$

Dabei sind L die durchschnittliche Teilchenzahl in einer Schicht, $H = \text{int}[N/L]$ die Anzahl der gefüllten Schichten und $N_0 = N - HL$ die Anzahl der Teilchen in der obersten, unvollständigen Schicht. Mit $N = 50$, $d_0 = 1$ mm und $l = 10d_0$ ergeben sich $L = 10$, $H = 5$ und $N_0 = 5$, was zu $h_{c.m.0} = 2.492 \times 10^{-3}$ m führt. Variiert man L um ± 1 so ändert sich h_c nicht wesentlich, solange $V > 0.1$ m/s ist. Für sehr kleine V Werte und polydisperse Teilchen ist Gleichung 64 nicht mehr gültig, aber dennoch eine gute Näherung.

Die mittlere potentielle Energie eines Teilchen ist mgh_c , wobei $g = 9.81$ m/s² die Gravitationsbeschleunigung ist. Unter Vernachlässigung des Vorfaktors $m/2$ ergeben sich $K = (1/M) \sum_{i=1}^N m_i v_i^2$ mit der Teilchengeschwindigkeit v_i und analog $R = (q/M) \sum_{i=1}^N m_i (\omega_i d_i / 2)^2$ mit der Winkelgeschwindigkeit ω_i und dem Trägheitsmoment $qm(d_i/2)^2$ des Teilchens i .

7.2 Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Um zu verstehen, wie sich ein System dissipativer Teilchen von einer klassischen „Harte-Kugel“-Flüssigkeit unterscheidet, ist es zweckmäßig, die Verteilungsfunktionen zu untersuchen. Die erste interessante Größe ist der Stoßparameter b , der in einem zweidimensionalen System von niedriger Dichte gleichverteilt vorkommt. In Abb. 18 ist die Wahrscheinlichkeit $P(b/d)$ dargestellt, einen bestimmten Stoßparameter b/d bei einer Kollision zu finden.

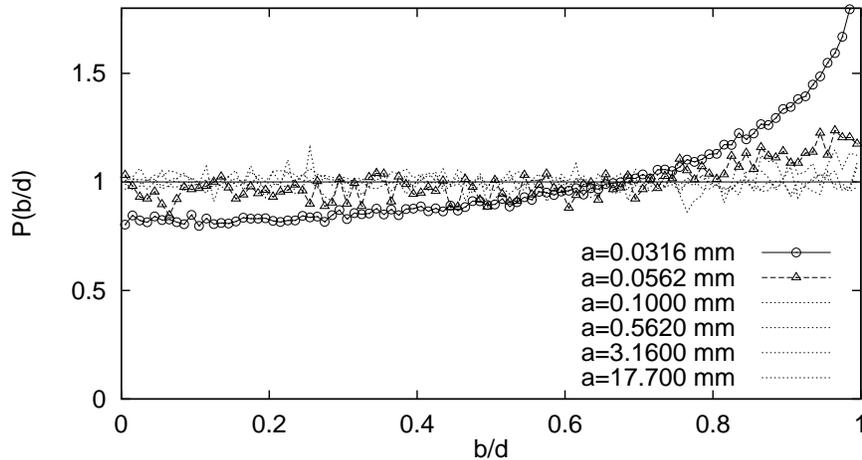


Abbildung 18: Die Wahrscheinlichkeit $P(b/d)$ als Funktion von b/d für Simulationen mit $N = 100$, $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0$, $L = 10$, $f = 100$ Hz und verschiedenen Amplituden $a = 0.0316, 0.0562, 0.1, 0.562, 3.16$ und 17.7 mm.

Abgesehen von den beiden Simulationen mit den kleinsten Anregungsamplituden, die den Beschleunigungen $\Gamma = 1.27$ und 2.26 entsprechen, ist der dimensionslose Stoßparameter im Intervall $0 \leq b/d < 1$ gleichverteilt. Man beachte, daß diese Gleichverteilung nur in 2D gilt und daß $P(b/d)$ in 3D linear mit b/d ansteigt.

Bei den Simulationen mit den kleinen Amplituden $a \leq 0.1$ mm ist das System relativ dicht gepackt. Dies wird deutlich, wenn man das vertikale Dichteprofil für verschiedene Amplituden vergleicht. In Abb. 19(a) sind die Dichteprofile von vier der Simulationen aus Abb. 18 dargestellt. Man erkennt, daß die typische Dichte mit zunehmender Amplitude stark abnimmt. Skaliert man die Höhe z mit einem Faktor $a^{-3/2}$ und die Dichte dementsprechend mit dem Faktor $a^{3/2}$, so ergibt sich, wie in Abb. 19(b) gezeigt, eine Übereinstimmung der Dichteprofile für große Amplituden. Das Dichteprofil für $a = 0.1$ mm zeigt eine beinahe konstante Dichte im unteren Bereich, während bei größeren Amplituden die Dichte im unteren Bereich leicht mit z zunimmt. Die Dichte als Funktion der Horizontalen koordinate ist in diesen Simulationen konstant.

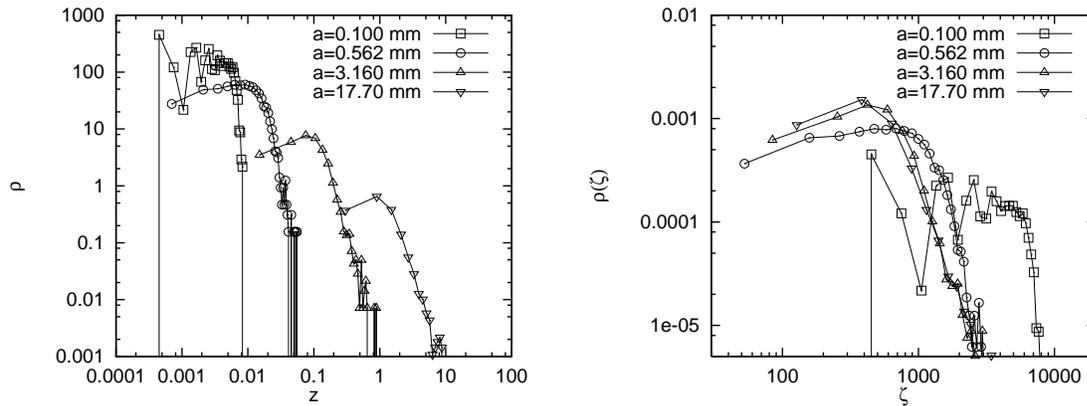


Abbildung 19: (a) Log-log Darstellung der Dichte ρ als Funktion der Höhe z für Simulationen mit $N = 100$, $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0$, $L = 10$, $d_0 = 1$ mm, $w_0 = 0$, $f = 100$ Hz und verschiedenen Amplituden $a = 0.1$, 0.562 , 3.16 und 17.7 mm. (b) Log-log Darstellung der skalierten Dichte $\rho(\zeta) = \rho a^{3/2}$ als Funktion der skalierten Höhe $\zeta = z a^{-3/2}$ für die Simulationen in (a).

Von Interesse ist außerdem die Geschwindigkeitsverteilung in horizontaler und in vertikaler Richtung. In Abb. 20 sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $P(u_x)$ für horizontale und $P(u_z)$ für vertikale Geschwindigkeiten dargestellt. Mit zunehmender Amplitude werden die Verteilungsfunktionen immer breiter. Bei kleinen Amplituden ist kein Unterschied zwischen $\epsilon_w = 0.9$ und $\epsilon_w = 1.0$ festzustellen, wohingegen bei großen Amplituden und niedrigen Dichten die Dissipation an der Wand zu einer verringerten mittleren Geschwindigkeit führt. Die Vertikalgeschwindigkeitsverteilung ist asymmetrisch, d.h. große Aufwärtsgeschwindigkeiten sind wahrscheinlicher als große Abwärtsgeschwindigkeiten.

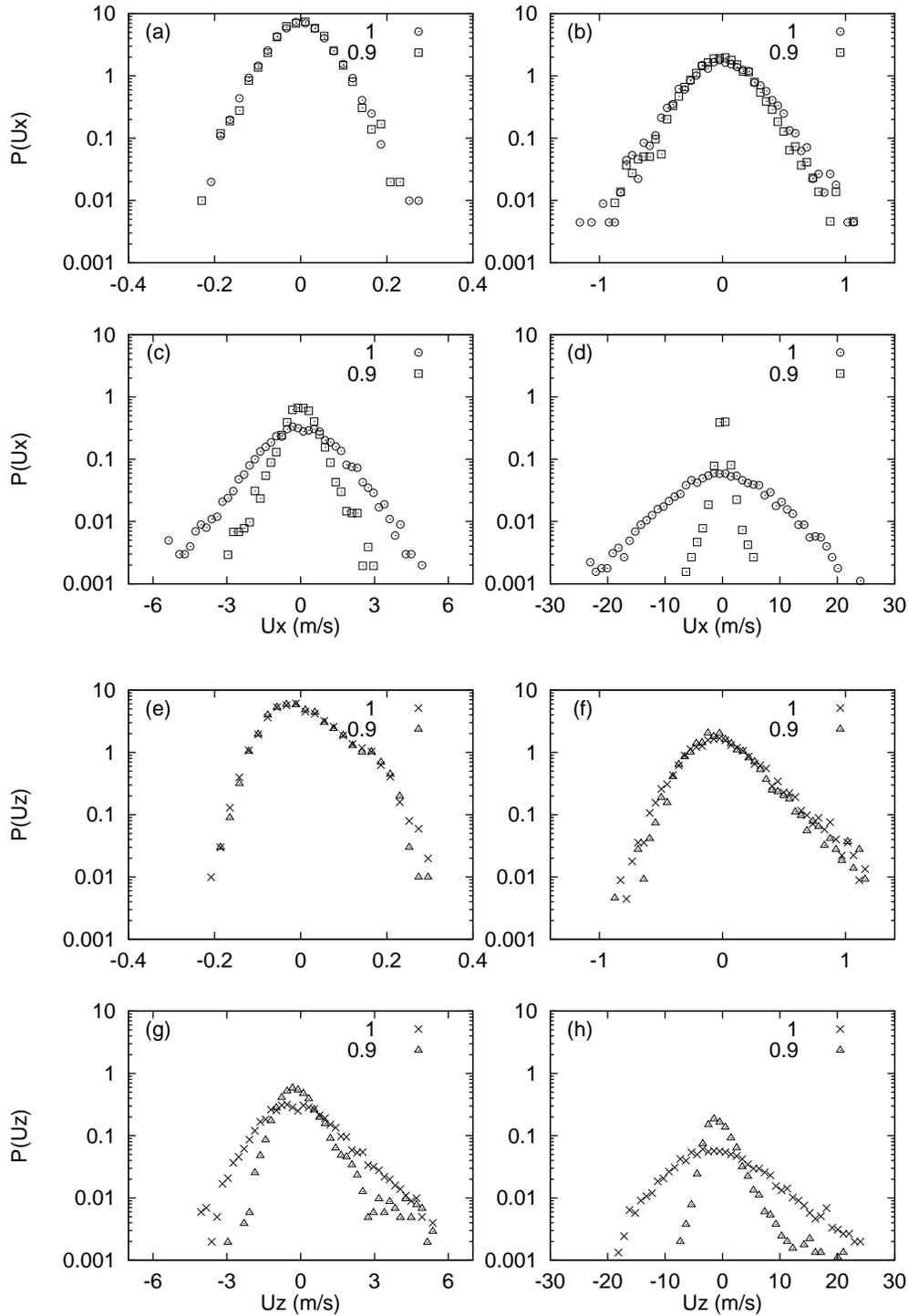


Abbildung 20: Log-lin Darstellung der horizontalen Geschwindigkeitsverteilung $P(u_x)$ und der vertikalen Geschwindigkeitsverteilung $P(u_z)$ von den Simulationen aus Abb. 19. Die Amplituden a und die entsprechenden Geschwindigkeiten V sind: (a,e) $a = 0.1$ mm, $V = 0.063$ m/s, (b,f) $a = 0.562$ mm, $V = 0.353$ m/s, (c,g) $a = 3.16$ mm, $V = 1.98$ m/s und (d,h) $a = 17.7$ mm, $V = 11.2$ m/s. Verschiedene Symbole kennzeichnen Simulationen ohne ($\epsilon_w = 1$) oder mit Wanddissipation ($\epsilon_w = 0.9$). Man beachte, daß die Vertikalachsen im Gegensatz zu den Horizontalachsen gleich skaliert sind.

7.3 Theorie vibrierter Systeme

Mit einer einfachen Abschätzung [WHJ95] der Energieabnahme durch Teilchen-Teilchen-Stöße und der Energiezufuhr durch Stöße von Teilchen mit der vibrierenden Bodenplatte werden im folgenden typische Meßgrößen für den Grenzfall niedriger Dichte und schwacher Dissipation hergeleitet. Die potentielle Energie bzw. die Höhe des Massenschwerpunktes $h_{c.m.}$ und die Relaxationszeit τ_D , innerhalb der die typische Systemenergie dissipiert wird, werden diskutiert.

Im betrachteten System ist die mittlere Geschwindigkeit $\langle u \rangle = 0$. Deshalb ist die mittlere kinetische Energie eines Teilchens

$$e_T = \frac{1}{2}m\bar{u}^2, \quad (65)$$

mit den Fluktuationen der Relativgeschwindigkeit $\bar{u} = \sqrt{\langle u^2 \rangle}$. Die Größe e_T wird in Analogie zu klassischen Gases oft als „granulare Temperatur“ bezeichnet, hat aber nichts mit einer Temperatur im thermodynamischen Sinn zu tun. Bei einem Stoß ändert sich die Energie um $\Delta e = (1/2)m\bar{u}^2(\epsilon^2 - 1)$ (siehe Anhang E). Im elastischen Grenzfall $\epsilon \rightarrow 1$ stellt sich, wie beim klassischen elastischen Gas, für niedrige Dichte ein exponentielles Profil der Teilchendichte

$$n(z) = n_0 \exp\left(\frac{-2gz}{\bar{u}^2}\right), \quad (66)$$

mit der Dichte in der Nähe der Bodenplatte $n_0 = 2Ng/(l\bar{u}^2)$ ein. In dünnen Systemen ist die mittlere freie Weglänge

$$\lambda(z) = \frac{\lambda_0}{2dn(z)}, \quad (67)$$

mit dem zweidimensionalen Wirkungsquerschnitt $2d$ und einer dimensionslosen Konstante λ_0 . Mit Gleichung 67 ergibt sich die mittlere Anzahl von Kollisionen pro Teilchen in der Höhe z aus dem Produkt von mittlerer Relativgeschwindigkeit und inverser freier Weglänge

$$\mathcal{Z} = \frac{\bar{u}}{\lambda} = 2d\bar{u}n(z)/\lambda_0. \quad (68)$$

Die Energieverlustrate pro Teilchen in Höhe z ist

$$\dot{e}_1(z) = \mathcal{Z}\Delta e = md(\epsilon^2 - 1)\bar{u}^3n(z)/\lambda_0, \quad (69)$$

woraus sich die Energieverlustrate der kinetischen Energie in einer Schicht der Höhe dz ergibt

$$d\dot{e}_K(z) = \dot{e}_1(z)n(z)ldz. \quad (70)$$

Durch Integration von $z = 0$ bis $z \rightarrow \infty$ ergibt sich die Energieverlustrate des gesamten Systems

$$\dot{e}_K = N^2mgd(\epsilon^2 - 1)\bar{u}/(l\lambda_0) = HNmg(\epsilon^2 - 1)\bar{u}/\lambda_0, \quad (71)$$

mit der Füllhöhe $H = N/L$ und der dimensionlosen Systembreite L .

Energie kann nur durch Kollisionen mit der Bodenplatte zugeführt werden. Im hier betrachteten Parameterbereich kann man die typische Teilchengeschwindigkeit

c_0 in der Nähe der Bodenplatte als $c_0 \gg v_b$ annehmen, wobei v_b die Geschwindigkeit der Bodenplatte v_b ist. Hier wird v_b für das in den obigen Abschnitten benutzte V verwendet, da die Form der Anregung nicht genau spezifiziert wird. Nach einer Kollision ist die Geschwindigkeit des Teilchens $c'_0 = (c_0 + v_b)\epsilon + v_b$, woraus sich die mittlere Energieänderung

$$\Delta e_0 = \frac{m}{2}(c_0^2 - c'^2_0) = \frac{m}{2} [c_0^2(1 - \epsilon^2) - v_b^2(1 + \epsilon)^2] \quad (72)$$

bei einer Kollision mit der Bodenplatte ergibt. Dabei wurde angenommen, daß $c_0 v_b$ im Mittel verschwindet, da sich die Bodenplatte mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach oben oder nach unten bewegen soll. Im elastischen Grenzfall $\epsilon \rightarrow 1$ ergibt sich somit die Energiezufuhrtrate

$$\dot{e}_I = \mathcal{Z}_0 \Delta e_0 \propto \frac{2Nmgv_b^2}{\bar{u}} \quad (73)$$

als Produkt von Δe_0 und der Kollisionsrate $\mathcal{Z}_0 = n_0 l c_0$ unter Verwendung von $\bar{u} \approx |c_0|$. Im Gleichgewichtszustand müssen sich Energieverlust und Energiezufuhr im Mittel ausgleichen, und man erhält schließlich

$$e_T = \frac{\lambda_0 m v_b^2}{2H(1 - \epsilon)}. \quad (74)$$

Die Höhe des Massenschwerpunktes ergibt sich durch Integration der Dichte

$$h_{c.m.} = \int_{z=0}^{\infty} zn(z)dz \propto \frac{v_b^2}{gH(1 - \epsilon)} \quad (75)$$

als eine Funktion der Füllhöhe H , der typischen Geschwindigkeit der Bodenplatte v_b , der Gravitation g und der Dissipation $(1 - \epsilon)$. Man beachte, daß hier ebenso wie in Abschnitt 4.1.2 die effektive Dissipation $\xi = H(1 - \epsilon)$ vorkommt (in einer Dimension ist $H = N$). Die Höhe des Massenschwerpunktes hängt demnach nur von der Geschwindigkeit v_b ab und nicht von anderen Kombinationen von Anregungsamplitude und -frequenz, wie der Beschleunigung Γ .

Die Zeit, innerhalb der die typische Energie im System dissipiert wird, ist das Verhältnis von mittlerer Energie und mittlerer Energieverlustrate bzw. Energiezufuhr-rate

$$\tau_D = \frac{\langle e_T \rangle}{\langle \dot{e}_I \rangle} \propto \frac{v_b}{g\xi^{3/2}}. \quad (76)$$

Um abschätzen zu können, wie stark das System die äußere Anregung spürt, d.h. wie wichtig die Form der äußeren Anregung ist, muß man τ_D mit der Anregungsperiode $1/f$ vergleichen. Die Größe

$$\tau_D f \propto \frac{\Gamma}{\xi^{3/2}} \quad (77)$$

ist eine Funktion der typischen Beschleunigung und der typischen Dissipation und gibt an wie stark das granulare Medium die Anwesenheit der Bodenplatte und insbesondere deren Bewegungsform spürt. Ist $\tau_D \ll 1$ erwartet man eine starke Korrelation zwischen der Bewegung der Bodenplatte und der Bewegung des granularen Mediums, das Material kondensiert in der Nähe der Bodenplatte, eine hohe Dichte stellt sich ein und die Abschätzungen in diesem Abschnitt verlieren ihre Gültigkeit. Für $\tau_D \gg 1$ sind alle Annahmen erfüllt und das System ist im gasartigen Zustand niedriger Dichte.

Der hier gezeigte theoretische Ansatz führt zum Ergebnis, daß das Verhalten granularer im gasartigen Zustand nur von den Parametern v_b und ξ abhängt. Der Übergang vom gasartigen Zustand in einen Zustand höherer Dichte hängt anstatt von v_b von Γ ab. Die Folge dieses unterschiedlichen Skalierungsverhaltens in den Gleichungen 74 und 77 ist, daß bei gleichem V kleinere Amplituden und größere Frequenzen zu einer effektiveren Anregung führen. Das System kann den gasartigen Zustand leichter erreichen, wenn f und damit Γ groß sind.

Im folgenden wird untersucht, wie sich das Modellsystem verhält, wenn sich die Randbedingungen ändern. Es wird untersucht, wie Reibung, Wandbewegung und Dissipation die Energieverteilung im System beeinflusst.

7.4 Zweidimensionale Simulationen

7.4.1 Simulationen mit elastischen Wänden

Zur Untersuchung des Systemverhaltens bei Änderung der Teilchen-Teilchen-Reibung werden die Parameter $N = 50$, $\epsilon = 0.9$, $\beta_0 = 0.5$, $L = 10$, $\epsilon_w = 1$ und $\mu_w = 0$ (ein Behälter mit elastischen glatten Wänden) festgehalten, während der Reibungskoeffizient von $\mu = 0$ bis $\mu = 20$ variiert wird. Diese beiden Extremwerte entsprechen glatten und extrem rauhen Oberflächen. In Abb. 21 sind h_c , K/R und K/h_c als Funktion des Reibungskoeffizienten μ dargestellt. Benutzt werden die Werte $V = 1.57$ m/s mit $f = 100$ Hz und $V = 0.314$ m/s mit verschiedenen Frequenzen $f = 40, 100$ und 500 Hz. Da die Standardabweichung der gemessenen h_c Werte immer ca. 10% bis 15% des gemessenen Absolutwertes beträgt, kann man auf Fehlerbalken verzichten.

In Abb. 21(a) stellt man eine schwache Abhängigkeit der potentiellen Energie vom Reibungskoeffizienten fest: Mit zunehmendem μ nimmt die potentielle Energie im Bereich $0.02 < \mu < 0.5$ ab. In den Grenzfällen $\mu \ll 1$ und $\mu \gg 1$ ist die potentielle Energie bis auf Fluktuationen konstant und damit bei rauhen Oberflächen nur etwa halb so groß wie bei glatten Oberflächen. h_c hängt nur von V ab, d.h. bei konstantem V kann man f und a in gewissen Grenzen frei wählen [LHB94, WHJ95, Lud95, Lee95].

In Abb. 21(b) wird deutlich, daß K/R einen konstanten μ -unabhängigen Wert nur im Grenzfall $\mu \gg 1$ erreicht. Für kleine μ findet man dagegen $K/R \propto 1/\mu$. Die durchgezogene Kurve in Abb. 21(b) ist die Funktion

$$r = \frac{K}{R} = \frac{(2/q) + (1/\mu)}{(1 + \beta_0)}, \quad (78)$$

mit $q = 2/5$ und $\beta_0 = 0.5$. Diese Funktion erhält man indem man, anstelle einer Gleichverteilung der Energie pro Freiheitsgrad eine Gleichverteilung der entsprechenden Geschwindigkeiten annimmt. Bei schwacher Reibung – und damit schwacher Kopplung der Freiheitsgrade – ist der Rotationsfreiheitsgrad nur schwach angeregt, was zu oben genannter Proportionalität $r \propto 1/\mu$ führt. Im Grenzfall starker Kopplung hängt die Energie im Rotationsfreiheitsgrad nicht mehr von der Reibung ab. In diesem Grenzfall kann man annehmen, daß die Transversal- und Rotationsgeschwindigkeit der Teilchenoberfläche von ähnlicher Größe sind, d.h. $v_{x0}^2 \approx v_{z0}^2 \approx (\omega_{y0}d/2)^2 \approx v_0^2$. Berücksichtigt man, daß man zwei Translationsfreiheitsgrade, aber nur einen Rotationsfreiheitsgrad hat, kann man damit abschätzen: $K \approx v_{x0}^2 + v_{z0}^2$ und $R \approx q(\omega_{y0}d/2)^2$, so daß $r \propto 2/q$ ist. Da r bei verschwindendem μ oder q divergiert, muß die Tangentialrestitution im Nenner erscheinen, d.h. bei $\beta_0 = -1$ muß r ebenfalls divergieren

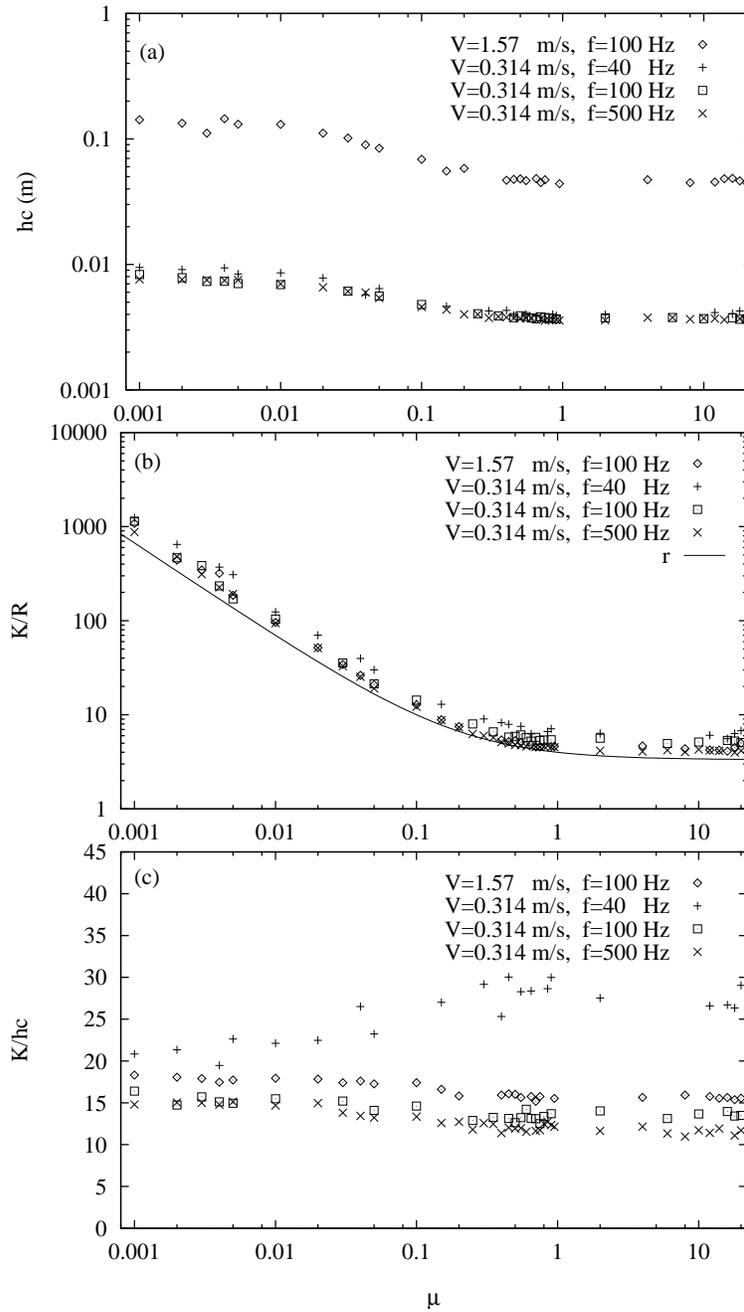


Abbildung 21: (a) Log-log Darstellung der reduzierten Höhe des Massenschwerpunktes h_c , aufgetragen gegen μ . Die verwendeten Parameter sind $N = 50$, $L = 10$, $\epsilon = 0.9$ und $\beta_0 = 0.5$. Die Werte von V und f sind in der Abbildung angegeben. (b) Log-log Darstellung des Verhältnisses von Translations- und Rotationsenergie K/R , aufgetragen gegen μ . Die Daten stammen aus den in Abb. 21(a) dargestellten Simulationen, und die durchgezogene Linie ist Gleichung 78 für die entsprechenden Parameter. (c) Lin-log Darstellung des Verhältnisses von Translationsenergie zur Höhe des Massenschwerpunktes K/h_c , aufgetragen gegen μ . Die Daten stammen aus den Simulationen aus Abb. 21(a).

($r \propto (1 + \beta_0)^{-1}$). Dies kann man qualitativ verstehen, wenn man bedenkt, daß im Grenzfall $(1 + \beta_0) \ll 1$ die meisten Kollisionen haftend sind (siehe Gleichung 20). Für große $(1 + \beta_0)$ ist ein wesentlicher Anteil der Kollisionen gleitend, und β_0 spielt kaum eine Rolle. Da das Verhältnis gleitender zu rutschender Kontakte nicht explizit von μ und q abhängt, wirkt $(1 + \beta_0)$ multiplikativ auf beide Terme von r . In Abb. 21(c) ist das Verhältnis von kinetischer Energie zur Höhe des Massenschwerpunktes dargestellt. Gleichverteilung von potentieller und kinetischer Energie würde $mgh_c = (m/2)K$ bedeuten, womit $K/h_c = 2g$ wäre. Da K/h_c in den Simulationen mit wesentlicher Reibung kleiner ist als der Schätzwert, ist Gleichverteilung für potentielle und kinetische Energie nicht gewährleistet.

Um die Annahmen zu prüfen, die zu Gleichung 78 führen, wird in Abb. 21 der Tangentialrestitutionskoeffizient variiert. Wie oben ist $N = 50$, $\epsilon = 0.9$ und $\mu = 0.2$. Der Wert $\beta_0 = -1$ entspricht dem Grenzfall einer glatten, der Wert $\beta_0 = 1$ dem Grenzfall einer sehr rauhen aber elastischen Oberfläche. Letzterer Fall bedeutet, daß die Tangentialgeschwindigkeit beim Stoß mit kleinem Ψ_1 vollkommen umgekehrt wird. In Abb. 22(a) ist die reduzierte Höhe des Massenschwerpunktes gegen β_0 aufgetragen. h_c ist, außer für $\beta_0 < -0.5$, bis auf statistische Schwankungen konstant. Im Fall $\beta_0 \rightarrow -1$ wird die Rotation immer schwächer angekoppelt, so daß h_c zunimmt. Das Verhältnis von Rotations- zu kinetischer Energie ist in Abb. 22(b) dargestellt. K/R divergiert im Grenzfall $\beta_0 \rightarrow -1$. Die Kurve in Abb. 22(b) ist Gleichung 78 mit $q = 2/5$ und $\mu = 0.2$. Das Verhältnis von kinetischer zu potentieller Energie ist beinahe unabhängig von β_0 , wie aus Abb. 22(c) ersichtlich wird.

Der dritte Parameter, der die Rotationsenergie beeinflusst, ist das Trägheitsmoment der Teilchen $I = qm(d/2)^2$ und damit der Vorfaktor q . Mit denselben Parametern, die in Abb. 22 verwendet wurden, wird q im Intervall $0 < q \leq 1$ variiert. Die untere Grenze beschreibt Teilchen, die all ihre Masse im Zentrum konzentriert haben, während die obere Grenze dem Grenzfall eines Rings entspricht, dessen gesamte Masse am Umfang liegt. Wie in Abb. 23(a) dargestellt, nimmt h_c , außer für sehr kleine μ , mit wachsendem q ab, was bedeutet, daß mit wachsendem q entsprechend mehr Energie im Rotationsfreiheitsgrad steckt. Für die experimentell interessanten Situationen mit Kugeln ($q = 2/5$) oder Scheiben ($q = 1/2$) ist jedoch kein Unterschied festzustellen. Abb. 23(b) zeigt, daß Gleichung 78 auch für verschiedene q Werte gute Vorhersagen liefert, und Abb. 23(c) macht deutlich, daß K/h_c kaum von q abhängt.

Abschließend sei bemerkt, daß die Extremfälle $\mu = 0$, $\beta_0 = -1$, und $q = 0$ in den Abbildungen 21(a), 22(a) und 23(a) äquivalent sind, da all diese Werte eine perfekt glatte Oberfläche und damit fehlende Rotation bedeuten. Aus demselben Grund divergiert das Verhältnis K/R in den Abbildungen 21(b), 22(b) und 23(b) in diesen Grenzfällen. Die empirisch hergeleitete Funktion für r in Gleichung 78 ist systematisch um einen Faktor 1.3 ± 0.2 zu klein, was durch die qualitativen Argumente der Herleitung nicht erklärt werden konnte.

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Simulationen zeigen, daß potentielle und kinetische Energie die gleiche Größenordnung haben, wobei K/h_c mit zunehmender Kopplung von Translation und Rotation in der Regel schwach abnimmt. Im Gegensatz dazu hängt das Verhältnis von Translations- und Rotationsenergie stark von den Kopplungsparametern ab, wobei diese Abhängigkeit durch die empirische Gleichung 78 gut beschrieben wird.

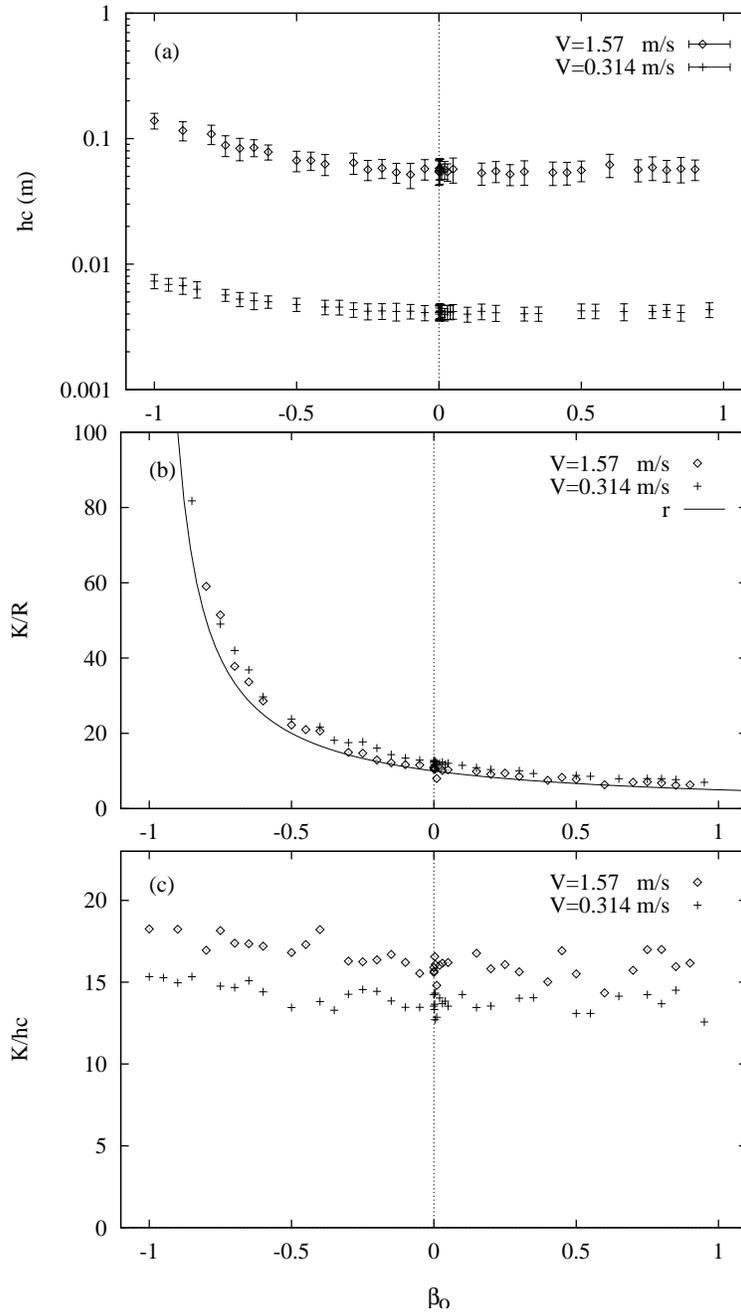


Abbildung 22: (a) Log-lin Darstellung von h_c für unterschiedliche β_0 . Die verwendeten Parameter sind $N = 50$, $L = 10$, $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.2$ und $f = 100$ Hz mit $V = 1.57$ m/s und $V = 0.314$ m/s. (b) K/R als Funktion von β_0 für die Simulationen von Abb. 22(a). Die Kurve ist Gleichung 78 für die entsprechenden Parameter. (c) K/h_c als Funktion von β_0 für die Simulationen von Abb. 22(a).

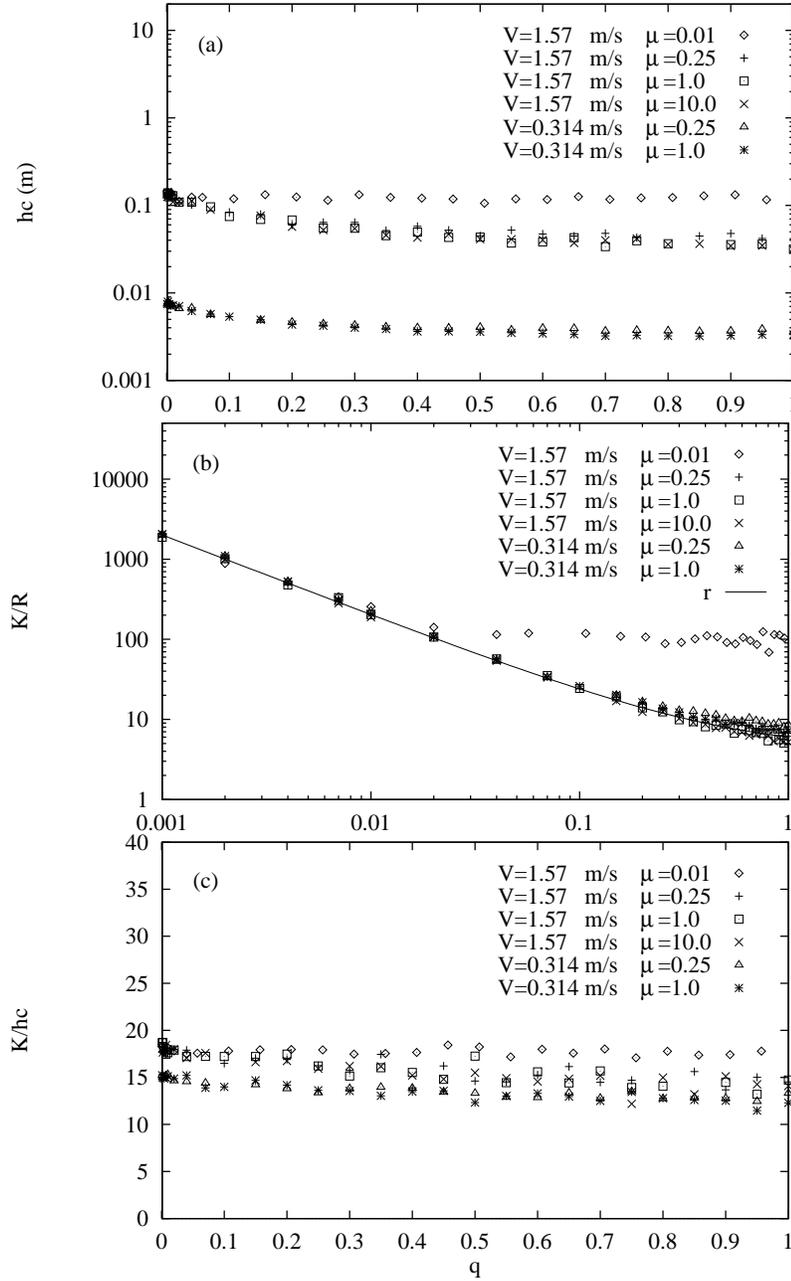


Abbildung 23: (a) Log-lin Darstellung von h_c als Funktion von q mit $N = 50$, $L = 10$, $\epsilon = 0.9$, $f = 100$ Hz und $\beta_0 = 0$. Die Werte von V und μ sind in der Zeichnung angegeben. (b) Log-log Darstellung von K/R als Funktion von q , gewonnen aus den Simulationen in Abb. 23(a). Die Kurve ist Gleichung 78 mit den entsprechenden $\mu = 0.25$ und $\beta_0 = 0$. (c) K/h_c als Funktion von q , gewonnen aus den Simulationen in Abb. 23(a).

7.4.2 Simulationen mit rauhen, dissipativen Wänden

Durch numerische Simulationen von glatten Teilchen in einem vibrierten Behälter wurde ein interessantes Skalierungsverhalten der Höhe des Massenschwerpunktes mit der Anregungsgeschwindigkeit V gefunden [LHB94]. Die potentielle Energie $Nmgh_c$, hängt im fluidisierten Bereich nicht direkt von der Amplitude a und der Frequenz f ab, sondern ist nur eine Funktion von $V = a\omega$ mit

$$h_c \propto V^\kappa. \quad (79)$$

Im Gegensatz zu theoretischen Ansätzen, die $\kappa = 2$ voraussagen [Lee95], ist aber in zweidimensionalen Geometrien $\kappa \approx 1.5$. Da die Simulationen mit glatten Teilchenoberflächen durchgeführt wurden, muß zuerst geprüft werden, ob sich das Skalierungsverhalten durch den Rotationsfreiheitsgrad ändert. Weiterhin muß der Einfluß der Wand-Dissipation und der Wandrauhigkeit geprüft werden, da wenigstens für große V eine Abhängigkeit des Systemverhaltens von den Wandeigenschaften festgestellt wurde [LHB94]. Experimente am selben Modellsystem [WHJ95] verwenden natürlich raue Teilchen und Wände. Die Experimente bestätigen das Skalenverhalten $h_c \propto V^\kappa$ und zeigen sogar eine etwas kleinere Potenz als die Simulationen. Unglücklicherweise konnten die Experimente nur in einem schmalen Bereich $0.1 \text{ m/s} < V < 1 \text{ m/s}$ durchgeführt werden, wohingegen die Simulationen den Bereich $0.1 \text{ m/s} < V < 10 \text{ m/s}$ abdecken.

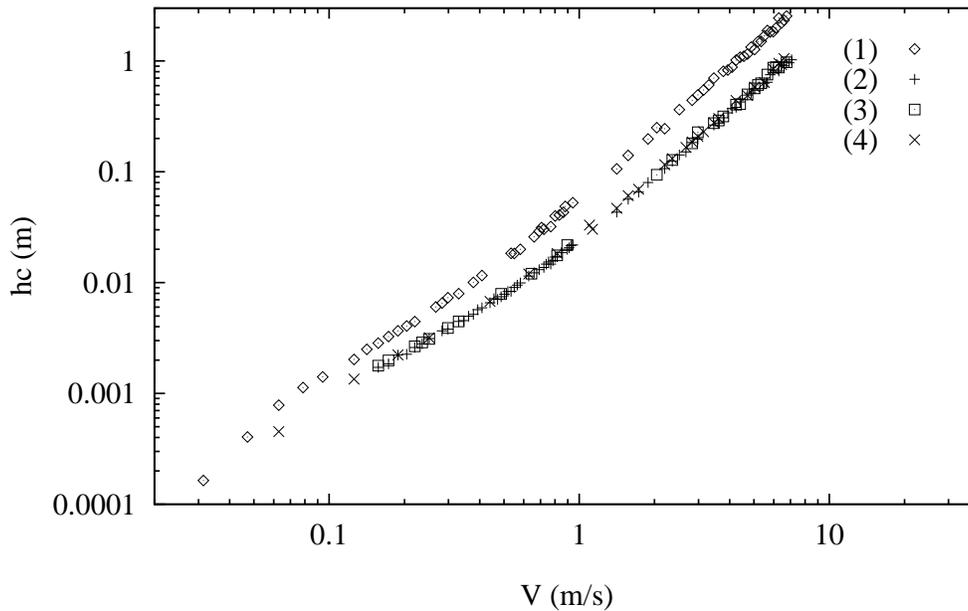


Abbildung 24: Log-log Darstellung von h_c als Funktion von V , wobei $\epsilon = 0.9$, $\beta_0 = 0.5$ und $\mu = 0$ (1) oder $\mu = 0.2$ (2-4) verwendet wurde. Bei gleicher Füllhöhe wird die Systembreite $L = 10, 30$ und 50 variiert, womit sich $N = 50$ (1,2), $N = 150$ (3) und $N = 250$ (4) ergeben.

Um den Einfluß der Teilchenrotation auf h_c zu untersuchen, simuliert man $N = 50$ Teilchen in einem Behälter der Breite $L = 10$ mit elastischen ($\epsilon_w = 1$) und glatten

($\mu_w = 0$) Wänden. In Abb. 24, ist h_c als Funktion von V gezeigt, wobei einerseits glatte, d.h. $\mu = 0$ (1), oder raue Teilchenoberflächen, d.h. $\mu = 0.2$ und $\beta_0 = 0.5$ (2-4) verwendet werden. Um den Einfluß der Systemgröße auf die potentielle Energie zu untersuchen, ist es sinnvoll, Simulationen mit unterschiedlicher Systembreite aber gleicher Füllhöhe durchzuführen. Die Teilchenzahlen sind $N = 50$ (1,2), $N = 150$ (3) und $N = 250$ (4). Abb. 24 macht deutlich, daß die Reibung zwischen den Teilchen zu einer Verringerung der potentiellen Energie führt, wie bereits von Abb. 21(a) gefolgert werden konnte. Da h_c mit den hier benutzten Parametern nicht von der Systemgröße abhängt, wird im folgenden nur das System mit $N = 50$ Teilchen verwendet.

Im Unterschied zu dem Skalengesetz, das im gleichen Geschwindigkeitsbereich die Potenz $\kappa \approx 1.5$ zeigt [LHB94], ist in Abb. 24 für $V \approx 1$ m/s ein Übergang von $\kappa \approx 1.5$ nach $\kappa \approx 2$ festzustellen. Die Experimente erstreckten sich nicht bis in diesen Bereich [WHJ95]. Während frühere Simulationen $e_w < 1$ verwendeten [LHB94], wird in Abb. 24 der Wert $e_w = 1$ verwendet. Die Wandeigenschaften beeinflussen die potentielle Energie vor allem im dünnen Bereich.

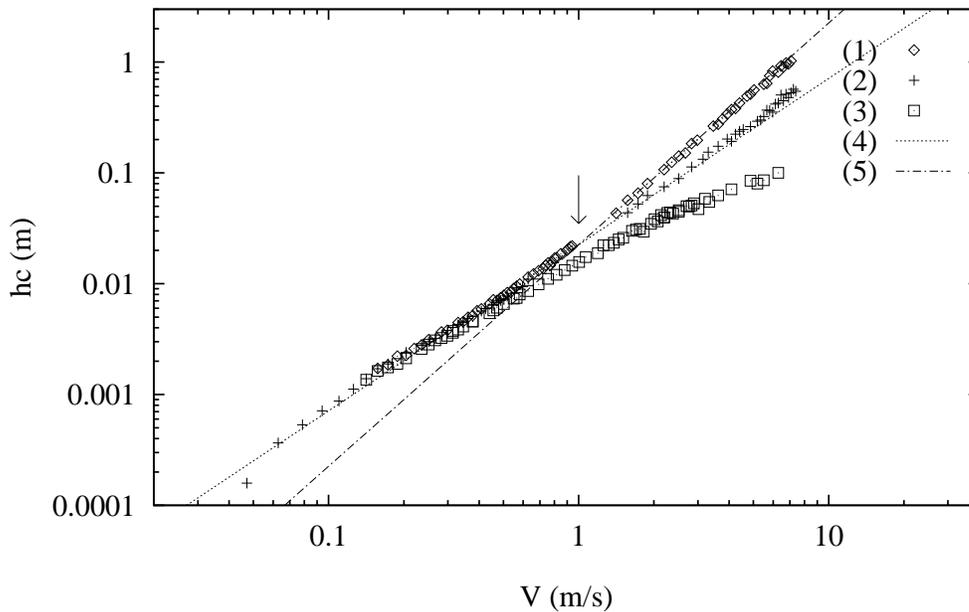


Abbildung 25: Log-log Darstellung von h_c als Funktion von V , mit $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.2$, $\beta_0 = 0.5$, $N = 50$ und $L = 10$. Die Wandparameter sind: $\mu_w = 0$, $\epsilon_w = 1$ (1), $\mu_w = 0$, $\epsilon_w = 0.9$ (2) und $\mu_w = 0.2$, $\beta_{0w} = 0.5$ und $\epsilon_w = 0.9$ (3). Die Geraden (4) und (5) zeigen die Steigungen $3/2$ (4) und 2 (5) an, und der Pfeil markiert den Übergang zwischen den zwei Potenzen in (1). Im Fall $\mu_w > 0$ sind die Wände von der Bewegung der Bodenplatte entkoppelt.

Um den Einfluß der Wandeigenschaften auf das Systemverhalten zu verdeutlichen, werden in Abb. 25 Simulationen mit glatt-elastischen, glatt-dissipativen und rauh-dissipativen Wänden verglichen. Dabei ist im Gegensatz zu früheren Simulationen [LHB94] die Rotation der Teilchen möglich. Im Falle glatt-dissipativer Wände (2) verhält sich h_c wie oben beschrieben, was durch die gepunktete Linie mit Steigung $3/2$ verdeutlicht wird. Im Falle glatt-elastischer Wände ändert sich der Exponent

κ bei $V \approx 1$ m/s. Der Übergang ist durch einen Pfeil markiert, und die Steigung $\kappa = 2$ wird durch Linie (5) angezeigt. Der Übergang findet nicht notwendigerweise bei $V = 1$ m/s statt, sondern hängt im allgemeinen von der mittleren freien Weglänge und der Systemgröße ab. In einem verdünnten System finden mehr Kollisionen mit den Wänden statt, so daß die Wandeigenschaften mit abnehmender Teilchendichte immer wichtiger werden. Dissipative oder rauhe Wände beeinflussen das Systemverhalten im dichten Bereich, d.h. $V < 1$ m/s, nicht sehr. Ist die mittlere freie Weglänge $\lambda \ll l$, so kann man das System als dicht ansehen und findet $\kappa \approx 3/2$; ist jedoch $\lambda \gg l$ findet man $\kappa \approx 3/2$ mit elastischen Wänden und $\kappa \approx 2$ mit dissipativen Wänden. Rauhe Wände verringern h_c noch stärker, da bei jedem Stoß mit einer unbewegten Wand tangentiale Relativbewegung verlorengeht.

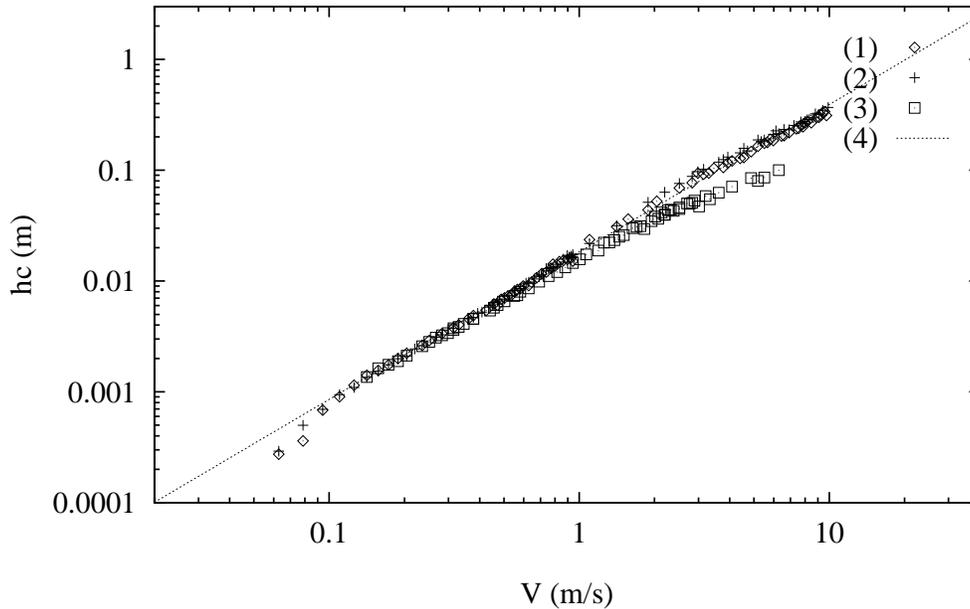


Abbildung 26: Log-log Darstellung von h_c als Funktion von V mit $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.2$, $\beta_0 = 0.5$, $N = 50$, und $L/d_0 = 10$. Die Wände bewegen sich vertikal mit der Bodenplatte (1,2) oder sind fixiert (3), und die Wandeigenschaften sind $\beta_{0w} = 0.5$, $\epsilon_w = 0.9$, und μ_w wird variiert, d.h. $\mu_w = 0.2$ (1,3) und $\mu_w = 0.5$ (2). Die Daten (3) sind aus Abb. 25 entnommen. Die Kurve (4) ist die beste Näherung an die Daten (1) und (2) für $V > 0.1$ und hat die Steigung $\kappa \approx 1.33$.

Ein Grund für den starken Unterschied zwischen Simulationen mit glatten und rauhen Wänden ist die Randbedingung. Sind die Wände unbeweglich, so wird bei jeder Teilchen-Wand-Kollision Tangentialenergie dissipiert; bewegen sich die Wände, so kann manchmal dem System Energie zugeführt werden. In Abb. 26 sind die Ergebnisse von Simulationen mit statischen und bewegten rauhen Wänden dargestellt. Der Reibungskoeffizient der bewegten Wände ist $\mu_w = 0.2$ (1), bzw. $\mu_w = 0.5$ (2), während die unbewegten Wände $\mu_w = 0.2$ (3) haben und damit der Simulation (3) in Abb. 25 entsprechen. Die anderen Parameter sind $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.2$, $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.5$, $N = 50$ und $L = l/d_0 = 10$. Ein least-square-fit an die Datensätze (1) und (2) im Intervall $0.1 \text{ m/s} < V < 10 \text{ m/s}$ ergibt die Gerade (4) mit einer Steigung

$\kappa \approx 1.33$. Folglich sind nicht nur die Materialeigenschaften der Wände, sondern auch deren Bewegung wichtig, um die Experimente korrekt zu modellieren.

7.4.3 Vergleich von DSMC und ED

Um zu verstehen, wie wichtig der Volumenausschluß für das Skalierungsverhalten vibrierter Granulate sind, werden in diesem Abschnitt ED, DSMC und DSMC2 Simulationen verglichen (siehe Teil VII). Bei ED werden explizit „harte“ Kugeln modelliert, während mit der stochastischen DSMC Methode Partikel ohne Eigenvolumen beschrieben werden. DSMC2 beinhaltet ebenso wie DSMC keine Korrelationen zwischen den Stößen, unterscheidet sich aber von DSMC durch einige Korrekturen, die das Eigenvolumen der Teilchen berücksichtigen sollen.

Zum Vergleich der Methoden betrachtet man die Höhe des Massenschwerpunktes als Funktion der Anregungsgeschwindigkeit für glatte, aber dissipative Teilchen und Wände. In Abb. 27 wird $h_{c.m.}$ als Funktion von V für elastische Wände und inelastische Teilchen dargestellt.

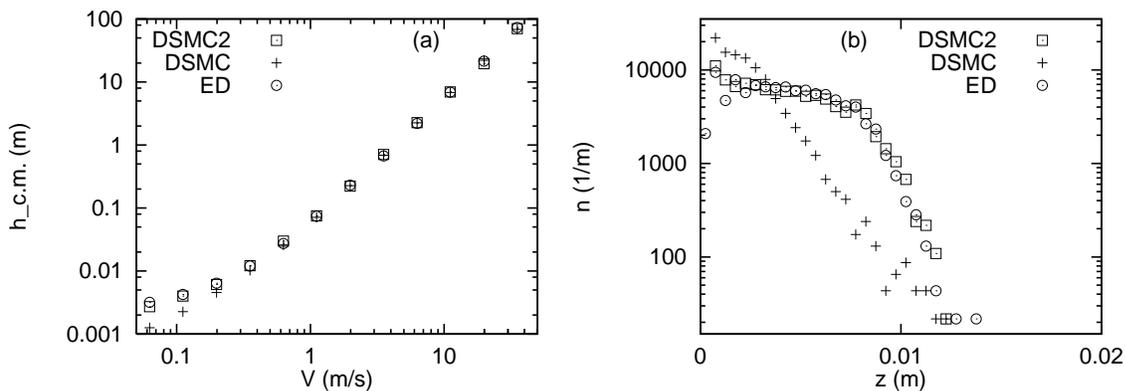


Abbildung 27: Vergleich der drei Methoden DSMC2, DSMC und ED, mit $N = 50$, $L = 10$ und $f = 100$ Hz. (a) Höhe des Massenschwerpunktes $h_{c.m.}$ als Funktion der Geschwindigkeit V . (b) Dichteprofile für die Simulationen mit $V = 0.11$ m/s.

Weiterhin wird die Teilchendichte der Simulation mit $f=100$ Hz und $V = 0.11$ m/s für die verschiedenen Methoden ED, DSMC und DSMC2 gezeigt. Außer bei niedriger Anregungsgeschwindigkeit stimmen die verschiedenen Methoden gut überein. Für $V < 0.6$ m/s weicht DSMC deutlich ab, während die DSMC2 bis zu $V \approx 0.06$ m/s (ca. 84% der maximalen Dichte) gute Ergebnisse liefert. Die bessere Übereinstimmung von ED und DSMC2 wird auch bei Betrachtung des Dichteprofiles klar. Das Eigenvolumen der Teilchen wird also bereits bei mittlerer Dichte bzw. mittlerer Anregungsenergie wichtig. In Abb. 28 ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Horizontal- (u_x) und der Vertikalgeschwindigkeit (u_z) für DSMC2 und ED dargestellt (vgl. Abb. 20). Die beiden Methoden zeigen wieder hervorragende Übereinstimmung.

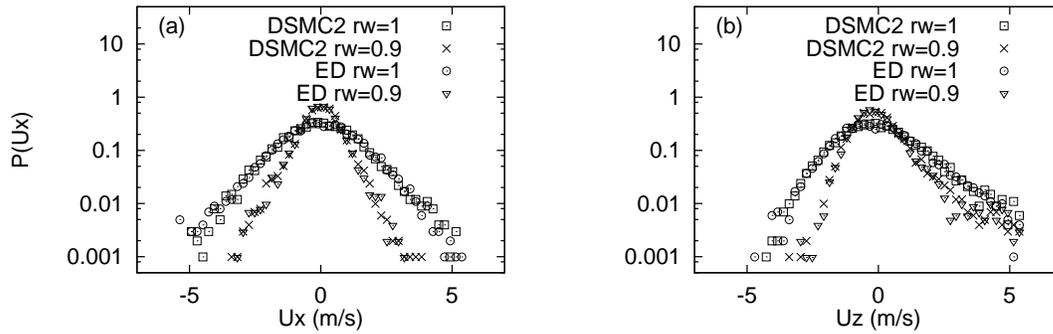


Abbildung 28: Log-lin Darstellung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(u)$ als Funktion der (a) horizontalen u_x und der (b) vertikalen Geschwindigkeit u_z für die Simulation mit $V = 1.98$ m/s aus Abb. 27.

7.4.4 Unterschiedliche Randbedingungen

Da die beiden Methoden ED und DSMC bis zu relativ hohen Dichten sehr gute Übereinstimmung zeigen, kann man davon ausgehen, daß in diesem Dichtebereich weder langreichweitige Korrelationen, noch die Erinnerung an frühere Kollisionen, eine wesentliche Rolle spielen: Diese Effekte sind in ED enthalten, jedoch nicht in DSMC2.

Um zu überprüfen, wie die Wahl der Methode das Skalierungsverhalten beeinflusst, wird in Abb. 29 $h_c = h_{c.m.} - h_{c.m.0}$ als Funktion von V für verschiedene Randbedingungen dargestellt. Mit den Parametern $N = 50$ und $l/d_0=10$ ist die Höhe des Massenschwerpunktes in Ruhe $h_{c.m.0} = 2.492 \times 10^{-3}$ m. Die hervorragende Übereinstimmung der beiden Methoden beweist, daß auch die Wände mit der stochastischen DSMC2 Methode modelliert werden können.

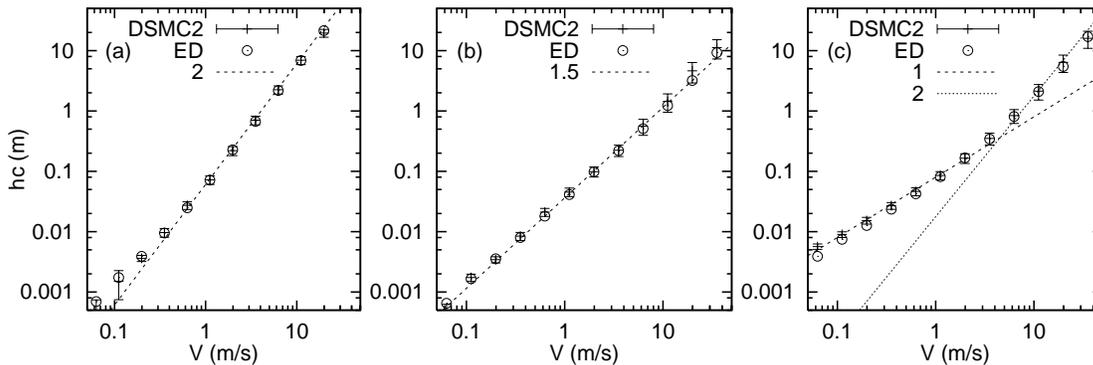


Abbildung 29: Die reduzierte Höhe des Massenschwerpunktes h_c als Funktion der Anregungsgeschwindigkeit V für verschiedene Kombinationen der Teilchen-Teilchen- und Teilchen-Wand-Dissipation: (a) $\epsilon_w = 1, \epsilon = 0.9$, (b) $\epsilon_w = 0.9, \epsilon = 0.9$, (c) $\epsilon_w = 0.9, \epsilon = 1$. Die Fehlerbalken geben die Standardabweichung der DSMC2 Simulation an.

Im Fall elastischer Wände und dissipativer Teilchen ($\epsilon_w = 1$ und $\epsilon = 0.9$) ist in der Skalierungsfunktion $h_c \propto V^\kappa$ die Potenz $\kappa \approx 2$, solange $V > 0.6$ m/s ist. Mit inelasti-

schen Wänden und Teilchen ($\epsilon_w = \epsilon = 0.9$) findet man $\kappa \approx 3/2$ über zwei Größenordnungen von V , und mit elastischen Teilchen und dissipativen Wänden ($\epsilon = 1.0$ und $\epsilon_w = 0.9$) ist $\kappa \approx 1$ ($V < 5$ m/s) und $\kappa \approx 2$ ($V > 5$ m/s). Man beachte, daß die Simulationen mit dissipativen Teilchen (a,b) im Bereich niedriger Geschwindigkeiten bzw. hoher Dichte übereinstimmen, während die Simulationen mit dissipativen Wänden (b,c) bei hoher Anregungsenergie bzw. niedriger Dichte übereinstimmen.

7.4.5 Vergleich mit Experimenten

In diesem Abschnitt werden die numerischen Simulationen direkt mit den Experimenten verglichen [WHJ95]. Der in den Experimenten verwendete Behälter war $l = 165$ mm breit und bewegte sich bei der Frequenz von $f = 50$ Hz mit den Amplituden $a = 0.5, 1.12, 1.84$ und 2.12 mm. Bei jeder Amplitude wurde auch die Teilchenzahl verändert: $N = 27, 40, 60$ und 90 . Die Teilchen sind Kugeln des Durchmessers $d_0 = 5$ mm und monodispers $w_0 = 0$, wobei die Restitutionskoeffizienten $\epsilon = \epsilon_w = \epsilon_b = 0.92$ verwendet werden, die typisch für Stahlkugeln von ca. 1mm Durchmesser sind. Der Reibungskoeffizient ist $\mu = \mu_w = \mu_b = 0.22$, und der Tangentialrestitutionskoeffizient ist $\beta_0 = \beta_{0w} = \beta_{0b} = 0$.

Entsprechend den Abbildungen 15 und 16 in [WHJ95] werden die Simulationsergebnisse der Höhe des Massenschwerpunktes $h_c = h_{c.m.} - h_{c.m.0}$ in Abb. 30(a) gegen $V = a\omega$ und in Abb. 30(b) gegen die inverse Füllhöhe $1/H = L/N$ aufgetragen. Die Simulationen zeigen ähnliche Absolutwerte, das Verhalten stimmt aber nicht exakt mit den Experimenten überein. Um die Ergebnisse qualitativ vergleichen zu können, werden „least-square-fits“ an die Funktion $h_c \propto V^\kappa$ vorgenommen. Die Experimente führen zu $\kappa = 1.239, 1.310, 1.326$ und 1.022 für $N = 27, 40, 60$ und 90 , während die Simulationen zu $\kappa = 1.72, 1.66, 1.57$ und 1.45 führen. Das Mittel der simulierten κ Werte ist mit $\bar{\kappa} = 1.60 \pm 0.10$ größer als in den Experimenten. Abb. 30(b) zeigt, daß auch die Abhängigkeit von h_c als Funktion der Teilchenzahl N in Experimenten und Simulationen unterschiedlich ist. Least-square-fits der Form $h_c \propto (L/N)^\varphi$ ergeben in den Experimenten die Potenzen $\varphi = 0.140, 0.172, 0.396$ und 0.350 bei $f = 50$ Hz und $a = 0.5, 1.12, 1.84$ und 2.12 mm. Die Anpassung der Simulationsergebnisse liefert $\varphi = 0.60, 0.71, 0.81$ und 0.91 mit $\bar{\varphi} = 0.76 \pm 0.11$, was wieder deutlich von den Experimenten abweicht. Die oben erwähnten Simulationen wurden in einem Behälter unendlicher Höhe vorgenommen. Begrenzt man die Höhe auf 285 mm, wie auch in den Experimenten, so ergeben sich die etwas besseren Mittelwerte $\bar{\kappa} = 1.52 \pm 0.06$ und $\bar{\varphi} = 0.70 \pm 0.08$, die aber immer noch über den experimentell erzielten Ergebnissen liegen. Die geringere Steigung in den Experimenten und auch die größeren absoluten Abweichungen kommen hauptsächlich von den Daten mit großer Amplitude und kleinen Teilchenzahlen.

Eine mögliche Erklärung für die großen Potenzen in den Simulationen wäre eine möglicherweise falsche Wahl des Restitutionskoeffizienten für Teilchen-Boden-Kollisionen ϵ_b . Deshalb wurden die Simulationen in Abb. 30 mit verschiedenen $\epsilon_b = 0.84$ und 0.96 wiederholt. h_c, κ und φ hängen aber so schwach von ϵ_b ab, daß dies die Unterschiede zwischen Experiment und Simulation nicht erklären kann.

Eine andere mögliche Ursache ist der experimentelle Aufbau, der nicht wirklich zweidimensional ist, sondern in der dritten Raumrichtung durch ebene Glasscheiben begrenzt wird, an denen die Teilchen ebenfalls reiben und dadurch Energie verlieren

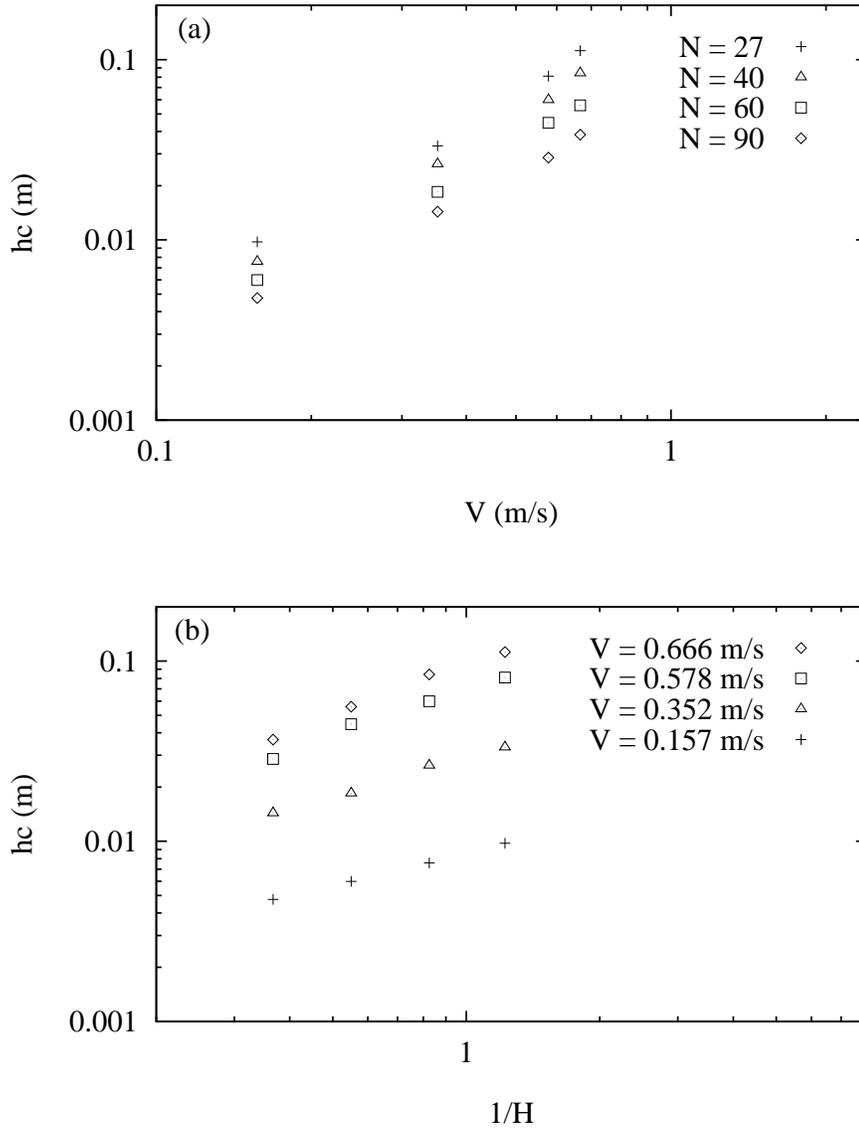


Abbildung 30: (a) Log-log Darstellung von h_c gegen V mit $\epsilon = \epsilon_w = \epsilon_b = 0.92$, $\mu = \mu_w = \mu_b = 0.22$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = \beta_{0b} = 0.0$. Die Teilchenzahl ist $N = 27$ (Kreuze), 40 (Dreiecke), 60 (Quadrate) und 90 (Rauten). (b) Log-log Darstellung von h_c als Funktion der inversen Füllhöhe L/N für dieselben Simulationen wie in Abb. 30(a). Die verschiedenen Amplituden sind $a = 0.5$ (Kreuze), 1.12 (Dreiecke), 1.84 (Quadrate) und 2.12 mm (Rauten).

können. Da die Simulationen im vorigen Abschnitt 7.4.2 gezeigt haben, wie wichtig die Wandeigenschaften sind, ist zu erwarten, daß auch die Glasplatten das Verhalten beeinflussen. Eine Abschätzung des Energieverlusts an diesen Wänden [WHJ95] sagt einen vernachlässigbaren Effekt voraus, eine Simulation, die dies überprüft, steht allerdings noch aus.

7.5 Dreidimensionale Simulationen

Um dieselbe Füllhöhe wie in 2D zu erhalten, benutzt man einen dreidimensionalen Behälter mit $L = 10$ in beiden horizontalen Richtungen und erhöht die Teilchenzahl um den Faktor 10, d.h. $N = 500$. Die Höhe des Massenschwerpunktes in Ruhe wird durch eine Simulation mit $V = 0$ als $h_{c.m.0}^{3D} \approx 2.2 \times 10^{-3}$ m bestimmt. In Abb. 31 sind Simulationsergebnisse mit elastischen und dissipativen Wänden dargestellt. Ähnlich wie in 2D ist h_c für kleine V nicht von den Wandeigenschaften abhängig, während man für große V Werte feststellt, daß dissipative Wände zu einem niedrigeren Massenschwerpunkt führen. Ebenso wie in 2D ist die Potenz $\kappa < 2$, d.h. das Skalierungsverhalten ist nicht nur ein zweidimensionales Artefakt.

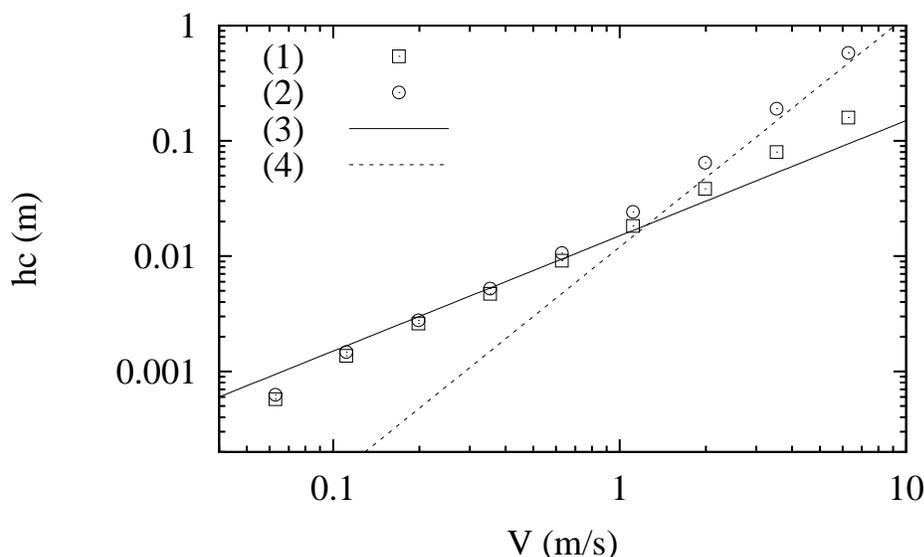


Abbildung 31: Log-log Darstellung von h_c als Funktion von V , mit $\epsilon = 0.9$, $\mu = 0.0$, $N = 500$ und $L = 10$. Die Wandparameter sind: $\epsilon_w = 0.9$ (1) und $\epsilon_w = 1.0$ (2). Die Geraden (3) und (4) zeigen die Steigungen 1 und 2 an.

7.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden zweidimensionale Modellsysteme kugelförmiger Teilchen in einem sinusförmig bewegten Behälter simuliert und mit Experimenten verglichen. Frühere Simulationen [LHB94] wurden um den Rotationsfreiheitsgrad erweitert, wobei das Kollisionsmodell aus Abschnitt 3 verwendet wurde [Lud95].

Reibung ändert nichts an dem interessanten Skalierungsverhalten, das noch immer nicht theoretisch verstanden ist. Die Energie ist nicht wie in einem klassischen Gas

auf die einzelnen Freiheitsgrade gleichmäßig verteilt. Das Verhältnis von Translations- und Rotationsenergie kann erklärt werden, indem man annimmt, die Geschwindigkeit der Teilchenoberflächen sei für Translations- und Rotationsbewegung vergleichbar. Die Kopplung der Teilchenoberflächen und damit der Energien findet durch die Reibung statt. Mit zunehmender Teilchenrauigkeit nehmen potentielle und kinetische Energie ab, da mehr Energie im Rotationsfreiheitsgrad enthalten ist und dissipiert wird.

Die Wandeigenschaften beeinflussen das Verhalten des Systems qualitativ. Bei elastischen und glatten Wänden findet man nur im verdünnten Bereich ein Skalierungsverhalten $h_c \propto V^\kappa$ mit $\kappa \approx 2$, wie auch theoretisch vorhergesagt. Im dichteren Bereich reduziert sich die Potenz auf $\kappa \approx 3/2$. Werden die Wände dissipativ, bleiben aber immer noch glatt, so erstreckt sich die Potenz $\kappa \approx 3/2$ über den gesamten untersuchten Parameterbereich, d.h. über ca. zwei Größenordnungen der Anregungsgeschwindigkeit V . Bei rauhen Wänden ist außerdem wichtig, ob sich die Wände mit dem Boden des Behälters vertikal bewegen. Bei starren Wänden führt jede Teilchen-Wand-Kollision zu Energieverlust, während bei bewegten Wänden eine Kollision auch zu einem Energiegewinn führen kann. Der Einfluß von Wandeigenschaften und -bewegung ist in dünnen Systemen wichtiger als in dichten, da Wandkollisionen dort häufiger auftreten.

Bei einem direkten Vergleich von Experiment und Simulation wurde festgestellt, daß die Potenzen κ und φ in den Simulationen systematisch größer sind als in den Experimenten. Nach Überprüfung verschiedener Ursachen für diese Abweichungen verbleibt allein die Möglichkeit des Einflusses der Front- und Rückwand im Experiment ungeprüft. Theoretische Ansätze [WHJ95, Lee95] sagen größere Potenzen κ voraus als die Simulationen, so daß weiterhin Forschungsbedarf besteht [ML97b, MML97].

Um die Bedeutung des Eigenvolumens der Teilchen und möglicher Korrelationen zwischen Stößen zu untersuchen wurde eine Simulationsmethode stochastischer Natur (DSMC) benutzt und mit ED verglichen. Durch die zufällige Wahl des Stoßparameters bei jeder Kollision sind Erinnerungseffekte bei DSMC nicht möglich. Im dünnen Bereich sind weder das Eigenvolumen noch Korrelationen von Bedeutung, im dichteren Bereich muß das Eigenvolumen berücksichtigt werden (DSMC2), Korrelationen scheinen sogar bis zu ca. 80% der maximalen Dichte keine Rolle zu spielen. Der Vergleich zeigt, daß die Annahmen, die der stochastischen DSMC Methode zugrunde liegen, wenigstens im oben untersuchten Bereich richtig sind.

Weiterhin zeigt das System in 2D und in 3D qualitativ dasselbe Verhalten. Das Skalierungsverhalten mit $\kappa < 2$ besteht auch in 3D, ist also nicht nur ein zweidimensionales Artefakt.

8 Kollektives Verhalten in vibrierten Systemen

8.1 Konvektion

Konvektion ist in Flüssigkeiten ein alltägliches Phänomen, kann aber auch in angeregten granularen Systemen gefunden werden [Far31]. Konvektion wird durch ein Gas oder eine Flüssigkeit zwischen den Teilchen verursacht, wenn Unterschiede in der Permeabilität existieren. Andererseits ist Konvektion ebenso im Vakuum möglich, wobei die Randbedingungen eine wichtige Rolle spielen. Hier soll Konvektion diskutiert werden, die im Vakuum vorkommt.

8.1.1 Überblick

Eine immer wieder aufgeworfene Frage ist, wie granulare Medien auf äußere Anregung reagieren und welche Rolle die Randbedingungen dabei spielen. Die Intensität der Konvektion nimmt mit der Intensität der Anregung zu, und die Stärke der Konvektion nimmt mit der Tiefe im System ab [KEK⁺96, Kni97, Gro97]. Konvektion kann nur oberhalb einer kritischen Anregungsbeschleunigung gefunden werden [Tag92, GHS92, KJN93, LCB⁺94b], unterhalb dieser Schwelle wird das Material verdichtet [BNKN96, NPJ⁺97].

In einem Behälter mit rauhen Wänden wird das Material in der Regel an den Wänden stärker nach unten beschleunigt [JM92a, Mor93, Gro97]. Massenerhaltung sorgt dafür, daß sich, im Mittel über viele Vibrationsperioden, Konvektionszellen bilden, in denen sich das Material in der Mitte nach oben bewegt [Far31, LDF89, Raj91, CDR92, GHS92, Tag92, LCB⁺94b, BM95, EJK⁺95, HYH95, PH95, Gro97]. Die Konvektion in granularen Materialien hängt, im Gegensatz zu Flüssigkeiten, wesentlich von der Beschaffenheit der Wände ab. Begleiterscheinungen von Konvektion können Haufenbildung [LDF89, CDR92] oder Entmischung (siehe Abschnit 8.2) sein.

Konvektion in vibrierten Behältern konnte mit der Steifigkeit moduliert werden: Hartes Material unterdrückt, weiches Material begünstigt die Entstehung von Konvektion [LCB⁺94b]. Neuere Experimente [KEK⁺96, Kni97] und Simulationen [Gro97] zu Konvektion in Behältern mit geneigten Wänden zeigen, daß sich die Richtung der Konvektionszellen bei einem Wand-Neigungswinkel von ca. 10° umkehrt. Dieses Ergebnis ist unabhängig von der Anregungsfrequenz, wird aber deutlich beeinflusst von der Wandrauhigkeit und der Anregungsamplitude. Ebenso wurden die mit Kernspinresonanz gewonnenen Geschwindigkeitsprofile [EJK⁺95] numerisch reproduziert [Gro97].

Im folgenden soll untersucht werden, bei welcher Phase der periodischen Anregungsbewegung Konvektion am stärksten ist und wie sich das Material während einer Periode als Funktion der Phase verhält.

8.1.2 Modellierungsergebnisse

Das Modellsystem ist ebenso wie in Abschnitt 7.1 ein zweidimensionaler Behälter der Breite l , mit vertikalen Wänden und einer horizontalen Bodenplatte. Er wird mit N

kugelförmigen Teilchen mit Durchmesser d_0 gefüllt und nach Gleichung 63 vertikal vibriert. Die Vibration ist sinusförmig, und die Phase der Bewegung wird mit $\phi = tf$ bezeichnet, wobei $T = 1/f$ die Periode und $0 \leq t < T$ ist.

Zur Simulation von Konvektion wird hier erstmals die in Kapitel 4 eingeführte TCED Methode verwendet. Zuerst soll geprüft werden, wie die verwendete Kontaktdauer t_c die Simulationen beeinflusst. Bei Verwendung der MD Methode wurde festgestellt, daß die Stärke der Konvektion mit wachsendem t_c durch elastische Effekte zunimmt [LCB⁺94b]. Die Stärke der Konvektion wird gemessen, indem man den Behälter in Zellen der Seitenlänge d_0 unterteilt und den Fluß der Teilchen für jede Zelle ermittelt:

$$\langle \vec{J}(\vec{r}) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N |\delta(\vec{r}_i(t) - \vec{r}) - \delta(\vec{r}_i(t - \Delta t) - \vec{r})| (\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \Delta t)) \right\rangle_{\Delta t}. \quad (80)$$

In Gleichung 80 ist $\vec{r}_i(t)$ das Zentrum der Zelle, in der sich Teilchen i zur Zeit t befindet. Die Delta-Funktion $\delta(\vec{r}_i(t) - \vec{r})$ ist demnach nur dann von Null verschieden, wenn Teilchen i sich zur Zeit t in Zelle \vec{r} befindet. Die Funktion im Absolutbetrag ist nur dann von Null verschieden, wenn Teilchen i im Zeitintervall Δt die Zelle gewechselt hat. Die Intensität der Konvektion im System

$$J = \sqrt{\sum_{\vec{r}} \vec{J}(\vec{r})^2} \quad (81)$$

ist durch ihre Definition immer positiv.

Für die in Gleichung 80 durch die eckigen Klammern gekennzeichnete Zeit-Mittelung gibt es mehrere Möglichkeiten: Man kann zu einer festen Phase $\phi = 0$ mitteln und wählt als Zeitschritt die Periode, d.h. $\Delta t = T$ [Tag92, LCB⁺94b], oder man mittelt zu m verschiedenen Phasen $\phi_j = j/m$ (mit $j = 0, 1, \dots, m - 1$) und wählt dabei entweder $\Delta t = T$ oder $\Delta t = T/m$.

Durch Mittelung über kurze Zeitintervalle T/m erhält man die *Fluß*-Intensität J_t als Funktion der Phase ϕ_j bezogen auf das Ruhesystem. Damit wird die kollektive Bewegung der Teilchen im Ruhesystem gemessen, und man kann feststellen, zu welcher Phase welcher Teil des Materials in Bewegung ist. Diese Mittelung kann zur Darstellung von Dichtewellen im Material verwendet werden. Eine Alternative dazu ist, die Mittelung bezogen auf den Massenschwerpunkt aller Teilchen zu verschiedenen Phasen ϕ_j durchzuführen, was zur Messung von *Kompression* J_c bzw. Dekompression im Material benutzt werden kann. Bei Mittelung über jeweils eine Periode wird die Fluß-Intensität J_k bezogen auf die Position des Behälters zur Phase ϕ_j ermittelt. So kann man feststellen, wie sich Teilchen relativ zum Behälter bewegen und ob, über viele Perioden gemittelt, *Konvektion* stattfindet.

In Abb. 32 sind die Intensität der Konvektion J_k und des Flusses J_t für verschiedene Kontaktdauern t_c dargestellt. Für diese Simulation wurden $N = 100$ Teilchen in einem Behälter der Breite $L = l/d_0 = 10$ über 250 Perioden mit $f = 20$ Hz und $\Gamma = 3.22$ simuliert. Die Materialparameter sind $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\epsilon_b = 1$, $\mu = \mu_w = 0.25$, $\mu_b = 0$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.5$. Über den Einschwingvorgang innerhalb der ersten Perioden wird durch Weglassen der ersten 50 Perioden nicht gemittelt. In Abb. 32(a) ist J_k als Funktion der Phase für $t_c = 0$ s, 10^{-6} s, 10^{-5} s, 10^{-4} s und 10^{-3} s dargestellt. Die klassische ED Methode mit $t_c = 0$ s ist durch schwarze Quadrate gekennzeichnet. Man stellt fest, daß die Intensität der Konvektion kaum von t_c abhängt, solange

$t_c \leq 10^{-4}$ s ist. Die Intensität J_k ist bei der Phase $\phi \approx 0$ maximal, wenn sich der Behälter mit seiner Maximalgeschwindigkeit nach oben bewegt.

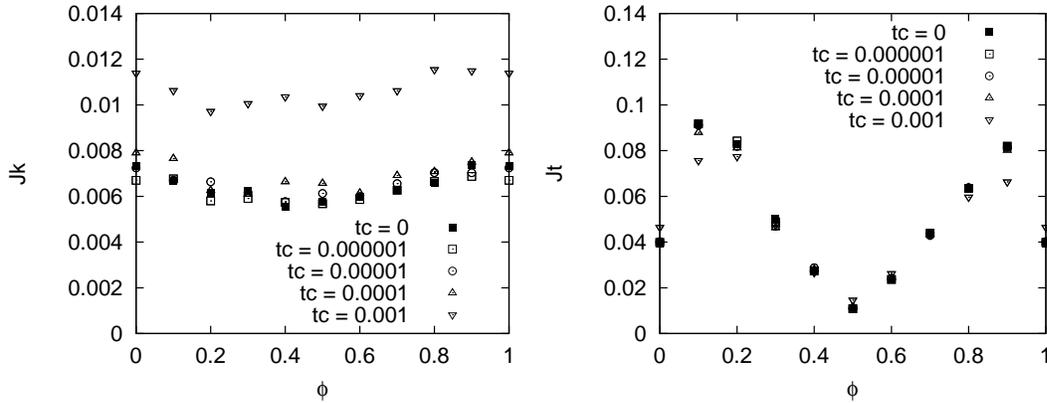


Abbildung 32: (a) Intensität der Konvektion J_k als Funktion der Phase ϕ , mit $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\mu = \mu_w = 0.25$, $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.5$, $N = 100$, $L = 10$, $f = 20$ Hz und $\Gamma = 3.22$. (b) Intensität des Flusses J_t als Funktion der Phase ϕ von den Simulationen aus (a). Die verschiedenen Symbole kennzeichnen TCED Simulationen mit unterschiedlichen t_c Werten.

In Abb. 33 sind Simulationsergebnisse mit $t_c = 10^{-5}$ s dargestellt, und der Wandreibungskoeffizient μ_w wird variiert. Mit zunehmender Wandreibung nimmt der konvektive Fluß J_k in Abb. 33(a) ab. Der Wert von J_c in Abb. 33(b) ist nur während der Aufwärtsbewegung der Bodenplatte groß. In dieser Zeit findet eine starke Kompression des Materials statt. Zu späteren Zeiten hebt das Material von der Bodenplatte ab und fliegt frei bis es die Bodenplatte wieder trifft. Während des ballistischen Flugs findet eine schwache Dekompression statt. Die Phase, zu der die Bodenplatte getroffen wird hängt in erster Linie von Γ und nicht von μ_w ab, weshalb die hier gezeigten Kurven fast zusammenfallen. Die Kompressions- und die Dekompressionsintensität nehmen leicht mit μ_w zu.

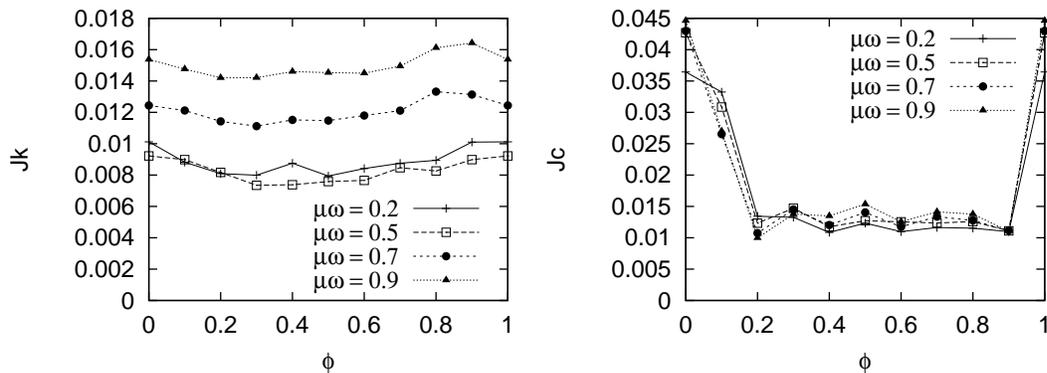


Abbildung 33: (a) Intensität der Konvektion J_k als Funktion der Phase ϕ für verschiedene μ_w , mit $t_c = 10^{-4}$ s, $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\mu = 0.25$, $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.5$, $N = 100$, $L = 10$, $f = 20$ Hz und $\Gamma = 3.22$. (b) Intensität der Kompression J_c als Funktion der Phase ϕ von den Simulationen aus (a).

In Abb. 34 sind Simulationsergebnisse mit $t_c = 10^{-4}$ s dargestellt, wobei die Beschleunigung Γ variiert wird. Mit zunehmendem Γ nimmt der konvektive Fluß J_k in Abb. 34(a) deutlich zu. Der Wert von J_t in Abb. 34(b) verhält sich für verschiedene Γ unterschiedlich. Abgesehen von den Daten für $\Gamma = 2.09$ ist eine Rechts-Verschiebung der Kurven mit wachsendem Γ zu erkennen, d.h. das Material trifft die Bodenplatte mit wachsendem Γ immer später.

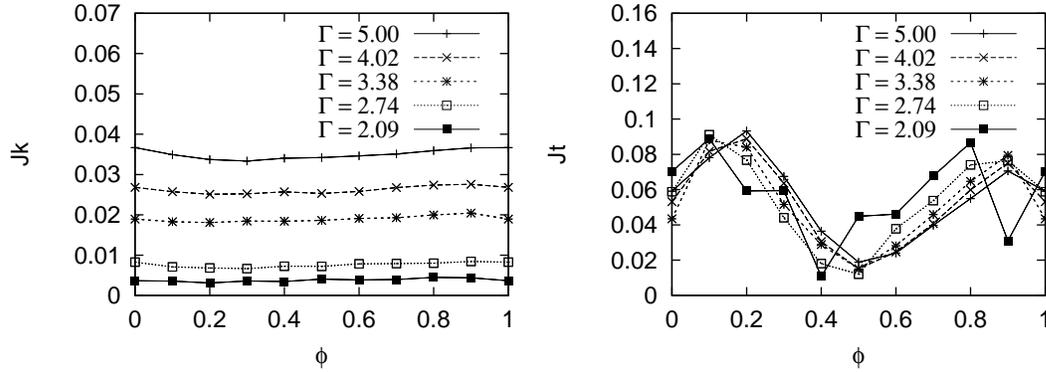


Abbildung 34: (a) Intensität der Konvektion J_k als Funktion der Phase ϕ , für verschiedene Γ mit $t_c = 10^{-4}$ s, $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\mu = \mu_w = 0.25$, $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.5$, $N = 100$, $L = 10$, $f = 20$ Hz. (b) Intensität des Flusses J_t als Funktion der Phase ϕ von den Simulationen aus (a).

8.1.3 Zusammenfassung

Anhand numerischer Simulationen wurden Fluß-, Kompressions- und Konvektionsintensität gemessen. Die im Bezugssystem des Behälters gemessene Konvektion hängt kaum von der Phase ab, nimmt aber deutlich mit zunehmendem μ_w oder Γ zu. Die Kompression ist während der Aufwärtsbewegung des Behälterbodens sehr stark, und die Dekompression während des ballistischen Flugs ist vergleichsweise schwach. Die Kompression hängt kaum von μ_w ab, es ist lediglich eine Tendenz zu stärkerer Kompression/Dekompression mit zunehmendem μ_w festzustellen. Der Fluß im Ruhesystem hängt deutlich von Γ ab, da die Phasen der Trennung und des Treffens mit der Bodenplatte von Γ bestimmt werden.

8.2 Größenseparation

Entmischung tritt besonders deutlich auf, wenn die Teilchensorten unterschiedliche Größen haben. Größenseparation granularer Teilchen ist ein Phänomen von enormer wirtschaftlicher Bedeutung und wird seit vielen Jahrzehnten intensiv erforscht. Dabei ist zu beachten, daß nicht nur unterschiedliche Größe, sondern auch unterschiedliche Materialeigenschaften zur Entmischung der verschiedenen Teilchenarten führen können. Ein besseres Verständnis der Ursachen kann für eine kontrollierbare Separation, ihre Abschwächung oder sogar ihre Vermeidung eine Hilfe sein. Neben experimentellen Untersuchungen und theoretischen Beschreibungen [Wil76, Som79, Cho95] sind numerische Simulationen der Separation ein gutes Hilfsmittel zu tieferen Einblicken [LDCR96b].

8.2.1 Überblick

Separation kann durch Geometrieeffekte, durch Konvektion oder durch Scherung verursacht bzw. beschleunigt werden. Geometriebedingte Separation bedeutet, daß sich kleinere Teilchen langsam unter die größeren Teilchen schieben. Dies ist möglich, da für eine Bewegung eines kleinen Teilchens bereits eine kleine Lücke ausreicht, während ein großes Teilchen eine entsprechend große Lücke finden muß. Separation durch reine Geometrie-Effekte ist sehr langsam, während Separation durch Konvektion von der eventuell sehr hohen Geschwindigkeit der Konvektion beeinflußt wird. Beide Effekte kommen in vibrierten Behältern vor, treten aber in unterschiedlichen Parameterbereichen auf. Da Konvektion bevorzugt bei starker Anregung beobachtet wird, und da die Intensität der Konvektion mit der Anregungsbeschleunigung zunimmt [KJN93], ist geometriebedingte Konvektion nur bei sehr schwachen Anregungen zu beobachten [DRC93, DMCR94b, DL95].

In rotierenden Trommeln kann man andere Ursachen für Entmischung identifizieren [Oya39, Lac54, DR62, CFH⁺66, HCHF66, CF70, RC71, CSB76, GKB91a, GKB91b, WB93, HK94, BJW94, ZLL⁺94, RCLB94, Nak94, HK95a, Koh95, MSMO95, CB95, BPT95, CRD95, PB95b, PB95a, Ris96]. Bei der Drehung wird die Oberfläche geneigt und bei Überschreitung eines kritischen Winkels wird der Böschungswinkel durch eine Lawine verringert. In der Lawine bewegen sich Teilchen in verschiedenen Tiefen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten – das Material wird inhomogen geschert. Unter Scherung wandern Teilchen unterschiedlicher Größe unter Umständen in verschiedene Richtungen, was wiederum Entmischung zur Folge hat. In einer rotierenden Trommel stellt man radiale und axiale Separation fest. Bei radialer Entmischung wandern die kleinen Teilchen zum Zentrum, bzw. die großen Teilchen wandern zur Oberfläche und werden durch Lawinen bevorzugt nach außen transportiert. Bei axialer Entmischung führen Fluktuationen des Böschungswinkels an der Oberfläche dazu, daß Teilchen auch axial wandern können. Axiale Entmischung wird stark von den Randbedingungen beeinflußt und findet auf einer Zeitskala von vielen tausend Umdrehungen statt, während radiale Separation bereits nach ein bis zwei Umdrehungen geschieht.

Außer in rotierenden Trommeln kommt Entmischung auch in vibrierten Behältern vor. Zweidimensionale Modellsysteme eignen sich besonders gut zur Beobachtung des Entmischungsvorgangs [DRC93, DMCR94b, WJH94, CRD95], da der Vorgang optisch sichtbar ist. Somit wird eine einfache Weiterverarbeitung der Bildinformationen

möglich. In dreidimensionalen Systemen muß man auf andere, wesentlich aufwendigere experimentelle Methoden wie Kernspinresonanz [EJK⁺95] zurückgreifen. In vibrierten Behältern tritt neben Entmischung oft auch Konvektion auf, was den Entmischungsvorgang wesentlich beschleunigt. Zahlreiche Experimente und Simulationen mit neuen Methoden wurden in den letzten Jahren durchgeführt [AS73, SB78, HW86, RPS⁺86, RSP⁺87, JM88, SL88, JM90, Dev90, AL90, BG90, ABS91, JM92b, DRC93, BMG93, BM93, JMP93b, KJN93, OTH⁺93, DMCR94b, CWHB96, DL95, PH95, GHPo96, VRD97]. Theoretische Ansätze, die zur mikroskopischen Beschreibung der Entmischung verwendet werden könnten, sind eher selten [SF88, Cam90, GZ93, MBD94, GS95].

In einem vibrierten Behälter stellt man oberhalb einer kritischen Anregungsbeschleunigung Konvektion fest. Das Material wird in der Regel an den Wänden stärker nach unten beschleunigt, als in der Mitte des Behälters [JM92a, Mor93]. Im Mittel über viele Vibrationsperioden ergeben sich so Konvektionszellen. Entmischung im Zusammenhang mit Konvektion wurde experimentell [KJN93, DRC93, DMCR94b, CWHB96] und numerisch [RSP⁺87, JM92b, Tag92, GHS92, LCB⁺94b, DL95, PB95b] mit verschiedenen Methoden untersucht. In einer Konvektionszelle werden, abgesehen von Schereffekten, große und kleine Teilchen gleichmäßig transportiert. Die Größen-separation findet an der Oberfläche des Materials statt, wo die großen Teilchen nicht zusammen mit den kleinen Teilchen nach unten transportiert werden. Konvektion führt also zu einer sehr schnellen Größenseparation [DMCR94b]. Da die Stärke der Konvektion mit der Tiefe im System abnimmt, kann man manchmal konvektionsinduzierte Separation und Entmischung durch Geometrieeffekte gleichzeitig beobachten [CDR92, DMCR94b, PB95b].

8.2.2 Entmischung ohne Konvektion

Das Modellsystem ist quasi-zweidimensional, d.h. N Teilchen des Durchmessers d werden zwischen zwei parallele Plexiglasplatten gebracht, deren Abstand nur minimal größer als der Teilchendurchmesser ist. Um Teilchengrößen $D_s > d$ zulassen zu können, benutzt man eine Scheibe der Dicke $0.9d$, in die drei der kleinen Teilchen mit Durchmesser d als Abstandhalter eingelassen sind [DRC93, DMCR94b, CWHB96]. Mit dem Durchmesser d der kleinen und D_s der großen Teilchen definiert man das Größenverhältnis $\Phi = D_s/d$ [DRC93]. Bei Entmischung ohne Konvektion wurden kritische Verhältnisse Φ_c numerisch berechnet bzw. analytisch vorhergesagt ($\Phi_c = 12.8$ in 2D, $\Phi_c = 2.78$ in 3D) [JM90, JM91, JM92b, JMP93a, DRC93]. Oberhalb von Φ_c findet Separation kontinuierlich statt, unterhalb von Φ_c findet man intermittentes Verhalten. Das große Teilchen bewegt sich während vieler Vibrationsperioden relativ zu den kleinen Teilchen nicht, bis es sich manchmal nach oben und viel seltener nach unten bewegen kann.

Dank der stetig wachsenden Leistungsfähigkeit der Computer ist es in den letzten Jahren möglich geworden, relativ viele Teilchen mit diversen Formen und Größen in unterschiedlichen Geometrien zu simulieren. Die meisten numerischen Untersuchungen wurden mit der MD Methode durchgeführt [Tag92, GHS92, LCB⁺94b, CS79, WB86, KMP⁺95]. Eine Alternative dazu sind Monte-Carlo (MC) Verfahren [JM92b, DL95], die im wesentlichen das Eigenvolumen der Teilchen berücksichtigen (siehe Teil VII). Bei der MC Methode werden die Fluktuationen bei der Teilchenbewegung durch

die zufällige Wahl eines Teilchens berücksichtigt, während die deterministische MD Methode die Teilchentrajektorien explizit verfolgt. Der Nachteil der stochastischen MC Methoden ist, daß die Materialparameter nicht direkt in das Verfahren eingehen.

Ebenso wie im Experiment wird bei der MC Simulation der zweidimensionale Behälter mit vielen gleich großen kleinen Kugeln und einer großen Scheibe gefüllt. Details zur Simulationsmethode sind in Abschnitt 19.2 zu finden. Die einzige Wechselwirkung der Teilchen ist die Bedingung, daß Teilchen *nicht* überlappen dürfen. Die Vibration des Behälters wird realisiert, indem man den Behälter um eine Amplitude a nach unten zieht und die Teilchen dann im Gravitationsfeld fallen läßt. Da die Teilchen in der Nähe der Wand bei der Verschiebung des Behälters nicht mitbeschleunigt werden, kann Konvektion nicht auftreten. Das Ziel ist zu prüfen, ob Entmischung auch ohne Konvektion auftreten kann und damit nicht nur ein Randeffect der Konvektion ist [KJN93, PB95b]. In Systemen mit starker Konvektion ist diese sicherlich die treibende Kraft [KJN93]. Da Konvektion schon bei sehr kleinen Anregungsamplituden gefunden werden kann, ist Separation ohne Konvektion nur bei äußerst schwachen Anregungen oder mit besonderen Randbedingungen möglich. Bei schwacher Anregung ist die Konvektion auf den oberen Bereich des Systems beschränkt [CDR92], so daß im unteren Bereich Separation auch ohne Konvektion beobachtet werden konnte [DRC93, DMCR94b].

8.2.3 Größenseparation im quasi-statischen Fall

Im folgenden wird eine Monte-Carlo (MC) Methode verwendet, um Größentrennung in vibrierten Behältern ohne Konvektion zu untersuchen. In Abb. 35 sind Momentaufnahmen des Systems zu zwei Zeiten während des Separationsvorgangs bei einem Größenverhältnis von $\Phi = 10.5$ gezeigt. In Abb. 35(a) geben die Pfeile die Versetzung der Teilchen in den nächsten 25 Perioden an, und in Abb. 35(b) ist eine Momentaufnahme 455 Perioden später dargestellt. Die Versetzung der Teilchen macht deutlich, daß kleine Teilchen, die sich neben der großen Scheibe befinden, manchmal nach unten rutschen können. Damit wird der freie Raum unter dem großen Teilchen langsam aufgefüllt, und es entstehen immer wieder Konfigurationen, bei denen das große Teilchen eine höhere stabile Position einnehmen kann. Unter der großen Scheibe sind die kleinen Teilchen in einem regelmäßigen Dreiecksgitter angeordnet, darüber ist die Regelmäßigkeit durch das große Teilchen gestört. Während das große Teilchen nach oben wandert, ordnen sich die kleinen Teilchen darunter regelmäßig an, nachdem sie lawinenartig einmal links, einmal rechts am großen Teilchen vorbei nach unten fallen.

In Abb. 36(a) ist die vertikale Position einer relativ kleinen Scheibe mit $\Phi = 2$ als Funktion der Vibrationsperioden dargestellt. Abb. 36(a) verdeutlicht, daß die Separation äußerst langsam stattfindet, wie auch experimentell festgestellt wurde [DRC93]. Die Vertikalpositionen, bei denen der Anstieg unterbrochen wird, entsprechen den Positionen, die man durch geometrische Stabilitätskriterien einfach vorhersagen kann [DRC93]. Die Steiggeschwindigkeit ist in diesem Fall nur etwa $2d$ pro 10000 Perioden.

8.2.4 Einfluß des Größenverhältnisses Φ auf die Separation

In Experimenten mit Scheiben unterschiedlicher Größe [DMCR94b] wurde eine lineare Abhängigkeit der Separationsgeschwindigkeit V_s vom Größenverhältnis Φ festgestellt.

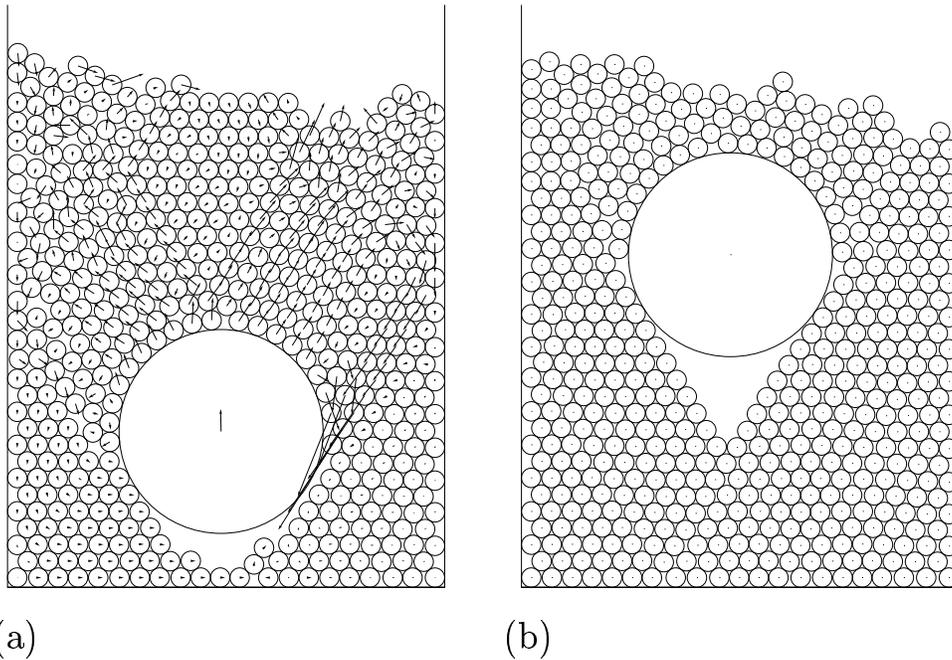


Abbildung 35: Momentaufnahmen des vibrierten Systems mit $\Phi = 10.5$ und $a = d/4$. (a) Die Kreise zeigen die Teilchenpositionen nach 445 Perioden und die Pfeile geben die Versetzung in den nächsten 25 Perioden an. (b) Die Kreise zeigen die Teilchen nach 900 Perioden.

Die Extrapolation zum Grenzfall $V_s = 0$ ergab das kritische Größenverhältnis $\Phi_c \approx 3.5$. Eine Untersuchung von V_s als Funktion der Anregungsamplitude a wurde für sehr große a Werte mit MC Methoden unternommen [Dev90], wobei relativ große Separationsgeschwindigkeiten festgestellt wurden.

In Abb. 36 sind die Trajektorien von großen Scheiben für verschiedene Größenverhältnisse Φ dargestellt. Die Position der großen Scheibe mit $\Phi = 2$ in Abb. 36(a) und mit verschiedenen Größenverhältnissen $\Phi \geq 10$ in Abb. 36(b) wurde mit den Parametern $a = d/4$, und $\delta_{\max} = 0.05d$ bestimmt. Die Steiggeschwindigkeit v_s kann durch eine Mittelung über den gesamten Anstieg gewonnen werden, und es muß über einige Simulationen gemittelt werden, um statistische Schwankungen zu verringern. Bei kurzen Simulationen mit ca. 1000 Vibrationszyklen konnte keine Separation bei $\Phi < 9$ festgestellt werden. Wie aus Abb. 36(a) ersichtlich wird, findet Separation auch bei kleinerem Φ auf einer viel längeren Zeitskala statt.

Um das intermittente Verhalten der großen Scheibe zu erklären, kann man mit einem einfachen geometrischen Modell die stabilen Positionen der Scheibe auf einem regulären Dreiecksgitter der kleinen Teilchen berechnen. In Abb. 37(a) ist die große Scheibe in einem Trichter kleiner Teilchen schematisch dargestellt. Die kleinen Teilchen entlang der Wand des Trichters sind in stabilen Positionen, so daß nur die mit „a“ gekennzeichneten Teilchen durch Positionsänderung eine andere stabile Konfiguration erzeugen können. Wie im folgenden gezeigt, ist die Lücke zwischen der großen Scheibe und dem Teilchen i eine nicht-stetige Funktion von Φ .

Die Höhe von Teilchen i ist $z_i = id\sqrt{3}/2$, und die Entfernung der Scheibe von Teil-

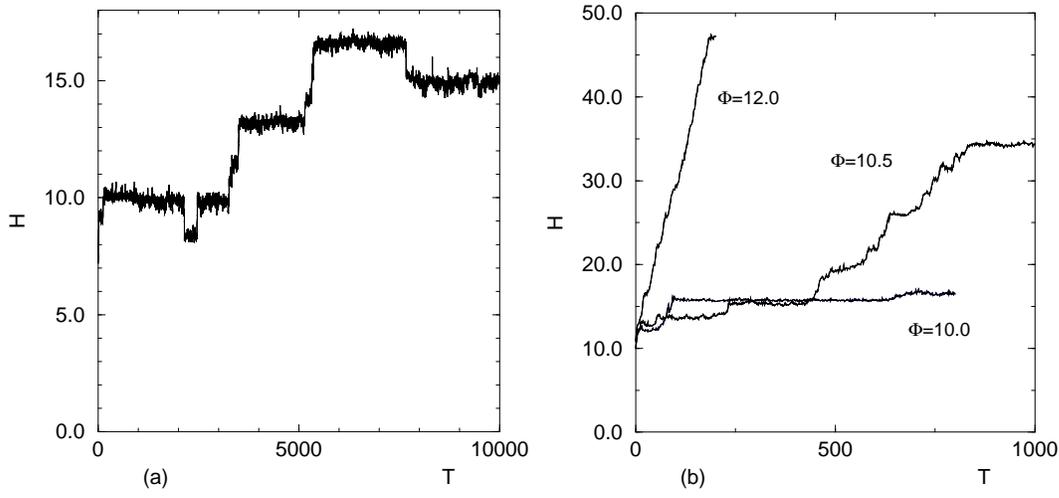


Abbildung 36: (a) Vertikale Position $H = 2z/d$ eines großen Teilchens als Funktion der Periode T mit $\Phi = 2$, $a = d/2$ und $\delta_{\max} = 0.05d$. (b) Vertikale Position $H = 2z/d$ eines großen Teilchens als Funktion der Periode T mit verschiedenen Φ , $a = d/4$ und $\delta_{\max} = 0.05d$.

chen 1 ist $D_s + d$. Das Teilchen i soll das oberste der Teilchen in der Wand sein, dessen Zentrum unter dem der Scheibe liegt. Daraus erhält man $i = \text{INT} \left(\frac{2(D_s + d)}{\sqrt{3}d} \right)$, wobei $\text{INT}(x)$ die größte ganze Zahl kleiner als das Argument x ist. Die Lücke zwischen der Scheibe und der Zylinderwand ist

$$\delta_s = \sqrt{\left(D_s + d - id\sqrt{3}/2 \right)^2 + (id/2)^2} \quad (82)$$

mit $x_i = id/2$. Die Entfernung zwischen zwei stabilen Positionen beeinflusst die Anzahl der Perioden, die nötig sind, um das große Teilchen auf die nächsthöhere stabile Position kommen zu lassen.

In Abb. 37(b) ist der Abstand zwischen den Oberflächen des Teilchens i und dem großen Teilchen als Funktion von Φ dargestellt. Ein Sprung im Abstand tritt jedesmal dann auf, wenn $2(\Phi + 1)/\sqrt{3}$ ganzzahlig wird [DRC93]. Knapp unterhalb eines solchen Sprungs ist die Öffnung klein, oberhalb des Sprungs ist die Öffnung sehr groß und begünstigt so das Herabrutschen des kleinen Teilchens a entlang der Trichterwand. Simulationen mit Φ Werten knapp unterhalb und oberhalb der Sprungwerte zeigen, daß die Steiggeschwindigkeit V_s oberhalb des Sprungs größer ist [DL95].

8.2.5 Zusammenfassung

Mit einer Monte-Carlo Methode, die vor allem die geometrischen Effekte in einem granularen System berücksichtigt, wurde ein periodisch angeregtes System untersucht, in dem sich eine große Scheibe zwischen vielen kleinen Teilchen befindet. Im Vergleich zu früheren Simulationen mit ähnlichen Methoden [RPS⁺86] wurden kleinere Schrittweiten verwendet, die das Relaxationsverhalten realistischer machen. Größenseparation wurde auch ohne Konvektion, allein durch geometrische Effekte gefunden. Die typischen Steiggeschwindigkeiten waren den experimentell gemessenen vergleichbar [DMCR94b], wenn den Teilchen auch erlaubt wurde, sich mit geringer Wahrscheinlichkeit entgegen dem Gravitationsfeld zu bewegen.

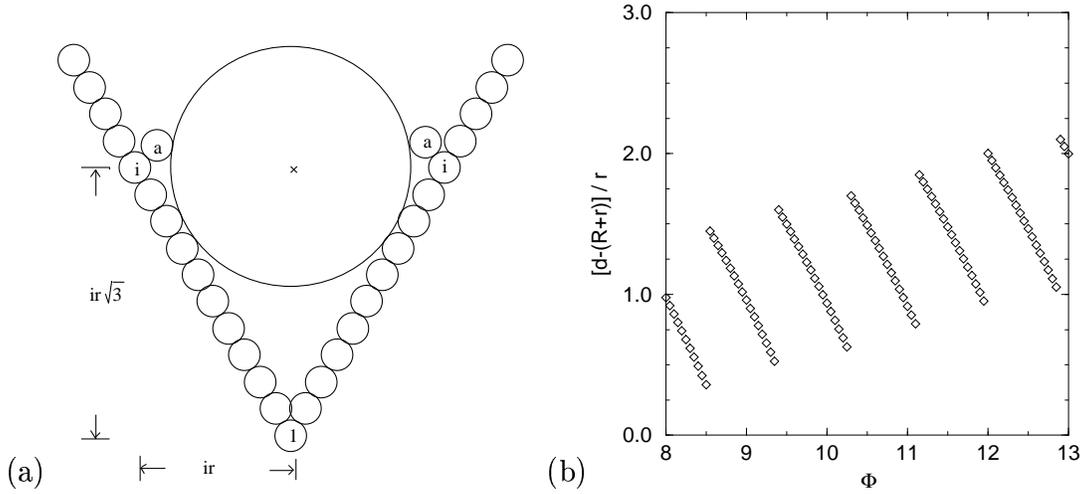


Abbildung 37: (a) Schematische Darstellung des Trichters aus kleinen Teilchen mit der großen Scheibe in der Mitte. (b) Abstand zwischen Teilchen i und der großen Scheibe.

Das Aufsteigen der großen Scheibe findet bei kleinen Φ Werten intermittent statt – das Teilchen verweilt auf verschiedenen Positionen unterschiedlich lange. Ist das Größenverhältnis größer als ein kritisches Φ_c , so steigt das Teilchen viel schneller gleichmäßig nach oben. Im Bereich unterhalb von Φ_c wurde ein sprunghaftes Anstiegsverhalten für verschiedene Φ Werte festgestellt und durch geometrische Argumente veranschaulicht. In der Simulation war es möglich, die Fluktuationen soweit zu reduzieren, daß keine Blockbewegungen und keine Konvektion auftrat. Damit haben die Simulationen gezeigt, daß Größenseparation auch ohne Konvektion auf einer extrem langen Zeitskala stattfindet.

Teil IV

Übergang von Statik zu Dynamik

Ausgehend von einem quasi-statischen granularen Medium in einem Behälter, wird untersucht, wie der Übergang von Statik zu Dynamik stattfindet. Die Ursachen für Verdünnung, Rißbildung und Drehsinnordnung werden diskutiert und der Unterschied zwischen homogenem und inhomogenem Zustand wird quantitativ beschrieben.

9 Motivation

Außer im Weltraum oder bei Betrachtung von Teilsystemen muß man immer die Ränder eines granularen Systems besonders beachten. Wie in Teil III gezeigt, findet Energiezufuhr über die Wände statt, und Eigenschaften der Ränder, wie Reibung oder Bewegungszustand, beeinflussen das Systemverhalten wesentlich. Materialtransport ist oft nur in begrenzten Geometrien wie Rohren möglich und muß durch Gravitation, Vibrationen oder ein Gas bzw. eine Flüssigkeit vorangetrieben werden. Sind die granularen Teilchen groß und ist die Bewegung langsam genug, so kann das Gas zwischen den Teilchen vernachlässigt werden.

Das Fließen entlang geneigter Oberflächen, also ein System mit einem festen und einem offenen Rand, ist wegen seiner Anwendung zur Erforschung von Lawinen von besonderem Interesse [Sav79, Dra90, RJR⁺94, RHB94, CDBR95]. Andere Beispiele für die Bewegung in begrenzten Geometrien sind Silo- oder Rohrfluß, wobei elementare Prozesse, wie Fluktuationen in der Massenflußrate verursacht durch Bogenbildung [BR70], Dichtewellen in Trichtern [BBFJ89] oder $1/f$ -Rauschen des Drucks an der Siloöffnung [BLB93], noch immer unverstanden sind. Beim Rohrfluß wurde besonders der Zustand relativ schnellen Fließens ausführlich untersucht. Verstopfungen und Staus in granularen Systemen im Vakuum wurden vor allem numerisch, in Systemen mit periodischen Randbedingungen, betrachtet [Pö94, PH94, LL94]. Es wurden Dichtefluktuationen festgestellt, die sich über die gesamte Länge des Rohres ausbreiten können, und sich mit Massen- und Impulsbilanzgleichungen analytisch beschreiben lassen [LL94]. In Experimenten wurden Dichtewellen entlang und entgegen der Stromrichtung nur in Gegenwart eines Gases festgestellt und durch eine Zweiphasen-Theorie erklärt [RHH96, RTHH97].

Der Übergang eines ruhenden granularen Mediums in den Zustand der Bewegung wurde erst kürzlich anhand eines zweidimensionalen Modellsystems genauer untersucht [DML⁺96]. Inspiriert wurden diese Experimente durch die Entdeckung von „Mikrorissen“ in schwach vibrierten granularen Medien. Unter schwacher Vibration stellt man auf einer sehr langen Zeitskala Verdichtung [KEK⁺96, Kni97], oder in Behältern mit rauhen Wänden Haufenbildung durch Konvektion an der Oberfläche und in Wandnähe fest [DMCR94b]. Eine Momentaufnahme dieses Experiments ist in Abb. 38 gezeigt.

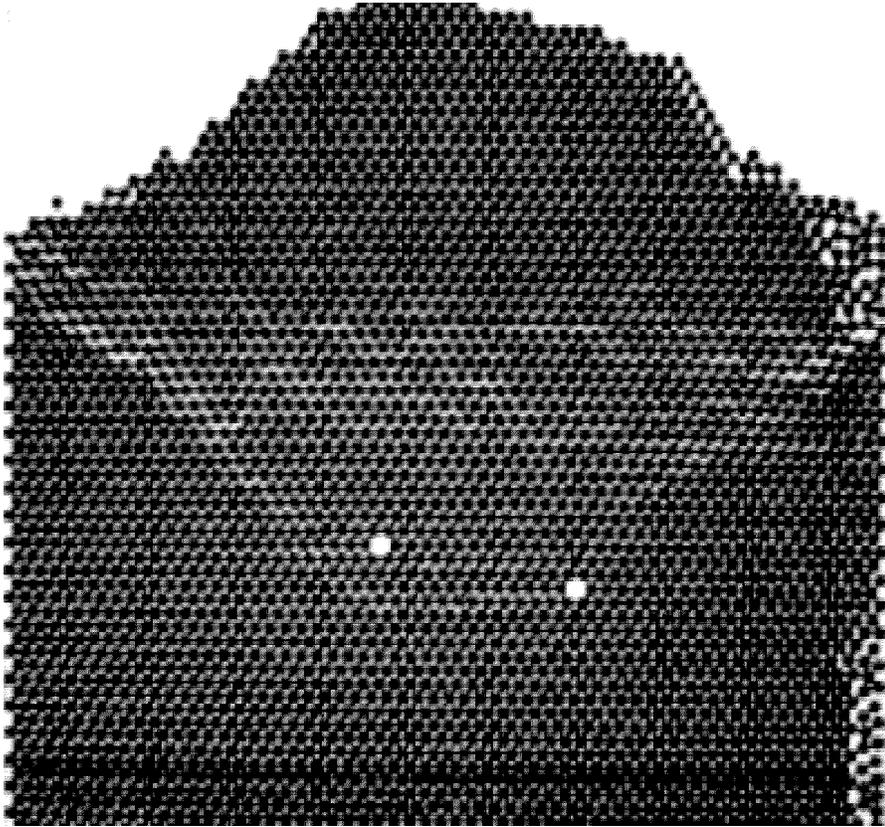


Abbildung 38: Foto eines mit $f = 15$ Hz vibrierten Modellgranulats während der Aufwärtsbewegung, nach Trennung von der Bodenplatte. Das Foto wurde mit einer Videokamera und einem Stroboskop aufgenommen.

Neben dem Haufen in der Mitte des Materials findet man im Inneren zwei Fehlstellen und, kaum sichtbar, die von den oberen Ecken nach innen laufenden „Mikrorisse“. Diese Risse sind nur für wenige Millisekunden ($\approx 1/10$ einer Periode) sichtbar, während sich das Material im freien Fall befindet und sich die Wände, relativ zum Material, schnell nach unten bewegen.

Während des freien Falls erwartet man, daß die Dichte des Materials abnehmen kann. Bei einem kompressiblen Gas würde das gleichmäßig über die ganze vertikale Ausdehnung geschehen. Im Fall eines granularen Mediums ist die Verdünnung jedoch auf wenige Teilchendurchmesser lokalisiert und deshalb als Öffnung oder Riß sichtbar.

10 Experimente und Theorie

10.1 Experimentelle Untersuchung

Will man die Bildung der oben beschriebenen Risse genauer untersuchen, so benötigt man zumindest eine Hochgeschwindigkeitskamera, die diesem schnellen Prozeß während Bruchteilen einer Anregungsperiode folgen kann. Anstatt das Material durch die Vibrationsbewegung hochzuwerfen und die Wände relativ zum Material nach unten zu bewegen, kann man die Wände fixieren und das Material einfach fallen lassen. Diese zweite Methode erfordert einen veränderten Versuchsaufbau, der in Abb. 39 schematisch dargestellt ist.

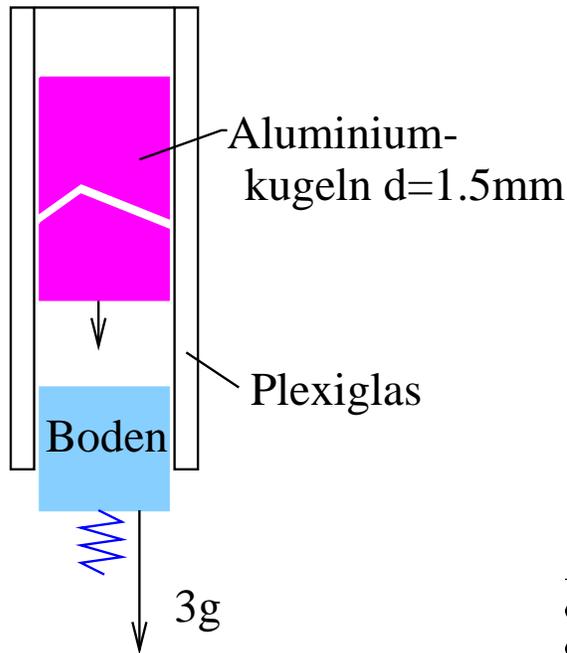


Abbildung 39: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus zur Untersuchung der Rißbildung in granularen Medien.

Der Behälter besteht neben den Seitenwänden und der beweglichen Bodenplatte aus zwei planparallelen Plexiglasplatten mit einem Abstand, der etwas größer als der Teilchendurchmesser $d = 1.5$ mm ist. Die Systembreite beträgt $l = 3.6$ cm und die Höhe des Mediums wurde zwischen $h = 0.15$ cm und $h = 19$ cm variiert. Diese Werte entsprechen den Füllhöhen von $H = 1$ und $H = 195$ Schichten. Die Bodenplatte, auf der sich das ruhende granulare Medium befindet, wird durch eine Feder mit der dreifachen Gravitationsbeschleunigung nach unten gezogen. Durch sorgfältige Justierung konnte sichergestellt werden, daß die Bodenplatte nicht die Wände berührt. Die resultierenden Erschütterungen hätten die Meßergebnisse verfälscht. Mögliche Einflüsse der Luft sind zu vernachlässigen, wie durch die Beobachtung des Falls einzelner Teilchen oder einer einzelnen Schicht gezeigt werden konnte. Das Material wird durch die Gravitation beschleunigt und durch die Reibung mit den Wänden abgebremst. Man verfolgt die Fallbewegung des klar definierten oberen Materialrands und stellt fest, daß die effektive Fallbeschleunigung von der Wandrauigkeit und der Füllhöhe abhängt. Bei genügender Wandrauigkeit treten nach kurzer Zeit Risse auf, wie in Abb. 40 zu sehen ist. Die Simulation wird unten genauer erläutert. Im Experiment und

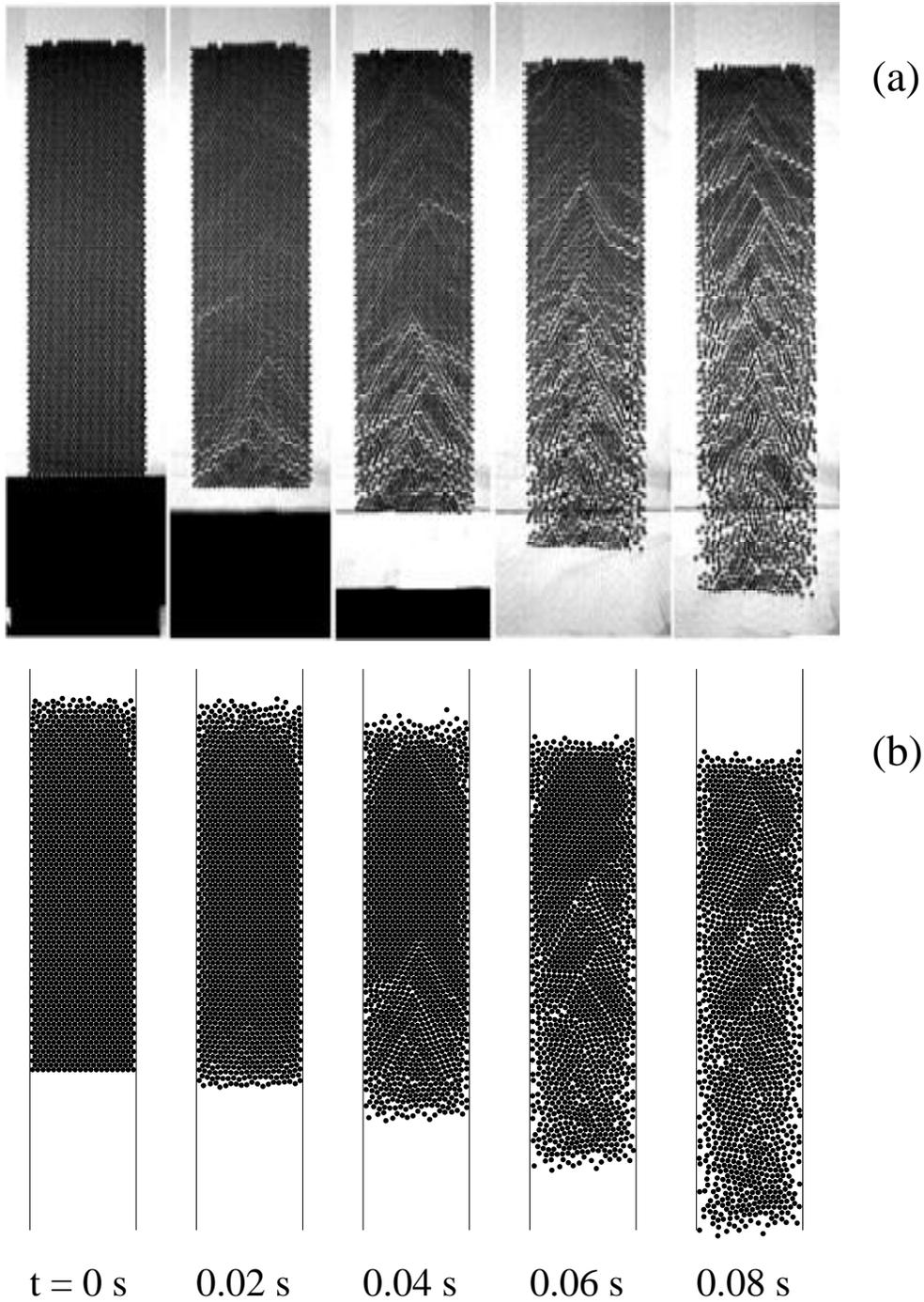


Abbildung 40: Repräsentative Momentaufnahmen im Abstand von 0.02 s, begonnen zur Zeit $t = 0 \text{ s}$ der Entfernung der Bodenplatte. (a) Experiment mit Aluminiumkugeln mit Durchmesser $d = 1.5 \text{ mm}$, Systembreite $L \approx 24$ und Füllhöhe $H = 103$. (b) ED Simulationen mit $L \approx 20.2$, $H = 80$, $\epsilon = 0.99$, $\epsilon_w = 0.98$, $\mu = 0.5$, $\mu_w = 1.0$, $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$ und $\bar{v}(t = 0) \approx 0.05 \text{ m/s}$.

in der Simulation stellt man eine Abnahme der Dichte des Materials fest. Der obere Materialrand fällt langsamer als der untere Rand, und die Verdünnung findet durch Reißbildung statt. Nach Versuchen mit unterschiedlich bearbeiteten Wänden wurde festgestellt, daß Risse nur dann auftreten, wenn die Oberflächenrauigkeit stark genug ist – bei optimal polierten Wänden konnten keine Risse festgestellt werden. Da der Wand-Reibungskoeffizient $\mu_w = 0.6$ kaum von der Wandrauigkeit abhängt, kann man folgern, daß Fluktuationen der Oberflächenrauigkeit für die Reißbildung verantwortlich sind. Zur Messung von μ_w wurden drei der für die Experimente verwendeten Aluminiumkugeln auf eine Scheibe geklebt und dann so auf eine Platte des Wandmaterials gelegt, daß nur die Kugeln die Platte berühren. Neigt man die Platte langsam, so kann man vom Neigungswinkel, bei dem die Scheibe zu rutschen beginnt, den Reibungskoeffizienten berechnen. Risse treten in der Regel zuerst in der unteren Hälfte des Materials auf, ein Effekt der im nächsten Kapitel genauer diskutiert wird. Risse, die selten auch in der oberen Systemhälfte vorkommen, schließen sich in der Regel wieder (siehe Abb. 40, $t = 0.04$ s, rechts oben).

10.2 Theorie der Fallbewegung in einem Rohr

Zur Beschreibung statischer granularer Materialien in Silos wurde von Janssen [Jan95] ein quasi-eindimensionales Modell vorgeschlagen. Die wesentliche Grundannahme ist ein homogener Spannungszustand, der nur von der vertikalen Koordinate abhängt. Im Gegensatz zu einer Flüssigkeit sind Horizontal- und Vertikalspannung nicht gleich groß. Die granulare Struktur führt zu einer geometrieabhängigen Übertragung einer Vertikalkraft in die horizontale Richtung. In Abb. 41(a) ist eine mögliche Konfiguration des quasi-zweidimensionalen Materials dargestellt.

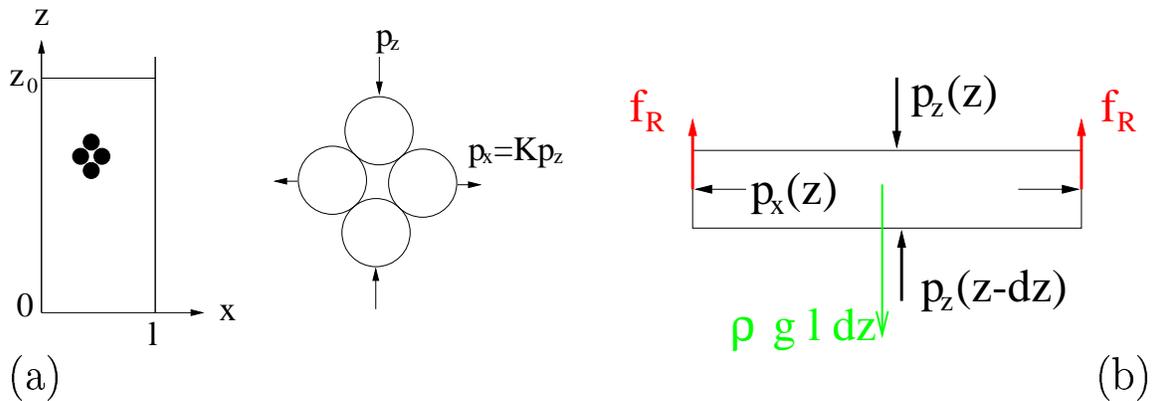


Abbildung 41: (a) Schematische Darstellung des Systems mit Breite l und Höhe z_0 . Das Systemgrößenverhältnis ist $S_0 = z_0/l$. Vier Kugeln sind vergrößert dargestellt um die Beziehung zwischen p_z und p_x zu verdeutlichen. (b) Kräftegleichgewicht an einer Schicht des Materials.

Die Vertikalspannung $p_z = \sigma_{zz}$ ist durch einen Geometriefaktor K mit der Horizontalspannung $p_x = \sigma_{xx} = K p_z$ verknüpft. Fordert man Kräftegleichgewicht an einer Schicht der Höhe dz und der Breite l , wie in Abb. 41(b) angedeutet, so ergibt sich die Gleichung

$$p_z(z - dz)l = p_z(z)l + \rho g l dz - 2f_R \quad (83)$$

mit der Materialdichte ρ , der Vertikalspannung p_z und der Reibungskraft an den Wänden $f_R = \mu_w f_N = \mu_w p_x(h) dz = \mu_w K p_z(z) dz$. Dividiert man Gleichung 83 mit dem Volumen des Streifens, ergibt sich mit $dz \rightarrow 0$ die Differentialgleichung

$$\frac{\partial p_z(z)}{\partial z} = -\rho g + 2K\mu_w p_z(z)/l \quad (84)$$

für die Spannung p_z . Die Lösung der Differentialgleichung ist

$$p_z(z) = \frac{\rho g l}{2K\mu_w} \left[1 - \exp\left(-\frac{z_0 - z}{\varsigma}\right) \right] \quad (85)$$

mit der typischen Abschirmlänge $\varsigma = l/2K\mu_w$. Diese Lösung wurde für die Randbedingung $p_z(z_0) = 0$ gewonnen und ergibt die Spannung $p_z(0) = \rho g \varsigma [1 - \exp(-z_0/\varsigma)]$ am Boden des Behälters. Für sehr tiefe Behälter $z_0 \rightarrow \infty$ ist die maximale Spannung $p_{\max} = \rho g \varsigma$. Die Spannungszunahme ist in Abb. 42 schematisch für eine Flüssigkeit und für ein granulares Material dargestellt.

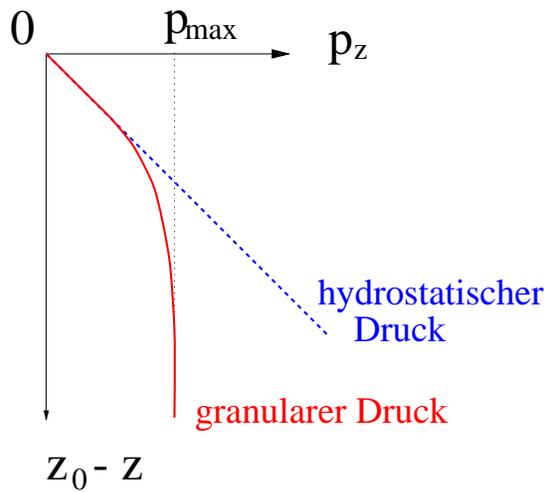


Abbildung 42: Vergleich der Spannungszunahme in einem granularen Material und einer Flüssigkeit.

Gleichung 85 beschreibt den Spannungszustand in einem statischen granularen Material. Beginnt dieses zu fallen, wie im vorigen Abschnitt beschrieben, so kann man annehmen, daß der Spannungszustand wenigstens kurzzeitig erhalten bleibt. Auf jede Schicht des Materials wirkt gleichzeitig die Gravitationskraft $g dm$ und die Reibungskraft $2f_R$ an den Wänden, was zur effektiven Beschleunigung

$$g_{\text{eff}}(z) = g - \frac{2f_R(z)}{dm} = g - \frac{2\mu_w K p_z(z) dz}{\rho l dz} = g \exp\left(-\frac{z_0 - z}{\varsigma}\right) \quad (86)$$

führt. Die maximale Spannung und damit die stärkste Verzögerung durch Wandreibung wirkt am tiefsten Punkt des Materials, d.h. die Beschleunigung des gesamten Materials ist

$$g_0 = g \exp\left(-\frac{z_0}{\varsigma}\right) = g \exp(-S_0 K \mu_w). \quad (87)$$

Da schwächer abgebremstes Material das darunterliegende, stärker verzögerte Material nicht überholen kann, bleibt das gesamte Medium kompakt und fällt mit der Beschleunigung g_0 . Diese Fallbeschleunigung hängt nur vom Größenverhältnis $S_0 = z_0/l$ und dem Produkt aus Geometriefaktor K und Wandreibungskoeffizient μ_w ab.

Um diese Vorhersage zu testen, wurden die Messungen der Trajektorie des oberen Rands $z_0(t)$ an Wurfparabeln angepaßt, die den Beschleunigungsterm g_0 enthalten. Wie in Abb. 43 dargestellt, lassen sich die Messungen für verschiedene S_0 (Quadrate) hervorragend durch Parabeln (Linien) beschreiben.

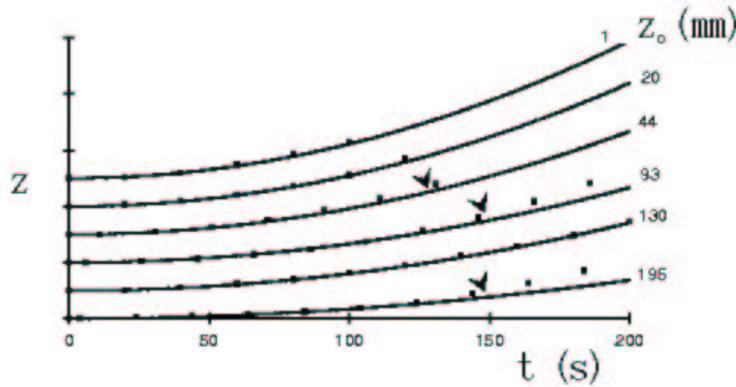


Abbildung 43: Messung der Trajektorie des oberen Materialrands (Quadrate), aufgetragen als Funktion der Zeit. Die Linien stellen Wurfparabeln mit der Fallbeschleunigung g_0 aus Gleichung 87 dar. Der Fitparameter für alle Daten ist $K\mu_w = 0.12$. Die Pfeile markieren das Sichtbarwerden von Rissen. Im Fall von $z_0 = 130$ mm wurden keine Risse festgestellt.

Die Pfeile markieren das Auftreten von Rissen und damit das Ende der Gültigkeit von Gleichung 87. Die Nullpunkte der Messungen sind verschoben, um eine Überschneidung der Linien zu vermeiden. Alle Parabeln enthalten g_0 mit demselben $K\mu_w = 0.12$. Mit dem Wandreibungskoeffizienten $\mu_w = 0.6$ für Plexiglas ergibt sich der Geometriefaktor $K = 0.2$. Benutzt man polierte Seitenwände mit Oberflächenrauigkeit kleiner als 10^{-6} m, wie im Fall $z_0 = 130$ mm, so findet man keine Risse und die theoretische Vorhersage der Trajektorie ist über die gesamte Meßzeit gültig.

Da die Beschleunigung vom Größenverhältnis S_0 abhängt, kann man erwarten, daß Teile eines großen Materialblocks nach dem Auftreten eines Risses schneller fallen. Diese Vermutung wird durch die Experimente bestätigt. Bei gleicher Breite des Containers l fällt ein höheres System langsamer. Damit kann man auch erklären, warum Risse vor allem in der unteren Hälfte des Materials entstehen bzw. stabil sind. In Abb. 44 ist schematisch gezeigt, daß sich ein Riß in der oberen Hälfte wieder schließt, da der obere, kleinere Teil stärker beschleunigt wird als der untere Teil (rechts). Im Gegensatz dazu wird sich ein Riß in der unteren Hälfte immer weiter öffnen, da der untere Teil stärker beschleunigt wird (links).

Betrachtet man wieder Abb. 40, so stellt man fest, daß Risse vor allem unten entstehen und daß in der oberen Hälfte entstandene Risse wieder verschwinden. Die Risse führen, sich von unten nach oben fortsetzend, zur Dichteabnahme im Material. Diese Dichteabnahme ist diskontinuierlich, auf wenige Risse lokalisiert, die durch Fluktuationen der Oberflächenrauigkeit erzeugt werden.

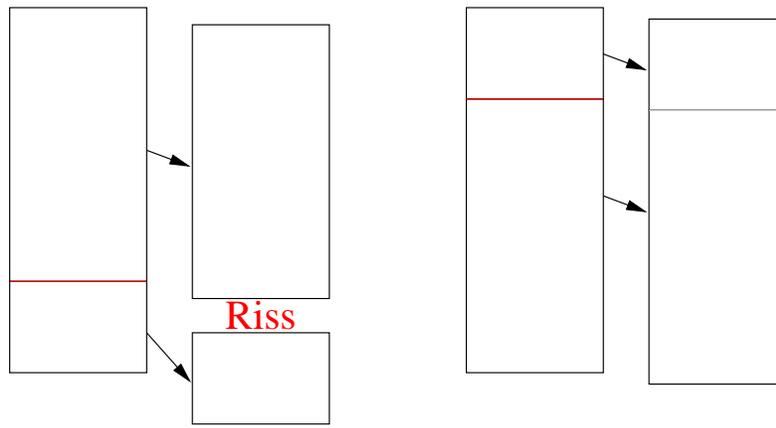


Abbildung 44: Schematische Darstellung der Entwicklung eines Risses in der unteren Hälfte (links) oder in der oberen Hälfte (rechts) des fallenden Materials.

An dieser Stelle sei noch bemerkt, daß ein Ri erst einige Zeit nach seiner Entstehung sichtbar wird. Die in diesem Abschnitt vorgestellte Kontinuumstheorie konnte erklren, warum Risse in der oberen Hlfte instabil sind und wie schnell ein Material mit bestimmter Hhe und Breite fallen wird. Ungeklrt ist die Frage, wie oder warum Risse entstehen. Im folgenden soll mit Hilfe numerischer Simulationen des Systems genauer untersucht werden, welcher Mechanismus zur Ribildung fhrt.

11 Numerische Resultate

Zur numerischen Untersuchung wird das „Harte-Kugel“ Modell (siehe Kapitel 17) mit quasi-statischer Anfangsbedingung, d.h. homogener, hoher Dichte, verwendet. Bei der numerischen Modellierung hat man leichten Zugang zu zahlreichen Informationen, wie z.B. die Spannungsverteilung, der kinetischen Energie, der Kollisionsrate und der Rotationsrichtung und -geschwindigkeit der einzelnen Teilchen.

11.1 Die Anfangsbedingung des Modellsystems

Da das traditionelle ED Verfahren keinen statischen Zustand, d.h. keinen Zustand mit verschwindender kinetischer Energie, zult, mu zuerst die geeignete quasi-statische Anfangsbedingung vorbereitet werden. Dazu werden N Teilchen mit Durchmesser d in den Behlter der Breite $L = l/d = 20.2$ mit der Bodenplatte auf ein Dreiecksgitter der Gitterkonstante $s_0 = 1.01d$ gesetzt. Jedes Teilchen erhlt eine Anfangsgeschwindigkeit \vec{v}_i , wobei beide Komponenten aus dem Intervall $[-v_0, v_0]$ zufllig gewhlt werden. Dieses homogene System wird solange elastisch mit $\epsilon = \epsilon_w = 1$ und $\mu = \mu_w = 0$ simuliert, bis sich ein Gleichgewichtszustand einstellt, d.h. bis sich die Dichte und der Wanddruck im Zeitmittel nicht mehr ndert. Die mittleren Fluktuationen der Geschwindigkeit eines Teilchens $\bar{v} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$ in dem so erreichten Zustand legt zusammen mit der Systembreite l die Anfangsbedingung fest. Zur Zeit $t = 0$ s wird die Bodenplatte entfernt, und Dissipation sowie Reibung werden aktiviert.

Wie schon in Abb. 40 sichtbar, sind fast alle Teilchen bei $t = 0$ s in einem regelmäßigen Dreiecksgitter angeordnet. Lediglich die beiden obersten Reihen sind durch ihre kinetische Energie in einem gasartigen Zustand. Um sicher zu sein, daß Risse nicht nur bei einer bestimmten Anfangsbedingung entstehen, werden verschiedene Anfangsbedingungen mit gleichem \bar{v} und andere mit unterschiedlichen \bar{v} Werten benutzt. Bei einer Versuchsreihe mit mehreren Anfangsbedingungen mit gleichem \bar{v} wurde festgestellt, daß die Form und der genaue Entstehungsort der Risse von der Anfangsbedingung abhängt. Die Dichte bzw. Menge der Risse ist allerdings bei gleichen Materialparametern bis auf statistische Schwankungen konstant. Eine andere Versuchsreihe mit unterschiedlichen \bar{v} Werten zeigt, daß mit zunehmendem \bar{v} die Anzahl der Reihen im gasartigen Zustand zunimmt. Bei sehr kleinem \bar{v} wurde festgestellt, daß sich wegen des nicht-ganzzahligen Werts von L zwei Zonen mit Dreiecksgitterstruktur bilden können, die durch eine Defektlinie getrennt sind. Die für die hier gezeigten Simulationen verwendete Anfangsgeschwindigkeit liegt mit $\bar{v} = 0.05$ m/s zwischen den beiden Extremen.

Da das ED Modell keine potentielle Energie beinhaltet, wird die oben beschriebene quasi-statische Anfangsbedingung verwendet. Die kinetische Energie der Teilchen, die durch \bar{v} quantifiziert wird, ist die einzige Quelle von Fluktuationen im System. Diese Energie kann mit der potentiellen Energie eines granularen Mediums in Ruhe identifiziert werden und führt zu einer Spannung im System und an den Wänden, die im folgenden gemessen werden soll.

11.2 Dichte- und Druckprofile an der Wand

In Abb. 45 sind Dichte- und Druckprofile dargestellt. Die Daten wurden von der Simulation in Abb. 40 mit den Parametern $N = 1562$, $L = 20.2$, $H = 80$, $\epsilon = 0.99$, $\epsilon_w = 0.98$, $\mu = 0.5$, $\mu_w = 1.0$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$ gewonnen. Verschiedene Symbole in Abb. 45(a) stellen das Dichteprofil zu unterschiedlichen Zeiten dar. Der Gravitationsbeschleunigung folgend verschiebt sich der Schwerpunkt des Materials zu kleineren z Werten. Von unten beginnend nimmt die Dichte mit der Zeit ab, und die vertikale Ausdehnung nimmt zu. Die interessante Physik spielt sich in einem Dichtebereich zwischen 80% und 100% der maximalen Packungsdichte ab. Berücksichtigt man, daß Dichteschwankungen experimentell nicht gut bestimmt werden können, muß man feststellen, daß die Dichte keine eindeutigen Rückschlüsse auf die Risse zuläßt.

In Abb. 45(b) ist das Druckprofil an den Seitenwänden zu verschiedenen Zeiten dargestellt. Der Druck auf ein Wandstück der Höhe $\Delta z \approx 4d$ wird durch Integration über die Normalkomponente der Impulsänderung bei allen Stößen innerhalb eines Zeitintervalls $\Delta t = 0.01$ s bestimmt. Zur Zeit $t = 0.02$ s ist der Druck noch immer ähnlich schwach wie am Anfang der Simulation. Zur Zeit $t = 0.04$ s stellt man im unteren Bereich des Materials eine drastische Zunahme des Drucks um beinahe eine Größenordnung fest. Diese Druckzunahme ist mit der Entstehung von Rissen korreliert. Bevor sich ein Riß öffnen kann, muß der über dem Riß liegende Teil des Materials abgebremst werden. Dies kann nur durch Reibung mit den Wänden geschehen, und stärkere Wandreibung erfordert eine größere Normalkraft bzw. einen stärkeren Druck auf die Wand. In Analogie zur Statik wird eine solche kurzzeitige Verstopfung als dynamischer Bogen bezeichnet. Wie gut dieser Begriff tatsächlich die Struktur im Inneren des fallenden Materials beschreibt, wird erst in den folgenden Abschnitten

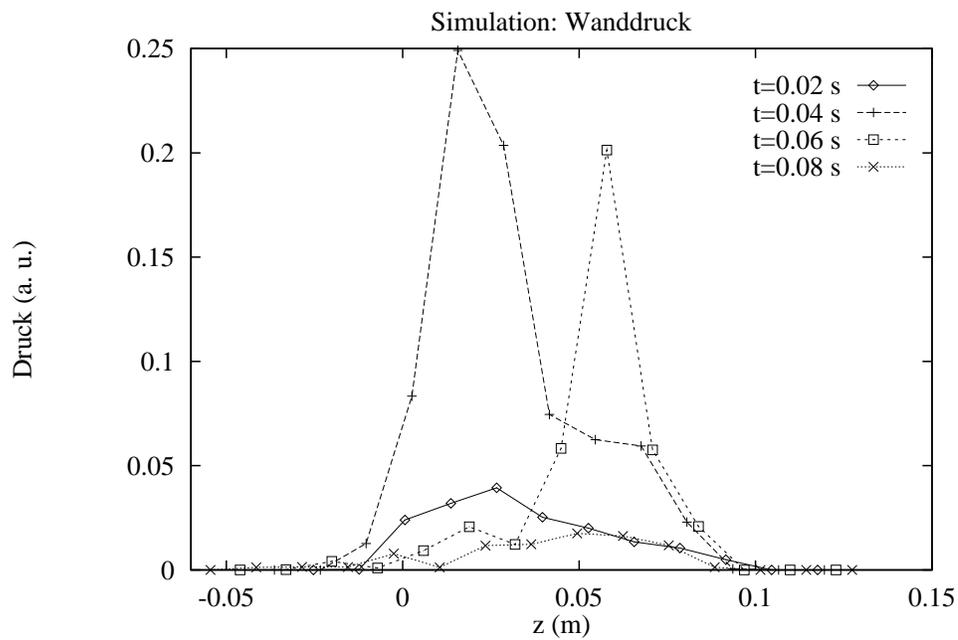
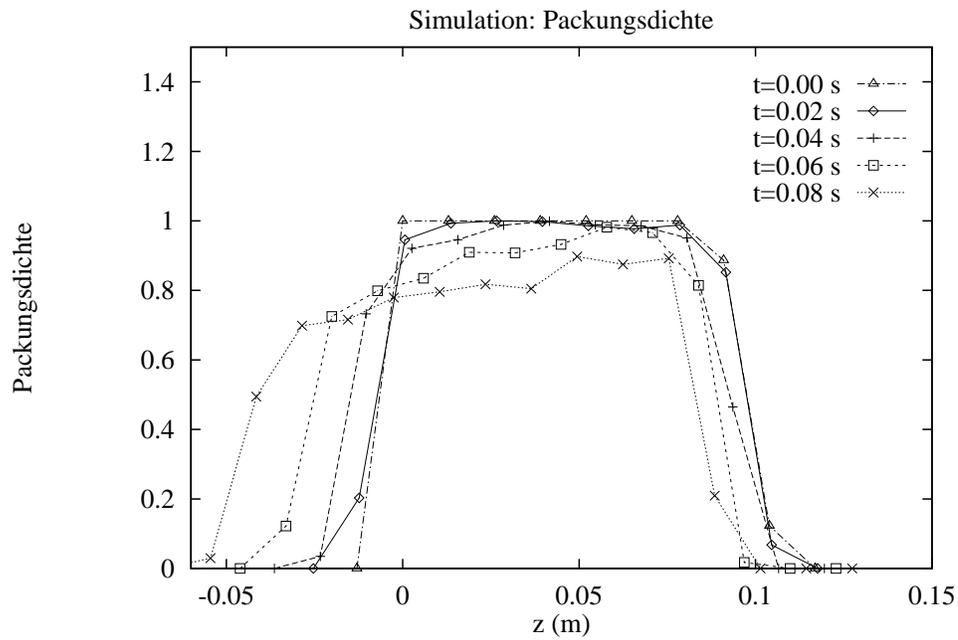


Abbildung 45: (a) Dichteprofil der Simulation aus Abb. 40 zu verschiedenen Zeiten.
 (b) Druckprofil an den Wänden von derselben Simulation.

deutlich werden.

Hat sich ein dynamischer Bogen einmal gebildet, so bremst er das darüberliegende Material ab, das darunterliegende Material fällt weiter und der Ri öffnet sich. Sobald der dynamische Bogen nicht mehr von unten untersttzt wird, lst er sich wieder auf, und ein neuer dynamischer Bogen kann zur Zeit $t = 0.06$ s an anderer Stelle auftauchen. Da die Dichte zur Zeit $t = 0.08$ s bereits zu stark abgenommen hat, stellt man keine dynamischen Bgen mehr fest, und der Druck bleibt niedrig.

11.3 Die Ursachen der Risse

Da man bei der numerischen Modellierung auf alle Informationen ber das System zugreifen kann, sollen hier nicht nur der Druck auf die Wnde, sondern auch die Spannungen im Inneren des Materials genauer untersucht werden. In den meisten Fllen findet man im Experiment und in den Simulationen mehrere Risse, die einander berlappen (siehe Abb. 40). Bei bestimmten Parameterstzen in den Simulationen findet man nur einen deutlich sichtbaren Ri. Ein Beispiel dafr ist die Simulation mit $N = 1562$, $L = 20.2$, $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\mu = \mu_w = 0.5$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$, von der einige Momentaufnahmen in Abb. 46 gezeigt sind. Die Graustufen geben an, wieviele Kollisionen in der letzten Millisekunde ausgefhrt wurden. Die schwarzen Kreise bedeuten $f_c = 0$, die weien Kreise bedeuten $f_c \geq 10^4$ Hz.

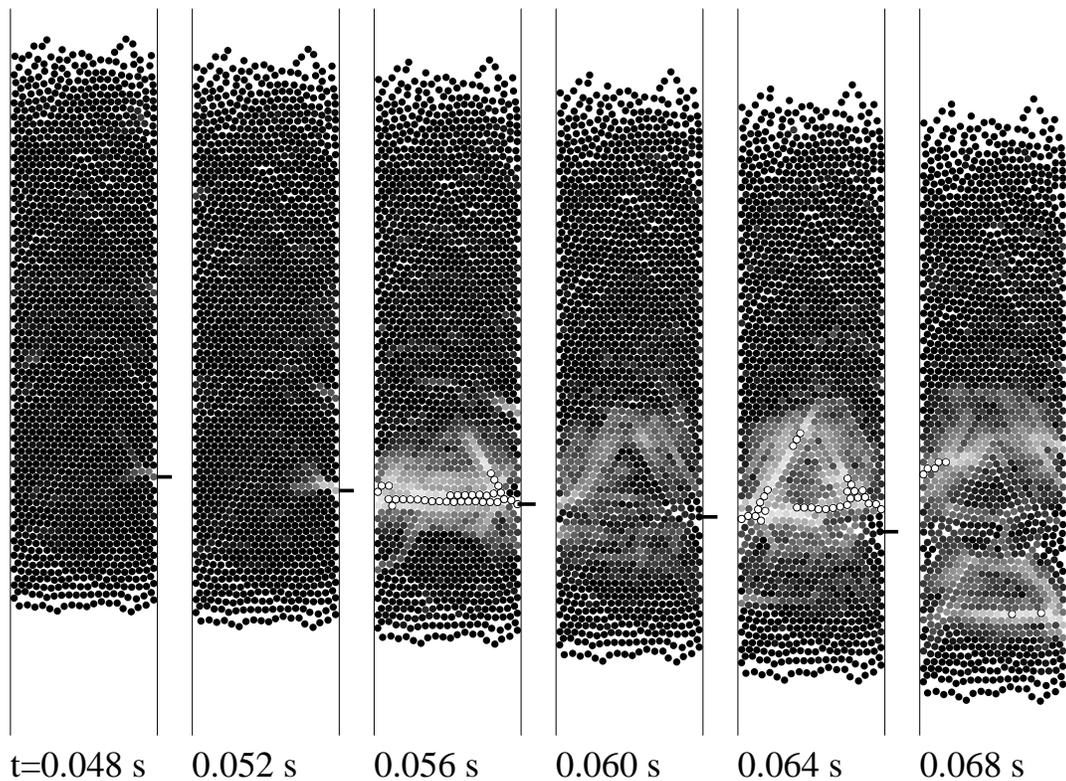


Abbildung 46: Momentaufnahmen einer Simulation mit den Parametern $N = 1562$, $L = 20.2$, $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\mu = \mu_w = 0.5$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$. Die Graustufen geben an, wieviele Kollisionen das jeweilige Teilchen in der letzten Millisekunde ausgefhrt hat. Die schwarzen Kreise bedeuten $f_c = 0$, die weien Kreise bedeuten $f_c \geq 10^4$ Hz.

Schwarze Teilchen hatten keine Kollision ($f_c = 0$), und weiße Teilchen hatten mehr als zehn Kollisionen innerhalb der letzten Millisekunde ($f_c \geq 10^4$ Hz). Der schwarze Balken außerhalb des Systems an der rechten Wand markiert die Position des Teilchens mit der Nummer 371, auf das im folgenden mit dem Kürzel #371 Bezug genommen wird. Zur Zeit $t = 0.048$ s nimmt die Kollisionsfrequenz des Teilchens #371 plötzlich zu. Bereits vier Millisekunden später ist die Kollisionsfrequenz auch bei einigen der Nachbarpartikel angestiegen, und zur Zeit $t = 0.056$ s haben alle Teilchen in derselben Schicht wie #371 eine sehr hohe Kollisionsfrequenz. Eine erhöhte Kollisionsfrequenz führt zu erhöhter Spannung, und erhöhte Spannung an den Wänden verursacht stärkere Reibung. Der in Abb. 46 dargestellte Bereich hoher Spannung kann mit dem im vorigen Abschnitt besprochenen dynamischen Bogen identifiziert werden. Der dynamische Bogen hat zur Zeit $t = 0.056$ s seine größte Stärke erreicht und ist bereits vier Millisekunden später stark zurückgegangen. Für Zeiten $t \geq 0.06$ s kann man bereits in Höhe des schwarzen Balkens den Riß erkennen, der durch den dynamischen Bogen verursacht wurde. Später, zu den Zeiten $t = 0.064$ s und $t = 0.068$ s, haben sich im oberen und im unteren Teil des Materials neue dynamische Bögen gebildet. Um die Entstehung des dynamischen Bogens genauer verfolgen zu können, ist in Abb. 47 die Impulsänderung in einer Millisekunde für die Simulation aus Abb. 46 dargestellt.

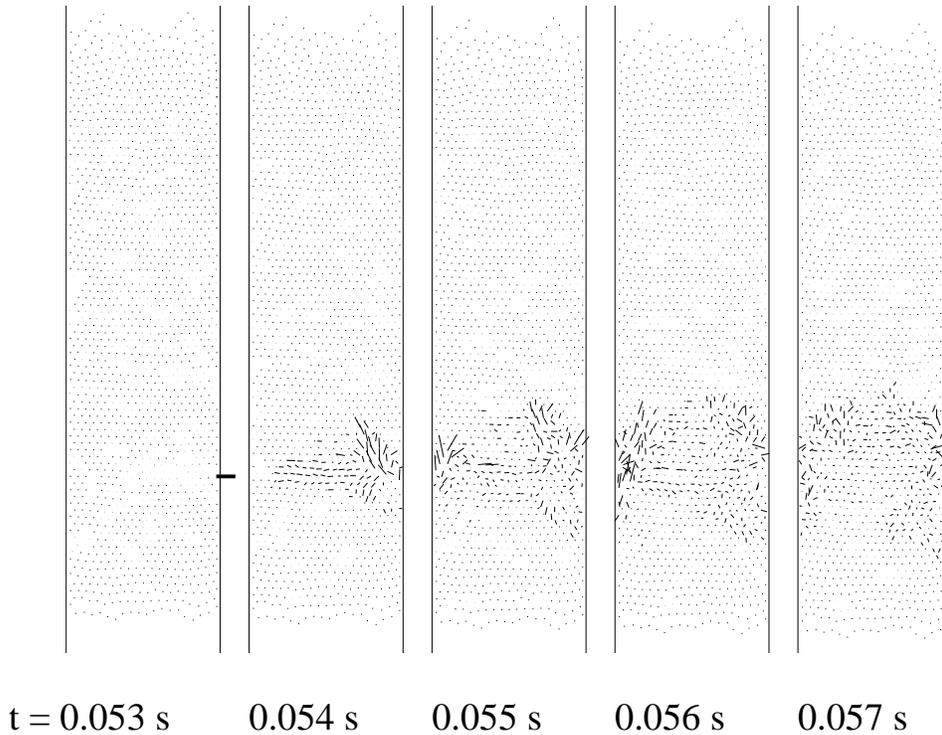


Abbildung 47: Momentaufnahmen einer Simulation mit den Parametern $N = 1562$, $L = 20.2$, $\epsilon = \epsilon_w = 0.9$, $\mu = \mu_w = 0.5$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$. Die Linien geben die Richtung und den Betrag der Impulsänderung innerhalb der letzten Millisekunde bzw. seit dem vorherigen Bild an.

Die Linien geben $\Delta\vec{v}$ mit den Komponenten $\Delta v_x = v_x(t + \Delta t) - v_x(t)$ und $\Delta v_z = v_z(t + \Delta t) - v_z(t) + g\Delta t$ an. Das Zeitintervall ist $\Delta t = 10^{-3}$ s, und der Term $g\Delta t$ verhindert die Darstellung der Geschwindigkeitszunahme durch die Gravitationsbeschleunigung. Es wird deutlich, daß dem Anstieg der Kollisionsfrequenz zur Zeit $t = 0.052$ s erst 2 ms später die Schockwelle folgt. Weiter erkennt man, daß die Welle in etwa einer Millisekunde die Systembreite umfaßt, d.h. die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle ist $c \approx 20d \times 10^3 \text{ s}^{-1} = 30 \text{ m/s}$. Die Richtung der Welle ist sowohl horizontal, als auch schräg nach oben, entlang der Orientierung des geordneten Dreiecksgitters.

Der starke Riß wurde durch einen dynamischen Bogen verursacht, wie bereits durch die Zunahme des Wanddrucks vermutet werden konnte. Der dynamische Bogen ging interessanterweise von dem Teilchen #371 aus, das zufällig mehr Kollisionen mit der Wand ausführte als seine Nachbarn. Zur genaueren Untersuchung der Entstehung des dynamischen Bogens wird im folgenden Abschnitt die Trajektorie des Teilchens #371 genauer verfolgt.

11.3.1 Fluktuationsinduziertes „Stick-Slip“-Verhalten

Um besser zu verstehen, wie es zum dynamischen Bogen kommt, kann man die Fall- und die Rotationsgeschwindigkeit von Teilchen #371 verfolgen, von dem in Abb. 46 der dynamische Bogen ausgeht. In Abb. 48 sind die Fall- und Rotationsgeschwindigkeit des Teilchens mit jener Geschwindigkeit verglichen, die ein frei fallendes Teilchen haben würde.

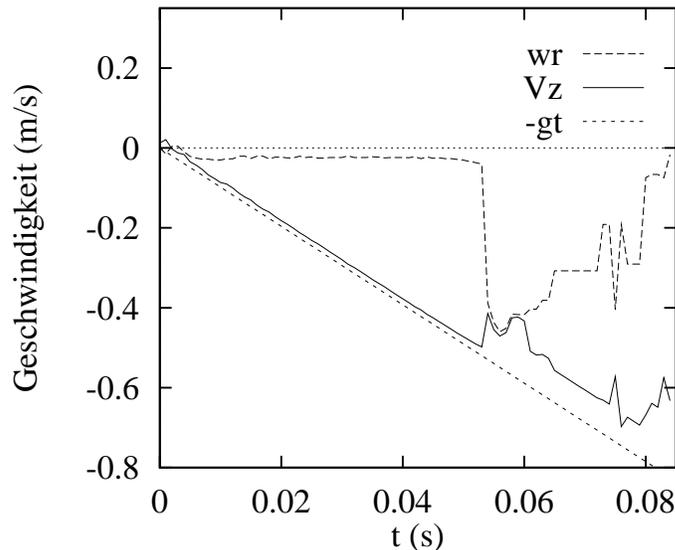


Abbildung 48: Die Rotationsgeschwindigkeit ωr , die Fallgeschwindigkeit v_z und die Fallgeschwindigkeit eines frei fallenden Teilchens im Gravitationsfeld $-gt$ als Funktion der Zeit t . Die Daten stammen aus der Simulation in Abb. 46.

Man erkennt, daß das Teilchen anfangs beinahe ungestört fällt. Zur Zeit $t \approx 0.051$ s nimmt die Rotationsgeschwindigkeit stark zu, und die Fallgeschwindigkeit wird leicht reduziert. Beide Geschwindigkeiten, Fall- und Rotationsgeschwindigkeit, sind gleich, d.h. die Teilchenoberfläche haftet an der Wand, und das Teilchen rollt

entlang der Wand. Die Fallgeschwindigkeit und die durch Rotation bedingte Oberflächengeschwindigkeit an der Wand sind entgegengesetzt und gleich groß. Mit anderen Worten befindet sich die Teilchenoberfläche an der Wand relativ zur Wand in Ruhe – die Teilchenoberfläche haftet wenigstens kurzzeitig an der Wand.

Wie in Kapitel 3 gezeigt, hat eine Änderung des Drehimpulses auch eine Änderung der Geschwindigkeit zur Folge. Kollidiert ein Teilchen zufällig häufiger mit der Wand als andere Teilchen, so nimmt wegen der Relativgeschwindigkeit seiner Oberfläche zur Wand seine Winkelgeschwindigkeit zu und damit seine Fallgeschwindigkeit ab. Deshalb wird es mehr Kollisionen mit den von oben kommenden Nachbarn ausführen, was wiederum zu mehr Kollisionen mit der Wand führt. Dies kann zu einer weiteren Zunahme der Winkelgeschwindigkeit, Abnahme der Fallgeschwindigkeit und Zunahme der Kollisionsfrequenz führen. Hat dieser Prozeß einmal begonnen, so kann er sich selbst verstärken und schließlich dazu führen, daß sich ein dynamischer Bogen bildet.

Sobald sich der Bogen wieder aufgelöst hat, wird die Teilchenoberfläche nicht mehr an der Wand haften, sondern wieder entlanggleiten. Es findet also ein intermittenter Übergang von haftenden zu gleitenden Kontakten statt, der englisch als „Stick-Slip“-Zustand bezeichnet wird.

11.3.2 Frustration und Spinordnung

Während der Entstehung des Bogens führen immer mehr Teilchen viele Kollisionen aus, d.h. die lokalen Spannungen nehmen zu. Damit nimmt auch die Coulombsche Reibung zu, und die Oberflächen zweier Teilchen können relativ zueinander in Ruhe kommen. Ausgehend von Teilchen #371 stellt man fest, daß die Oberflächen seiner Nachbarn eine Relativgeschwindigkeit haben, die deutlich kleiner ist als die Rotationsgeschwindigkeit. Dies ist möglich, weil sich benachbarte Teilchen, wie in Abb. 49(a) schematisch dargestellt, in entgegengesetzte Richtung drehen. Durch diese Anordnung wird der Energieverlust durch Coulombsche Reibung minimiert, da die Teilchen aufeinander abrollen.

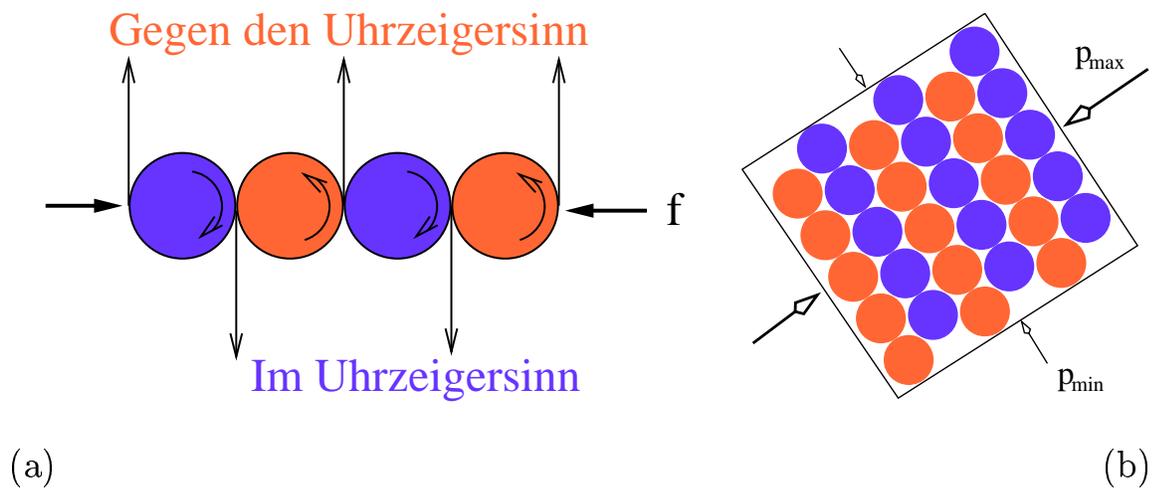


Abbildung 49: (a) Schematische Darstellung der Drehrichtung einiger Teilchen, die entlang einer Linie angeordnet sind und die durch eine Kraft f zusammengedrückt werden. (b) Schematische Darstellung eines rechteckigen Bereichs mit zwei verschiedenen Drücken p_{\max} und p_{\min} . Teilchen gleicher Farbe drehen sich in dieselbe Richtung.

In einem regelmäßigen Dreiecksgitter angeordnet, würde man allerdings Frustration erwarten, d.h. der Rotationsfreiheitsgrad sollte eingefroren sein. Sind die Spannungen p_{\max} und p_{\min} unterschiedlich, so können die Teilchen nur entlang der stärkeren Spannung frustriert sein und abrollen, wie in Abb. 49(b) schematisch dargestellt.

Beobachtet man den Drehsinn der Teilchen in einer Simulation mit $L \approx 20.2$, $H = 80$, $\epsilon = 0.96$, $\epsilon_w = 0.92$, $\mu = 0.5$, $\mu_w = 1.0$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$, so findet man zur Zeit $t = 0.04$ s das in Abb. 50 abgebildete Muster.

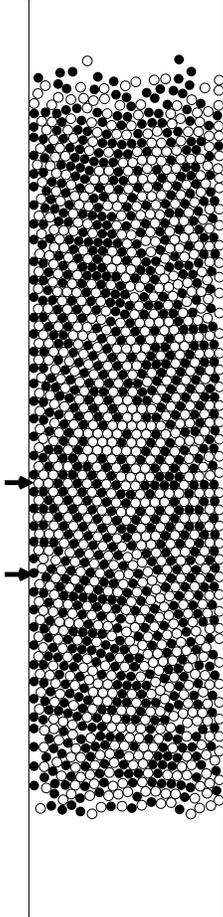


Abbildung 50: Darstellung des Drehsinns der Teilchen zur Zeit $t = 0.04$ s. Die schwarzen Teilchen drehen sich im Uhrzeigersinn, die weißen Teilchen rotieren gegenläufig. Die beiden schwarzen Pfeile markieren den Bereich mit deutlicher Spinordnung.

In der linken Hälfte der Röhre findet man Bereiche mit einer Drehsinnorientierung wie in Abb. 49(b) dargestellt. In der anderen Hälfte kann man kleinere Bereiche mit umgekehrter Orientierung finden. Direkt an den Wänden drehen sich die Teilchen so, daß sie an der Wand abrollen.

11.3.3 Wahrscheinlichkeitsverteilung der Kollisionsrate

In Abb. 51 ist die Wahrscheinlichkeit $P(N_c)$ dargestellt, im gesamten System ein Teilchen zu finden, das im letzten Zeitintervall $\Delta t = 5$ ms genau N_c Stöße ausgeführt hat. In Abb. 51(a) ist $P(N_c)$ aus der Simulation in Abb. 46 zu den Zeiten $t = 0.02$ s, 0.03 s, 0.04 s und 0.05 s aufgetragen. Die Daten lassen sich über drei Größenordnungen

gut mit der normierten Exponentialfunktion

$$P_e(N_c, A) = \frac{1}{A} \exp\left(-\frac{N_c}{A}\right) \quad (88)$$

und der typischen Kollisionsrate $A = 1 \text{ s}^{-1}$ beschreiben. Zu diesen Zeiten sind noch keine Risse aufgetreten und das System ist, bis auf den oberen und unteren Rand, homogen. Sobald Schockwellen, dynamische Bögen und Risse vorkommen, findet man eine andere funktionale Abhängigkeit für $P(N_c)$. In Abb. 51(b) ist $P(N_c)$ zu den Zeiten $t = 0.055 \text{ s}$, 0.065 s , 0.075 s und 0.085 s dargestellt. Die Wahrscheinlichkeit für große Kollisionsraten nimmt dramatisch zu und die Daten für $t = 0.075 \text{ s}$ und $t = 0.085 \text{ s}$ lassen sich gut durch ein Potenzgesetz der Form

$$P_p(N_c, B) = \frac{B}{(B + N_c)^2}, \quad (89)$$

mit der typischen Kollisionsrate $B = 14 \text{ s}^{-1}$ beschreiben. Die beiden Verteilungsfunktionen in den Gleichungen 88 und 89 sind normiert für beliebige Werte A und B . Verfolgt man die Simulation weiter, findet man später wieder eine exponentiell abfallende Wahrscheinlichkeit für große Kollisionsraten, sobald das System genug ausgedünnt ist und dynamische Brücken nicht mehr stabil sind.

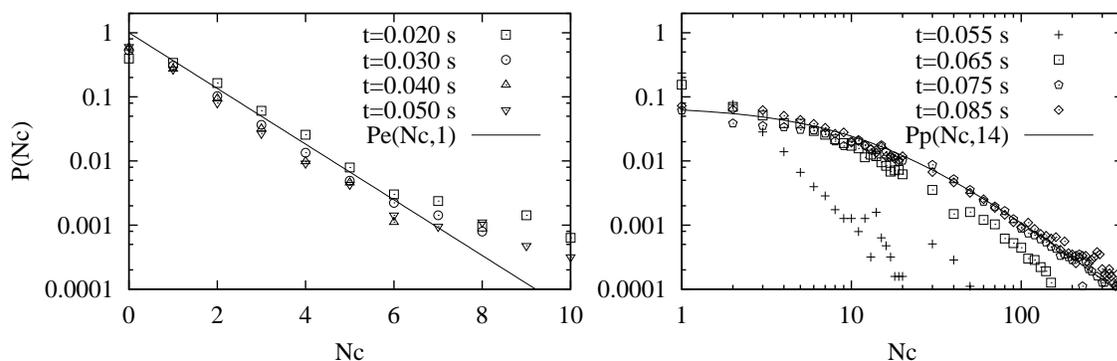


Abbildung 51: (a) Halblogarithmische Auftragung der Wahrscheinlichkeit $P_e(N_c, A)$ als Funktion der Anzahl der Stöße für die Simulation aus Abb. 46 zu verschiedenen Zeiten ohne Risse und dynamische Bögen. (b) Doppeltlogarithmische Auftragung von $P_p(N_c, B)$ zu verschiedenen Zeiten bei Existenz von Rissen und dynamischen Bögen.

11.4 Parameterstudien

Zum Verständnis der Abhängigkeit des Systemverhaltens von den Parametern Dissipation und Reibung werden in diesem Abschnitt Parameterstudien durchgeführt. Dazu ist es nötig, die optisch sichtbaren Risse in einer Weise zu quantifizieren, die eine numerische Auswertung zulässt. In Abb. 52 ist für eine repräsentative Simulation dargestellt, wie man aus allen Teilchen jene herausfindet, die sich in der Nähe eines Risses befinden [LDM⁺96]. Zählt man diese Teilchen und trägt die so gewonnene Zahl nc in Abb. 53 als Funktion der Zeit auf, so kann man für verschiedene Parameter verfolgen, wie die Anzahl der Risse zu- und wieder abnimmt.

In Abb. 52(a) ist eine Momentaufnahme der Simulation dargestellt. Man erkennt bereits zahlreiche Risse und kann außerdem sehen, daß Teilchen, die sich anfangs auf derselben Höhe befanden (graue Kreise), unterschiedlich schnell im Rohr fallen. Teilchen in der Nähe der Wände werden stärker abgebremst als Teilchen in der Mitte. Das genaue Verfahren zur Zählung der Risse ist an anderer Stelle beschrieben [LDM⁺96], hier sei nur kurz das Prinzip erklärt. Zuerst erzeugt man ein „Kontakt“-Netzwerk, siehe Abb. 52(b), indem man alle Teilchenzentren, deren Entfernung kleiner als $(1+c)d$ mit $c = 1.06$ ist, durch eine Linie verbindet. Der Wert $c = 1.06$ ist willkürlich, das qualitative Verhalten der Resultate ändert sich jedoch nicht, solange c im Bereich $1.03 \leq c \leq 1.15$ liegt. Nun berechnet man für alle Teilchen die Anzahl der Nachbarn und vernachlässigt die Teilchen mit drei oder weniger Nachbarn, siehe Abb. 52(c). Diese Teilchen sind nicht in der Nähe eines Risses, da ein Riß wenigstens auf einer Seite an einen dichtgepackten Bereich angrenzt. Von den restlichen Teilchen sind nur solche in der Nähe eines Risses, die eine ähnliche Anzahl Nachbarn, aber weniger als sechs Nachbarn haben. Diese Teilchen sind in Abb. 52(d) als schwarze Kreise dargestellt.

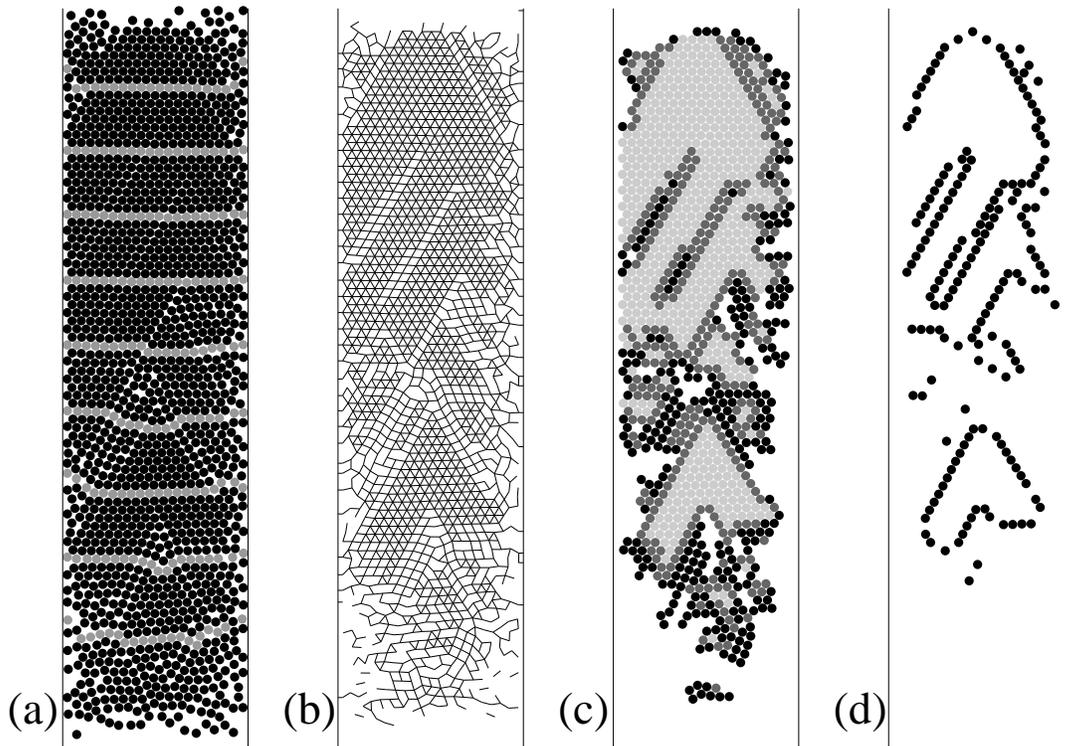


Abbildung 52: Momentaufnahmen einer Simulation mit $N = 1562$, $L/d = 20.2$, $\epsilon = 0.99$, $\epsilon_w = 0.98$, $\mu = 0.5$, $\mu_w = 1.0$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$ zur Zeit $t = 0.05$ s. (a) Die grau markierten Teilchen waren anfangs auf derselben Höhe. (b) Das Kontaktnetzwerk von der Simulation in (a). Jede Linie verbindet zwei Teilchen, deren Zentren näher als $1.06d$ beieinander liegen. (c) Teilchen mit vier oder mehr Nachbarn sind als graue, dunkelgraue und schwarze Kreise gezeichnet. (d) Nur die Teilchen in der Nähe von Rissen sind abgebildet.

In Abb. 53 sind die durch das oben beschriebene Schema erhaltenen Werte der Rißanzahl nc für verschiedene Kombinationen der Materialparameter dargestellt. In allen Simulationen ist der anfängliche Wert $nc \approx 40$, da der anfangs dichte Block des Materials eine obere und untere Kante hat, die als Riß identifiziert wird. Für die Daten in Abb. 53(a) wurde μ verändert und man erkennt, daß sich Risse nur dann bilden, wenn $\mu > \mu_w$ ist, was in diesem Fall bedeutet $\mu \geq 0.75$. Die in Abb. 53(b) dargestellte Veränderung der Tangential-Restitutionskoeffizienten führt, ebenso wie die in Abb. 53(c) dargestellte Veränderung der Restitutionskoeffizienten, zu keiner deutlichen Verhaltensänderung des fallenden granularen Mediums. Man kann lediglich ahnen, daß Risse umso früher auftreten, je größer β_0 ist, und daß umso mehr Risse auftreten, je kleiner ϵ ist. Die Veränderung der Teilchen-Teilchen-Reibung führt zu schneller, kurzer Rißentstehung, wenn μ klein ist. Bei stärkerer Teilchen-Teilchen-Reibung bleiben Risse über längere Zeiten erhalten. Beobachtet man die Simulation mit $\mu = 0$ genauer, so stellt man fest, daß in diesem Fall nur sehr kurze Risse auftreten, während für $\mu > 0$ lange Risse zu finden sind. Die kurzen Risse kommen von einer eher zufälligen Verdünnung des Systems und haben relativ wenig mit einem dissipativen granularen Medium zu tun, d.h. sie kommen auch im elastischen System harter Kugeln vor.

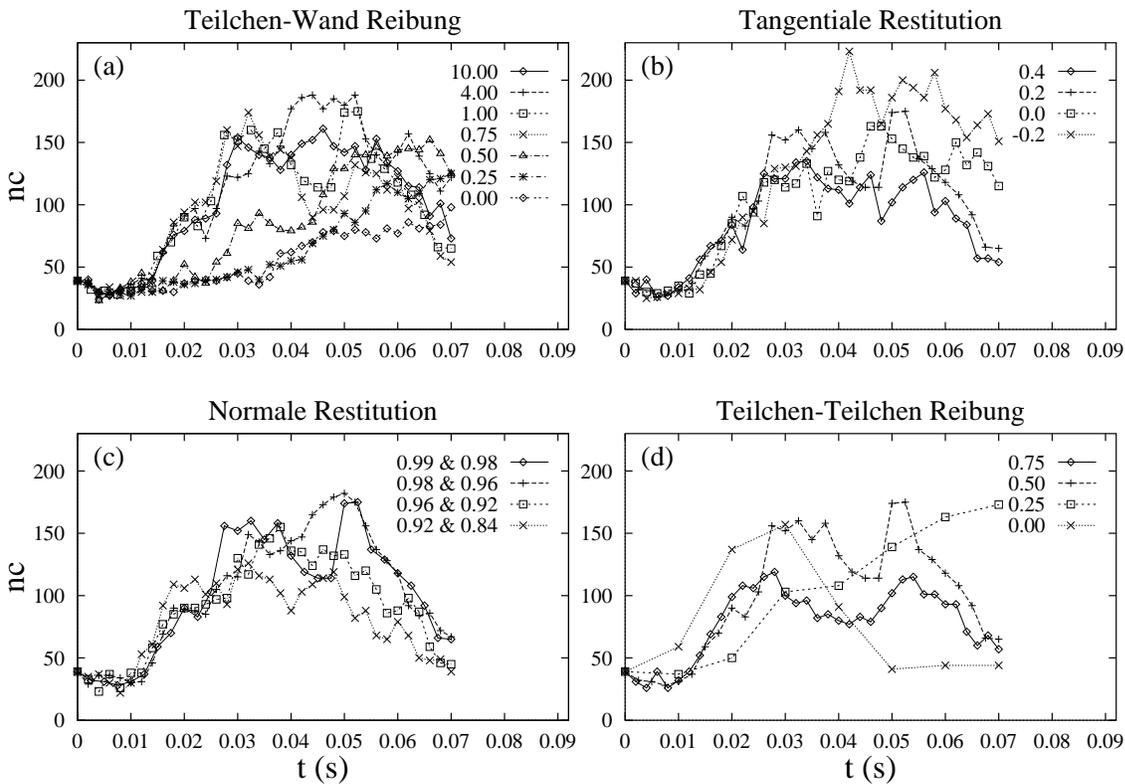


Abbildung 53: Darstellung der typischen Rißanzahl nc für verschiedene Simulationen mit $N = 1562$, $L/d = 20.2$, $\epsilon = 0.99$, $\epsilon_w = 0.98$, $\mu = 0.5$, $\mu_w = 1.0$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.2$ als Funktion der Zeit. Die variierten Werte (a) der Wandreibung μ_w , (b) der Tangential-Restitutionskoeffizienten β_0 und β_{0w} , (c) der Restitutionskoeffizienten ϵ und ϵ_w sowie (d) der Teilchen-Teilchen-Reibung μ sind jeweils im Bild angegeben.

Obwohl es nicht gelang, die kurzen zufälligen Risse von den langen Rissen zu trennen, konnten quantitative Aussagen zur Ribildung gemacht werden. Die hier vorgestellte Methode zur quantitativen Erfassung von Rissen in granularen Medien fhrt zum Ergebnis, da fr die Ribildung vor allem die Wandreibung wichtig ist. Risse entstehen und sind stabil, falls der Wandreibungskoeffizient μ_w grer ist als der Teilchen-Teilchen-Reibungskoeffizient μ .

12 Zusammenfassung

Der Beginn des Flieens granularer Medien in Rohren wurde anhand eines zwei-dimensionalen Modellsystems experimentell, numerisch und theoretisch untersucht. Eine quasi-statische Kontinuumstheorie liefert die typische Abschirmlnge, nach der das Material nichts mehr vom darber liegenden Material sprt. Diese Lnge wchst mit zunehmender Rohrbreite und nimmt mit zunehmender Reibung ab. Auf dieser Lngenskala bilden sich Risse und dynamische Bgen, die zu einer Verdnnung des Materials fhren.

Mit den numerischen Simulationen wurde herausgefunden, da ein dynamischer Bogen nur von einem Teilchen ausgeht. Durch eine zufllige Zunahme der Kollisionsfrequenz dieses einen Teilchens nimmt die lokale Spannung solange zu, bis die Teilchenoberflche an der Wand stecken bleibt. Das Teilchen rollt nun entlang der Wand und lst durch seine Verzgerung eine Schockwelle aus, die sich schnell ber das gesamte System erstreckt und fr kurze Zeit einen dynamischen Bogen bildet. Dieser dynamische Bogen sttzt whrend seiner Existenz das darber fallende Material ab und erlaubt so, da sich darunter ein Ri ffnet, unter dem das Material ungestrt weiter fallen kann.

Oberhalb des dynamischen Bogens nehmen die Dichte und die Spannung zu. Die Spannungen sind in der Regel anisotrop, und man findet eine Drehsinnordnung der Teilchen. Entlang der greren Hauptachse des Spannungstensors herrscht Frustration der Oberflchenbewegung, die Teilchen rollen aufeinander. Entlang der kleineren Hauptachse rutschen die Teilchenoberflchen. Durch diese Selbstorganisation wird der Energieverlust minimiert. Die Rollreibung ist gegenber der Gleitreibung klein, und die Reibungskraft ist proportional zur Normalkraft. Da die Teilchen mit groen Normalkrften rollen und die Teilchen mit kleinen Normalkrften rutschen, wird die Dissipation minimiert. Im Falle totaler Frustration (das Bild von verhakten Zahnrdern) wrde alle Drehbewegung zum Stillstand kommen. Die Drehsinnordnung ist nur in dem hier vorgestellten monodispersen granularen Medium sichtbar [LDCR96a]. In einem Medium mit Teilchen verschiedener Gre gilt aber weiterhin das Prinzip minimaler Dissipation. Kontakte mit starken Normalkrften werden bevorzugt rollen und Kontakte mit schwachen Normalkrften rutschen, d.h. dissipieren Energie.

Eine offene Frage ist, wie man von der im Modell enthaltenen, lokalen Reibung zu einer globalen Reibung gelangen kann. Weiterhin ist nicht klar, ob die dynamischen Bgen auch in dreidimensionalen Systemen existieren und wie sich dort die Oberflchen zueinander bewegen.

Teil V

Musterbildung

In diesem Teil wird die Strukturbildung in granularen Medien untersucht. Bei periodischer Anregung im Gravitationsfeld bilden sich Oberflächenwellen, ähnlich wie in Flüssigkeiten. In Systemen mit periodischen Rändern, ohne Wände und externe Störungen, findet man dissipationsinduzierte Dichtestabilitäten. In beiden Fällen entstehen geometrische Muster, deren Entstehung und Entwicklung hier beschrieben werden soll.

13 Periodisch angeregte Systeme

Neben kollektiven Effekten wie Konvektion (Abschnitt 8.1) oder Entmischung (Abschnitt 8.2) beobachtet man in großen vibrierten Behältern auch Musterbildung im granularen Material [FDL89, PB93, MUS94, CVRD96, GSMF95, WBH96, LCRD96, AAMW96, UMS96, Shi97, Was97, WHB97, SBU⁺97], und es zeigen sich ähnliche Strukturen wie in normalen Flüssigkeiten bei der Faraday-Instabilität [Far31, CH93]. Sand oder Glaskugeln werden im dreidimensionalen Experiment [MUS94] seitlich beleuchtet und von oben betrachtet, um die Wellenberge mit gutem Kontrast von den Wellentälern im Schatten unterscheiden zu können. Es stellen sich Streifen-, Quadrat- und Sechseckmuster ein, die sich im einfachsten Fall nach der zweifachen Anregungsperiode wiederholen. Neueste Experimente mit Bronzekugeln zeigen in einem kleinen Parameterbereich Hysterese und lokalisierte Anregungen [UMS96]. Hysterese bedeutet, daß die Wellen bei Verringerung der Anregungsenergie noch stabil sind, während sie bei stetiger Erhöhung bei genau derselben Energie noch nicht ausgebildet sind. In diesem Bereich findet man die sogenannten „Oszillonen“, die sich in kleinen Gruppen anordnen können und attraktiv oder repulsiv miteinander wechselwirken.

Auch Experimente mit Aluminiumkugeln in zweidimensionalen Modellsystemen führen bei ähnlicher Beschleunigung Γ , aber bei niedrigeren Frequenzen, zur Musterbildung mit einer typischen Wellenlänge [CVRD96]. Der wesentliche Unterschied zu Oberflächenwellen in Flüssigkeiten ist die Tatsache, daß die Wellenlänge in granularen Medien bei niedrigen Frequenzen einen Minimalwert von etwa 10 Teilchendurchmes-

sern nicht unterschreitet.

Zur genaueren Untersuchung des granularen Systems werden TCED Simulationen (siehe Kapitel 17) mit den 2D-Experimenten [CVRD96] verglichen [LCRD96]. Benutzt man Materialparameter ähnlich zu den experimentell gemessenen, stellt man fest, daß sich die Instabilität bereits nach wenigen Anregungsperioden ausbildet. Neben dem Vergleich der Dispersionsrelation mit den experimentellen Daten erhofft man sich von den Simulationen einen tieferen Einblick in die mikroskopischen Zustände eines jeden Teilchens und den Zugang zu den Dichte- und Geschwindigkeitskorrelationsfunktionen.

13.1 Experimente

Die Experimente wurden in einer quasi-zweidimensionalen Geometrie durchgeführt [CVRD96]. Momentaufnahmen des Systemzustands, wie in Abb. 54, wurden mit einer CCD-Kamera aufgezeichnet, und Wellenlänge sowie Musteramplitude können von den Bildern gewonnen werden.

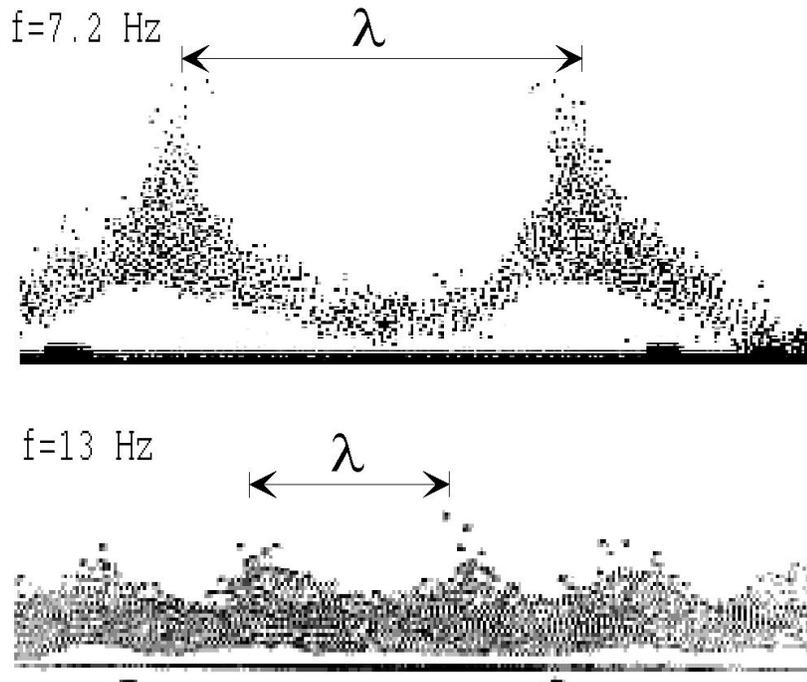


Abbildung 54: Momentaufnahmen von Experimenten mit Aluminiumkugeln in einer quasi-zweidimensionalen Geometrie bei den Anregungsfrequenzen $f = 7.2$ Hz und $f = 13$ Hz.

Der Schüttler arbeitet in einem Frequenzbereich zwischen $f = 6$ Hz und $f = 25$ Hz, wobei Beschleunigungen $\Gamma = a\omega^2/g$ zwischen $\Gamma = 1$ und $\Gamma = 7$ erreicht werden konnten. Es wurden Aluminiumkugeln mit einem Durchmesser $d_0 = 1.5$ mm verwendet, die bei einer Relativgeschwindigkeit von $u \approx 1$ m/s einen Restitutionskoeffizienten $\epsilon \approx 0.6$ besitzen. Das Material hatte im Ruhezustand eine Füllhöhe H ,

in Schichten gemessen. Im Beschleunigungsbereich $1 < \Gamma < 2.5$ bleibt das granulare Medium kompakt und keine Muster sind zu erkennen. Oberhalb $\Gamma \approx 2.5$ und bei Füllhöhen $H \geq 5$ werden Oberflächenwellen festgestellt. Aus den Experimenten wurde die Beziehung für die Wellenlänge der Muster

$$\lambda = \sqrt{H} \left(\lambda^*(d_0) + \frac{g^*}{f^2} \right) \quad (90)$$

abgeleitet, die alle Meßergebnisse mit $3 \leq H \leq 9$ und $2.5 \leq \Gamma \leq 4.5$ zusammenfassen konnte. Die dazu verwendeten Konstanten sind $\lambda^*(d_0) = 7.2$ mm und $g^* = 1.05$ m/s². Die Wahl der Funktion \sqrt{H} ist bei der kleinen Variation in H als willkürlich anzusehen.

13.2 Numerische Resultate

Es wird das gleiche Modellsystem verwendet, wie in Abschnitt 7.1 beschrieben. Die Teilchendurchmesser d_i werden aus dem Intervall $[d_0(1 - w_0), d_0(1 + w_0)]$ mit $d_0 = 1.5$ mm und $w_0 = 0.1$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit gewählt. Die Breite der Verteilung $w_0 = 0.1$ wird benutzt, um die Bildung eines regelmäßigen Dreiecksgitters zu vermeiden, das mit monodispersen Teilchen ($w_0 = 0$) entstehen würde. Die Füllhöhe in Schichten ist im Ruhezustand $H = Nd_0/l = N/L$, wobei N die Teilchenzahl und $L = l/d_0$ die dimensionslose Systembreite ist.

Die hier verwendete Ereignis-Dynamik ist in Kapitel 17 genauer beschrieben. Wichtig ist hier, daß bei der ED Methode die Kontaktdauer verschwindet ($t_c = 0$) und deshalb keine elastische Welle im Material existiert. Die Tatsache, daß Oberflächenwellen trotzdem auftreten, deutet darauf hin, daß sie nicht auf die Materialelastizität zurückzuführen sind. Durch Simulationen mit verschiedenen Reibungskoeffizienten, insbesondere $\mu = 0$, wird gezeigt, daß der Rotationsfreiheitsgrad bei der Entstehung der Wellen nicht mitwirkt. Um sich nahe an die experimentellen Vorgaben zu halten, wird im folgenden $\mu > 0$ verwendet. Weiterhin wird gezeigt, daß die Musterbildung nicht wie Konvektion von den Wänden erzeugt wird, sondern auch ohne Wände bzw. bei Wänden mit vollkommen unterschiedlichen Eigenschaften auftritt.

Im Gegensatz zur klassischen ED Methode wird ein realistischer, geschwindigkeitsabhängiger Restitutionskoeffizient $\varepsilon(u)$ verwendet. Die hier verwendete Abhängigkeit stimmt qualitativ mit Experimenten [Gol64] und theoretischen Vorhersagen [KK87, LCB⁺94a, BSHP96] zu visko-elastischen Materialien überein. Der Restitutionskoeffizient wird mit zunehmender Geschwindigkeit kleiner und ist bei einer typischen Geschwindigkeit $u_0 = 1$ m/s ist $\varepsilon = 1 - \epsilon_0$. Mit den Potenzen $\alpha = \zeta_0 = 1/2$, die in Abschnitt 3.5.2 eingeführt wurden, gilt die Beziehung

$$\varepsilon(u) = 1 - \epsilon_0(u/u_0)^\gamma, \quad (91)$$

mit $\gamma = +1/5$ bei schwacher Dissipation [LCB⁺94a]. Um möglichst genau Aluminiumkugeln zu simulieren, wird außerdem $\epsilon_0 = 0.4$ verwendet, was mit $u_0 = 1$ m/s zu $\varepsilon = 0.6$ führt. Einige Simulationen mit $\gamma = 0$ zeigen, daß der Musterbildungsprozess nicht von der Wahl der funktionalen Form des Restitutionskoeffizienten beeinflusst wird.

Um bei großen Füllhöhen simulieren zu können, muß der „inelastische Kollaps“ verhindert werden. Dazu wird eine kritische Kollisionsrate eingeführt, oberhalb der

keine Dissipation mehr auftritt. Dieses TC Verfahren wird in Kapitel 5 genauer erläutert. Mit verschiedenen Werten von $t_c = 0$ s, 10^{-6} s, 10^{-5} s und 10^{-4} s wurde mit $H = 6$ nur beim größten Wert von t_c eine Abweichung festgestellt. Mit $H = 14$ konnte nur mit $t_c \geq 10^{-5}$ s gerechnet werden, kleinere Werte von t_c führten zum inelastischen Kollaps. Oberflächenwellen werden auch mit traditioneller ED, d.h. $t_c = 0$ s und $\varepsilon = \text{const.}$ bzw. $\gamma = 0$ gefunden, was zeigt, daß die Musterbildung unempfindlich gegenüber algorithmischen Details ist. Allerdings sind mit klassischer ED nur kleine Füllhöhen zu simulieren, was im folgenden den Einsatz der TCED Methode nötig macht.

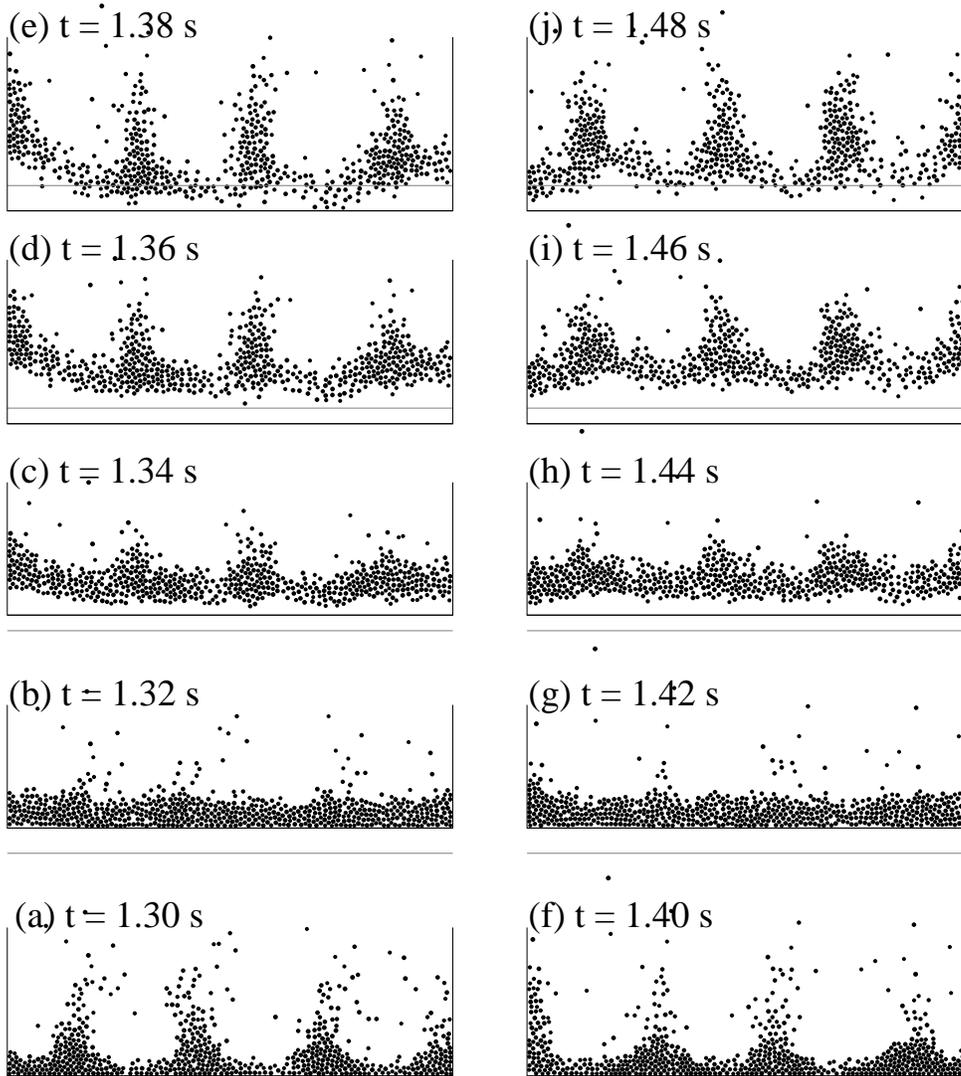


Abbildung 55: Momentaufnahmen im Zeitabstand $\Delta t = 0.02$ s einer Simulation mit den Parametern $N = 600$, $L = 100$, $f = 10$ Hz, $\Gamma = 3.6$, $\epsilon_0 = 0.4$, $\epsilon_{0w} = 0.2$, $\mu = 0.2$ und $\beta_0 = 0$. Die gestrichelte Gerade zeigt die Höhe $z = 0$ an.

In Abb. 55 sind Momentaufnahmen einer typischen Simulation mit $N = 600$ Teilchen abgebildet. Die Breite des Behälters ist $L = 100$, die Vibrationsfrequenz

ist $f = 10$ Hz und die Beschleunigung ist $\Gamma = 3.6$. Die Materialparameter sind $\epsilon_0 = 0.4$, $\epsilon_{0w} = 0.2$, $\mu = \mu_w = 0.2$ und $\beta_0 = \beta_{0w} = 0.0$, wobei der Index w die Teilchen-Wand-Parameter kennzeichnet. In Abb. 55 ist eine Zeitserie zwischen $t = 1.30$ s und $t = 1.48$ s abgebildet. Ebenso wie im Experiment hat das Muster die Periode $2T = 2/f$. Wenn sich die Bodenplatte nach oben bewegt (a,f), wird das Material komprimiert (b,g). Sobald der Boden nach unten beschleunigt, trennt sich das komprimierte Material vom Boden (c,h), und die Muster bilden sich aus (d,i), bis die Bodenplatte wieder den unteren Rand des nun relativ dünnen Materials trifft (e,j). Die Position der Muster ist von einer Periode zur nächsten um die halbe Wellenlänge verschoben, d.h. an der Stelle eines „Fingers“ findet man in der nächsten Periode ein „Tal“. Außerdem ist ähnlich wie in Experimenten [CVRD96] eine bogenähnliche Struktur unter den Fingern zu sehen (h-j).

In Abb. 56 sind Momentaufnahmen bei verschiedenen Füllhöhen dargestellt. Die Phase $\phi = t/T = 0.72$ entspricht ungefähr der Minimalposition der Bodenplatte, die bei $\phi = 0.75$ erreicht wird. Die Wellenlänge der Muster nimmt mit der Füllhöhe zu. In Abb. 57 sind Momentaufnahmen bei verschiedenen Frequenzen dargestellt. Die Wellenlänge der Muster nimmt ebenso wie die Höhe mit abnehmender Frequenz, also zunehmender Periode zu, da die Strukturen bei langen Perioden mehr Zeit haben, sich zu entwickeln.

13.2.1 Verfolgung eines Teilchens

In Abb. 58 ist die Bewegung eines einzelnen Teilchens während mehrerer Perioden dargestellt. Die Simulationsparameter sind $N = 500$, $f = 12.5$ Hz, $\Gamma = 3.6$, wobei die Reibungsparameter von Abb. 55 verwendet werden. In Abb. 58(a) und (b) ist die Horizontal- bzw. die Vertikalkoordinate des Teilchens gegen die Zeit aufgetragen. Man bemerkt, daß die Horizontalbewegung bis auf wenige Kollisionen beinahe ungestört stattfindet. Die Änderung der Horizontalgeschwindigkeit findet vor allem dann statt, wenn sich die Bodenplatte nach oben bewegt, d.h. wenn das granulare Material die Bodenplatte trifft. Die Kollision des Materials mit der Bodenplatte führt also in der Tat zu einer zufälligen Änderung der Horizontalgeschwindigkeit, wie in einem vereinfachten Modell als wesentlich für Musterbildung angenommen wurde [Shi97].

Die Vertikalbewegung zeigt Wurfparabeln, und man bemerkt, daß sich das Teilchen anfangs unter und später über dem Massenschwerpunkt befindet. Die Aufwärtsbewegung beginnt zur Zeit $t = 1.84$ s kurz nach einer Kollision des Materials mit dem Boden. In Abb. 58(c) und (d) sind die zweidimensionalen Trajektorien eines Teilchens (durchgezogene Linie) und die Aufenthaltsorte der Nachbarpartikel zu den Zeiten $t = 1.845$ s und $t = 1.925$ s gezeigt. Das Teilchen folgt der Trajektorie entgegen dem Uhrzeigersinn und die momentane Position ist mit einem Stern angezeigt. Das Teilchen befindet sich anfangs nahe dem Boden und bewegt sich während des gezeigten Zeitintervalls nach oben.

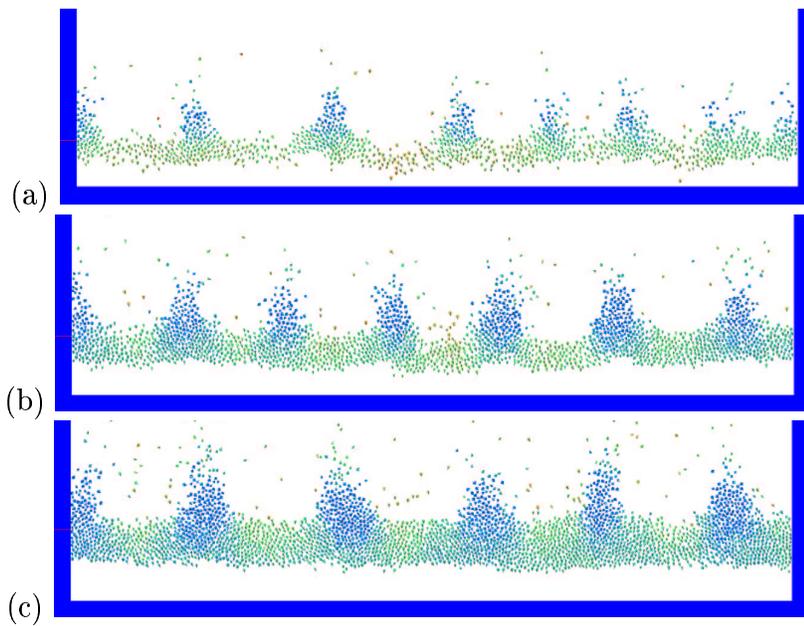


Abbildung 56: Momentaufnahmen zur Phase $\phi = t/T = 0.72$ von Simulationen mit verschiedenen Füllhöhen (a) $H = 6$, (b) $H = 10$ und (c) $H = 14$ bei der Anregungsfrequenz $f = 11.11$ Hz und $\Gamma = 3.6$; die Farbskala gibt hohe (rot) und niedrige (blau) kinetische Energie an.

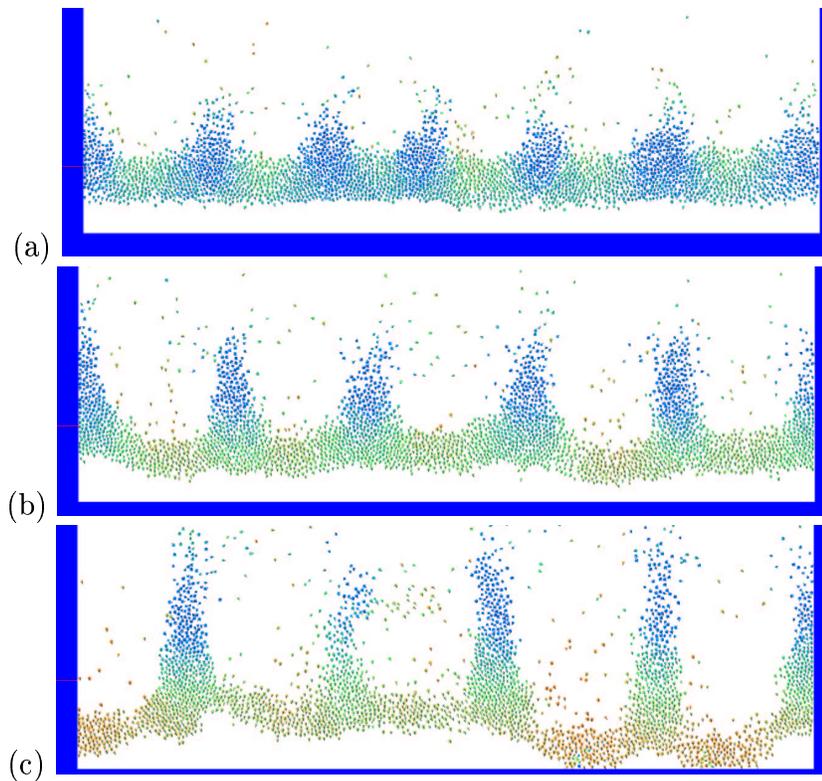


Abbildung 57: Momentaufnahmen von Simulationen mit verschiedenen Anregungsfrequenzen (a) $f = 11.77$ Hz, $\phi = 0.715$, (b) $f = 9.52$ Hz, $\phi = 0.755$ und (c) $f = 8$ Hz, $\phi = 0.8$ mit Füllhöhe $H = 14$ und $\Gamma = 3.6$; die Farbskala gibt hohe (rot) und niedrige (blau) kinetische Energie an.

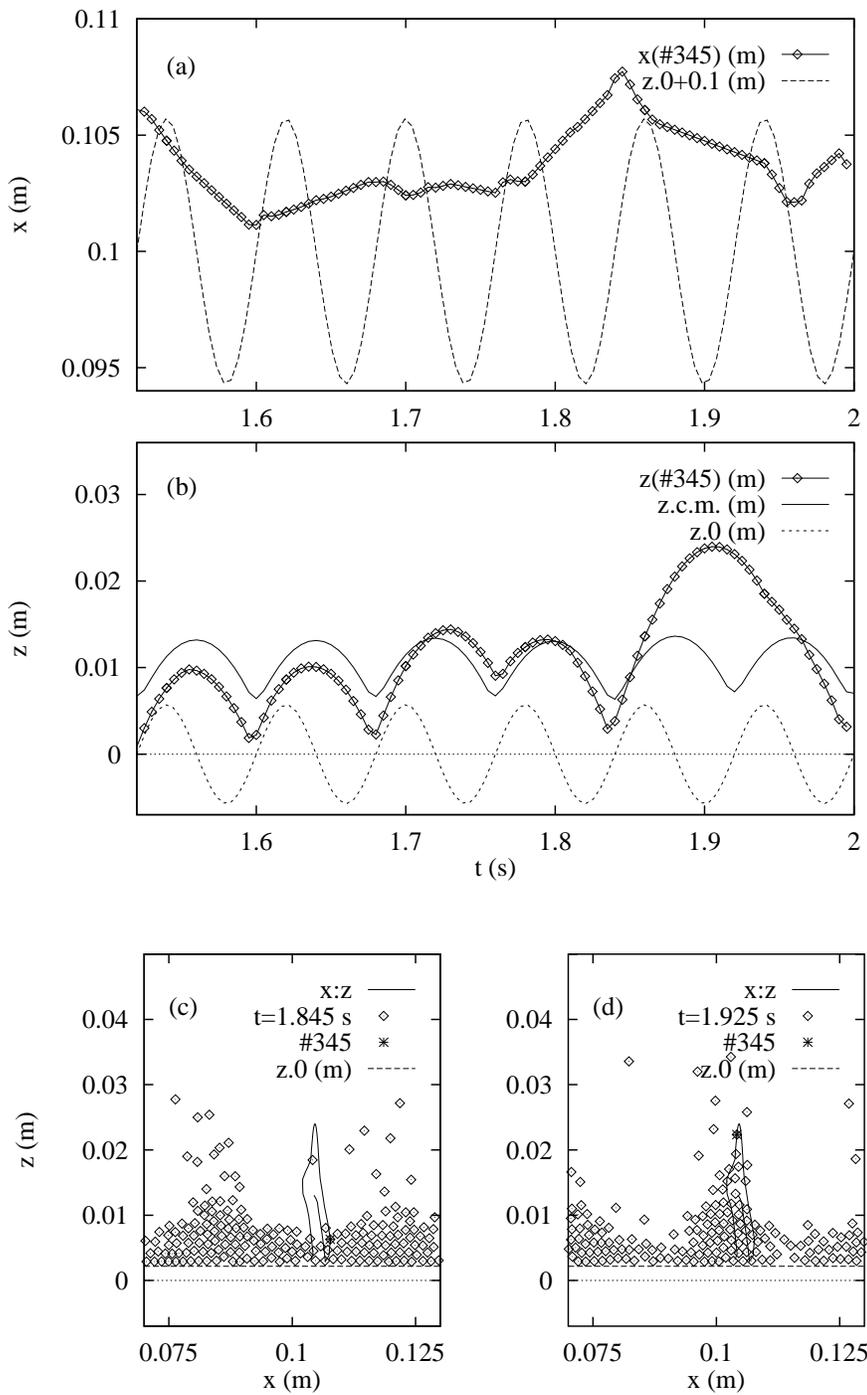


Abbildung 58: (a) Horizontale Koordinate des Teilchens #345 als Funktion der Zeit. Die gestrichelte Linie zeigt die Position der Bodenplatte. (b) Vertikale Koordinate des Teilchens #345, wobei die durchgezogene Linie die Position des Massenschwerpunktes aller Teilchen anzeigt. Die gepunktete Linie entspricht $z = 0$. (c) Trajektorie von Teilchen #345, aus (a) und (b) mit einer Momentaufnahme der anderen Teilchen in der Umgebung zur Zeit $t = 1.845$ s. Die gestrichelte Linie zeigt die Position der Bodenplatte an und die gepunktete Linie entspricht $z = 0$. (d) Momentaufnahme zur Zeit $t = 1.925$ s. Teilchen #345, das die gezeigte Trajektorie entgegen dem Uhrzeigersinn durchläuft, hat das Maximum seiner Bahn passiert.

13.2.2 Korrelationsfunktionen

Zur quantitativen Beschreibung des Systemverhaltens verwendet man die Korrelationsfunktionen der Dichte und der Geschwindigkeit. Die Dichte-Korrelationsfunktionen sind

$$C_{\alpha\alpha}(r) = \frac{1}{N^2(l-r)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta[r - |\alpha_i - \alpha_j|], \quad (92)$$

in horizontaler Richtung ($\alpha = x$) oder in vertikaler Richtung ($\alpha = z$) und der entsprechenden Entfernung $r = x$ oder $r = z$. Der Vorfaktor $1/(l-r)$ dient bei dem durch die Wände begrenzten System zur Normierung auf eine Konstante. Das erste Maximum der Dichte-Korrelationsfunktion C_{xx} gibt die Wellenlänge des Musters $l_x(t)$ an, und das erste Moment der vertikalen Korrelationsfunktion C_{zz} gibt die typische Systemhöhe an

$$l_z = \frac{\int_0^\infty dz z C_{zz}(z)}{\int_0^\infty dz C_{zz}(z)}, \quad (93)$$

wobei die Ausdehnung des komprimierten Systems l_z^0 proportional zur Füllhöhe ist. Die Korrelationsfunktionen der Geschwindigkeiten sind

$$V_{\alpha\beta}(r) = \frac{1}{N^2(l-r)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta[r - (\alpha_i - \beta_j)] (v_i^\alpha - \langle v^\alpha \rangle) (v_i^\beta - \langle v^\beta \rangle), \quad (94)$$

mit $\alpha, \beta = x, z$, dem Abstand r , der Geschwindigkeit $\vec{v}_i = (v_i^x, v_i^z)$ von Teilchen i und der gemittelten Geschwindigkeit $\langle (v^x, v^z) \rangle$.

In Abb. 59 sind die Dichte-Korrelationsfunktionen und die beiden Längen l_x und l_z zu verschiedenen Zeiten aufgetragen. In Abb. 59(a) ist die horizontale Dichtekorrelation zu den Zeiten $t = 1.30, 1.32, 1.34, 1.36$ und 1.38 s gezeigt. Beim Vergleich von C_{xx} mit den entsprechenden Bildern in Abb. 55(a)-(e) stellt man bei Existenz der Oberflächenwellen auch eine Modulation von $C_{xx}(x, t)$ mit derselben Wellenlänge fest. So läßt sich aus $C_{xx}(x, t)$ die Wellenlänge $l_x(t)$ bestimmen, und man stellt fest, daß sie sich mit der Phase leicht ändert. Der aus den gezeigten Messungen gebildete Mittelwert ist $\bar{l}_x = 0.0408 \text{ mm} \pm 0.0007 \text{ mm}$ (Rauten). In Abb. 59(b) ist die vertikale Dichtekorrelation $C_{zz}(z, t)$ für die in (a) gezeigten Simulationen als Funktion der Höhe z aufgetragen. Die Kreuze entsprechen dem am stärksten komprimierten Zustand (mit minimaler Ausdehnung) in Abb. 55(b), während Rauten und Dreiecke der maximalen Ausdehnung in Abb. 55(a) entsprechen. In Abb. 59(c) ist die Wellenlänge l_x zu verschiedenen Phasen ϕ gezeigt. Die durchgezogenen Geraden geben den jeweiligen Mittelwert $\langle l_x \rangle$ an. Wenn keine Oberflächenwellen vorhanden sind, kann auch keine Wellenlänge bestimmt werden, weshalb einige Punkte fehlen. In Abb. 59(d) ist die vertikale Ausdehnung l_z für Simulationen mit verschiedenen Frequenzen f gezeigt. Anders als l_x ändert sich l_z während einer Periode von seinem von Null verschiedenen Minimal- bis zu seinem Maximalwert. Dies quantifiziert die periodische Ausdehnung und Verdichtung des Systems. Bei fester Beschleunigung Γ wächst l_z mit abnehmender Frequenz bzw. zunehmender Periode, da das Muster bei längerer Periodendauer mehr Zeit hat zu wachsen.

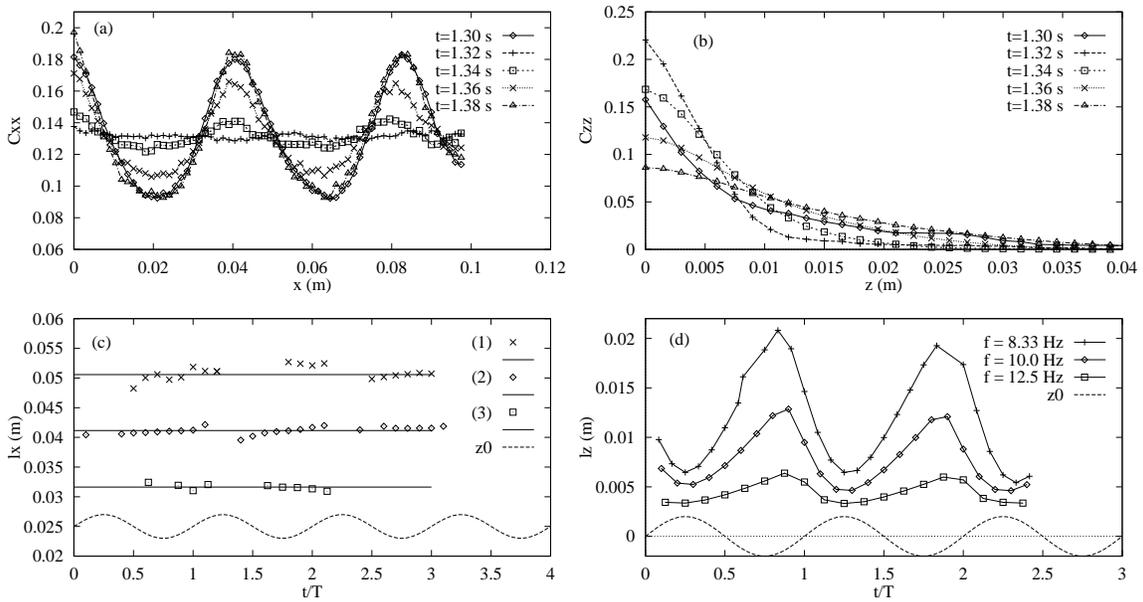


Abbildung 59: (a) $C_{xx}(x)$ für die Simulation in Abb. 55. (b) $C_{zz}(z)$ für dieselbe Simulation. (c) l_x als Funktion der Phase ϕ für verschiedene Simulationen. Die Rauten (2) wurden von der Simulation in Abb. 55 gewonnen. Die verwendeten Parameter sind $N = 600$, $L = 100$, und $f = 10$ Hz. Die anderen Simulationen werden mit $N = 1050$, $L = 150$, $f = 10$ Hz (1) bzw. $N = 600$, $L = 100$, $f = 12.5$ Hz (3) durchgeführt. Die gestrichelte Linie zeigt die Bewegung der Bodenplatte (versetzt) an. (d) l_z als Funktion von ϕ mit $N = 600$, $L = 100$ und $f = 8.33$ Hz (Kreuze), $f = 10$ Hz (Rauten) und $f = 12.5$ Hz (Quadrate).

In Abb. 60(a) und (b) sind die gemischten horizontalen Geschwindigkeitskorrelationen $V_{xz}(x)$ für zwei aufeinanderfolgende Perioden dargestellt. Es werden wieder die Simulationen in Abb. 55 verwendet, allerdings sind die Korrelationsfunktionen nur zu den interessanten Phasen dargestellt. Periodische x - z Korrelationen in der Horizontalen bedeuten ein konvektives Muster, d.h. Teilchen bewegen sich entlang der x -Richtung abwechselnd vertikal und horizontal. Die Korrelationen sind nur dann deutlich, wenn das granulare Medium komprimiert wird und viele Teilchen zur selben Zeit wesentliche Vertikal- und Horizontalbewegungen ausführen.

In Abb. 60(c) und (d) sind die gemischten vertikalen Geschwindigkeitskorrelationen $V_{zx}(z)$ für die Simulationen aus (a) und (b) gezeigt. Wegen der abnehmenden Wahrscheinlichkeit, Teilchen mit großem z -Abstand zu finden, nimmt auch die Geschwindigkeitskorrelation mit z ab. Dennoch kann man von der Modulationslänge der Korrelationsfunktion die vertikale Ausdehnung der aktiven Bereiche abschätzen. Für $t = 1.29$, 1.30 und 1.31 s und für $t = 1.39$ und 1.40 s stellt man die erste starke negative Korrelation bei $z \approx 0.007$ m fest. Horizontale und vertikale Korrelationen sind dann am stärksten, wenn die Teilchen den Boden treffen und das Material komprimiert ist. Von den Dichte-Korrelationsfunktionen kann man die Wellenlänge des Musters berechnen, und die Geschwindigkeits-Korrelationen zeigen konvektive Strömungen im System an.

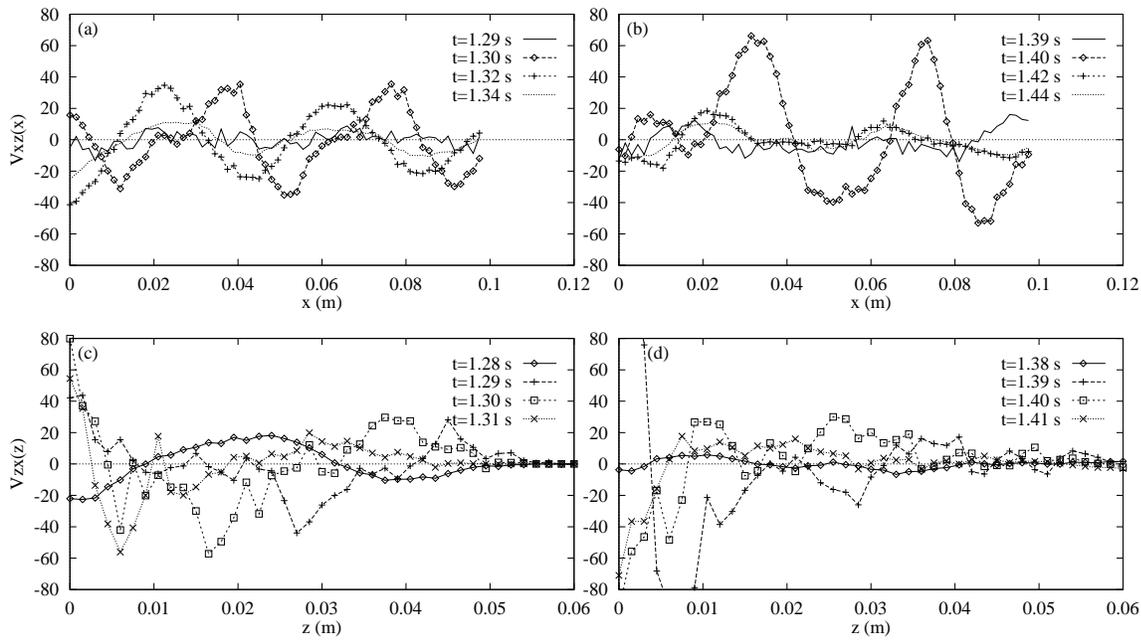


Abbildung 60: (a) $V_{xz}(x)$ aus der Simulation in Abb. 55. (b) $V_{xz}(x)$ eine Periode später als in (a). (c) $V_{zx}(z)$ aus der Simulation in Abb. 55. (d) $V_{zx}(z)$ eine Periode später als in (c).

13.2.3 Vergleiche mit Experimenten

Die Experimente von Clément et al. [CVRD96] zeigen nur eine sehr schwache Abhängigkeit der Wellenlänge von der Beschleunigung Γ . Auch bei einer Erhöhung der Systembreite von $L = 100$ auf $L = 200$ wurde im Experiment kein Einfluß von Γ auf die Dispersionsrelation gefunden. Dies wurde mit Aluminium-Kugeln für $\Gamma \leq 4.5$ festgestellt, wobei die Periode der Oberflächenwellen doppelt so lange wie die Periode der Anregung war. Bei viel stärkerer Anregung $\Gamma \geq 6$ wird Periodenverdopplung und eine viel größere Wellenlänge festgestellt, da das granulare Medium während beinahe zwei Anregungsperioden fliegt. Diese Periodenverdopplung wird auch mit Simulationen reproduziert. Im folgenden soll die Untersuchung aber lediglich auf Muster der Periode $2T$ beschränkt bleiben, und die Simulationsergebnisse sollen mit der empirischen Formel in Gleichung 90 verglichen werden.

Überraschenderweise zeigen die Simulationen eine deutliche Abhängigkeit der Wellenlänge von der Beschleunigung Γ . In Fig. 61(a) ist die Wellenlänge l_x für verschiedene Γ und verschiedene $L = 100$ oder $L = 166$ aufgetragen. Der Wert $L = 166$ wurde gewählt, um die Systemgröße um einen nicht-ganzzahligen Faktor zu verändern. In diesem System war die Füllhöhe $H = 6$ und die Anregungsfrequenz $f = 10$ Hz bei Beschleunigungen im Bereich $2.6 \leq \Gamma \leq 4.3$. Für beide Systemgrößen $L = 100$ und $L = 166$ ist eine deutliche Variation der Wellenlänge mit der Anregung Γ festzustellen. Die starken Änderungen der Wellenlänge gehen nicht auf Fluktuationen der Meßgrößen zurück, wie man aus der kleinen Standardabweichung folgern kann. Das Muster ist vermutlich auf Resonanzeffekte zwischen der Wellenlänge und der Systemgröße zurückzuführen.

In Abb. 61(b) ist l_x gegen f aufgetragen, wobei verschiedene $H = 6, 10, 14$, $\Gamma = 3.2, 3.6$ und $L = 100, 200$ verwendet werden. Beim Vergleich mit dem empi-

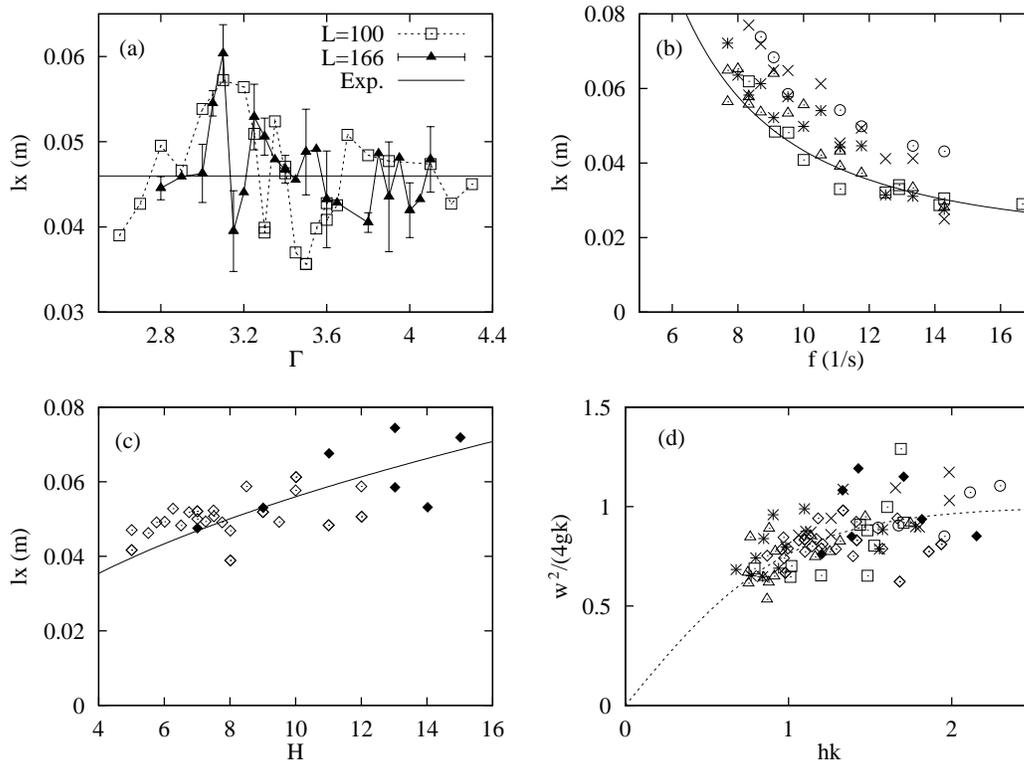


Abbildung 61: (a) l_x als Funktion von Γ mit $H = 6$, $f = 10$ Hz und $L = 100$ (Quadrate) bzw. $L = 166$ (Dreiecke). Die Fehlerbalken geben die Standardabweichung der über ca. 20 Perioden gemessenen Werte an, und die durchgezogene Linie ist die empirische Dispersionsrelation aus Gleichung 90. (b) l_x als Funktion von f mit $H = 6$, $\Gamma = 3.6$ und $L = 100$ (Quadrate), $\Gamma = 3.6$, $L = 200$ (Dreiecke), $\Gamma = 3.2$, $L = 200$ (Sterne) sowie $\Gamma = 3.6$, $L = 200$ mit $H = 10$ (x) oder $H = 14$ (Kreise). Die durchgezogene Linie ist wieder Gleichung 90 für $H = 6$, weshalb die (x)- und (o)-Symbole höher liegen. (c) l_x als Funktion der Füllhöhe H mit $f = 10$ Hz, $\Gamma = 3.6$ und $L = 100$ (Rauten) bzw. $L = 200$ (gefüllte Rauten). (d) Dimensionslose Darstellung der Daten aus den Abbildungen 61(b) und (c). Die gestrichelte Linie zeigt die Dispersionsrelation für Gravitationswellen in Flüssigkeiten an.

rischen Fit an die experimentellen Daten (Gleichung 90 mit $H = 6$) stellt man für die Simulationsergebnisse mit $H = 6$ auch sehr gute Übereinstimmung fest. Die in Abb. 61(b) höher liegenden Daten mit $H = 10$ (x) und $H = 14$ (o) lassen sich sehr gut mit \sqrt{H} skalieren und fallen dann mit den anderen Werten zusammen. Um die Abhängigkeit der Wellenlänge l_x von H genauer zu untersuchen, variiert man H im Bereich $5 \leq H \leq 15$ in Systemen der Breite $L = 100$ (Rauten) und $L = 200$ (gefüllte Rauten). In Abb. 61(c) ist die Wellenlänge als Funktion von H aufgetragen. Man stellt einen Anstieg von l_x mit zunehmendem H fest. Wegen des kleinen Parameterbereichs und der starken Schwankungen der Meßdaten läßt sich aber keine abschließende Aussage über die funktionale Abhängigkeit $l_x(H)$ machen. Der Vergleich mit Gleichung 90 zeigt jedoch befriedigende Übereinstimmung.

In Abb. 61(d) wird geprüft, ob die für Gravitationswellen in Flüssigkeiten berechnete Dispersionsrelation [GSMF95] zu einer guten Übereinstimmung mit den Simula-

tionsdaten führt. Dazu wird $\omega^2/(4gk)$ für alle Simulationsdaten aus den Abbildungen 61(b) und (c) als Funktion von hk aufgetragen, wobei die Höhe des Materials in dichter Packung $h = \sqrt{3}dH/2$ ist und die Wellenzahl $k = 2\pi/l_x$ ist. Die gestrichelte Kurve ist die theoretische Beziehung

$$\omega^2/(4gk) = \tanh(hk), \quad (95)$$

für Gravitationswellen in dünnen Flüssigkeitsschichten. Obwohl die Daten in der Nähe der Vorhersage liegen, ist die Streuung extrem groß, was auf Unterschiede zwischen granularen Materialien und Flüssigkeiten schließen läßt.

Eine weitere interessante Größe ist die Amplitude der Wellen l_z . Um nur die Höhe der Finger zu zeigen, werden in Abb. 62(a) die gemittelten Werte von $l_z - l_z^0$ der Simulationen aus Abb. 61(a) gezeigt. Die Resonanzeffekte, die bei der Wellenlänge in Abb. 61(a) sichtbar waren, sind bei der Amplitude der Muster nur noch undeutlich vorzufinden. Für kleine Γ nimmt $l_z - l_z^0$ stetig zu, und bei $\Gamma \approx 3.8$ wird das Muster instabil, d.h. die Amplitude nimmt mit weiter zunehmendem Γ stark ab. In Abb. 62(b) sind die Werte $l_z - l_z^0$ der Simulationen aus Abb. 61(b) gezeigt. Oberhalb $a \approx 0.003$ m findet man flache Oberflächenwellen, deren Amplitude mit zunehmendem a linear anwächst.

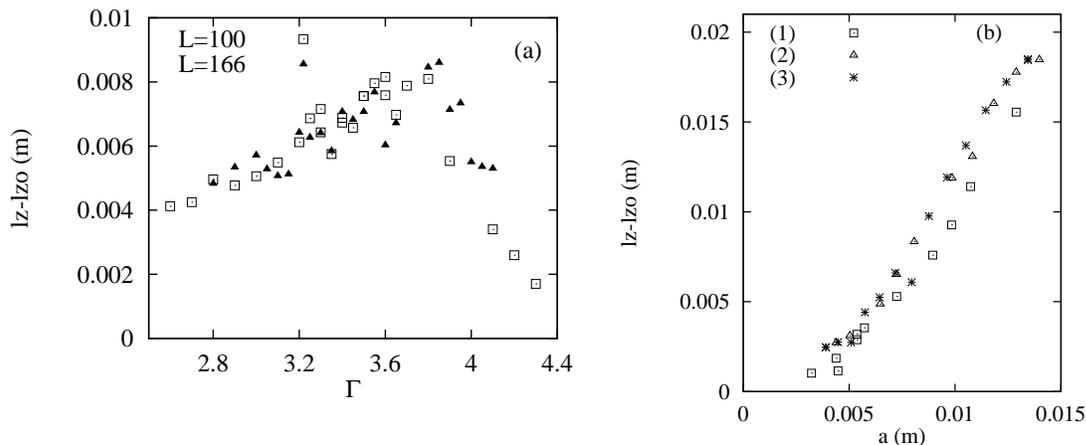


Abbildung 62: (a) $l_z - l_z^0$ als Funktion von Γ mit $H = 6$, $f = 10$ Hz und $L = 100$ (Quadrate) bzw. $L = 166$ (Dreiecke). (b) $l_z - l_z^0$ als Funktion von a mit $H = 6$, $\Gamma = 3.6$ und $L = 100$ (Quadrate), $\Gamma = 3.6$, $L = 200$ (Dreiecke) und $\Gamma = 3.2$, $L = 200$ (Sterne).

13.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden numerische Experimente zu Mustern in Form von Oberflächenwellen in vibrierten granularen Systemen vorgestellt. Um den Parameterbereich, insbesondere der Füllhöhe H , zu erweitern, wurde eine Verbesserung der Ereignis-Dynamik Methode mit geschwindigkeitsabhängigem Restitutionskoeffizienten verwendet. Es wurde festgestellt, daß die Musterbildung auch mit der klassischen Simulationemethode und ohne Reibung und Rotation stattfindet. Oberflächenwellen werden in den Parameterbereichen $5 \leq H \leq 16$, $2.5 \leq \Gamma \leq 4.3$ und $8 \text{ Hz} \leq f \leq 17 \text{ Hz}$ untersucht, und es zeigt sich eine gute quantitative Übereinstimmung mit Experimenten.

Die Muster haben die doppelte Periode wie die anregende Schwingung, und es treten Resonanzen zwischen der Wellenlänge und der Behältergröße auf, was experimentell nur in kleinen Behältern gemessen wurde [GSMF95].

Die Musterbildung ist auch deshalb interessant, weil man bei starker Dissipation und großer Füllhöhe eigentlich erwartet, daß alle Energie verloren geht und sich das granulare Medium wie ein Materialblock verhält (Teil III). Das Bild eines stark dissipativen Granulats, das all seine Energie beim Stoß verliert, ist nicht immer richtig. In begrenzten Parameterbereichen findet eine Selbstorganisation des Materials derart statt, daß sich ein hochenergetischer, periodischer Zustand einstellt, in dem die Dissipation relativ schwach ist. Das System wählt also den Zustand höherer Energie mit periodischen Mustern im Raum.

Immer noch ist der Unterschied zwischen granularen Medien und Flüssigkeiten nicht deutlich. Die Beschreibung hydrodynamischer Instabilitäten in vibrierten, dünnen Flüssigkeitsschichten zeigt qualitative Ähnlichkeit mit der Instabilität im granularen System. Wegen der starken Fluktuationen kann allerdings keine Aussage zur Qualität der Theorie gemacht werden. Die Frage, warum Muster bzw. Oberflächenwellen entstehen, bleibt ebenso unbeantwortet wie die Frage nach dem Mechanismus der Wellenlängenselektion. Eine Theorie, die die granulare Struktur und die dissipativen Materialeigenschaften berücksichtigt, steht noch immer aus.

14 Offene Systeme mit periodischen Rändern

Ein wesentlicher Unterschied zwischen einem klassischen Gas und granularen Medien ist Dissipation. In granularen Systemen ohne oder mit schwacher Energiezufuhr kann man trotz fehlender attraktiver Wechselwirkung die Bildung von Zonen mit hoher Dichte und geometrischer Ordnung beobachten [GZ93, MY96]. Diese Dichtestabilität wird durch anfangs kleine Fluktuationen hervorgerufen. In einem Raumgebiet wird zufällig etwas mehr Energie dissipiert als in den Nachbargebieten. Dadurch sinkt der Druck, und Teilchen können aus den Nachbarzonen in die Zone niedrigen Drucks wandern, was zu erhöhtem Energieverlust und weiterer Druckabnahme führt. Wird dieser „Teufelskreis“ nicht durch Energiezufuhr verhindert, bilden sich „Cluster“ mit hoher Dichte und dazwischen Zonen mit sehr niedriger Dichte, in denen die Fluktuationsenergie immer weiter abnimmt. Bei hinreichend starker Dissipation führt diese Abnahme der Fluktuationsenergie und des Drucks zu einer Zunahme der Kollisionsfrequenz, die im Extremfall divergieren kann. Dieses Phänomen wird als „inelastischer Kollaps“ bezeichnet, da die mittlere freie Weglänge und damit das freie Volumen verschwinden – die Teilchen kollabieren. Die Größe der Cluster und damit die typische Korrelationslänge wächst bis zur Systemgröße [GZ93, MY96]. Die Dichtestabilität und ihre Folgen wurden in 1D [BM90, MY92, MY93, LCB⁺94c, GR96, KWG96] und in 2D [SKS90, GZ93, MY94, TH95b, MY96, SSK96, DB97, OBvNE97] detailliert untersucht; systematische dreidimensionale Untersuchungen stehen allerdings noch aus.

Die kinetische Gastheorie basiert auf der Annahme homogener repräsentativer Volumenelemente [Haf83, Sav79, JC79, GS95, GSMF95, GSG95] und kann das Phänomen Dichtestabilität nicht beschreiben, da maximale und minimale Dichte in sehr kleinen Volumenelementen parallel existieren können (große Dichtegradienten sind möglich). Die Vorhersagen der kinetischen Gastheorie sind also nur für niedrige Dichten und schwache Dissipation gültig [MY96]. Das Clusterwachstum wurde bisher nur für den Grenzfall vollständig inelastischer Kollisionen und damit irreversibler Aggregation numerisch und theoretisch untersucht [TH95b, TH95c], der allgemeinere Fall reversibler Aggregation ist ein ungelöstes Problem.

Detaillierte Untersuchungen des inelastischen Kollapses [MY96] führen zu verschiedenen möglichen Phasen. In einem periodischen System ohne externe Kräfte bilden sich Cluster nur oberhalb einer effektiven Dissipationsstärke, die sowohl von der lokalen Dissipation als auch von der globalen Dichte abhängt. Ist die effektive Dissipation zu schwach, so verbleibt das System in einem Zustand homogener Dichte und Energie, und die kinetische Gastheorie ist anwendbar. Bei starker effektiver Dissipation bilden sich innerhalb weniger Kollisionen pro Teilchen Zonen mit niedriger interner Energie und hoher Geschwindigkeit relativ zueinander. In diesem Bereich wächst mit der effektiven Dissipationsstärke und der Dichte auch die Wahrscheinlichkeit für den inelastischen Kollaps.

Um den inelastischen Kollaps zu verhindern bzw. zu umgehen, wurden verschiedene Methoden vorgeschlagen (siehe Kapitel 5). Hier soll die TC Methode verwendet werden, welche die Dissipation bei zu hoher Kollisionsfrequenz deaktiviert. Der sta-

tische Grenzfall ist lokal durch keine weitere Änderung der Energie definiert – alle Kollisionen sind elastisch und die Kollisionsfrequenz aller an Kollisionen beteiligten Teilchen ist größer oder gleich der inversen Kontaktdauer. Die im System verbleibende kinetische Energie kann mit der potentiellen Energie der Kontakte identifiziert werden, und lokale Kraft bzw. Spannungen im System sind – gemittelt über mehrere Kontaktdauern – definiert [Lud97b]. Die Berücksichtigung der TC Regel erlaubt die numerische Beschreibung von Systemen, die der klassischen ED Methode wegen des inelastischen Kollapses nicht zugänglich sind.

14.1 Dichteinstabilitäten

Will man ein homogenes granulares System untersuchen, muß man möglichst auf Wände verzichten, da Randeﬀekte und Wände das Material unvorhersehbar beeinflussen können. Ein System mit periodischen Rändern ist per se translationsinvariant, aber keineswegs unendlich groß. Das System kann so lange als groß genug angesehen werden, solange die Korrelationslängen deutlich kleiner sind als die Systemgröße l . Vor diesem Zeitpunkt kann man die zeitliche Entwicklung ohne Rücksicht auf die Systemgröße untersuchen. Danach wird sich das System in der Regel anders verhalten, d.h. es wird sich ein von der Systemgröße abhängiger quasi-stationärer Zustand einstellen. Von Interesse ist dann ein eventuelles Gleichgewicht und dessen Abhängigkeit von der Systemgröße („Finite Size Scaling“).

Im folgenden werden mit Hilfe von ED Simulationen periodische Systeme der Länge $L = l/d_0$ in 2D untersucht, wobei d_0 der Teilchendurchmesser ist. Der Volumenanteil ist definiert als $\varrho = N\pi(d_0/2l)^2 = (\pi/4)N/L^2$. Die Teilchen werden am Anfang auf einem Quadratgitter gleichmäßig im System verteilt und mit zufälligen Geschwindigkeiten versehen. Die mittlere Geschwindigkeit wird von allen Teilchengeschwindigkeiten abgezogen, um ein ruhendes Bezugssystem zu erhalten. Mit dieser Anfangsbedingung erreicht man mit elastischer Simulation ($\epsilon = 1$) nach kurzer Zeit einen Gleichgewichtszustand mit Maxwellscher Geschwindigkeitsverteilung. Mit dem so erhaltenen Anfangszustand wird die eigentliche Simulation mit dissipativen Stößen ($\epsilon < 1$) begonnen. Die dimensionslose kinetische Energie ist $K(t) = e(t)/e(0) = K_x + K_z$ als die Summe ihrer x - und z -Anteile mit der Anfangsenergie $e(0)$. Zuerst soll untersucht werden, wie die Energie mit der Zeit abnimmt. Dazu bereitet man, wie oben beschrieben, ein kleines System mit $N = 784$, $L = 50$ und $\varrho \approx 0.25$ vor. Man simuliert mit $\epsilon = 0.99, 0.97, 0.95, 0.9, 0.8, 0.6$ und 0.2 solange, bis jedes Teilchen im Mittel $C/N = 1000$ Kollisionen ausgeführt hat. In Abb. 63(a) ist $K(t)$ als Funktion der Zeit und in Abb. 63(c) als Funktion der mittleren Kollisionszahl pro Teilchen C/N aufgetragen. Die Theorie von Haff [Haf83] sagt für die Energieabnahme in einem homogenen System die Funktion

$$K(t) = \left(\frac{1}{1 + c(1 - \epsilon^2)t} \right)^2 \quad (96)$$

voraus. Die Simulationen mit $\epsilon = 0.99$ (Quadrate) und $\epsilon = 0.97$ (Kreise) können durch diese Theorie mit einem einzigen Parameter $c = 62.8 \text{ s}^{-1}$ hervorragend erklärt werden, wobei der Parameter c von der Anfangsenergie und der Dichte abhängt. Verwendet man kleinere ϵ treten allerdings Abweichungen zwischen Simulation und Theorie auf. Neben der Realzeit t , die von der Anfangsenergie abhängt, gibt es die

Zahl der Kollisionen pro Teilchen C/N mit der Gesamtzahl C aller Kollisionen. In Abb. 63(b) ist t gegen diese Größe aufgetragen. Man erkennt, daß C/N anfangs um so schneller zunimmt, je schwächer die Dissipation ist. Aus Abb. 63(c) wird klar, daß für große ϵ und kleine C/N die Energie $K(t) \propto \exp(-C/N)$ ist, wie man leicht von Gleichung 96 ableiten kann, indem man das Produkt der mittleren Geschwindigkeit \sqrt{K} und der inversen freien Weglänge $\lambda \propto 1/\rho$ integriert.

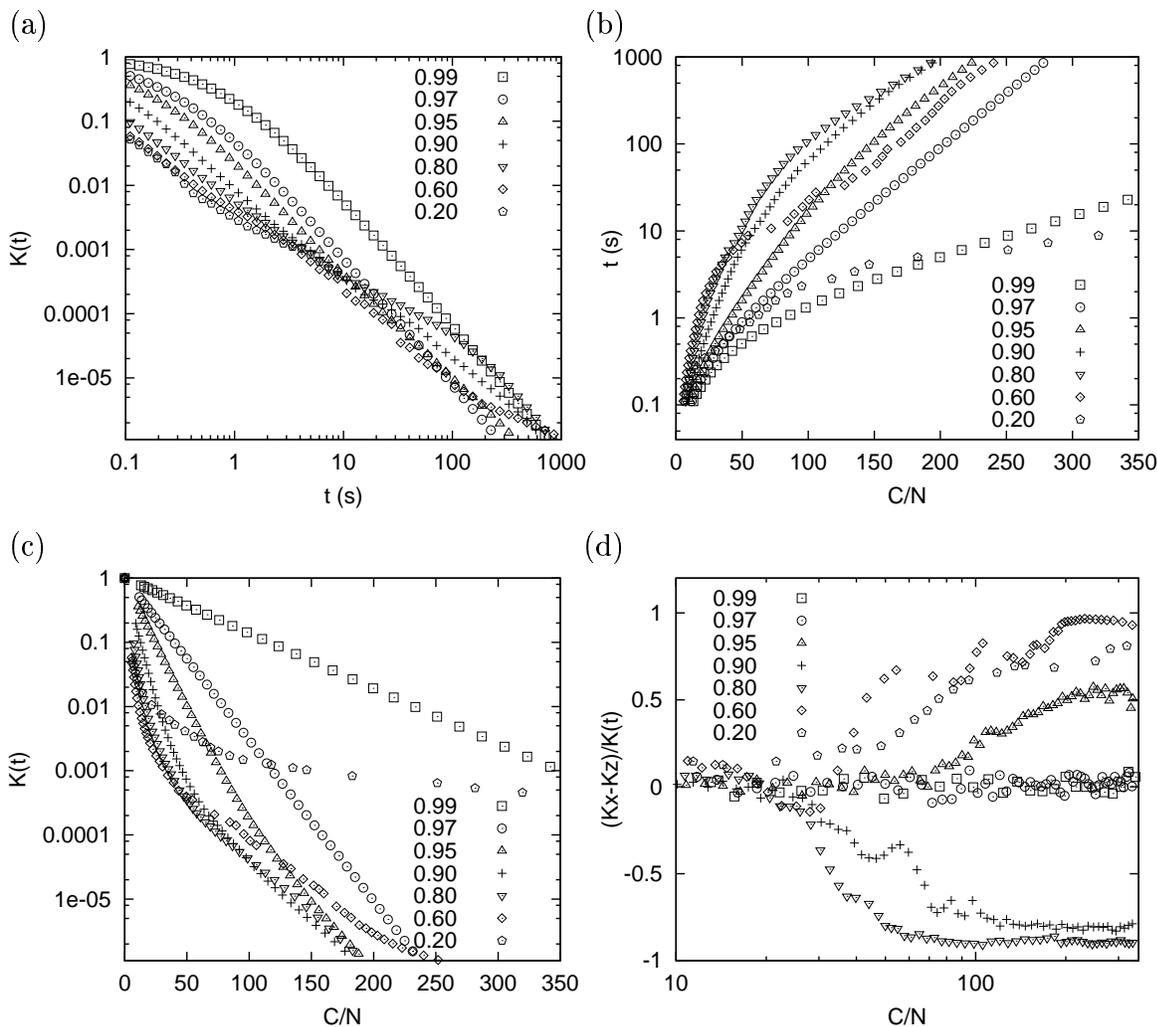


Abbildung 63: (a) $K(t)$ als Funktion der Zeit t für verschiedene Restitutionskoeffizienten ϵ . Die Symbole für $\epsilon = 0.97$ und 0.99 werden durch Gleichung 96 mit der Konstante $c = 62.8 \text{ s}^{-1}$ beschrieben. (b) t als Funktion von C/N . (c) $K(t)$ als Funktion von C/N . (d) $(K_x - K_z)/K(t)$ als Funktion von C/N .

Um die Abweichungen von der Theorie für $\epsilon < 0.97$ zu verstehen, kann man das Verhältnis der kinetischen Energie in Horizontal- und Vertikalrichtung betrachten. Die Differenz $(K_x - K_z)/K(t)$ in Abb. 63(d) ist ein Maß für die Inhomogenität des Systems. Ist $(K_x - K_z)/K(t) > 0$, so ist der Hauptteil der kinetischen Energie in der Horizontalkomponente und Gleichverteilung nicht gegeben. Der Absolutwert von $(K_x - K_z)/K(t)$ ist ein Maß für die Stärke des sogenannten Schermodus, in dem die meiste Energie in zwei Bereichen steckt, die sich gegenläufig bewegen [MY96, GT96].

Man erkennt, daß die Abweichungen vom homogenen System ($(K_x - K_z)/K(t) \approx 0$) in Abb. 63(d) mit abnehmendem ϵ immer früher beginnen.

Bei starker Dissipation treten Sprünge in C/N auf, d.h. es geschehen in einem kurzen Zeitintervall sehr viele Stöße. In diesem Fall kann die kritische Kollisionsrate $1/t_c$ (siehe Abschnitt 5) überschritten werden, und die Dissipation wird für beteiligte Teilchen deaktiviert. Um die Empfindlichkeit der Simulation gegenüber der Wahl des Parameters t_c zu untersuchen, wird obige Simulation mit $\epsilon = 0.6$ für die Werte $t_c = 10^{-10}$ s, 10^{-8} s, 10^{-6} s, 10^{-5} s und 10^{-3} s durchgeführt. In Abb. 64 sind für diese Simulationen ebenso wie in Abb. 63 verschiedene Kombinationen von $K(t)$, t , C/N und $(K_x - K_z)/K(t)$ dargestellt.

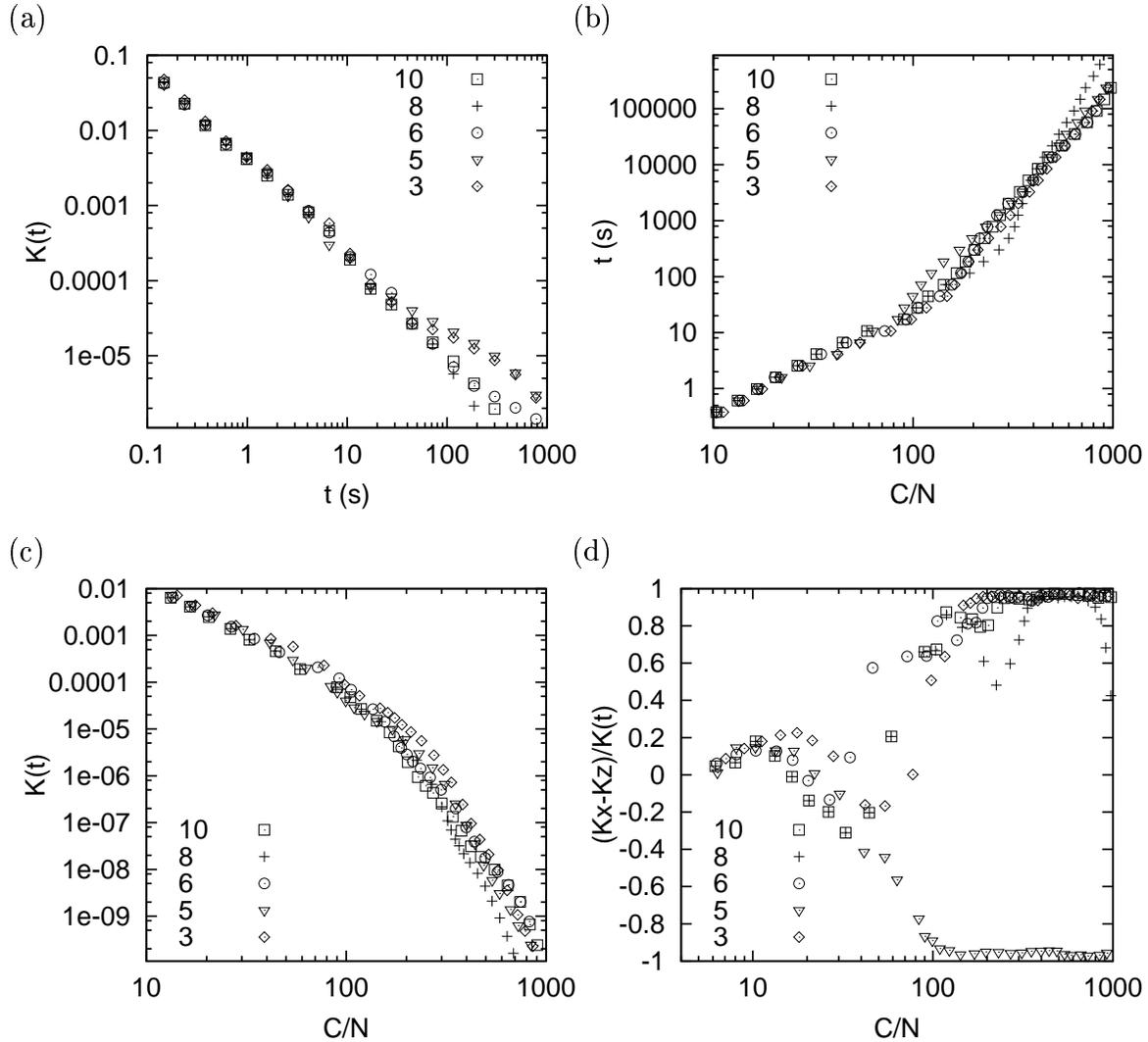


Abbildung 64: (a) $K(t)$ als Funktion der Zeit t mit $\epsilon = 0.6$ für verschiedene t_c Werte (die Zahlen in der Abbildung geben $-\log_{10} t_c$ an). (b) t als Funktion von C/N . (c) $K(t)$ als Funktion von C/N . (d) $(K_x - K_z)/K(t)$ als Funktion von C/N .

Von Abb. 64 kann man folgern, daß das Systemverhalten für $C/N < 40$ nicht von t_c abhängt, solange $t_c < 10^{-5}$ s ist. Für größere C/N bildet sich der Schermodus, wie in Abb. 64(d) sichtbar. Der Schermodus beginnt sich bei $C/N \approx 40$ zu formieren, und

die Orientierung des Schermodus, d.h. der Wert von $(K_x - K_z)/K(t)$, hängt stark von t_c ab.

Die Zeitskala t_c beeinflusst das Systemverhalten deutlich, sobald sich die Dichteinstabilität ausbildet. In diesem Fall überschreitet eine relativ große Anzahl der Teilchen die kritische Kollisionsfrequenz. Der Anteil der elastischen Kollisionen im System, und damit die Gesamtdissipation, wird eine Funktion von t_c . Aus Abb. 64(a) kann man eine Tendenz ablesen, daß größere t_c Werte zu schwächerer Energieabnahme mit der Zeit führen. Allerdings scheint vor allem die Simulation mit $t_c = 10^{-8}$ s am deutlichsten von den anderen Simulationen abzuweichen, wenn man die Abb. 64(b) und (c) betrachtet. Diese Abweichung tritt allerdings erst für große $C/N \approx 140$ auf. Die Simulationen mit $t_c = 10^{-8}$ s und $t_c = 10^{-10}$ s stimmen bis zu diesem C/N Wert in Abb. 64(d) miteinander überein (Kreuze und Quadrate). Die Abweichung tritt mit abnehmendem t_c also immer später auf, der Zustand für sehr große C/N bzw. sehr große Zeiten t hängt aber nicht linear von t_c ab. Dies ist ein Zeichen dafür, daß die Entwicklung des Systems nur für eine kurze Zeit von den Anfangsbedingungen abhängt, während danach ein Materialparameter das Verhalten bzw. den Zustand des Systems bestimmt.

Das System wird bei Simulationen mit $\epsilon < 0.97$ rasch inhomogen. Cluster und damit verdünnte Bereiche von der Größe des Systems entstehen. Solange die Cluster deutlich kleiner sind als das System, befindet sich das granulare Medium im Wachstumsbereich. Haben die Cluster Systemgröße erreicht, ist man im Sättigungsbereich. Um den Wachstumsbereich über längere Zeiten untersuchen zu können, muß man zu größeren Systemen übergehen. Im folgenden wird eine Simulation mit $N = 79524$, $L = 500$, $\varrho = 0.25$ und $t_c = 10^{-5}$ s genauer diskutiert. In Abb. 65 sind die Energie und C/N als Funktion der Zeit dargestellt.

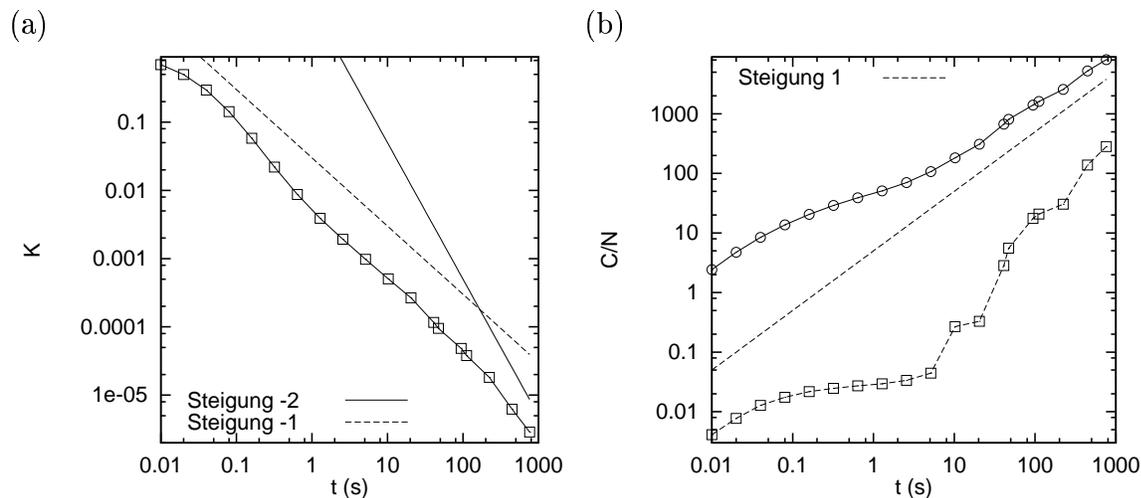


Abbildung 65: (a) K als Funktion der Zeit t für eine Simulation mit $N = 79524$, $L = 500$, $\varrho = 0.25$ und $t_c = 10^{-5}$ s. (b) C/N als Funktion von t für die Simulation aus (a). Die Kreise geben die Anzahl der durchgeführten Kollisionen an und die Quadrate geben die Anzahl der Kollisionen an, bei denen die kritische Kollisionsfrequenz überschritten wurde.

Zuerst bemerkt man, daß die Energie im gesamten Bereich langsamer als $K \propto t^{-2}$ abnimmt, wie theoretisch vorhergesagt wurde. Weiter wird deutlich, daß die Zahl

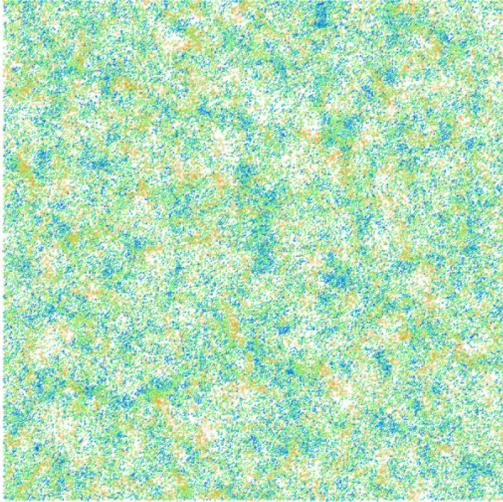
der Kollisionen pro Teilchen C/N (Kreise) zunächst linear mit t zunimmt, dann schwächer anwächst und für lange Zeiten wieder linear mit t wächst. Die Anzahl der Kollisionen, bei denen die Zeit zwischen den Stößen t_n kleiner war als t_c (Quadrate), ist immer wesentlich kleiner als C/N . Die Wahrscheinlichkeit, bei einem Stoß $t_n < t_c$ zu beobachten, ist für $t < 50$ s kleiner als 0.01 und für größere Zeiten immer noch kleiner als 0.03. Im folgenden soll untersucht werden, welcher Bereich als Wachstums- bzw. als Sättigungsbereich identifiziert werden kann.

Momentaufnahmen des Systems zu verschiedenen Zeiten sind in Abb. 66 dargestellt. Mit zunehmender kinetischer Energie im Ruhesystem werden die Teilchen blau, grün und rot eingefärbt. Dichtefluktuationen nehmen mit der Zeit zu, und die Cluster wachsen an. Bemerkenswert ist, daß ein Cluster aus Teilchen verschiedener Energien besteht. Durch den verwendeten Restitutionskoeffizienten von $\epsilon = 0.8$ sind die Kollisionen inelastisch, die Clusterbildung ist aber im Gegensatz zum Fall $\epsilon = 0$ [TH95b] reversibel, d.h. Teile eines Clusters können sich wieder voneinander lösen. Dieser Fall wird vor allem dann eintreten, wenn ein Teil des Clusters eine wesentlich andere Geschwindigkeit hat als der Massenschwerpunkt des Clusters. Ab einer Zeit von $t \approx 200$ s haben die Cluster eine Größe von mehr als $l/2$ erreicht, man befindet sich also schon im Sättigungsbereich.

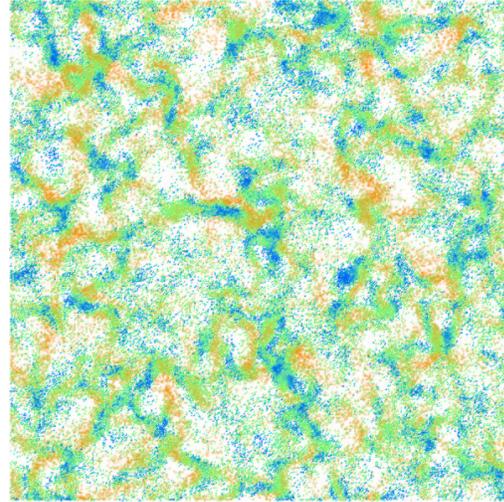
In Abb. 67 zeigt die Farbe die typische Kollisionsfrequenz f_c der Teilchen an. Mit zunehmender Frequenz werden die Teilchen blau, grün und rot eingefärbt. Die Daten stammen von der Simulation aus Abb. 66, und die Farbgebung zeigt ein Maximum der Kollisionsfrequenz im Inneren der Cluster. Teilchen, die die kritische Kollisionsfrequenz überschritten haben, sind für $t > 2.56$ s in den roten Bereichen zu finden.

Ebenfalls von derselben Simulation kann man in Abb. 68 verfolgen, wie die Teilchen anfangs diffundieren und sich später durchmischen. Dazu wurden horizontale Schichten mit zunehmender $Z = z/l$ Koordinate mit der gleichen Farbe blau, grün und rot markiert. Die Selbstdiffusion der Teilchen ist am oberen ($Z = 1$) und unteren ($Z = 0$) Rand sichtbar, da dort der stärkste Farbkontrast herrscht. Die anfangs horizontale Trennlinie zwischen Blau und Rot zerfällt und greift immer weiter ins System hinein. Bei $t \approx 40$ s sind rote und blaue Teilchen aus der Nachbarschaft dieser Grenzlinie bereits bis zur Mitte des Systems vorgedrungen. Später bilden sich innerhalb von Clustern durch Scherung dünne Streifen einer Farbe, und zuletzt kann man in kleinen Bereichen Teilchen aller drei Hauptfarben vorfinden.

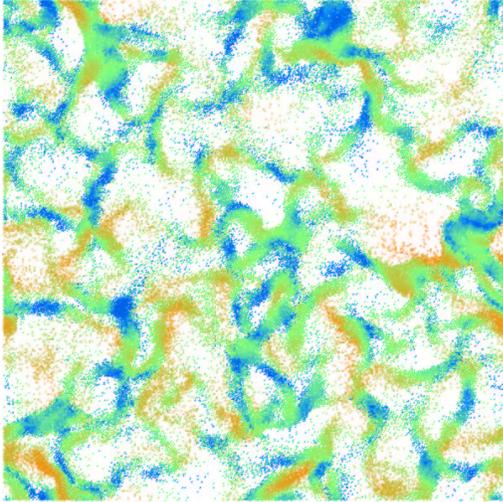
$t = 0.640 \text{ s}, C/N = 39$



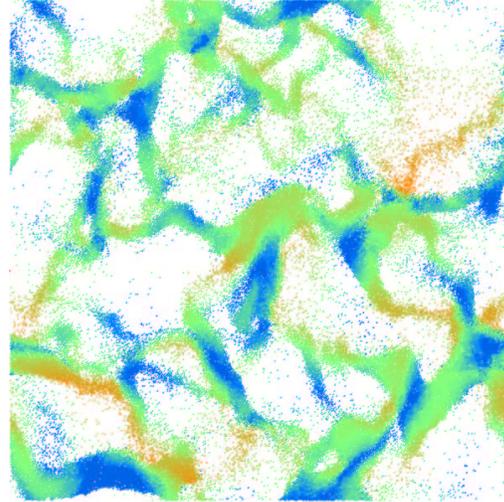
$t = 2.560 \text{ s}, C/N = 70$



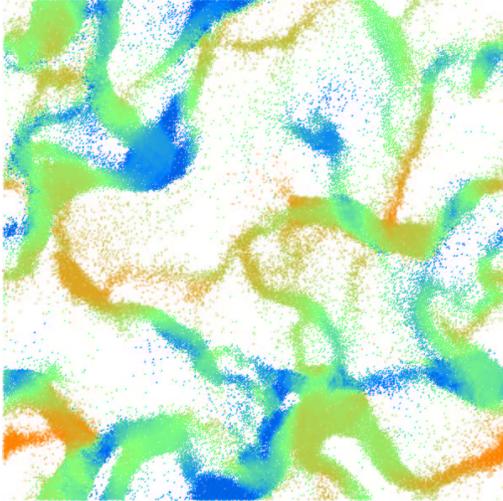
$t = 10.24 \text{ s}, C/N = 183$



$t = 40.96 \text{ s}, C/N = 670$



$t = 223.2 \text{ s}, C/N = 2567$



$t = 446.6 \text{ s}, C/N = 5258$

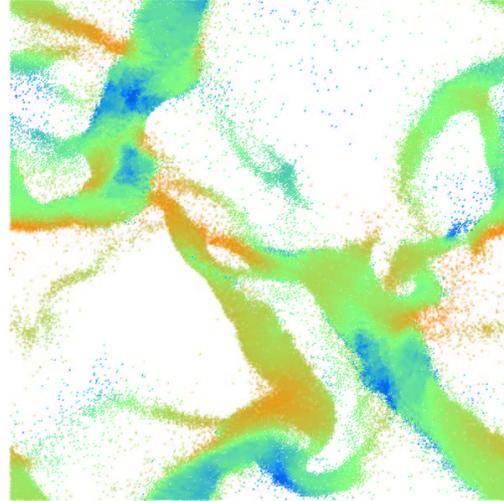
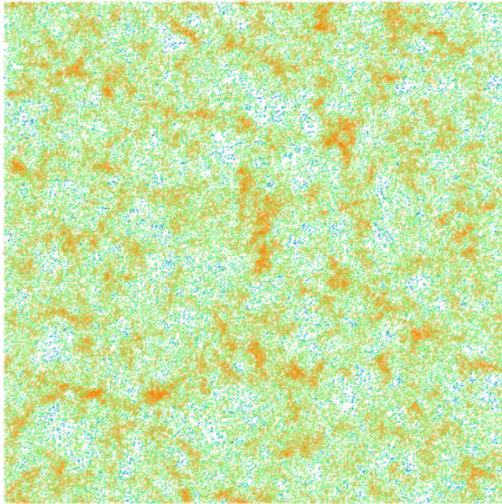
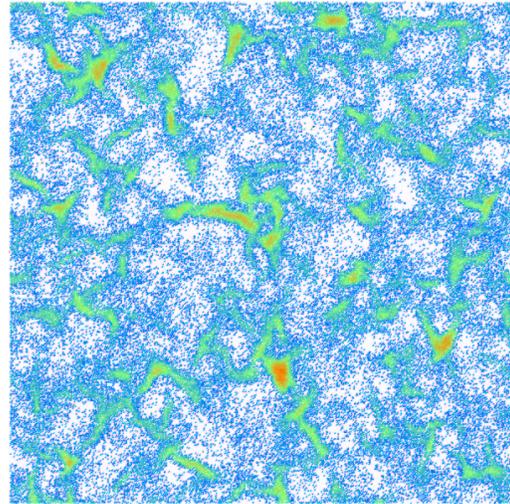


Abbildung 66: ED Simulation von $N = 79524$ Teilchen mit $L = 500$, $\varrho = 0.25$, $\epsilon = 0.8$ und $1/t_c = 10^5 \text{ s}^{-1}$. Die Energie ist mit dem Maximalwert (rot) skaliert und nimmt ab (grün) bis zu Null (blau).

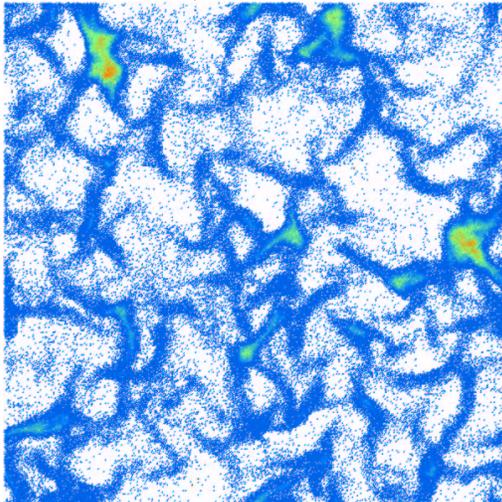
$t = 0.640 \text{ s}, C/N = 39$



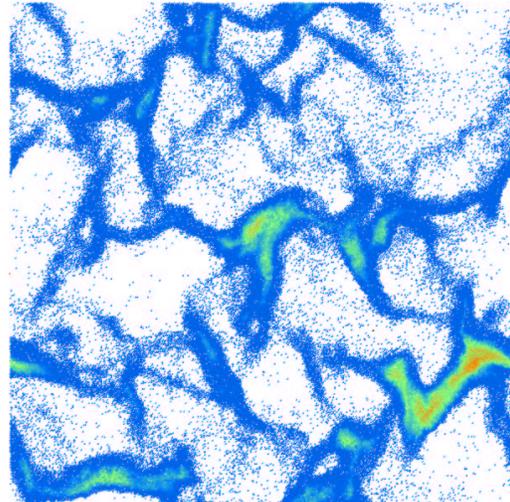
$t = 2.560 \text{ s}, C/N = 70$



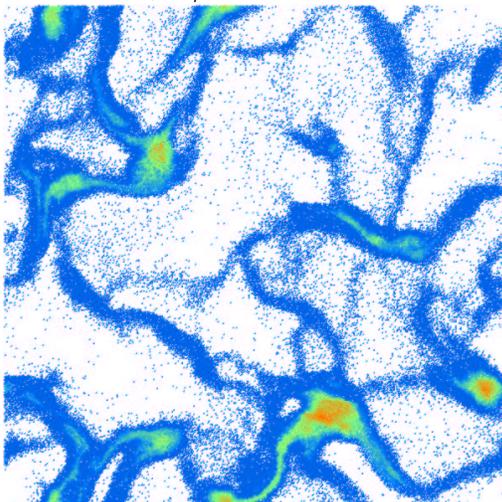
$t = 10.24 \text{ s}, C/N = 183$



$t = 40.96 \text{ s}, C/N = 670$



$t = 223.2 \text{ s}, C/N = 2567$



$t = 446.6 \text{ s}, C/N = 5258$

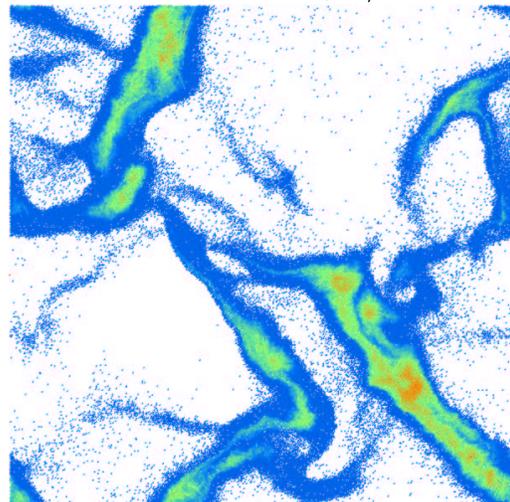
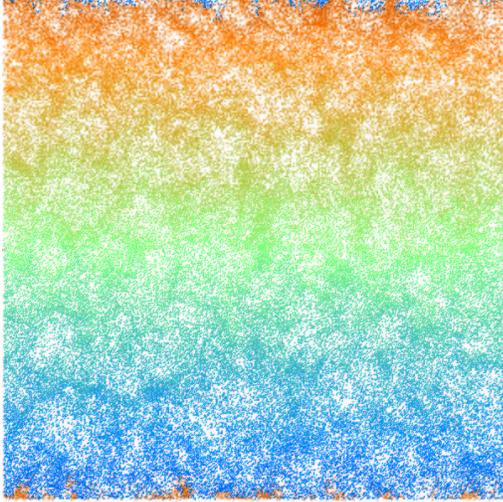
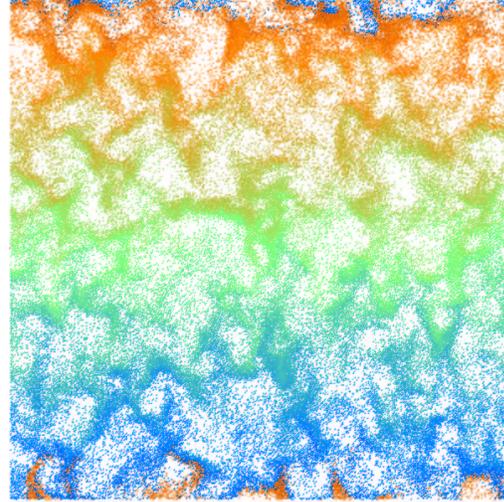


Abbildung 67: Kollisionsfrequenz der Teilchen in der Simulationen aus Abb. 66, skaliert mit dem Maximalwert (rot). Kleinere Kollisionsfrequenzen sind grün, und die niedrigsten Frequenzen sind blau.

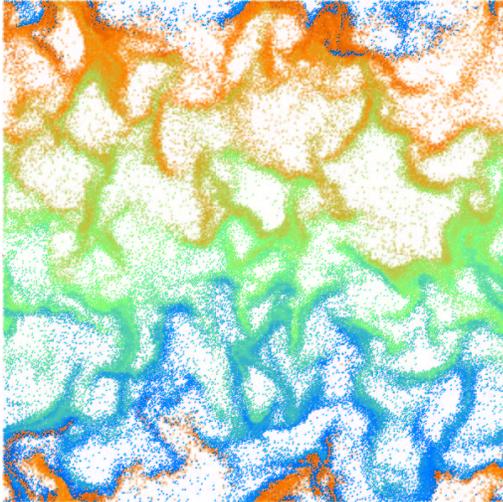
$t = 0.640 \text{ s}, C/N = 39$



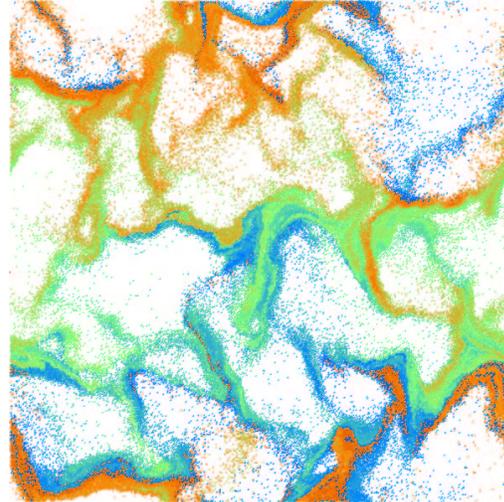
$t = 2.560 \text{ s}, C/N = 70$



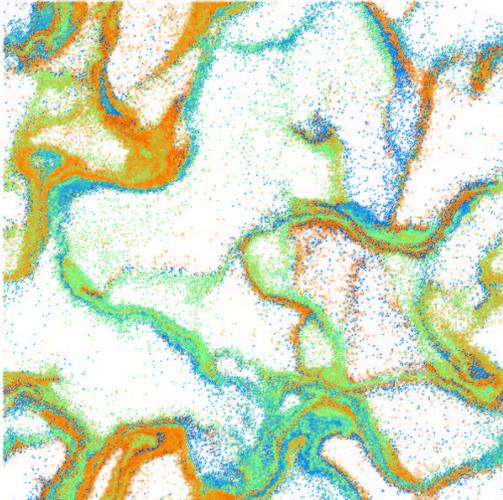
$t = 10.24 \text{ s}, C/N = 183$



$t = 40.96 \text{ s}, C/N = 670$



$t = 223.2 \text{ s}, C/N = 2567$



$t = 446.6 \text{ s}, C/N = 5258$

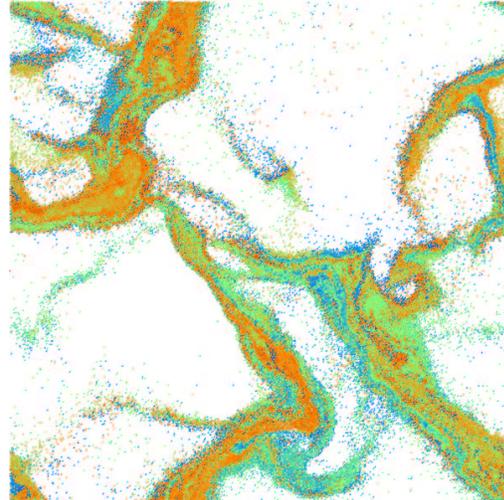


Abbildung 68: Die Teilchen der Simulation in Abb. 66 wurden anfangs in horizontalen Streifen eingefärbt um die Mischung verfolgen zu können.

14.2 Clusterwachstum

Um das Clusterwachstum quantitativ zu beschreiben wird eine Methode benutzt, die dem sog. „Burning“-Algorithmus für Perkolationsprobleme ähnlich ist. Man nimmt an, daß alle Teilchen mit Relativabstand

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \leq S_c(d_1 + d_2)/2 \quad (97)$$

zu einem Cluster gehören und muß dann jeden Cluster und die dazugehörenden Teilchen identifizieren und markieren.

Dazu sortiert man zuerst alle Teilchen in eine „Linked-Cell“ Struktur, d.h. in quadratische Zellen, die größer als $S_c(d_1 + d_2)/2$ sein müssen. Jede Zelle enthält die Nummer eines der darin enthaltenen Teilchen, und jedes davon zeigt auf ein anderes, in derselben Zelle liegendes Teilchen. Man stellt sicher, daß kein Teilchen zweimal besucht wird, und kennzeichnet das letzte in der jeweiligen Zelle besonders. Die Nachbarschaftssuche, zur Prüfung des Kriteriums in Gleichung 97, erfordert nun die Untersuchung aller Paare in benachbarten Zellen.

Am Anfang bezeichnet man jedes Teilchen i als eigenen Cluster i und untersucht alle Paare, die man in benachbarten Zellen findet, indem man folgendes Schema anwendet. Gehören die zwei zu untersuchenden Teilchen zu unterschiedlichen Clustern i_1 und i_2 prüft man ihren Abstand. Sind die zwei Teilchen nahe genug beieinander, so fügt man alle Teilchen in Cluster i_2 dem Cluster i_1 hinzu. Den Cluster i_{\max} (der letzte Cluster) wird als Cluster i_2 umbenannt und, indem man die Anzahl der Cluster i_{\max} um Eins erniedrigt, wird der frühere Cluster $i_{\max-1}$ zum letzten Cluster. Danach untersucht man das nächste Paar. Sind die beiden Teilchen zu weit voneinander entfernt oder gehören beide Teilchen bereits demselben Cluster an, so geht man sofort zum nächsten Paar über. Hat man alle benachbarten Paare untersucht, kann man die Anzahl der Cluster $I_c = i_{\max}$, die Größe des größten Clusters M_{\max} und die mittlere Clustergröße

$$\langle M \rangle = \sum_{i=1}^{I_c} M_i, \quad (98)$$

mit der Größe des i -ten Clusters M_i , leicht berechnen. Clustergröße bedeutet hier die Anzahl der Teilchen in einem Cluster. In Abb. 69 sind die so gewonnenen Informationen für die Simulation aus Abb. 66 dargestellt.

Um die Empfindlichkeit der Ergebnisse gegenüber der Wahl der kritischen Entfernung S_c zu untersuchen wurden verschiedene S_c Werte getestet. Man stellt fest, daß sich das qualitative Verhalten erst für $S_c \geq 1.4$ leicht ändert. Die Clusteranzahl in Abb. 69(a) ist anfangs groß, solange das System noch ungeordnet genug ist. Danach nimmt die Anzahl der Cluster deutlich ab ($1 \text{ s} < t < 40 \text{ s}$) und fluktuiert ab $t \approx 40 \text{ s}$ sehr stark. Im Bereich abnehmender der Clusterzahl nimmt konsequenterweise die die mittlere Clustergröße in Abb. 69(b) zu. Die eingezeichneten Geraden deuten eine Zeitabhängigkeit der Form

$$I_c \propto t^{-\mathcal{M}} \quad \text{und} \quad \langle M \rangle \propto t^{\mathcal{M}}, \quad (99)$$

wobei $\mathcal{M} \approx 0.3$ ist. Die Größe des größten Clusters in Abb. 69(c) wächst im Bereich $1 \text{ s} < t < 40 \text{ s}$ viel stärker, und wächst sogar ab $t \approx 40$ immer weiter.

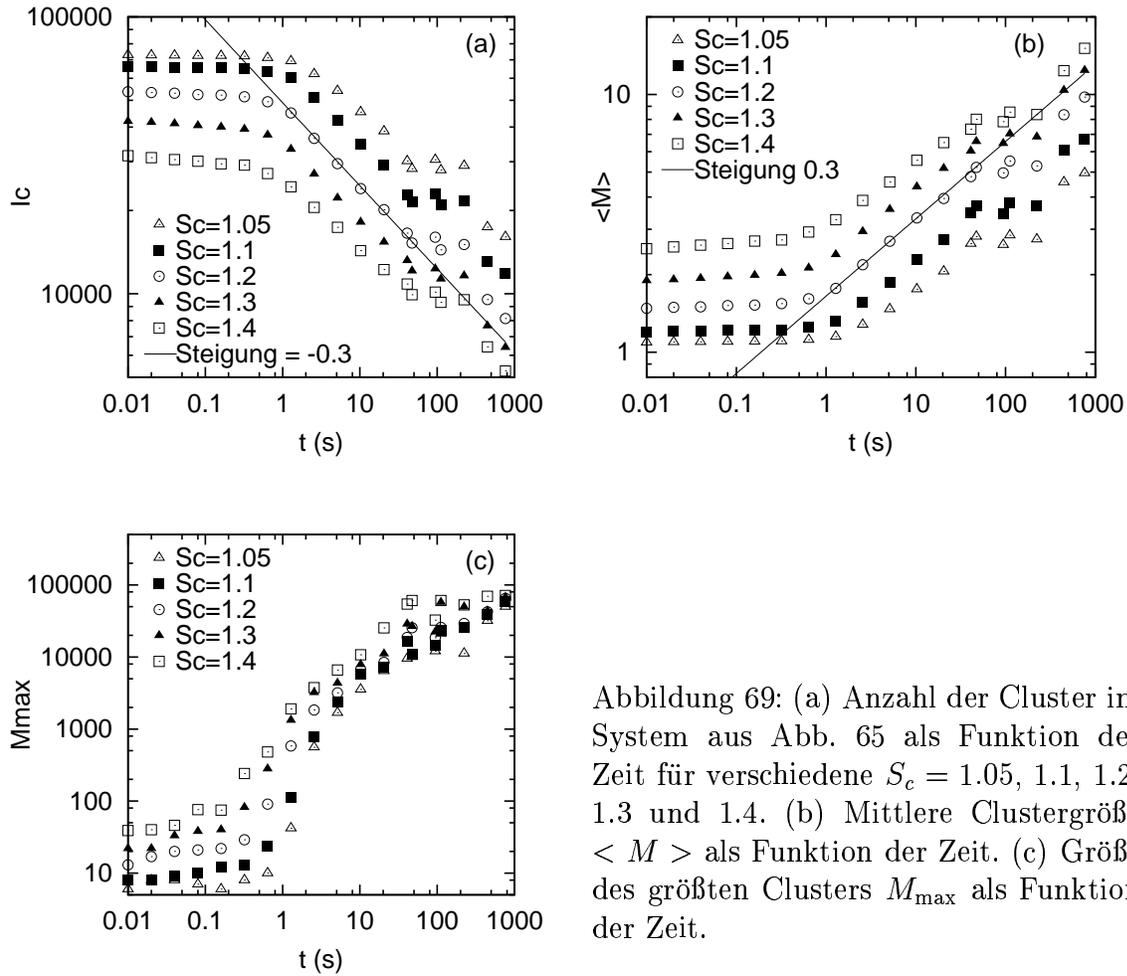


Abbildung 69: (a) Anzahl der Cluster im System aus Abb. 65 als Funktion der Zeit für verschiedene $S_c = 1.05, 1.1, 1.2, 1.3$ und 1.4 . (b) Mittlere Clustergröße $\langle M \rangle$ als Funktion der Zeit. (c) Größe des größten Clusters M_{\max} als Funktion der Zeit.

14.3 Stoßwahrscheinlichkeit und Ereignisfrequenz

Um das Systemverhalten genauer zu verstehen wird im folgenden die Wahrscheinlichkeit untersucht, Teilchen zu finden, die im letzten Zeitintervall N_c Kollisionen pro Einheitszeit durchgeführt haben. Man beachte, daß N_c nur die mittlere Kollisionsfrequenz ist und keine Aussagen über die Häufigkeit der Stöße zuläßt, die innerhalb einer Zeit t_c stattfinden, da über Intervalle gemittelt wird, die sehr viel länger als t_c sind. In Abb. 70(a) ist die normierte Wahrscheinlichkeit $P(N_c)$ für den homogenen Bereich dargestellt. Die Form von $P(N_c)$ ist für $C/N \leq 39$ gleich, nur die Stoßrate nimmt ab. Der homogenen Bereich ist durch eine relativ schmale Verteilung um einen Mittelwert gekennzeichnet.

Zur Zeit $C/N \approx 70$ beginnt der Wachstumsbereich und die Form von $P(N_c)$ ändert sich. Der Wachstumsbereich ist in Abb. 70(b) dargestellt und zeichnet sich dadurch aus, daß die Wahrscheinlichkeit zunimmt, Teilchen zu finden, die entweder sehr viele oder sehr wenige Kollisionen hatten. Die Form der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(N_c)$ ändert sich im Wachstumsbereich fast nicht. Im Sättigungsbereich, der in Abb. 70(c) dargestellt ist, nimmt die Wahrscheinlichkeit große Stoßzahlen zu finden ab, die Wahrscheinlichkeit für kleine Stoßzahlen ändert sich jedoch nicht wesentlich.

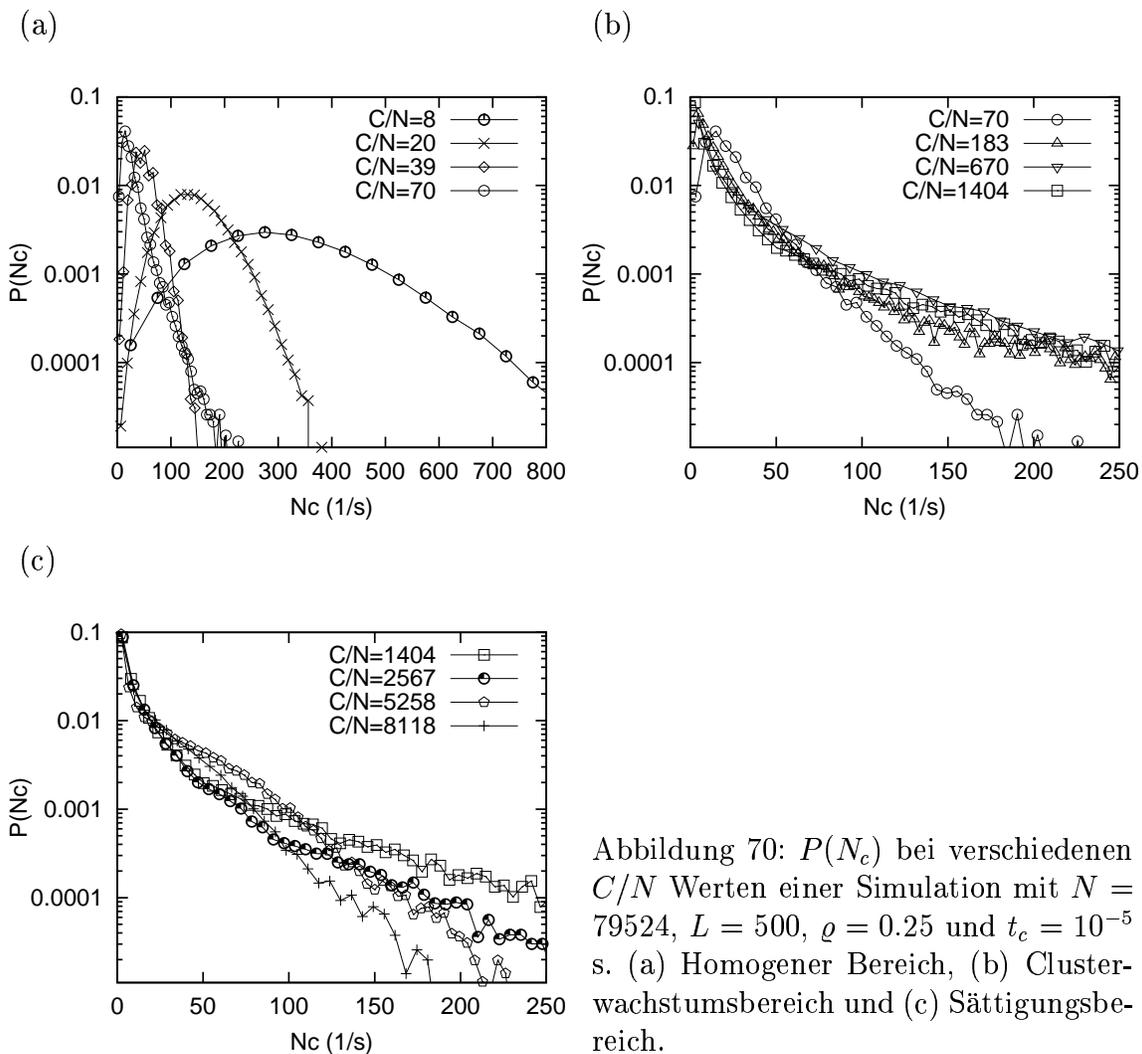


Abbildung 70: $P(N_c)$ bei verschiedenen C/N Werten einer Simulation mit $N = 79524$, $L = 500$, $\varrho = 0.25$ und $t_c = 10^{-5}$ s. (a) Homogener Bereich, (b) Clusterwachstumsbereich und (c) Sättigungsbereich.

14.4 Zusammenfassung

In einem quadratischen, zweidimensionalen System mit periodischen Rändern wurde ein granulares Medium mit vorgegebener Dichte, aber zufälliger Geschwindigkeitsverteilung beobachtet. Das gesamte System bleibt homogen, solange der Restitutionskoeffizient $\epsilon \approx 1$ ist. In diesem Bereich kann das Abkühlverhalten mit einer kinetischen Theorie vorhergesagt werden. Bei stärkerer Dissipation bildet sich eine Dichteinstabilität, die zu „Clustern“ mit stetig wachsender Masse und Größe führt. Sobald die Clustergröße in den Bereich der Systemgröße kommt, wachsen die Cluster immer langsamer und man kann, wenigstens in kleinen Systemen, ein Quasigleichgewicht finden, in dem die kinetische Energie immer weiter abnimmt, in dem die Inhomogenität jedoch nicht zunimmt.

Bei der Beobachtung einer Simulation eines großen Systems wurde festgestellt, daß in einem Cluster wenig Relativenergie gespeichert ist, d.h. benachbarte Teilchen im Cluster haben sehr ähnliche Geschwindigkeiten. Innerhalb eines Clusters kann es dennoch Bereiche mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten geben, da für $\epsilon > 0$ niemals alle Relativenergie dissipiert wird. Ein Cluster kann deshalb wieder auseinanderbre-

chen und zwei Cluster mit hoher Relativgeschwindigkeit zueinander können im Laufe der Simulation miteinander verschmelzen. Die Clusterentstehung ist reversibel, man findet aber im Mittel Clusterwachstum.

Sobald sich Cluster ausbilden verändert sich auch die Stoßstatistik. Im homogenen Bereich findet man eine selbstähnliche Wahrscheinlichkeitsverteilung der Kollisionsrate, die mit der mittleren Teilchengeschwindigkeit skaliert. Im Wachstumsbereich der Cluster stellt sich eine nicht mehr von der Zeit abhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung ein, d.h. die Kollisionsrate bleibt im Wachstumsbereich konstant. Im Sättigungsbereich nimmt die Wahrscheinlichkeit für große Kollisionsraten dann wieder ab.

Teil VI

Quasi-statische granulare Packungen

In diesem Teil werden quasi-statische granulare Medien am Beispiel von Sandhaufen untersucht. Die Entstehung und die Spannungsverteilung innerhalb eines Sandhaufens werden diskutiert.

15 Entstehung eines Sandhaufens

Läßt man von einer Punktquelle Sandkörner auf eine ebene Tischplatte fallen, so wird sich nach kurzer Zeit ein Haufen bilden, dessen Form von den Randbedingungen abhängt [Puh92, Puh93]. Auf einem kreisförmigen Tisch ein konischer, auf einem quadratischen Tisch bildet sich ein pyramidenförmiger Haufen. Nimmt man an, daß die Oberfläche des Tisches unendlich weit ausgedehnt ist, so wird sich, bedingt durch die Rotationssymmetrie der Punktquelle, ein konischer Haufen bilden, dessen Oberfläche mit der Zeit selbständig nach oben wächst. Abgesehen vom Fuß und der Spitze des Sandhaufens findet man einen konstanten Böschungswinkel. Die Form des Fusses läßt sich mit einer logarithmischen Funktion beschreiben [AH96] und die Form der Spitze hängt davon ab, von welcher Höhe man die Sandkörner fallen läßt.

Während der Sandhaufen wächst, finden immer wieder Lawinen statt, deren Häufigkeitsverteilung mit dem Konzept der Selbstorganisierten Kritizität (SOK) in Verbindung gebracht wurde [BTW87]. Die Messung der Lawinenverteilung an einem Reishaufen führte zum Ergebnis, daß Lawinen nur bei Langkornreis selbstorganisiert kritisch sind [FCMS⁺96, Lud96]. Bei der Modellierung von Sandhaufen werden häufig Gittermodelle verwendet, bei denen die lokale Steigung die Bedingung für Bewegung oder Stagnation ist. Im folgenden wird eine quasi-statische Erweiterung eines frühen Modells [BTW87] verwendet, bei der keine Lawinen vorkommen können, da stets nur ein Teilchen in Bewegung ist.

Mit diesem Modell soll neben der Entstehung eines Sandhaufens auch die Entmischung in Form von Streifenbildung (Stratifikation) untersucht werden, die vorkommt, sobald man unterschiedliche Teilchensorten verwendet [MHKS96, BdG96, MHKS97].

15.1 Ein-Teilchen-Modell für Sandhaufen

Im folgenden werden ein Zellularautomat und sein Kontinuumsrenzfall zur Beschreibung von Sandhaufen vorgestellt. Man betrachtet ein Gitter mit der Horizontalcoordinate x ($1 \leq x \leq L_{\max}$) und der Vertikalkoordinate z ($z \geq 1$). Der Sandhaufen wird durch die Oberfläche $h(x, t)$ beschrieben, wobei hier $h(1 \leq x \leq L, 0) = 0$ ist. Das Modell ist nur im quasi-statischen Grenzfall gültig, d.h. man setzt neue Teilchen in großen Zeitabständen mit Anfangsenergie e_0 auf die Anfangsposition $(x_0, h(x_0, t) + 1)$, und einmal zur Ruhe gekommene Teilchen werden nie wieder bewegt. Längen werden in Einheiten der Gitterkonstante gemessen und die Teilchenmasse sowie die Gravitationskonstante werden zu Eins gesetzt. Damit sind Energien ebenso dimensionslos wie Geschwindigkeiten und die Zeit.

Ein Teilchen an der Stelle $(x, h(x) + 1)$ mit Energie $e(x)$ kann sich entweder weiterbewegen oder liegenbleiben. Aus Symmetriegründen muß man mit gleicher Wahrscheinlichkeit Bewegung in beide Richtungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit zulassen, falls die Regeln keine Richtung festlegen. Bewegt sich ein Teilchen einmal in eine Richtung, so behält es diese Bewegungsrichtung bei bis es stehenbleibt. Nun kann es sich, sofern die Regeln das zulassen, in die andere Richtung zurückbewegen oder endgültig stehenbleiben. Da das Teilchen die lokale Steigung fühlt, nimmt man an, daß sich das Teilchen um die Entfernung Δx weiterbewegt, falls die Bedingung $e(x + \Delta x) > e_t$ erfüllt ist. Dabei ist

$$e(x + \Delta x) = e_r (e(x) - [h(x + \Delta x) - h(x)]) \quad (100)$$

die Energie, die das Teilchen an der neuen Stelle haben wird und e_t die lokale Falltiefe oder Einfangwahrscheinlichkeit. Bei jeder Bewegung entlang $h(x)$ erfährt das Teilchen eine Änderung der Energie um $-[h(x + \Delta x) - h(x)]$ und einen Energieverlust durch Dissipation, der durch die Energierestitution e_r beschrieben wird. Darf sich das Teilchen bewegen, so führt man diese Bewegung aus, ändert Energie und Koordinaten des Teilchens und wiederholt dies solange bis das Teilchen liegenbleibt. Danach bringt man das nächste Teilchen auf seine Startposition und verfährt entsprechend mit ihm.

Im Originalmodell 1 [Rim97] wird nur $\Delta x = 1$ zugelassen. Hier wird eine Erweiterung (Modell 2) diskutiert, die die Trägheit der Teilchen berücksichtigt. Wenn ein Teilchen eine hohe Energie hat, so besteht eine große Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen auch große Entfernungen zurücklegt, bevor es wieder auf die Oberfläche trifft. Aus den Bewegungsgleichungen läßt sich, mit der Geschwindigkeit v_h senkrecht zur Oberfläche und der Geschwindigkeit v_s parallel zur Oberfläche, die Sprungweite $\Delta x = (2v_h/g)[v_s + v_h \sin \theta]$ auf einer um θ geneigten Ebene berechnen. Unter der Annahme daß beide Geschwindigkeitskomponenten ungefähr gleich groß sind, ist die Schrittweite proportional zur Energie und damit ist im Modell 2 die Schrittweite

$$\Delta x = \left[\frac{e(x)}{e_t} \right]. \quad (101)$$

Diese Regel läßt beliebige $|\Delta x| > 0$ zu. Eigentlich muß in Gleichung 101 auch die lokale Steigung $h'(x)$ berücksichtigt werden, da e_t eine Funktion der lokalen Steigung ist. Zur Vereinfachung wird im folgenden lediglich der Fall $e_t = \text{const.}$ betrachtet. Bei einem weiten Sprung kann $e(x + \Delta x)$ negativ werden, falls das Teilchen eine

Steigung hinaufspringt. Um diesen unphysikalischen Fall zu vermeiden verringert man Δx solange, bis $e(x + \Delta x)$ positiv ist und das Teilchen den Sprung ausführen darf.

15.2 Kontinuumsbeschreibung

Durch Umformung von Gleichung 100 ergibt sich die Energieänderung pro Schritt

$$e(x + \Delta x) - e(x) = (e_r - 1)e(x) - e_r[h(x + \Delta x) - h(x)], \quad (102)$$

woraus sich nach Division mit $\Delta x \rightarrow 0$ die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial x}e(x) = -\mathcal{E} - e_r \frac{\partial}{\partial x}h(x) \quad (103)$$

ergibt. In Gleichung 103 ist die Funktion \mathcal{E} vom benutzten Modell abhängig. Für Modell 1 mit konstantem $\Delta x = 1$ ist $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 e(x)$, wobei die Konstante $\mathcal{E}_1 = (1 - e_r)/\Delta x$ ein Maß für den Energieverlust pro Länge Δx ist. Im erweiterten Modell 2 ergibt sich durch Kombination der Gleichungen 101 und 103 die Konstante $\mathcal{E}_2 = e_t(1 - e_r)$ unabhängig von $e(x)$. Die Differentialgleichungen, die die beiden Modelle beschreiben sind

$$\frac{\partial}{\partial x}e(x) = \begin{cases} e_r h'(x) - \mathcal{E}_1 e(x) & \text{für Modell 1} \\ e_r h'(x) - \mathcal{E}_2 & \text{für Modell 2,} \end{cases} \quad (104)$$

mit der lokalen Steigung $h'(x) = -\frac{\partial}{\partial x}h(x)$. Für sich allein betrachtet steht der Term $e_r h'(x)$ für die Beschleunigung, die das Teilchen durch die lokale Steigung $h'(x)$ erhält. Der zweite Term beschreibt für Modell 1 eine exponentiell mit der zurückgelegten Entfernung abklingende Energie und für Modell 2 eine zur zurückgelegten Entfernung proportionale Energieabnahme.

Integration von Gleichung 104, mit den Randbedingungen x_0 und $e(x_0) = e_0$, ergibt die Energie eines Teilchens, das sich am Ort x_0 startend auf einer Oberfläche $h(x)$ bewegt

$$e(x) = \begin{cases} \exp(-\mathcal{E}_1(x - x_0))[e_0 + e_r \int_{x_0}^x d\hat{x} h'(\hat{x}) \exp(\mathcal{E}_1(\hat{x} - x_0))] & \text{für Modell 1} \\ e_0 - \mathcal{E}_2(x - x_0) + e_r \int_{x_0}^x d\hat{x} h'(\hat{x}) & \text{für Modell 2.} \end{cases} \quad (105)$$

Die erste Nullstelle der Funktion $e(x) - e_t = 0$ ist der Ort x_s an dem das Teilchen stehenbleibt. Dieser Ort ist die Lösung der impliziten Gleichung

$$0 = \begin{cases} e_0 \exp(-\mathcal{E}_1(x - x_0)) - e_t + e_r \int_{x_0}^x d\hat{x} h'(\hat{x}) \exp(-\mathcal{E}_1(x - \hat{x})) & \text{für Modell 1} \\ e_0 - \mathcal{E}_2(x - x_0) - e_t + e_r [h(x) - h(x_0)] & \text{für Modell 2,} \end{cases} \quad (106)$$

die man wenigstens für einige Spezialfälle analytisch berechnen kann. Der Wert von x_s , der von der Oberfläche $h(x, t)$ zur Zeit t abhängt, ist der Ort, an dem die Oberfläche durch Stehenbleiben eines Teilchens wächst. Mit der Teilchenzufuhrtrate h^+ ergibt sich daraus eine Differentialgleichung für die zeitliche Änderung der Oberfläche

$$\frac{\partial}{\partial t}h(x, t) = h^+ \delta(x - x_s). \quad (107)$$

Mit den Gleichungen 106 und 107 ist die zeitliche Entwicklung der Oberfläche $h(x, t)$ definiert.

15.2.1 Ein Teilchen auf einer schiefen Ebene

Vom Neigungswinkel θ einer schiefen Ebene folgt $h'(x) = \tan \theta = -[h(x) - h(x_0)]/(x - x_0)$. Benutzt man unterschiedliche Winkel θ_1 und θ_2 für die beiden Modelle, folgt aus Gleichung 105

$$e(x) = \begin{cases} \frac{e_r}{\mathcal{E}_1} \tan \theta_1 [1 - \exp(-\mathcal{E}_1(x - x_0))] + e_0 \exp(-\mathcal{E}_1(x - x_0)) & \text{für Modell 1} \\ e_0 + (e_r \tan \theta_2 - \mathcal{E}_2)(x - x_0) & \text{für Modell 2.} \end{cases} \quad (108)$$

Im Grenzfall großer x ergibt sich für Modell 1 die Energie $e_1(x \rightarrow \infty) = \frac{e_r}{\mathcal{E}_1} \tan \theta_1$. Die Energie eines Teilchens erreicht auf der schiefen Ebene einen endlichen, positiven Wert, und bei stärkerer Neigung der Ebene stellt sich eine höhere Energie ein. Damit das Teilchen nicht stehenbleibt, muß $e_1 > e_t$ sein, d.h. $\tan \theta_1^\infty > e_t \mathcal{E}_1 / e_r$. Modell 1 beschreibt somit die Bewegung eines Körpers auf der schiefen Ebene, der durch eine viskose Kraft gebremst wird.

Für Modell 2 muß man verschiedene Möglichkeiten berücksichtigen, d.h.

$$e_2(x \rightarrow \infty) = \begin{cases} \infty & \text{für } \tan \theta_2 > \\ e_0 & \text{für } \tan \theta_2 = \\ 0 & \text{für } \tan \theta_2 < \end{cases} \frac{\mathcal{E}_2}{e_r}. \quad (109)$$

Es gibt also nur einen Winkel $\theta_2^\infty = \mathcal{E}_2 / e_r$, bei dem Bewegung mit konstanter Energie möglich ist. Ist der Winkel θ_2 flacher als θ_2^∞ , so wird das Teilchen bis zum Stillstand abgebremst, ist der Winkel steiler, so wird das Teilchen beschleunigt. Modell 2 beschreibt damit einen Körper auf einer schiefen Ebene, dessen Bewegung durch Coulombsche Reibung mit $\mu = \tan \theta_2^\infty$ abgebremst wird.

Der Ort, an dem ein Teilchen zur Ruhe kommt, ergibt sich aus den Gleichungen 106 und 108 als

$$x_s = \begin{cases} x_0 + \frac{1}{\mathcal{E}_1} \ln \frac{e_0 \mathcal{E}_1 - e_r \tan \theta_1}{e_t \mathcal{E}_1 - e_r \tan \theta_1} & \text{für Modell 1} \\ x_0 + \frac{e_0 - e_t}{\mathcal{E}_2 - e_r \tan \theta_2} & \text{für Modell 2.} \end{cases} \quad (110)$$

Für Modell 1 muß das Argument des Logarithmus größer als Eins sein, damit das Teilchen nicht sofort stehen bleibt, d.h. die Regeln $e_0 > e_t$ und $e_t \mathcal{E}_1 > e_r \tan \theta_1^+$ müssen erfüllt sein. Die Voraussetzung $x_s > x_0$ kann alternativ erfüllt werden, indem man Zähler und Nenner negativ werden läßt, was den Regeln $e_0 < e_t$ und $e_0 \mathcal{E}_1 < e_r \tan \theta_1^-$ entspricht. Für Modell 2 gelten analog die Regeln $e_0 > e_t$ und $\mathcal{E}_2 > e_r \tan \theta_2^+$. Mit negativem Zähler und Nenner lauten diese aber $e_0 < e_t$ und $\mathcal{E}_2 < e_r \tan \theta_2^-$.

Setzt man \mathcal{E}_1 , $\Delta x = 1$ und \mathcal{E}_2 in die Regeln ein, ergibt sich für große Anfangsenergie $e_0 > e_t$ die Regel $\tan \theta_1^+ = \tan \theta_2^+ < e_t(1 - e_r)/e_r$ unabhängig vom Modell. Bei großer Anfangsenergie muß der Neigungswinkel einer Ebene unter einem kritischen Wert liegen, sonst kommt das Teilchen nicht zur Ruhe. Beginnt man mit kleiner Anfangsenergie $e_0 < e_t$ sind die Bedingungen $\tan \theta_1^- > e_0(1 - e_r)/e_r$ für Modell 1 und $\tan \theta_2^- > e_t(1 - e_r)/e_r$ für Modell 2. Damit ist für Modell 2 genau ein kritischer Winkel definiert, da $\theta_2^+ = \theta_2^-$ ist. Für Modell 1 ist $\theta_1^- < \theta_1^+$, und damit ist ein Bereich von stabilen Winkeln möglich, dessen Breite von der Anfangsenergie abhängt.

In der Tat findet man bei der Erzeugung eines Sandhaufens mit Modell 1 verschiedene Winkel für unterschiedlich breite Anfangsenergieverteilungen [Rim97], während mit Modell 2 einen Winkel erhält, der kaum von der Anfangsenergie abhängt.

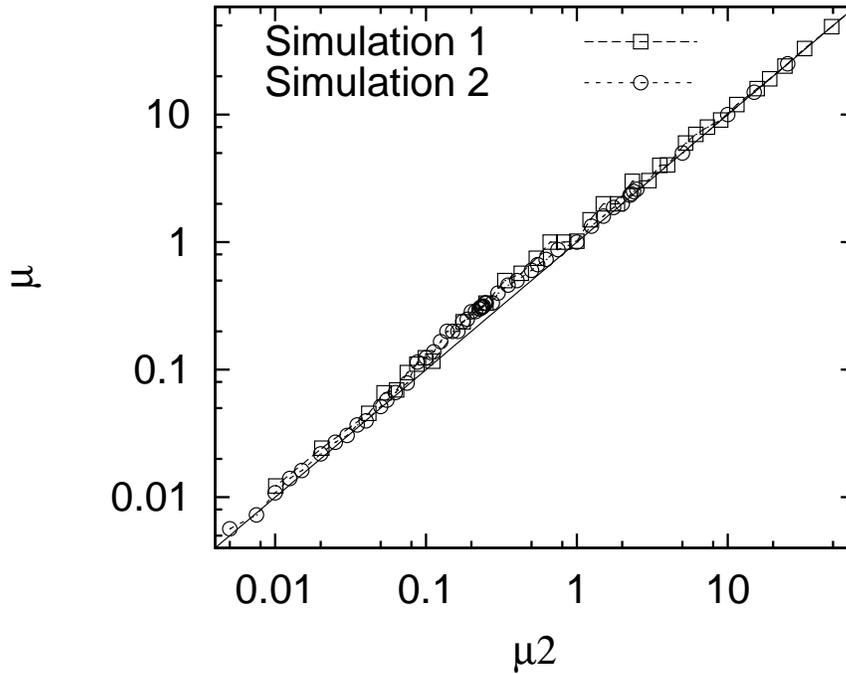


Abbildung 71: Der Böschungswinkel $\mu = \tan \theta_2$ aus Simulationen mit Modell 2 als Funktion der theoretischen Vorhersage $\mu_2 = ((1/e_r) - 1)e_t$ für $e_t = 1$ mit verschiedenen e_r (Simulation 1) und für $e_r = 0.8$ mit verschiedenen e_t (Simulation 2).

15.2.2 Selbstähnliches Oberflächenwachstum

Im Fall steter Teilchenzufuhr wird sich nach einiger Zeit ein bestimmtes Profil $h(x, t)$ ausbilden, wobei die Steigung, bis auf die Randbereiche, nicht mehr von der Zeit abhängt, d.h. $h'(x, t) = h'(x, t + \Delta t)$. Dies ist nur möglich, wenn das Teilchen an jeder Stelle x_s mit gleicher Wahrscheinlichkeit liegenbleiben kann, sich also mit minimaler und konstanter Energie $e(x) = e_t$ die Oberfläche entlang bewegt.

Die Forderung konstanter Energie bei einem Sprung entlang der Oberfläche, d.h. $e(x + \Delta x) - e(x) = 0$ ist für Modell 1 bei konstantem Böschungswinkel für große x automatisch erfüllt, so daß aus Gleichung 108 die Beziehung $e_0(1 - e_r)/e_r < \tan \theta_1 < e_t(1 - e_r)/e_r$ folgt. Ebenso folgt für Modell 2 die Beziehung $\tan \theta_2 = e_t(1 - e_r)/e_r$. In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse nur für das neue Modell 2 vorgestellt, da Simulationsergebnisse zu Modell 1 an anderer Stelle ausführlich diskutiert werden [Rim97].

In Abb. 71 ist der Tangens des Böschungswinkels als Funktion der theoretischen Vorhersage $\mu_2 = e_t(1 - e_r)/e_r$ für verschiedene e_r mit $e_t = 1$ (Quadrate) und für verschiedene e_t mit $e_r = 0.8$ dargestellt. Man erkennt, bis auf Abweichungen durch das bei den Simulationen verwendete diskrete Gitter, eine hervorragende Übereinstimmung von Theorie und Simulation.

15.2.3 Simulationsergebnisse für verschiedene Teilchensorten

Um verschiedene Teilchensorten zu modellieren, gibt man jedem Teilchen bei seiner Entstehung seine Eigenschaften und behält diese solange bei, bis das Teilchen liegenbleibt. Das Verhältnis der zwei Teilchenarten ist hier $p_{12} = p_1/p_2 = 1$, und die Teilchen erscheinen unkorreliert.

In Abb. 72 ist die Lage der Teilchen der Sorte 1 mit $e_r(1) = 0.8$ und $e_t(1) = 1$ mit schwarzen Punkten gekennzeichnet. Die Teilchen der Sorte 2 mit $e_t(1) = 1$ und verschiedenen $e_r(2)$ sind in den weißen Bereichen im Sandhaufen zu finden. Mit zunehmendem Unterschied zwischen $e_r(1)$ und $e_r(2)$ trennen sich die beiden Teilchensorten immer stärker.

15.3 Zusammenfassung

Aus dem hier vorgestellte Ein-Teilchen-Modell für langsame Schüttungen konnte eine Kontinuumstheorie für die zeitliche Entwicklung der Oberfläche eines Sandhaufens abgeleitet werden. Die Meßgröße Böschungswinkel ist eine Funktion der im Modell vorkommenden Materialparameter. Indem man zwei verschiedene Materialparameter zuläßt, kann man den Effekt der Streifenbildung (Stratifikation) beobachten. Bei zwei Teilchenarten genügt im erweiterten Modell 2 schon ein kleiner Unterschied der Materialparameter um Separation zu erzeugen. Ist der Unterschied zu klein mischen sich die Teilchen, ist der Unterschied zu groß, so findet man Streifen parallel zum Böschungswinkel oder totale Separation. Die Teilchen mit dem größeren e_r laufen weiter nach unten und haben einen flacheren Böschungswinkel.

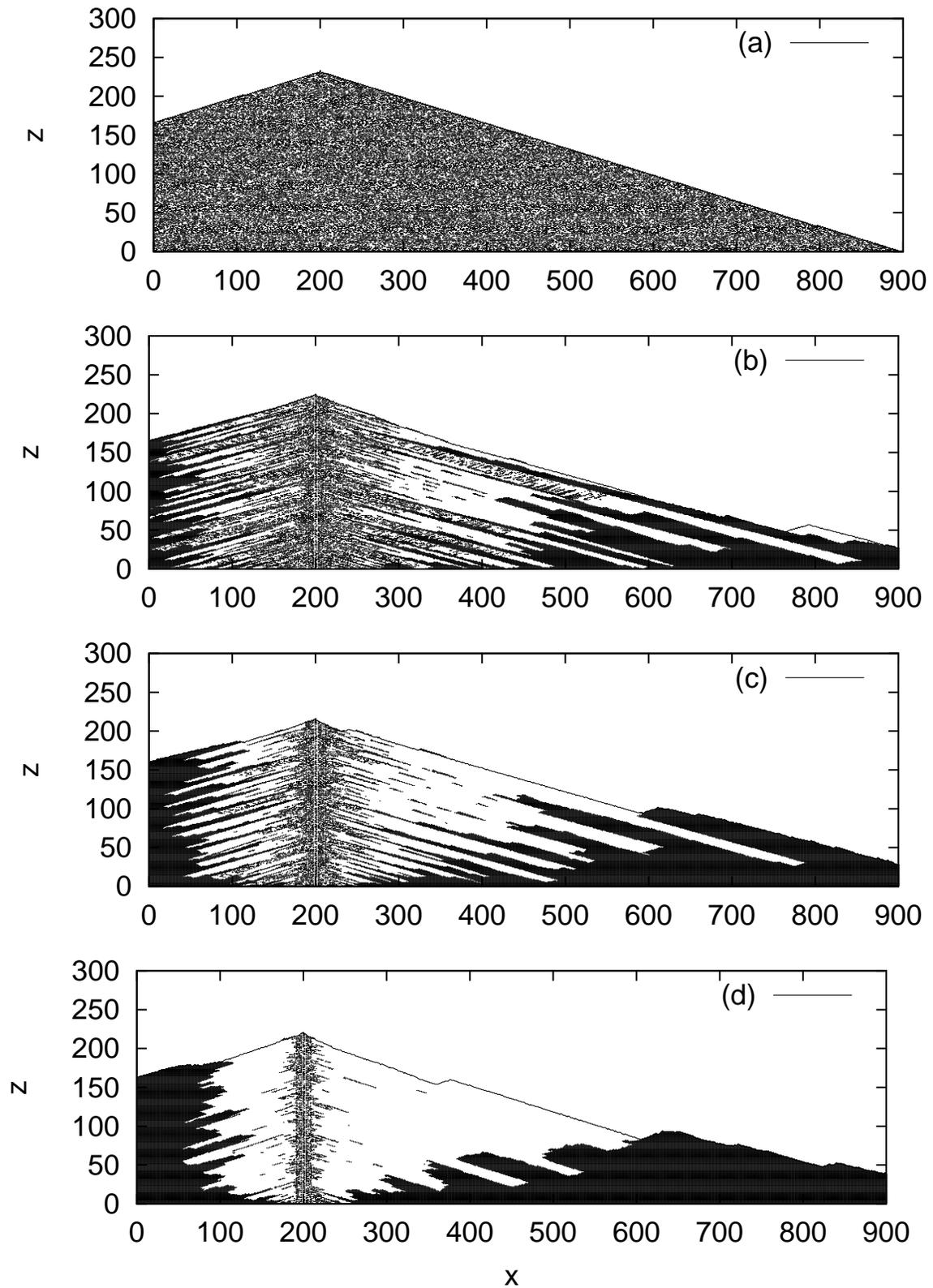


Abbildung 72: Entmischung zweier Teilchensorten mit $e_t = 1$, $p_{12} = 1$, $e_r(1) = 0.8$ und (a) $e_r(2) = 0.795$, (b) $e_r(2) = 0.790$, (c) $e_r(2) = 0.780$, (d) $e_r(2) = 0.760$. Die Füllung erfolgt an der Stelle $x_0 = 200$.

16 Kraftverteilung in Sandhaufen

Eines der wesentlichsten Unterscheidungsmerkmale zwischen granularen Medien und Flüssigkeiten ist der Druckanstieg im Material innerhalb eines tiefen Behälters, wie z.B. einem Silo mit vertikalen Wänden. In einer Flüssigkeit nimmt der Druck mit der Tiefe linear zu, d.h. der Druck ist proportional zum Gewicht der Flüssigkeitssäule über dem Ort der Messung. In einem Granulat steigt der Druck am Anfang ebenfalls mit der Tiefe, nähert sich dann aber einem Maximalwert [Jan95]. Dies kommt von der Reibung zwischen Material und Wänden: Im Material bilden sich Bogen oder Brücken, die einen Teil des Materialgewichts zu den Wänden umleiten, wo das Gewicht durch die Reibung von den Wänden übernommen werden kann. Unterhalb einer bestimmten Tiefe im Material halten sich das hinzukommende Materialgewicht und die von den Wänden getragenen Kräfte das Gleichgewicht, die Spannung steigt nicht weiter an. In Sandhaufen, wo man außer dem Boden keine weiteren Wände hat, muß natürlich der Boden das Gesamtgewicht tragen. Dennoch ist die Kraftverteilung im Sandhaufen keineswegs homogen oder intuitiv vorherzusagen. Experimente an meterhohen Häufungen von granularen Medien zeigen, daß unter dem Maximum des Haufens nicht etwa auch ein Maximum der gemessenen Vertikalspannung zu finden ist [TB80, SN81]. Dieses Phänomen wird als „dip“ in der Spannung am Boden eines Sandhaufens bezeichnet und kann wenigstens intuitiv auf Bogenbildung zurückgeführt werden. Ebenso wie in einem Behälter werden Kräfte durch bogenartige Strukturen nach außen geleitet. Auf einer viel kleineren Skala wird außerdem eine viel stärkere Änderung der Kräfte festgestellt: Von Korn zu Korn kann die Kontaktspannung um einige Größenordnungen variieren, und die Wahrscheinlichkeitsverteilung nimmt für große Kräfte exponentiell ab [LNS⁺95, RJMR96, OR97, Lud97a].

Als einfachster Modell-Sandhaufen wurden harte Scheiben auf einem Diamantgitter so angeordnet, daß jedes Teilchen innerhalb des dreieckigen Haufens vier nächste Nachbarn hat [LCH92, Hon93]. Im Gegensatz zu den Experimenten zeigt ein solches System eine konstante Spannung unter dem Maximum des Haufens. Periodisch eingefügte Fehlstellen änderten nichts an der analytischen Lösbarkeit des Modells, führten aber ebenfalls nicht zum „dip“ [Hun93]. Nur die Größenänderung eines Teils der Teilchen oder die Einführung attraktiver Kräfte führt zu einer variierenden Normalspannung unter der Spitze des Haufens [LCH94]. Kontinuumsansätze [EO89b, BCC95, EM96, WCCB96, WCC97] können zum experimentell gemessenen Verhalten führen, wenn die konstitutiven Gleichungen, die zur Lösung der Gleichgewichtsbedingung benötigt werden, geeignet gewählt werden. Edwards [EO89b] schlug eine dachziegelartige geometrische innere Struktur innerhalb des Haufens vor, durch die die Kräfte automatisch nach außen geleitet werden. Die Schwäche dieses Modells ist, daß die Gleichgewichtsbedingungen senkrecht zu den „Kraftlinien“ nicht erfüllt sind. Wittmer et al. bauten dieses vereinfachte Modell weiter aus, um die Gleichgewichtsbedingungen immer zu erfüllen, und verglichen verschiedene gebräuchliche konstitutive Gesetze mit ihrem Modell der festen Hauptspannungsrichtungen („Fixed Principal Axis“ FPA) [WCCB96, WCC97]. Mit diesem Modell konnte eine überzeugende Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erzielt werden. Als al-

alternativer Ansatz ist noch ein Gittermodell zu nennen, womit ebenfalls ein „dip“ gefunden wurde [HHR97], das das zufällige Öffnen von Kontakten beinhaltet, ohne die Gleichgewichtsbedingungen zu verletzen.

In diesem Kapitel werden quasi-statische Modellsysteme untersucht. Von Interesse ist dabei die Spannungsverteilung in geordneten und ungeordneten Anordnungen diskreter Teilchen. Mit dem einfachsten Modell kugelförmiger Teilchen in zwei Dimensionen werden verschiedene frühere theoretische und numerische Resultate vereinheitlicht. Es zeigt sich, daß dafür nicht einmal Reibung erforderlich ist. Lediglich das Kontaktnetzwerk bestimmt die Kraftverteilung und genügt für ein breites Spektrum an Effekten. Es wird untersucht, wie sich verschiedene Randbedingungen, das Wegnehmen von Teilchen und kleine Größenänderungen auf das Kraftnetzwerk auswirken. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten sehr starker Kräfte nimmt exponentiell ab und stimmt damit mit anderen numerischen und theoretischen Ansätzen überein. Weiterhin wird eine qualitative Beziehung zwischen den Hauptspannungen und der Form des lokalen Kontaktnetzwerks hergestellt.

16.1 Das quasi-statische Modell

Die elementaren Objekte in einem Granulat sind Teilchen mit endlicher Ausdehnung und damit abstoßenden Kontaktkräften. Neben diesem elementaren Volumenausschluß sind anziehende Wechselwirkungen und Reibung wirksam, die jedoch im folgenden zunächst vernachlässigt werden sollen. Da die abstoßenden Kräfte nur bei Kontakt wirken, muß das Kontaktnetzwerk und damit die Anordnung der geschlossenen Kontakte bestimmt werden. Dies geschieht durch Relaxation von einer Anfangsbedingung in der Nähe der vermuteten Lösung. Um die Relaxation herbeizuführen, wird neben den linearen Kontaktkräften auch lineare Dämpfung verwendet. Im Gegensatz zu früheren Untersuchungen [LCH92, Hon93, Hun93] wird das Kontaktnetzwerk nicht festgehalten. Abhängig von den Randbedingungen, von Fehlstellen oder von einer Polydispersität der Korngröße können sich das Kontaktnetzwerk und die Spannungen an Kontakten verändern. Es soll verstanden werden, wie die Bogenbildung mit der Struktur des Kontaktnetzwerks zusammenhängt.

Diese mögliche Änderung des Kontaktnetzwerks, und damit der elastischen Eigenschaften des Materials, ist der wesentliche Unterschied zu Kontinuumsansätzen oder Gittermodellen, bei denen solche Änderungen nicht möglich sind.

16.1.1 Anfangs- und Randbedingungen

Das Modellsystem besteht aus N runden Teilchen mit den Durchmessern d_i ($i = 1, \dots, N$). Falls nicht besonders spezifiziert, sind in diesem Kapitel alle Teilchen alle gleich groß $d_i = d_0 = 1.5$ mm. Es werden Behälter mit verschiedenen Randbedingungen und Größen betrachtet. Um Sandhaufen unterschiedlicher Steigung 60° oder 30° zu modellieren, werden die N Teilchen auf ein Dreiecksgitter gesetzt, wobei die unterste Reihe $M = 0$ aus L Teilchen besteht. Die Systembreite ist damit $l = Ld_0$. Jede weitere Reihe M besteht dann aus $L_M^{(60)} = L - M$ oder $L_M^{(30)} = L - 3M$ Teilchen. Die Gesamtanzahl der Teilchen ist $N^{(60)} = H^{(60)}(L + 1)/2$ oder $N^{(30)} = H^{(30)}(L - 3(H^{(30)} - 1)/2)$, wobei die Anzahl der Schichten $H^{(60)} = L$ oder $H^{(30)} = \text{int}[(L - 1)/3] + 1$ ist. Der größte hier benutzte Haufen besteht mit $L = 100$

aus $N^{(30)} = 1717$ Teilchen. Die Anfangsgeschwindigkeiten und Überlappungen werden gleich Null gesetzt, und die Gravitation wird langsam bis zum gewünschten Wert erhöht. Dann wird das System solange relaxiert, bis die kinetische Energie viele Größenordnungen kleiner ist als die potentielle Energie und sich die Spannungszustände nicht mehr wesentlich ändern. Als Randbedingung gibt es zwei Möglichkeiten: Die Teilchen in Reihe $M = 0$ können festgehalten werden, womit der Haufen stabil bleibt und die ersten beweglichen Teilchen in Reihe $M = 1$ zu finden sind. Alternativ werden die Teilchen in Reihe $M = 0$ in einen Behälter exakt eingepaßt, womit sie sich durch elastische Verformungen noch leicht verschieben können. Die erste Konfiguration entspricht in Grenzen einem rauhen, die zweite Konfiguration einem perfekt glatten Boden. Eine schematische Zeichnung der damit möglichen vier Konfigurationen ist in Abb. 73(a) zu sehen. Im Laufe der Simulation können sich bei monodispersen Teilchen nur wenige Kontakte öffnen, ohne daß die Struktur ihre Stabilität verliert. In Abb. 73(b) sind die vier möglichen Kontaktnetzwerk-Elemente dargestellt.

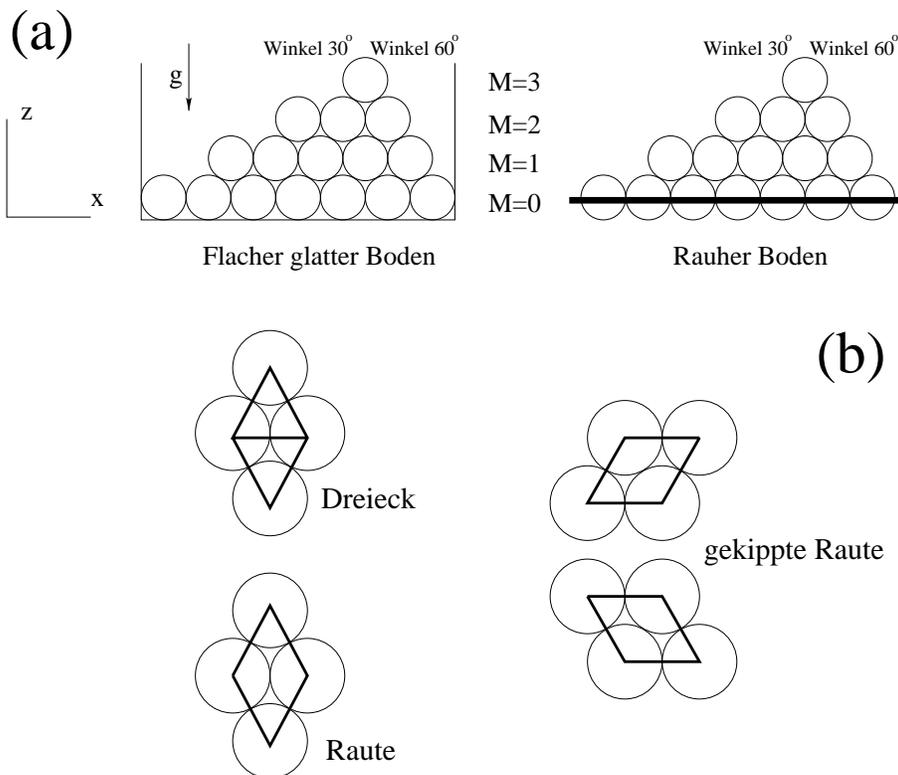


Abbildung 73: (a) Modell-Sandhaufen mit $L_0 = 7$ in einem Behälter mit glattem, flachem Boden (links) oder rauhem, aus Teilchen bestehendem Boden (rechts). Die dicke horizontale Linie soll andeuten, daß die Teilchen in der Reihe $M = 0$ fixiert sind, womit sich die erste relevante Reihe als $M = 1$ mit $L_1 = 5$ ergibt. (b) Schematische Darstellung der typischen Kontaktnetzwerk-Konfigurationen.

16.1.2 Lösungsverfahren

Zum Erreichen des Kräftegleichgewichts wird die Molekulardynamik Methode (MD) verwendet, die in Abschnitt 18 genauer beschrieben ist. Dieses Verfahren erzielt bei weitem nicht die schnellste Konvergenz, erlaubt aber äußerst einfach das Öffnen und Schließen von Kontakten. Solange nicht explizit angegeben, wird in diesem Kapitel das lineare Feder-Dämpfer-Kraftgesetz aus Abschnitt 3.5.1 verwendet.

16.2 Rauher Boden

Im oben eingeführten Modellsystem entspricht die Randbedingung mit festgehaltenen Teilchen dem Grenzfall sehr rauher Oberflächen.

16.2.1 Vergleich verschiedener Böschungswinkel

Die erste zu untersuchende Konfiguration ist ein homogener Sandhaufen mit unterschiedlichen Steigungen [Hon93, LCH94, Lud97a]. Mit $L_1 = 20$ Teilchen in Reihe $M = 1$ wird ein 60° Haufen erzeugt, wobei die $L_0 = 21$ Teilchen in der untersten Reihe mit dem Abstand d_0 fixiert sind. Diese Teilchen haben keine horizontalen Kontakte, so daß das Kontaktnetzwerk die symmetrische Rautenform hat, wie sie auch für analytische Berechnungen benutzt wurde [Hon93, LCH94]. Ebenso wie die analytischen Resultate ergibt die Simulation eine konstante Normalspannung am Boden. In Abb. 74(a) sind die Komponenten des dimensionslosen Spannungstensors $S(1)$ (Abschnitt 4.2) gegen die dimensionslose Horizontalkoordinate $X = x/l$ aufgetragen.

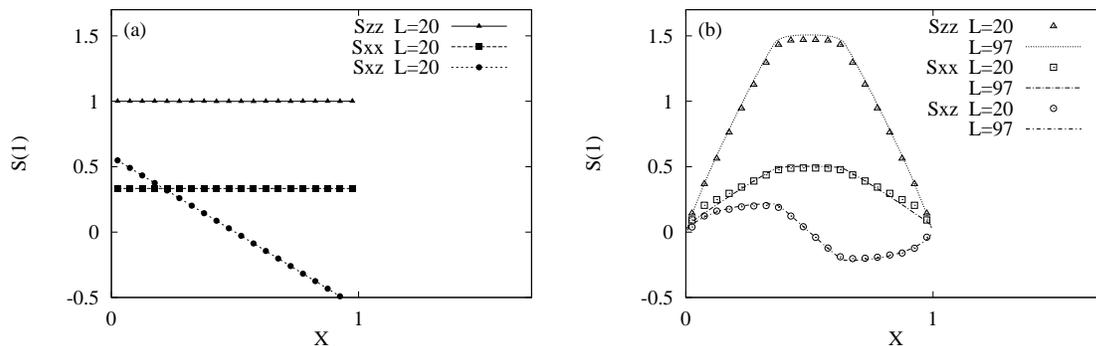


Abbildung 74: Komponenten des dimensionslosen Spannungstensors $S(1)$ in Reihe $M = 1$ als Funktion der Horizontalkoordinate $X = x/l$. Die Teilchen in Reihe $M = 0$ sind fixiert, und die Steigungen sind 60° mit $L_1 = 20$ (a) und 30° mit $L_1 = 20$ oder $L_1 = 97$ (b).

Die Vertikal- und Horizontalkomponenten sind konstant, während die Scherspannung von außen nach innen abnimmt. Die Vertikalkomponente ist durch die in Abschnitt 4.2 eingeführte Skalierung konstant $S_{zz} = 1$. Der Spannungstensor $S(1)$ für 30° -Haufen mit $L_1 = 20$ oder $L_1 = 97$ ist in Abb. 74(b) dargestellt. Im Gegensatz zum 60° -Haufen sind die Diagonalelemente des Spannungstensors nur im mittleren Bereich konstant und fallen zu den Seiten hin ab. Dies stimmt mit analogen Simulationen [LCH94] insofern überein, als durch die Materialverformbarkeit nur schwache

Unstetigkeiten des Spannungsgradienten auftreten. Eine analytische Berechnung, die auf „harten“ Teilchen basiert, zeigt schärfere Übergänge zwischen den drei Bereichen [LCH94].

Aus Abb. 74 zeigt sich, daß das Modell mit elastischen, weichen Teilchen in der Lage ist, analytische Vorhersagen zu den Kräften in einem Sandhaufen zu reproduzieren [Hon93, LCH94]. $S_{zz} = 1$ entspricht der konstanten Normalspannung am Boden $\sigma_{zz} = mg/l$, woraus sich die Kraft, die jedes einzelne Teilchen in der untersten Reihe ausübt, berechnen läßt $f_z = d_0\sigma_{zz} = mg/L$. Dazu wurde verwendet $l = Ld_0$ und $m = L(L + 1)m_0/2$ mit der Masse eines Teilchens m_0 . Damit ist $f_z = (L + 1)m_0g/2$ in Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen (Gleichung 42 in [LCH94]).

16.2.2 Änderung der Systembreite

In diesem Abschnitt soll genauer untersucht werden, warum die leichten Unterschiede zwischen Theorie und Simulation auftreten. Die unmittelbare Antwort ist der Unterschied im Modell, d.h. der Unterschied zwischen „harten“ und „weichen“ Teilchen. Der eigentliche Grund für die Abweichungen ist die Änderung des Kontaktnetzwerks bei unterschiedlicher Teilchensteifigkeit bzw. unterschiedlichen Randbedingungen.

Die Theorie basiert auf einem perfekten Diamantgitter, sowohl für den 30°- als auch für den 60°-Haufen. Im folgenden werden anhand eines 30°-Haufens mit $L_1 = 19$ das Kontaktnetzwerk und der Spannungszustand innerhalb des granularen Materials genauer untersucht.

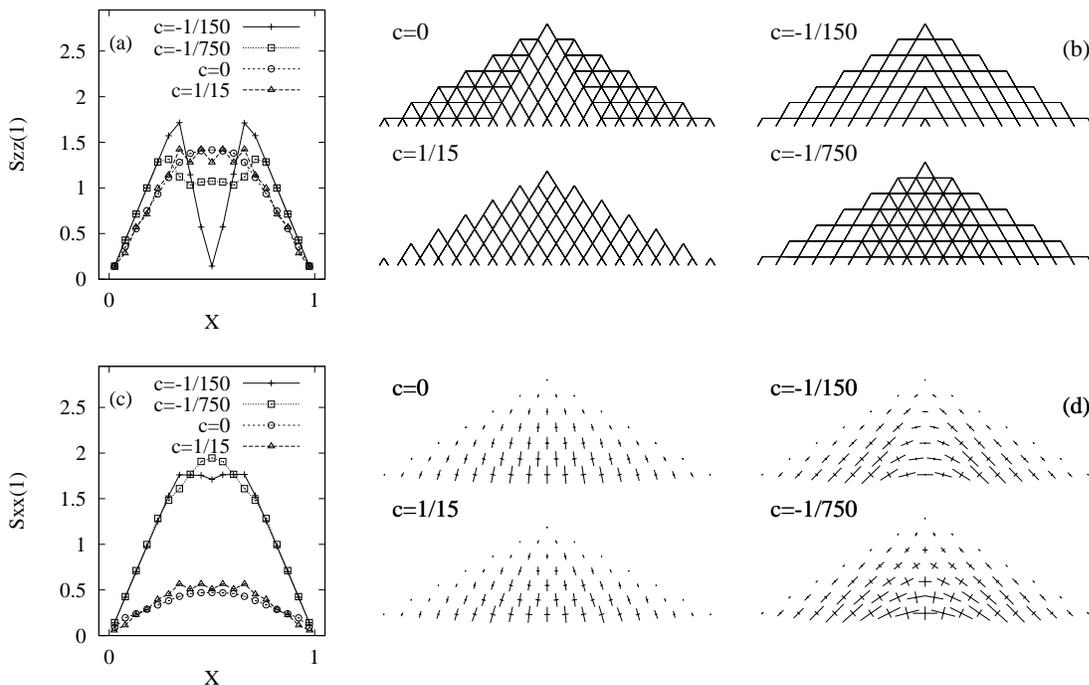


Abbildung 75: (a) Vertikalspannung $S_{zz}(1)$ in Reihe $M = 1$ für einen 30° Haufen mit rauhem Boden und $L_1 = 19$. Die Teilchen in Reihe $M = 0$ sind im Abstand $d_0(1 + c)$ fixiert, d.h. sie sind zusammengedrückt ($c < 0$) oder auseinandergezogen ($c > 0$). (b) Das Kontaktnetzwerk für die Systeme aus (a). (c) Horizontalspannung $S_{xx}(1)$ für die Simulationen aus (a). (d) Hauptspannungsdarstellung des Spannungszustands.

Zur Veränderung der Systembreite wird lediglich der Abstand zwischen den Zentren der Teilchen in Reihe $M = 0$ variiert. Die Teilchen sind im Abstand $d_0(1 + c)$ fixiert, und es werden $c = 1/15, 0, -1/750$ und $-1/150$ verwendet. In Abb. 75(a) und (c) sind die Vertikal- und Horizontalkomponenten des Spannungstensors $S(1)$ für die verschiedenen c Werte gezeigt, und in Abb. 75(b) und (d) sind das Kontaktnetzwerk und die Hauptspannungen dargestellt.

Das interessante Resultat ist, daß die Vertikalspannung in Abb. 75(a) ein Minimum im Zentrum des Haufens hat, falls c negativ ist, d.h. wenn der Boden zusammengedrückt ist [LCH94]. In diesem Fall ist die Horizontalspannung in Abb. 75(c) wesentlich höher als für $c \geq 0$. Aus Abb. 75(b) ist ersichtlich, daß die Annahme eines homogenen Rauten-Gitters nur für $c = 1/15$ erfüllt ist. In allen anderen Fällen treten auch andere Elementarzellen auf. Im Fall $c = 1/15$ hat die Vertikalspannung ein Zick-Zack-Muster, das von der Diskretisierung des Sandhaufens kommt. Diese Schwankungen nehmen mit zunehmender Systemgröße ab. Beim anfangs benutzten $c = 0$ und auch bei $c = -1/750$ wechseln sich Bereiche mit der Koordinationszahl 4 und 6 ab, während im Fall $c = -1/150$ hauptsächlich die Koordinationszahl 4 vorkommt. Die Koordinationszahl gibt die Anzahl der Kontakte eines Teilchens an, sagt aber nichts über die Orientierung des Kontaktnetzwerks aus. Im Fall des stark zusammengedrückten Bodens $c = -1/150$ besteht das Kontaktnetzwerk hauptsächlich aus Rauten. Im Gegensatz zu dem Netzwerk für $c = 1/15$ sind die Rauten allerdings nach außen gekippt. Der Unterschied zwischen verschiedenen Randbedingungen ist in der Hauptspannungsdarstellung in Abb. 75(d) noch deutlicher zu sehen. Für negative c Werte findet man eine Bogenstruktur, d.h. die Vertikalspannung wird nach außen abgeleitet. Offensichtlich ist ein gekipptes Rauten-Gitter mit der Bogenstruktur korreliert.

In Abb. 76(a) ist für die Simulationen aus Abb. 75 der Winkel $\phi(1)$ dargestellt (Gleichung 76), um den die größere Hauptachse des Spannungstensors von der Horizontalen gegen den Uhrzeigersinn gedreht ist.

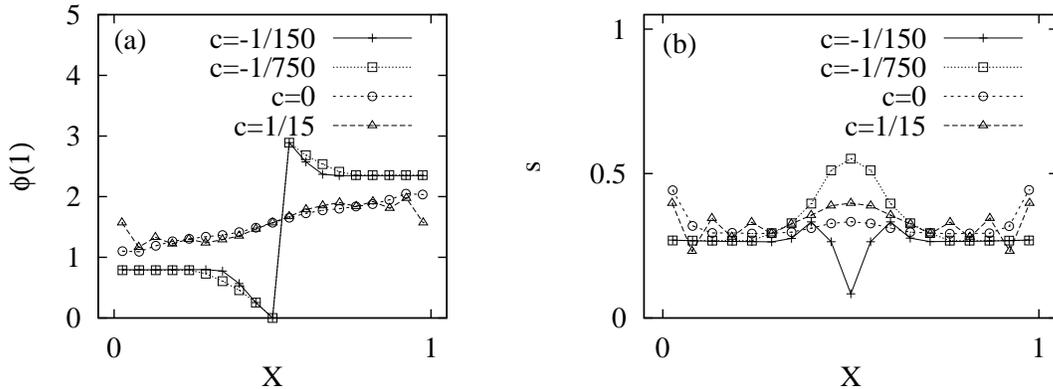


Abbildung 76: (a) Die Orientierung der größeren Hauptachse $\phi(1)$ in Reihe $M = 1$ von den Simulationen in Fig. 75. (b) Das Verhältnis der Eigenwerte $s = S_{\min}/S_{\max}$ von den Simulationen in (a).

Der Winkel im Außenbereich ist für $c < 0$ nahezu konstant, was konsistent zu der „fixed principal axis“ (FPA) Theorie ist [WCCB96, WCC97]. Im zentralen Übergangsbereich ist FPA ebensowenig gültig wie für positive c Werte. Bogenbildung,

gekippte Rauten-Gitter und die FPA-Hypothese sind korreliert. In Abb. 76(b) ist das Verhältnis der Hauptspannungen $s = S_{\min}/S_{\max}$ aufgetragen. Im Außenbereich ist $s \approx 1/3$ konstant, während es im zentralen Bereich stark von c abhängt. Von einem detaillierten Vergleich von Kontaktnetzwerk und dem Verhältnis der Eigenwerte s lassen sich noch weitere Tatsachen ableiten. Das Verhältnis der Hauptachsen scheint entscheidend dafür zu sein, ob ein Dreiecks- oder ein Rautengitter vorliegt. Bei starker Abweichung von $s = 1$ findet man Rauten-Gitter. Die Orientierung des Gitters ist mit der Orientierung der Hauptachsen des Spannungstensors korreliert, die Raute ist entlang der größeren Hauptachse in Richtung $\phi(1)$ orientiert. Ist $\phi(1)$ groß genug, so findet man gekippte Rauten.

16.2.3 Entfernung von Teilchen

In diesem Abschnitt wird vom Haufen aus Abb. 74(a), d.h. 60° mit $L_1 = 20$, ein Teilchen entfernt. Genauer gesagt werden in unterschiedlichen Simulationen jeweils das dritte, fünfte und siebte Teilchen in der siebten Reihe entfernt. Diese Teilchen werden dementsprechend mit $R = 3, 5, 7$ und $M = 7$ gekennzeichnet. Nachdem das Teilchen entfernt wurde, wird der Haufen relaxiert, und man betrachtet den neuen Gleichgewichtszustand. In Abb. 77(a) ist wieder die Vertikalspannung in Reihe $M = 1$ aufgetragen. Die in Abb. 74(a) konstante Spannung am Boden (durchgezogene Linie) ist gestört und nimmt unter den Fehlstellen bei $X = 0.55, 0.65$ und 0.75 ab. Interessanterweise ist die Spannung minimal, wenn man von den Fehlstellen entlang von Linien parallel zum Kontaktnetzwerk nach unten geht. Diese Linien sind im Falle des 60° -Haufens parallel zu den Oberflächen des Haufens. Von diesem Ort findet nach außen zum nächsten Gitterplatz ein Sprung der Spannung bis zum Maxialwert statt. Wird ein Teilchen in der Mitte des Haufens entfernt, ist das Spannungsmuster beinahe symmetrisch. Entfernt man ein Teilchen in der Nähe der Oberfläche, so ist auch die Spannung am Boden nicht mehr symmetrisch zum Zentrum $X = 0.5$.

Wird ein Teilchen aus dem Modell-Sandhaufen entfernt, so kann es nicht mehr zur Übertragung von Spannungen zu seinen unteren Nachbarn beitragen. Dieser Überschub muß um das fehlende Teilchen herum nach außen geleitet werden. Dies führt zu einer Verringerung der Spannung unter dem Teilchen und zu einer Erhöhung weit außerhalb der Position der Fehlstelle. Um diese Aussagen noch weiter zu verdeutlichen, sind in Abb. 77(b) die Vertikalspannungen in einem Haufen in verschiedenen Reihen $M = 1, 4, 7, 10$ und 13 aufgetragen. Die Spannungen nehmen mit zunehmender Höhe im Haufen ab, da das über der jeweiligen Reihe liegende Gewicht abnimmt. Auch innerhalb des Haufens findet man Spannungsminima, wenn man von der Fehlstelle dem Böschungswinkel folgend nach unten geht. Durch die asymmetrische Verformung des Sandhaufens stellt man auch oberhalb der Fehlstelle eine asymmetrische Spannung fest.

In Abb. 77(c) ist das Kontaktnetzwerk im Falle $R = 7, M = 7$ dargestellt. Im Gegensatz zum ungestörten System zeigt das Kontaktnetzwerk um die Fehlstelle herum mehrere Horizontalkontakte. Die Hauptspannungen in Abb. 77(d) zeigen außerdem die bogenähnliche Struktur, entlang der das Gewicht von oberhalb der Fehlstelle nach außen geleitet wird. Ebenso ist sichtbar, daß unter der Fehlstelle die Spannung stark abgenommen hat. In diesem Bereich reduzierter Spannungen ist außerdem die Orientierung der größeren Hauptachse beinahe vertikal.

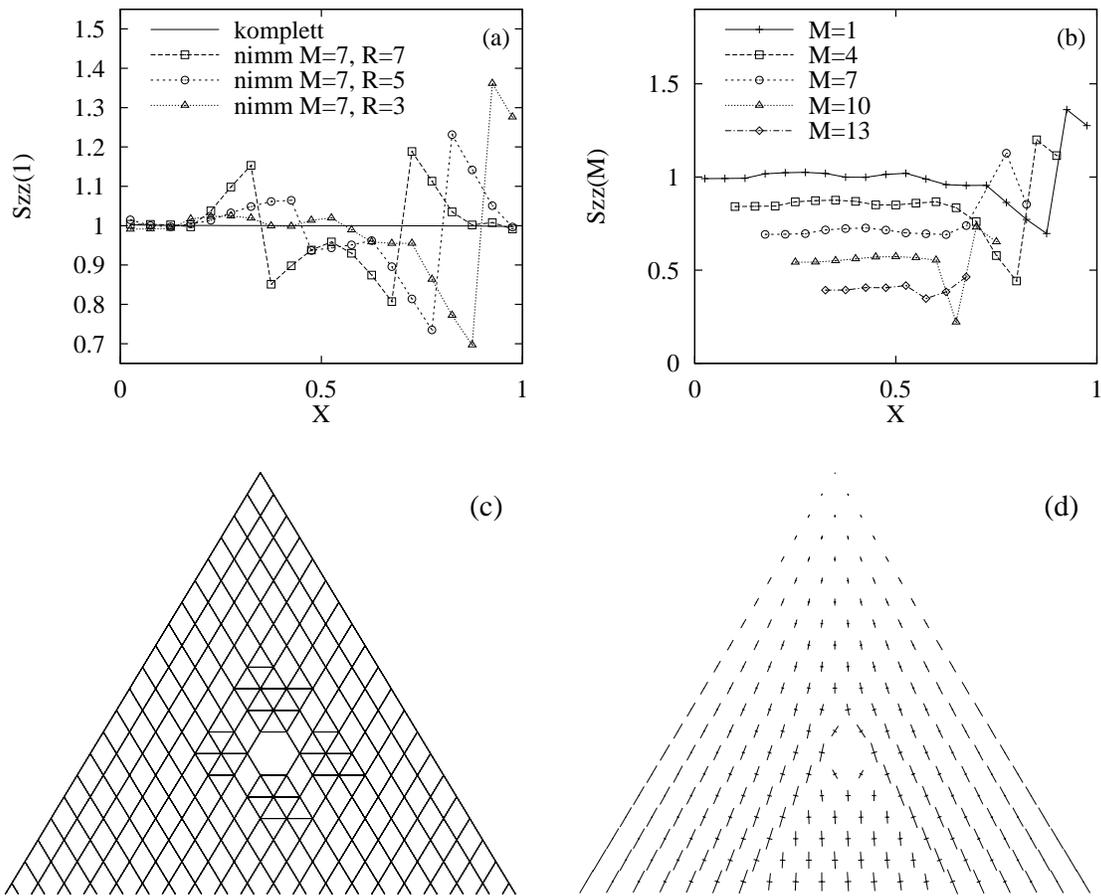


Abbildung 77: (a) Vertikalspannung $S_{zz}(1)$ in Reihe $M = 1$ unter einem 60° -Haufen mit $L_1 = 20$ (durchgezogene Linie). $S_{zz}(1)$ ist für verschiedene Simulationen gezeigt bei denen jeweils Teilchen $R = 7, 5, 3$ in Reihe $M = 7$ entfernt wurde. R wird von rechts außen nach innen gezählt. (b) Vertikalspannung $S_{zz}(M)$ in verschiedenen Reihen $M = 1, 4, 7, 10$, und 13 im Haufen, von dem Teilchen $R = 3, M = 7$ entfernt wurde. Man beachte, daß in Reihe $M = 7$ ein Symbol fehlt (Kreise). (c) Kontaktnetzwerk in dem Haufen, von dem Teilchen $R = 7, M = 7$ entfernt wurde. (d) Hauptspannungen von derselben Konfiguration wie in (c).

Die Entfernung eines Teilchens aus der homogenen Struktur des granularen Materials hat unmittelbar eine Verringerung der Spannung unterhalb der Fehlstelle entlang der inneren Struktur des Haufens zur Folge. Es kann sich eine bogenartige Geometrie bilden, die den gesamten Bereich unterhalb der Fehlstelle abschirmt. Man beachte, daß dieses Resultat nicht notwendigerweise der Modellvorstellung von Masse-Punktquellen widerspricht [WCCB96, WCC97]. Die Modellvorstellung geht von kleinen Störungen aus, die sich nur entlang von „Strahlen“ ausbreiten, während im obigen Fall ein ganzes Teilchen vom Haufen entfernt wurde, was eine wesentliche Störung der Struktur zur Folge hatte.

16.3 Flacher und glatter Boden

In diesem Abschnitt wird die Randbedingung untersucht, die starke horizontale Verformungen der untersten Schicht zuläßt. Solche Ränder entsprechen einem perfekt glatten Boden, und das System ist mangels Reibung nur dann stabil, wenn wenigstens die äußersten Teilchen horizontal fixiert sind.

16.3.1 Vergleich von Haufen mit unterschiedlicher Steigung

Im Fall des perfekt glatten Bodens können sich die Teilchen in der untersten Schicht ungehindert in horizontaler Richtung bewegen. Um den Haufen zu stabilisieren, werden die beiden äußersten Teilchen durch vertikale Wände festgehalten. In Abb. 78(a) sind Simulationsergebnisse von 60° -Haufen mit $L_0 = 20$ und $L_0 = 40$ dargestellt.

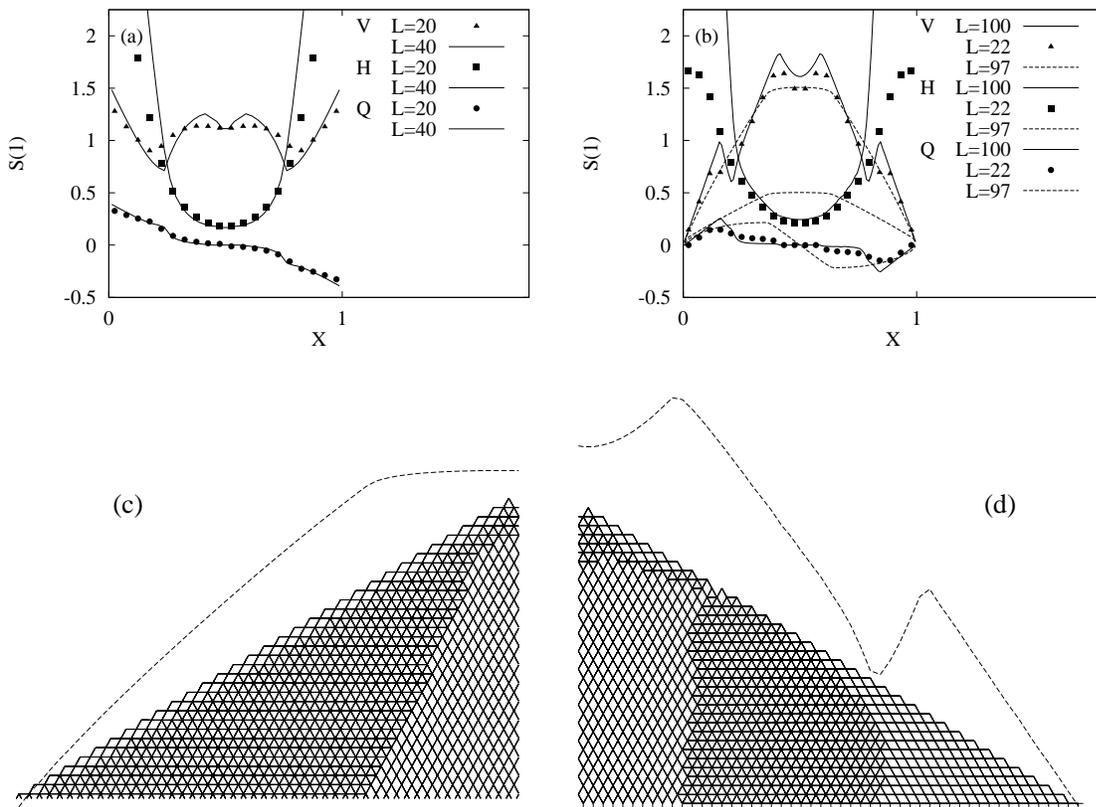


Abbildung 78: Komponenten des dimensionslosen Spannungstensors $S(0)$ in Reihe $M = 0$ als Funktion der Horizontalen $X = x/l$. Die Teilchen in Reihe $M = 0$ sind beweglich, und die Steigungen sind 60° mit $L_0 = 20$ oder $L_0 = 40$ (a) bzw. 30° mit $L_0 = 22$, $L_0 = 100$ oder $L_1 = 97$ (b). Die Kurve $L_1 = 97$ stammt von der Simulation aus Abb. 74(b). Kontaktnetzwerke der linken Hälfte eines Haufens mit rauhem Boden $L_1 = 97$ (c) oder mit glattem Boden $L_0 = 100$ (d). Die gestrichelte Kurve in (c) und (d) zeigt die entsprechende Vertikalspannung an.

Die Vertikalkomponente des Spannungstensors $S_{zz}(0)$ ist nicht konstant wie im Fall des rauhen Bodens. Die Horizontalkomponente $S_{xx}(0)$ nimmt nach außen hin drastisch zu: Die Vertikalspannungen werden in Reihe $M = 0$ in die horizontale Richtung umgeleitet, da sie wegen mangelnder Reibung nicht vom Boden aufgenommen

werden können. Für $L_0 = 40$ findet man ein relativ kleines Spannungsminimum im Zentrum des Haufens $X = 0.5$.

In Abb. 78(b) werden Ergebnisse aus Abb. 74(b), d.h. $L_1 = 97$ mit 30° -Haufen der Breiten $L_0 = 22$ und $L_0 = 100$ verglichen. An den Hängen der Haufen stellt man Sprünge fest, und in der Mitte findet man wieder ein schwaches Minimum. Betrachtet man die Kontaktnetzwerke in den Abbildungen 78(c) und (d) für einen Haufen mit rauhem Boden (c) und einen Haufen mit glattem Boden (d), so stellt man fest, daß Änderungen der Vertikalspannung mit einer Änderung der Struktur des Kontaktnetzwerks korreliert sind. In Abb. 78(c) findet man ein Kontaktnetzwerk ähnlich zu dem Haufen in Abb. 75(b) für $c = 0$. Im Zentrum des Haufens findet man Rauten, im Außenbereich Dreiecke, d.h. im Außenbereich sind die Horizontalkontakte geschlossen. In Abb. 78(d) bemerkt man eine größere Vielfalt der Strukturen. Im Zentrum sind Rauten, weiter außen Dreiecke und in einem breiten Außenbereich findet man gekippte Rauten.

16.3.2 Änderung der Systembreite

Um die Systembreite zu variieren, ändert man die Durchmesser $d_1 = d_L = (1 + c)d_0$ der beiden äußersten Teilchen in der untersten Reihe $M = 0$. Alle anderen Teilchen behalten ihren Durchmesser d_0 . In Abb. 79 sind die Vertikalspannungen $S_{zz}(0)$, $S_{zz}(2)$ und $S_{zz}(4)$ in einem 30° -Haufen der Breite $L_0 = 22$ dargestellt. Das kleine relative Minimum in der Mitte des Haufens verschwindet bereits für kleine c Werte. Mit abnehmenden c Werten findet man weiterhin den „dip“, und bei zu starker Abnahme von c kann die Spannungsverteilung durch Versetzungen asymmetrisch werden ($c = -2/15$).

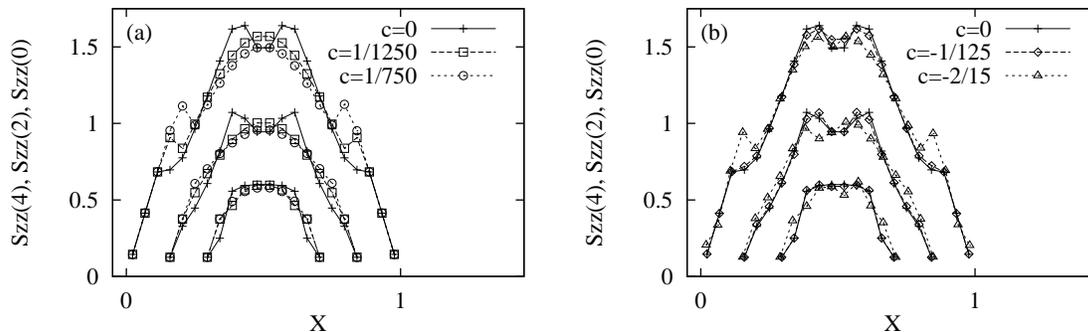


Abbildung 79: Vertikalspannungen $S_{zz}(0)$, $S_{zz}(2)$, $S_{zz}(4)$ in den Reihen $M = 0, 2$ und 4 für einen 30° -Haufen mit glattem Boden der Breite $L = 22$. Die Bewegung der beiden äußersten Teilchen ist durch die vertikalen Wände begrenzt, und der Durchmesser dieser Teilchen ist $d_1 = d_L = (1 + c)d_0$. (a) Große Randteilchen $c > 1$, d.h. Abnahme der Systembreite und (b) kleine Randteilchen $c < 1$, d.h. Zunahme der Systembreite.

16.4 Zufällige, kleine Änderung der Teilchengröße

Ausgehend von einem 30° -Haufen mit rauhem Boden, siehe Abb. 74(b), wird in diesem Abschnitt der Durchmesser eines jeden Teilchens zufällig um ein Verhältnis r

geändert. Der neue Radius ist $d_i = d_0(1 + r_i)$ und r_i ist eine für jedes Teilchen gezogene, im Intervall $[-r/2, r/2]$ gleichverteilte Zufallszahl. Die Vertikalspannungen $S_{zz}(1)$ sind in Abb. 80 für Simulationen mit $r = 2/3000$ (a), $2/300$ (b) und $1/30$ (c) dargestellt.

Das Ergebnis einer Realisierung (durchgezogene Linie) ist mit dem Fall gleich großer Teilchen (gestrichelte Linie) und der Mittelung über 40 (a) bzw. 100 (b,c) Realisierungen verglichen. Die Fluktuationen der Spannung am Boden des Haufens wachsen mit zunehmendem r an. Diese Fluktuationen nehmen sogar bis auf ein Mehrfaches der Spannungen im homogenen Fall zu. Die Form des gemittelten Spannungsprofils ändert sich mit zunehmendem r von einem Maximum, siehe $r = 2/3000$, zu einem Minimum unterschiedlicher Ausprägung, siehe $r = 2/300$ und $r = 1/30$. Die gemittelte Spannung in Abb. 80(c) gleicht der Spannung, die man nach vielen Mittelungen von einem Zellularautomaten-Modell erhält [HHR97]. Das Wesentliche an dem Zellularautomaten ist, daß Kontakte geöffnet werden können, d.h. daß das Gitter nicht fest vorgegeben ist.

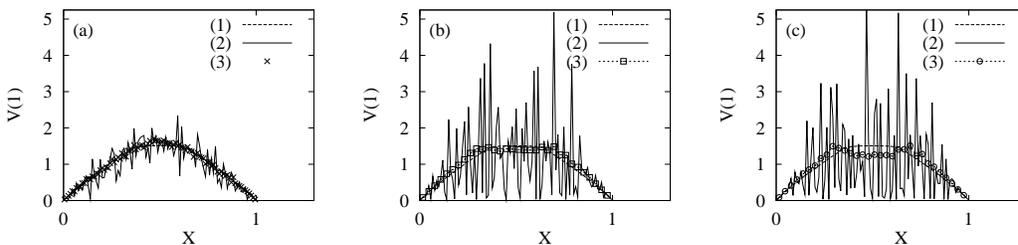


Abbildung 80: Vertikalspannung $S_{zz}(1)$ in Reihe $M = 1$ als Funktion von X unter einem 30° -Haufen der Breite $L_1 = 97$. Der Teilchendurchmesser ist gleichverteilt im Intervall $[d_0(1 - r/2), d_0(1 + r/2)]$ mit $r = 2/3000$ (a), $r = 2/300$ (b) und $r = 1/30$ (c). Die gestrichelte Linie zeigt das Ergebnis aus Abb. 74(b) mit $r = 0$ und $L_1 = 97$. Die durchgezogene Linie gibt das Ergebnis einer Realisierung mit entsprechendem r an, und die Symbole sind Mittelungen über (a) 40 bzw. (b,c) 100 Realisierungen mit verschiedenen Zufallszahlen.

In Abb. 81(a) ist das Kontaktnetzwerk einer Realisierung aus Abb. 80(c) gezeigt. Die Strichdicke gibt die Stärke der an diesem Kontakt wirkenden Kraft an. In Abb. 81(b) ist ein Ausschnitt des Netzwerks vergrößert, und in Abb. 81(c) ist die Hauptachsendarstellung des entsprechenden Bereichs gezeigt. In den Abbildungen 81(a) und (b) entspricht jede Linie der Normalrichtung eines Kontaktes, d.h. in der Mitte jeder Linie befindet sich ein Kontaktpunkt. Man beachte, daß einige Teilchen im Haufen keine Kontakte nach oben haben, demnach also abgeschirmt sind. Vergleicht man das Kontaktnetzwerk (b) mit den Hauptspannungen in (c), so kann man ebenso wie in Abschnitt 16.2.2 eine Beziehung zwischen Netzwerkstruktur und Orientierung bzw. Stärke der Hauptachsen feststellen.

Von den vielen Realisierungen, die zur Mittelung verwendet wurden, kann man die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Vertikalspannungen am Boden des Haufens gewinnen. Dazu mittelt man über die unterste Reihe, vernachlässigt aber die äußersten Teilchen. Von unten links begonnen wertet man nur die Teilchen $10 \leq i \leq 87$ aus. Es wurde getestet, daß die Auswertung der Teilchen $33 \leq i \leq 67$ in derselben Reihe oder der Teilchen $130 \leq i \leq 164$ eine Reihe höher das Ergebnis nicht verändert.

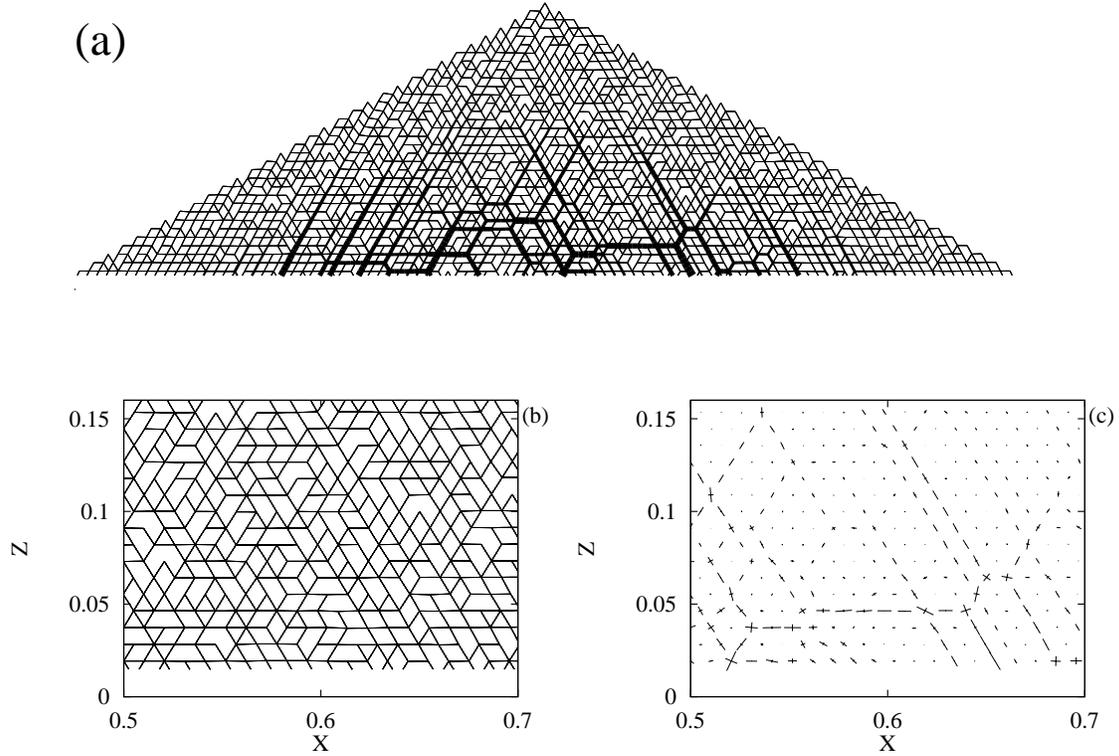


Abbildung 81: (a) Kontaktnetzwerk von einer Realisierung aus Abb. 80(c). Die Strichstärke zeigt die an dem Kontakt wirkende Kraft an. (b) Ausschnitt aus dem Kontaktnetzwerk in (a). (c) Hauptachsendarstellung des Bereichs in (b).

Da die Spannung in Reihe $M = 1$ bereits im monodispersen Fall nicht konstant ist, werden die Spannungen für $r > 0$ mit der Spannung für $r = 0$ skaliert. Die skalierte Vertikalspannung

$$T = S_{zz}^{(r>0)} / S_{zz}^{(r=0)} - \min[T] \quad (111)$$

wird auf das Minimum $\min[T]$ aller T geeicht. Dieses Minimum ist identisch mit Teilchen, die abgeschirmt sind, d.h. die Spannung $\min[T]$ entspricht dem Eigengewicht eines einzelnen Teilchens. Die Wahrscheinlichkeit $P(T)$ ist in Abb. 82 dargestellt. Die gestrichelte Linie in Abb. 82(a) zeigt ein Potenzgesetz für kleine T an, und die gepunktete Linie in Abb. 82(b) zeigt eine exponentielle Abnahme der Wahrscheinlichkeit für große T .

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(T)$ in einem Sandhaufen stimmt mit theoretischen Vorhersagen [LNS⁺95] und numerischen Ergebnissen mit anderen Randbedingungen [RJMR96] überein. Die Wahrscheinlichkeit, große Spannungen T zu finden, ist für $r = 1/30$ größer als für $r = 2/300$, nimmt also mit den Fluktuationen zu. Bei kleinen Spannungen folgt die Wahrscheinlichkeitsverteilung einem Potenzgesetz mit der Potenz $-1/2$, unabhängig von r .

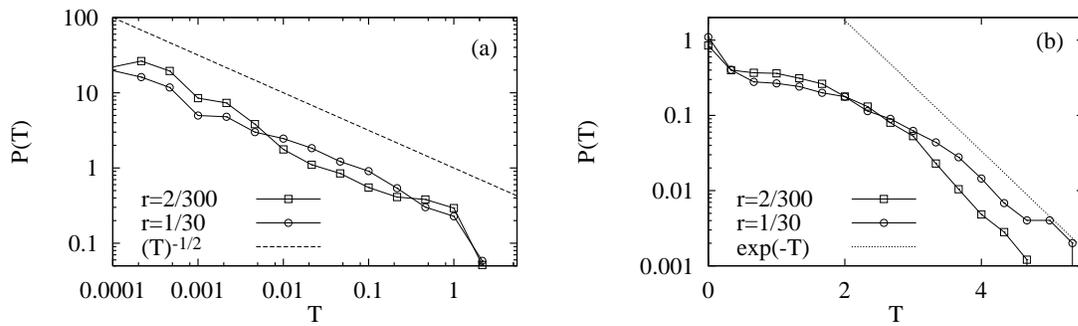


Abbildung 82: (a) Doppelt-logarithmische Auftragung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für kleine Vertikalspannungen T in Reihe $M = 1$ eines 30° -Haufens der Breite $L_1 = 97$. (b) Halb-logarithmische Darstellung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für große Spannungen.

16.5 Zusammenfassung

Mit einfachen MD Simulationen quasi-statischer Sandhaufen konnten viele theoretischen Vorhersagen und auch alternative numerische Modelle reproduziert und zusammengefaßt werden. Es stellt sich heraus, daß vor allem das Kontaktnetzwerk die Spannungsverteilung in einem granularen Material beeinflusst. Interessante Phänomene wie Bogenbildung oder die Fluktuationen der Spannungen am Boden konnten ohne Reibung bereits mit einem linearen Modell modelliert werden. Das wesentliche Element des numerischen Modells ist die Möglichkeit eines variablen, vom momentanen Spannungs- und Verformungszustand abhängigen Kontaktnetzwerks.

Die Existenz von Bögen im Material wurde mit einem nicht-translationsinvarianten Kontaktnetzwerk korreliert. Bögen treten zusammen mit gekippten Rauten im Netzwerk auf, wobei die geöffneten Kontakte senkrecht zum Bogen stehen. Das Kontaktnetzwerk ist immer spiegelsymmetrisch zur Mitte des Haufens. Ohne Bögen im Material kann man eine beliebige Zelle des Kontaktnetzwerks von der einen Seite auf die andere Seite verschieben. Existieren Bögen ist dies nicht mehr möglich, d.h. eine nach links gekippte Raute kann nur durch Spiegelung auf eine nach rechts gekippte Raute abgebildet werden. Die anderen möglichen Strukturen, vertikale Rauten und Dreiecke, können weiter beliebig im Netzwerk verschoben werden. Zusammen mit der Bogenbildung findet man, wenigstens in den äußeren Hälften des Haufens, eine konstante Orientierung des Spannungstensors, wie theoretisch vorhergesagt [WCCB96, WCC97].

Allgemeiner ausgedrückt sind die Orientierung des Spannungstensors und das Verhältnis der Hauptspannungen entscheidend für die Struktur des Kontaktnetzwerks. Ähnliche Eigenwerte führen zu Dreiecksgittern, d.h. alle Kontakte sind mit gleicher Wahrscheinlichkeit geschlossen. Bei starkem Unterschied der Eigenwerte ist der Kontakt parallel zur kleineren Spannung geöffnet, und die Orientierung des Spannungstensors beeinflusst die Orientierung des Kontaktnetzwerks.

Bei zufälliger, aber schwacher Änderung der Teilchendurchmesser treten schnell sehr starke Fluktuationen der Kräfte auf, und das homogene Kontaktnetzwerk wird zerstört. Im Mittel über bis zu 100 Realisierungen findet man den „dip“ in der Spannungsverteilung am Boden des Haufens, wenn die Größenunterschiede der Teilchen

groß genug sind. Durch die Skalierung der Spannungen und Verformungen ist allerdings eher $mg/(kr)$ als nur r relevant.

Da die wesentlichen Phänomene in einem quasi-statischen Sandhaufen bereits in einem stark vereinfachten Modell ohne Reibung gefunden werden konnten, kann man folgern, daß die Rolle, die das Kontaktnetzwerk für die Spannungsverteilung im Sandhaufen spielt, sehr wichtig ist. Bevor man komplizierte Kraftgesetze und Reibung modelliert, muß zuerst die Rolle eines variablen, vom lokalen Spannungszustand abhängigen Kontaktnetzwerks verstanden werden. Dennoch kann erwartet werden, daß Reibung und realistischere Wechselwirkungspotentiale auch zu einer quantitativ besseren Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten führen.

Teil VII

Numerische Methoden

Im folgenden werden kurz die algorithmischen Aspekte der verwendeten numerischen Methoden diskutiert. Für detailliertere Informationen und Anleitungen sei jedoch auf die im Text erwähnten Lehrbücher und Publikationen verwiesen.

17 Ereignis-Dynamik (ED)

Die Ereignis-Dynamik (ED) wird zur Modellierung harter kugelförmiger Teilchen verwendet. Ein Ereignis ist der Stoß eines Teilchens mit einem anderen Objekt, d.h. einem anderen Teilchen oder einer Wand, und zwischen Ereignissen folgen die Teilchen ballistischen Flugbahnen. Alle Ereignisse geschehen instantan und gehorchen den in Kapitel 3 formulierten Gesetzen. Energiedissipation in Normalrichtung wird durch den Restitutionskoeffizienten ϵ modelliert, Reibung gehorcht Coulombs Gesetz mit dem Reibungskoeffizienten μ und die Impulsübertragung in Tangentialrichtung ist durch den Tangential-Restitutionskoeffizienten β_0 begrenzt. Für die Wechselwirkung eines Teilchens mit einer Wand oder mit der Bodenplatte wird entsprechend der Index w oder b an die Parameter ϵ , μ und β_0 angefügt.

Unterschiede zwischen der ED Methode und der im folgenden Kapitel beschriebenen MD Methode sind in Kapitel 4 beschrieben. Da die Kontaktdauer verschwindet, muß man bei der numerischen Simulation nur Zwei-Teilchen-Kontakte berücksichtigen. In dichten Systemen mit starker Dissipation kann die Zeit zwischen zwei Ereignissen sehr klein werden, was als „inelastischer Kollaps“ bezeichnet wird [GZ93, MY96]. Dieses Problem kann in einer Dimension mit einem Cluster-Algorithmus, dem „Largest Relative Velocity“ (LRV) Algorithmus behandelt [LCB⁺94c] oder alternativ durch die in Kapitel 5 eingeführte maximale Kollisionsfrequenz verhindert werden.

17.1 Algorithmus

Der einfachste Ansatz einer ED Simulation beinhaltet die Aktualisierung aller Teilchen im System nach jedem Ereignis. Außer in eindimensionalen oder kleinen zweidimensionalen Systemen ist diese Methode allerdings viel zu rechenzeitaufwendig. Für

alle hier vorgestellten ED Simulationen wurde der von Lubachevsky [Lub91] vorgeschlagene, seriell optimierte Algorithmus verwendet. Gravitation kann einfach in den Algorithmus übernommen werden, da die Berechnung der Zeit des nächsten Ereignisses immer noch analytisch möglich ist. Fixierte Teilchen, bewegliche Wände oder nicht-kugelförmige Teilchen erfordern allerdings die numerische Berechnung des Zeitpunkts an dem ein Ereignis stattfindet und reduzieren damit die Geschwindigkeit der ED Methode. Bisher wurde nur eine bewegte, horizontale Bodenplatte mit sinusförmiger Vertikaltrajektorie implementiert [LCB⁺94c, LHB94, Lud95, LCRD96, Lud97b].

Die Informationen für jedes Teilchen werden in einer doppelt gepufferten Datenstruktur gespeichert. Informationen, die man zur Simulation zweifach benötigt, werden als Status bezeichnet. Dies sind die Zeit des letzten Ereignisses t_i , die Position \vec{r} und die Geschwindigkeiten \vec{v} und $\vec{\omega}$ nach dem letzten Ereignis, sowie die Information, welches Objekt am letzten Ereignis beteiligt war. Ein Objekt ist entweder ein anderes Teilchen, eine Wand oder eine Zellwand (siehe unten). Der „alte“ Status eines Teilchens i beinhaltet den Status direkt nach dem letzten Ereignis und der „neue“ beinhaltet den Status vor dem nächsten Ereignis, an dem Teilchen i zur Zeit t_i^{neu} beteiligt sein wird. Alle t_i^{neu} werden in einem „Heap-Sort“ Suchbaum abgespeichert, wobei der Minimalwert die Wurzel des Baumes ist. Auf das Teilchen i mit der kürzesten Zeit t_i^{neu} , d.h. das Teilchen an der Wurzel des Suchbaums, kann somit direkt zugegriffen werden. Aus dem Status dieses Teilchens erhält man die Information, welcher Kollisionspartner am nächsten Ereignis beteiligt ist und kann es damit ausführen. Die Ergebnisse werden im „neuen“ Status abgespeichert. Nach dem Ereignis müssen die „alte“ und die „neue“ Datenstruktur vertauscht werden, damit der „neue“ Status für die Aufnahme des nächsten Ereignisses von Teilchen i frei wird. Die Zeit bis zum nächsten Ereignis wird berechnet, indem mögliche Kollisionen von Teilchen i mit nahen Objekten geprüft werden. Die Berechnung der Zeit, in der der Kontakt zweier Kugeln stattfindet, kann in Abwesenheit ortsabhängiger externer Kraftfelder analytisch – und damit schnell – berechnet werden. War der Partner ebenfalls ein Teilchen, so muß auch für den Partner die hier beschriebene Aktualisierung vorgenommen werden.

Eine gute Möglichkeit, um Rechenzeit zu sparen ist die Einordnung aller Teilchen in eine „Linked-Cell“ Datenstruktur, wobei die Zellen zumindest etwas größer sein müssen als der Teilchendurchmesser. Die möglichen Kollisionspartner eines Teilchens sind jetzt immer in seiner eigenen Zelle oder den angrenzenden Nachbarzellen zu finden. Der Vorteil dieser Methode ist eine enorme Zeitersparnis bei der Kollisionspartnersuche in großen Systemen. Nachteile sind ein erhöhter Speicher- und Verwaltungsaufwand und eine zunehmende Ereignisanzahl, da das Passieren einer Zellwand als Ereignis behandelt werden muß. Ab einer Anzahl von mehreren hundert Teilchen wird die Zeitersparnis den Mehraufwand ausgleichen, und bei mehr als tausend Teilchen ist eine schnelle Simulation nur durch die beschleunigte Partnersuche möglich.

17.2 Die TCED Methode für den quasi-statischen Fall

Wie bereits in Kapitel 5 beschrieben, kann die traditionelle ED Methode erweitert werden, um den inelastischen Kollaps zu umgehen. Man führt einen von der Kollisionsfrequenz abhängigen Restitutionskoeffizienten $\varepsilon_n^{(i)}$ ein (Gleichung 62), der Kon-

takte elastisch macht ($\epsilon = 1$, $\beta_0 = \pm 1$), falls die Zeit zwischen zwei Stößen kleiner ist als die Dauer eines Kontaktes t_c . Die physikalische Bedeutung des Parameters t_c , der in der klassischen ED Methode nicht vorkommt, wird in Kapitel 5 diskutiert.

Die so entstandene TCED Methode kann zur Simulation von vibrierten Systemen mit schwacher Anregung verwendet werden, bei denen die klassische ED versagt. Der numerische Aufwand divergiert bei der TCED Methode nicht, sondern wächst lediglich mit abnehmendem t_c . Mit der erweiterten TCED Methode sind Simulationen in größeren Parameterbereichen möglich geworden, wie in verschiedenen Kapiteln dieser Arbeit gezeigt wurde.

18 Molekulardynamik (MD)

Die MD Methode wurde ursprünglich zur Modellierung von Flüssigkeiten mit langreichweitigen Wechselwirkungspotentialen benutzt [AT87]. Für die Beschreibung granularer Medien wird die Methode insofern verändert, daß nur der abstoßende Anteil des Potentials berücksichtigt wird. Die Newtonschen Bewegungsgleichungen der Teilchen erhält man, indem man in den Gleichungen in Kapitel 3 die Impulsübertragung $\Delta\vec{p}$ durch $t_{\text{MD}}\vec{f}$ ersetzt, wobei \vec{f} die wirkende Kraft und t_{MD} der feste Simulationszeitschritt der MD Methode ist.

Zur numerischen Integration der Bewegungsgleichungen kann man Verlet-, Leapfrog- und Prädiktor-Korrektor-Algorithmen verwenden. Eine Diskussion der verschiedenen Algorithmen sowie ihrer Vor- und Nachteile findet man in Lehrbüchern [AT87, Rap95]. Zur stabilen Integration muß der Integrationszeitschritt t_{MD} deutlich kleiner sein als die Dauer eines Kontaktes t_c , d.h. mit $t_{\text{MD}} \approx t_c/50$ erzielt man in der Regel befriedigende Resultate. In Kapitel 16 wird ein Prädiktor-Korrektor-Algorithmus fünfter Ordnung verwendet, d.h. man muß alle Ableitungen, einschließlich der fünften, berechnen.

Der Hauptteil der Rechenzeit wird für die Kraftberechnung benötigt. Zwei der verwendeten Verfahren zur Beschleunigung der Nachbarschaftssuche sind Verlet-Tafeln und „Linked-Cell“ Strukturen [AT87]. Bei nicht allzugroßen Teilchenzahlen ($N < 1000$) sind Verlet-Tafeln eine einfache Alternative zur komplexeren „Linked-Cell“ Struktur. Man speichert die Nachbarn, d.h. die möglichen Kollisionspartner innerhalb einer Kugelschale mit Radius $r_{\text{VT}} = c_{\text{VT}}d_0/2$ um jedes Teilchen mit Durchmesser d_0 , und kontrolliert die Maximalgeschwindigkeit aller Teilchen. Hat das schnellste Teilchen eine bestimmte Entfernung kleiner als $(c_{\text{VT}} - 1)d$, zurückgelegt, muß man die Verlet-Tafel neu erstellen. Die Erstellung der Verlet-Tafel ist bei großen Teilchenzahlen der rechenzeitaufwendige Teil. In einer „Linked-Cell“ Struktur sind alle Teilchen in Zellen sortiert und bei der Nachbarschaftssuche muß man nur 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.

Die beiden Methoden ED und MD sind nur im Grenzfall sehr großer Zeiten zwischen den Ereignissen äquivalent (siehe Kapitel 4).

19 Alternative Methoden

19.1 Direkte Monte-Carlo Simulation (DSMC)

Die im folgenden vorgestellte Monte-Carlo Methode (genannt „Direct Simulation Monte Carlo“, DSMC) wurde zuerst von Bird et al. zur Simulation der Strömung verdünnter Gase verwendet [Bir94, AGA95a, AGA95b] und später auch zur Modellierung von Zwei-Phasen-Strömungen eingesetzt [TYYT96]. Einer der wichtigsten Vorteile dieses Algorithmus ist seine einfache Parallelisierbarkeit. Im folgenden werden Dissipation und Korrekturen, die den Volumenausschluß berücksichtigen, eingeführt, um die Originalmethode zur Simulation granularer Medien in vibrierten Behältern einzusetzen (siehe Abschnitt 7.4.3).

Bei dieser Methode wird die Dynamik des Systems in diskreten Zeitschritten $\Delta\tau$ berechnet, die von der typischen Teilchengeschwindigkeit und der Zellgröße abhängen. In jedem Zeitschritt bewegen sich die Teilchen zuerst ohne Wechselwirkung miteinander, nur unter dem eventuellen Einfluß äußerer Kräfte. Danach werden die Teilchen in Zellen der Länge L_c und Volumen V_c einsortiert. Zwischen Teilchen in derselben Zelle finden stochastische Kollisionen statt. Die Kollisionsregeln werden dabei der kinetischen Gastheorie entnommen. Zuerst werden

$$M_c = \frac{N_c(N_c - 1)\sigma_{2D}v_{\max}\tau}{2V_c} \quad (112)$$

Kollisionspaare in jeder Zelle ausgewählt. N_c ist die Anzahl der Teilchen in der Zelle, v_{\max} ist eine obere Schranke für die Relativgeschwindigkeit zweier Teilchen und $\sigma_{2D} = 2d$ ist der Streuquerschnitt für harte Kugeln in 2D.

Um die korrekte Kollisionswahrscheinlichkeit bezüglich der Relativgeschwindigkeit der Teilchen zu erhalten, wird eine „acceptance-rejectance“ Methode angewandt. Ein Paar von Teilchen i und j führt die Kollision aus, falls

$$\frac{|\vec{v}_i - \vec{v}_j|}{v_{\max}} < R \quad (113)$$

ist. Die Zufallszahl R sei im Intervall $[0, 1]$ gleichverteilt. Da die Kollision unabhängig vom Ort in der Zelle durchgeführt wird, muß man einen Stoßparameter b zufällig wählen, um die Geschwindigkeiten der Teilchen nach dem Stoß berechnen zu können (siehe Abschnitt 3). Hier wird molekulares Chaos angenommen, d.h. b ist in 2D gleichverteilt im Intervall $[-2R, 2R]$, was durch Simulationen bis zu relativ hohen Dichten gerechtfertigt scheint (Abb. 18).

Um die Methode für dichte Systeme zu verbessern, wurden verschiedene Änderungen eingeführt [MLH97]. Die Erhöhung der Kollisionzahl aufgrund des Volumenausschlusses wurde durch die Verwendung des freien Volumens $V_c - V_0$ der Zelle in Gleichung 112 berücksichtigt. V_0 ist das Volumen, das die Teilchen in einer dichten Zufallspackung einnehmen würden (der Volumenanteil in 2D ist 0.82 [GB92]). Weiterhin werden zwei Stoßpartner nach dem jeweiligen Stoß mit einem zusätzlichen Bewegungsschritt der Länge $d_1 + d_2$ voneinander wegbewegt [AGA95a, AGA95b].

19.2 Monte-Carlo mit Volumenausschluß (MC)

In diesem Abschnitt werden der Originalalgorithmus für Monte-Carlo mit Volumenausschluß [RPS⁺86] und eine Erweiterung der Methode vorgestellt [DL95]. Die erweiterte Methode wurde zur Untersuchung von Größenseparation in vibrierten granularen Materialien verwendet (siehe Abschnitt 8.2).

19.2.1 Der Originalalgorithmus nach Rosato

Der Originalalgorithmus wurde ursprünglich verwendet, um N „harte“ Teilchen in einem rechteckigen, bewegten Behälter zu modellieren. Am Anfang werden die Teilchen zufällig im Behälter verteilt und dann nach den im folgenden beschriebenen Regeln unter Gravitation fallen gelassen. Die periodische Anregung wird dadurch modelliert, daß man zuerst alle Teilchen um die gleiche Amplitude a anhebt und sie dann fallen läßt, bis man die Teilchen am Beginn der nächsten Periode wieder anhebt. Ist die Zeit, in der die Teilchen fallen können, lang genug, so entspricht diese Art der Anregung genau den Experimenten, die zur Untersuchung von Separation mit Konvektion durchgeführt wurden [KJN93].

Die Abwärtsbewegung der Teilchen wird wie folgt realisiert: Man wählt zufällig ein Teilchen und berechnet ebenso zufällig die neue Position, an die es sich bewegen soll. Stellt man dort eine Überlappung mit einem anderen Teilchen fest, so verwirft man diesen Versuch und das Teilchen behält die alte Position bei. Existiert keine Überlappung, setzt man es auf die neue Position. Danach wird das nächste Teilchen zufällig gewählt, und man simuliert so lange, bis eine vorgegebene Anzahl von $n_{\max} = N$ Versuchen verworfen wird [RPS⁺86]. Die zugrundeliegende Annahme ist, daß das System in einem stabilen Zustand gelangt ist, sobald man fast kein Teilchen findet, das sich bewegen kann.

Die neue Position des Teilchens wird berechnet, indem man zwei unabhängige, gleichverteilte Zufallszahlen in den Intervallen $\chi_x \in [-1, 1]$ und $\chi_y \in [-1, 0]$ erzeugt. Die neue Position (x', y') des Teilchens ist dann

$$x' = x + \chi_x \delta_{\max} \quad (114)$$

$$y' = y + \chi_y \delta_{\max} \quad (115)$$

wobei x and y die alte Position bezeichnen und δ_{\max} die maximale Schrittweite ist. In der Originalversion wurde $\delta_{\max} = d/2$ verwendet [RPS⁺86].

19.2.2 Erweiterung des Rosato-Algorithmus

Um das Modell realistischer zu gestalten, kann man zwei Verbesserungen vornehmen. Einerseits erlaubt man mit der Wahrscheinlichkeit $\delta_o/(1 + \delta_o)$ kleine Aufwärtsbewegungen mit $\chi_y \in [-1, \delta_o]$ und andererseits verringert man die Schrittweite δ_{\max} .

Der Wert von δ_o sollte nicht zu groß sein, da sonst die Wirkung der Gravitation durch die starken Fluktuationen kompensiert wird, und man nie einen dichten Endzustand erreicht. Man kann δ_o mit der Elastizität der Teilchen in Zusammenhang bringen, da schwächere Dissipation stärkere Fluktuationen zur Folge hat. Dennoch ist unklar, wie δ_o mit dem Restitutionskoeffizienten verknüpft ist. In den Simulationen wurde $\delta_o = 0.05$ verwendet, weil mit diesem Wert sehr gute Übereinstimmung mit den Experimenten gefunden wurde.

Durch Verringerung der maximalen Schrittweite verringert sich die Dichte, die man nach der Abbruchbedingung erreicht. Da kleinere Schritte eine höhere Wahrscheinlichkeit haben akzeptiert zu werden, wird das System nach entsprechend mehr Versuchen einen dichteren Zustand erreichen. Außerdem ändert sich mit δ_{\max} die Steiggeschwindigkeit, die hier als Entfernung pro Periode verstanden wird. In Abb. 83 sind die Trajektorien eines Teilchen mit $\Phi = 2$ für verschiedene δ dargestellt.

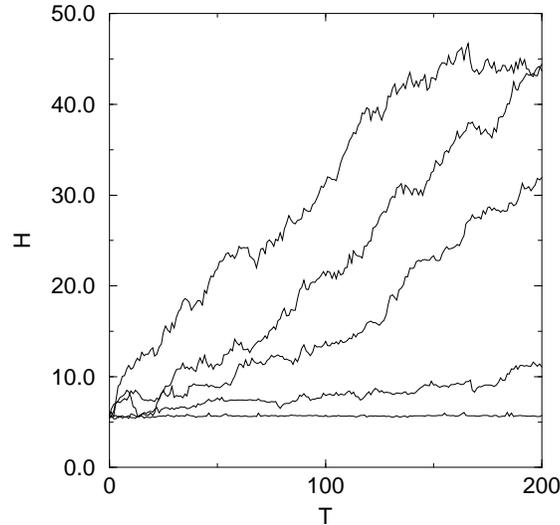


Abbildung 83: Einfluß der Wahl von δ auf die Steiggeschwindigkeit einer Scheibe mit $\Phi = 2$ in Simulationen with $N = 500$, $a = d$ und (von oben nach unten) $\delta_{\max} = 0.25d, 0.15d, 0.1d, 0.05d$ und $0.025d$.

Die maximale Schrittweite bestimmt auch, wie weit sich das frei fliegende Material ausdehnen kann, bevor es auf den Boden trifft. Je größer δ_{\max} ist, umso mehr verdünnt sich das Material. Da in Experimenten [DRC93, DMCR94b] kaum Verdünnung festgestellt werden konnte, erscheint ein kleiner Wert von δ_{\max} gerechtfertigt. Mit $\delta_{\max} = 0.05d$ wurde gute Übereinstimmung der Steiggeschwindigkeiten von Experiment und Simulation erzielt.

Teil VIII

Zusammenfassung und Ausblick

Die Physik granularer Medien wurde für große Bereiche der Dichte untersucht. Angefangen bei sehr dünnen Systemen, in denen nur Zwei-Teilchen-Kontakte vorkommen, wurde die Dichte erhöht, und es wurde schließlich der statische Grenzfall mit permanenten Vielteilchen-Kontakten nahe der maximal möglichen Dichte modelliert.

Bei der Diskussion der grundlegenden Zwei-Teilchen-Wechselwirkung wurden Erweiterungen der klassischen Stoßtheorie vorgenommen, die den Energieverlust, die Reibung und die Drehung der Teilchen berücksichtigen. Neben anderen Materialparametern wirkt sich insbesondere die Form des Potentials auf die Dauer von Kontakten aus. Ein steiferes Potential führt in der Regel zu kürzeren Kontaktdauern und ein unendlich steifes „Harte-Kugel“ (HK) Potential führt zu instantanen, d.h. unendlich kurzen Kontakten. Bei Zwei-Teilchen-Stößen beeinflusst die Kontaktdauer die gesamte Impulsübertragung nicht notwendigerweise. Dennoch können verschiedene Wechselwirkungspotentiale oder Materialparameter bei gleicher Anfangsbedingung zu unterschiedlichen Ergebnissen führen. Bedingt durch die komplizierte Meßtechnik zur Beobachtung eines Einzel-Stoßes sind die experimentellen Daten von mäßiger Qualität und erlauben oft nicht, die Entscheidung für ein bestimmtes Modell zu treffen. Deshalb wurden möglichst einfache Modelle, die die experimentellen Befunde gut annähern, verwendet.

Wendet man unterschiedliche Methoden auf ein vereinfachtes eindimensionales System mehrerer Teilchen die mit einer Wand stoßen an, so stellt man fest, daß das Verhältnis von zwei Zeitskalen, nämlich der typischen Zeit zwischen Stößen und der Kontaktdauer, das Systemverhalten kontrolliert. Die effektive Dissipation im System nimmt ab, wenn die Zeit zwischen Kontakten ab- oder die Kontaktdauer zunimmt. Das Wechselwirkungspotential beeinflusst somit die effektive Dissipation. Bei weichen Potentialen nimmt die Dissipation mit der Teilchenzahl ab, bei harten Potentialen nimmt die Dissipation mit der Teilchenzahl zu. Glaskugeln und Gummibälle unterscheiden sich nicht zuletzt durch ihre unterschiedlichen Kontaktdauern. Ein Sack gefüllt mit Murmeln wird sich anders verhalten als derselbe Sack mit einer Füllung aus Gummibällen.

Das HK Modell enthält keine Kontaktdauer, es fehlt also ein Materialparameter. Dies äußert sich in einem Artefakt, dem „inelastischen Kollaps“, bei dem die Anzahl von Stößen innerhalb eines begrenzten Zeitintervalls divergiert. Dieser Effekt tritt nur

bei dissipativen Kollisionen auf. Im elastischen bzw. schwach dissipativen Grenzfall konnte der inelastische Kollaps nicht gefunden werden. Die Kontaktdauer t_c kann in das HK Modell eingeführt werden, indem die Dissipation pro Kontakt als die Dissipation innerhalb einer Kontaktdauer umformuliert wird. Mit dieser TC Regel wird der inelastische Kollaps vermieden, das Modell erhält einen quasi-statischen Grenzfall, und die numerische Modellierung ist in großen Parameterbereichen möglich.

Die Ereignis-Dynamik (ED) Simulationsmethode ist das direkte Verfahren zur Simulation des HK Potentials und wurde hier mit wenigen Ausnahmen zur Modellierung granularer Medien verwendet. Für die Systeme, in denen die Kontaktdauer der Teilchen wichtig ist wurde die erweiterte TCED Methode verwendet, um den inelastischen Kollaps zu verhindern.

Granulare Medien verlieren Energie und nähern sich dem Zustand verschwindender kinetischer Energie im Grenzfall langer Zeiten. Um einen homogenen dynamischen Zustand zu untersuchen, muß man Energie zuführen. Eine verwendete Methode zur Energiezufuhr besteht in der Vibration des Behälters in dem sich das Material befindet. Das Systemverhalten wird von der Füllhöhe H , der Dissipation $(1 - \epsilon)$ und der Anregung bestimmt. Dabei ist eine ansteigende Füllhöhe äquivalent zu zunehmender Dissipation. Füllt man einen Behälter mit vielen nahezu elastischen Stahlkugeln und vibriert das System, so ähnelt das Verhalten dem eines ähnlich vorbereiteten Systems, in dem die Stahlkugeln durch wenige, aber dissipative Aluminiumkugeln ersetzt werden.

Bei starker effektiver Dissipation $\xi = H(1 - \epsilon)$ und schwacher Anregung bestimmt die dimensionslose Anregungsbeschleunigung das Systemverhalten. Bei schwacher effektiver Dissipation und starker Anregung wird das Systemverhalten durch die maximale Anregungsgeschwindigkeit bestimmt. In beiden Fällen kommen Amplitude und Frequenz der Anregung nur kombiniert vor, d.h. das dynamische System skaliert. Eine einfache Theorie führt im Fall dünner Systeme mit hoher Energie zu diesem Skalenverhalten und zu einer kritischen Beschleunigung als Untergrenze ihrer Gültigkeit.

Qualitativ ändern sich diese Resultate nicht, wenn Reibung eingeführt und damit Rotation der Teilchen zugelassen wird. Quantitativ nimmt die kinetische Energie jedoch ab, da ein Teil der Energie im Rotationsfreiheitsgrad steckt. Der Gleichverteilungssatz ist *nicht* erfüllt. Das Verhältnis von Rotations- und Translationsenergie ist durch zwei einfache Annahmen abzuschätzen. Einerseits findet die Kopplung über den Materialparameter Reibung statt, und andererseits sind anstatt der Energien die Fluktuationen der Oberflächenrelativgeschwindigkeiten gleichverteilt.

Vergleiche mit Experimenten zeigen gute Übereinstimmung abgesehen von Abweichungen, die vermutlich durch zusätzliche unkontrollierte Reibung und Fluktuationen im Experiment verursacht werden. Sowohl Simulationen als auch Experimente zeigen Skalierung mit der Geschwindigkeit der Anregung. Aber die funktionale Abhängigkeit der Energien von dieser Anregungsgeschwindigkeit unterscheidet sich von theoretischen Vorhersagen. Das Skalenverhalten und die Abweichung werden auch mit alternativen Simulationsmethoden, sowohl in zwei als auch in drei Dimensionen, gefunden. Daraus kann man folgern, daß dieses Phänomen allgemeiner Natur ist und nicht von Modellierungsdetails abhängt. Offenbar verhalten sich granulare Medien auf eine besondere Art und Weise, die nicht mit der kinetischen Theorie erklärt werden kann.

Bei der Beobachtung granularer Medien stellt man eine starke Abhängigkeit des Verhaltens von den Randbedingungen fest. Bei hoher Dichte sind die Wandeigenschaften weniger wichtig als in Systemen niedriger Dichte, da nur wenige Teilchen die Anwesenheit der Wände fühlen. Dennoch findet man in dichten vibrierten granularen Medien kollektive Effekte, die von den Wandeigenschaften abhängen können. Ein Beispiel dafür ist Konvektion, deren Stärke zunimmt, wenn die Wandreibung zu- oder die Materialsteifigkeit abnimmt. Im Zusammenhang mit Konvektion kann auch Entmischung festgestellt werden, aber es wurde gezeigt, daß Entmischung auch ohne Konvektion, allein durch „geometrische“ Effekte, vorkommt. Verursacht durch Konvektion findet Entmischung innerhalb weniger Anregungsperioden statt, während die geometrischen Ursachen zu wesentlich langsamerer Entmischung führen. Allgemeiner stellt man in dichten Systemen fest, daß mit einem gemittelten Materialfluß stets eine Reorganisation der Teilchenanordnung durch kollektive Bewegung vieler Teilchen verbunden ist. In einer dichten Packung können sich einzelne Teilchen nur schwer allein bewegen, viel häufiger bemerkt man die Bewegung ganzer Bereiche.

Die Art und Weise, wie die kollektiven Bewegungen stattfinden und was dazu führt, wird am Beispiel eines in einem Rohr fallenden granularen Mediums untersucht. Die Fallbewegung (relativ zu den Wänden nach unten) ist invers äquivalent zu dem Teil der Bewegung in einem vibrierten Behälter, in dem sich das Material von der Bodenplatte entfernt (relativ zu den Wänden nach oben). Vorteile der Rohrgeometrie sind, daß sich die Bewegungsrichtung nicht bereits nach kurzer Zeit umkehrt und daß man das System deshalb einfacher über große Zeiten hinweg untersuchen kann. Übereinstimmend mit den Experimenten stellt man fest, daß sich das Material während des Falls verdünnt, wobei die Verdünnung lokalisiert auf „Risse“ stattfindet. Diese treten zuerst in der unteren Hälfte des Systems auf, und die Verdünnung pflanzt sich nach oben fort, eine Tatsache die durch eine einfache quasi-statische Theorie vorhergesagt werden kann. Die theoretisch berechnete effektive Fallbeschleunigung vor dem Auftreten der Risse stimmt gut mit experimentellen Messungen überein.

Ein Riß geht von einem einzigen Teilchen aus. Fluktuationen der Wandreibung sind nötig für die Rißentstehung und führen dazu, daß ein Teilchen zufällig etwas abgebremst wird. Diese schwache Abbremsung führt zu häufigeren Kollisionen mit den von oben kommenden Teilchen, was wiederum zu mehr Kollisionen mit der Wand und damit einem höheren Druck am Wandkontakt führt. Diese Fluktuation verstärkt sich selbst und führt schließlich dazu, daß die Teilchenoberfläche durch Reibung an der Wand steckenbleibt. Die derart erzeugte Stoßwelle breitet sich schnell über die gesamte Systembreite aus und führt zu einem „dynamischen Bogen“. Dieser stützt sich und das Material darüber kurzzeitig ab, wodurch sich ein Riß öffnen kann.

In dem Bereich oberhalb des Bogens wird das Material komprimiert, die Dichte und die Spannungen nehmen zu, und man könnte eine Frustration der Teilchendrehbewegung erwarten. Bei einer Anordnung dicht gepackter Zahnräder gäbe es nur wenige Konfigurationen, die die Rotation vieler Teilchen zulassen. Stattdessen findet man starke Rotation der Teilchen und eine geordnete Drehrichtung in Bereichen anisotroper Spannungen. Entlang der großen Spannungen wird die Teilchenoberfläche gekoppelt, d.h. die Relativbewegung ist frustriert. In dieser Richtung bildet sich eine alternierende Drehsinnordnung. In der Richtung der kleineren Spannung, senkrecht zur alternierenden Ordnung, rutschen die Kontakte aufeinander, da die Reibung nicht

stark genug ist, um zu Frustration zu führen.

Bei Rißbildung stellt man fest, daß sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenkollisionsfrequenz ändert. Im homogenen Bereich nimmt die Wahrscheinlichkeit, große Kollisionsfrequenzen zu finden, exponentiell ab. Korreliert mit der Rißbildung, findet man nur noch eine schwach abnehmende Wahrscheinlichkeit, d.h. die Verteilung wird breiter, und große Kollisionsfrequenzen treten mit hoher Wahrscheinlichkeit auf. Verschiedene Bereiche des Systems haben stark unterschiedliche Zustände, was durch die breite Verteilungsfunktion angezeigt wird.

Im homogenen Bereich kann das Systemverhalten gut mit Kontinuumstheorien vorhergesagt werden. Der inhomogene Bereich und die Ursachen für sein Auftreten werden am Beispiel von Struktur- und Musterbildung in granularen Medien untersucht. In vibrierten Behältern findet man Oberflächenwellen, ähnlich wie bei Flüssigkeiten, und in offenen, periodischen Systemen beobachtet man eine dissipationinduzierte Dichtestabilität, die mit der Zeit zu wachsenden Strukturen führt. Beide Effekte erfordern als wesentliches Ingredienz die Dissipation. Ohne Dissipation würde in beiden Fällen der homogene Zustand erhalten bleiben.

Die Oberflächenwellen stimmen sehr gut mit den verglichenen Experimenten überein. Das Phänomen ist extrem stabil und hängt nicht, wie Konvektion oder Rißbildung, von den Wandeigenschaften ab. Die Wellen werden kaum von der Reibung und damit der Rotation der Teilchen beeinflusst, und die Form des Wechselwirkungspotentials ist kaum von Bedeutung. Die einzige zur Entstehung der Wellen notwendige Eigenschaft des granularen Mediums scheint die Dissipation zu sein, ohne die das Material nicht im Behälter bleiben würde. Um die spezifische Art der Energiezufuhr und die Symmetriebrechung durch das Gravitationsfeld zu verhindern, kann man ein anfangs homogenes System mit periodischen Rändern untersuchen, in dem bei genügend starker Dissipation ebenfalls Musterbildung vorkommt. Das Material sammelt sich in Bereichen die als „Cluster“ bezeichnet werden. Die räumliche Ausdehnung und die Masse der Cluster wächst durch reversible Aggregation mit der Zeit, da das Wachstum nicht durch eine externe Störung wie im Fall der Oberflächenwellen unterbrochen wird. Ob und wie die Korrelationslänge der beiden untersuchten Muster zusammenhängt, bleibt eine offene Frage. Beide Systeme zeichnen sich durch die Koexistenz von Bereichen mit hoher und niedriger Dichte aus. Im Bereich derart starker Dichtegradienten stellt man eine breite Wahrscheinlichkeitsverteilung der Kollisionsraten fest. Der inelastische Kollaps kann bei der Modellierung auftreten und wird durch die Verwendung der TCED Methode verhindert.

Im quasi-statischen Grenzfall wurden die Entstehung und die Kraftverteilung in Sandhaufen mit vereinfachten Modellen untersucht. Bereits ein Ein-Teilchen-Modell genügt, um die Sandhaufenentstehung und die entlang der Oberfläche stattfindende Entmischung zu modellieren. Aus dem diskreten Modell kann eine Kontinuumstheorie für das Wachstum der Haufenoberfläche abgeleitet werden, wobei der Böschungswinkel als eine analytische Funktion der Materialparameter hergeleitet werden kann.

Bei der Untersuchung der Kraftverteilung im Sandhaufen wurde ein „Weiche-Kugel“-Modell verwendet, in dem das Öffnen und Schließen von Kontakten intrinsisch enthalten ist. Es wurde festgestellt, daß in diesem Fall das Kontaktnetzwerk und die Spannungsverteilung stark korreliert sind. Details des Wechselwirkungspotentials oder der Form verändern die Spannungsverteilung nur unwesentlich.

Mit diesem auf das Wesentliche reduzierten Modell gelang die Vereinheitlichung verschiedener anderer theoretischer und numerischer Resultate der letzten Jahre. Bereits kleine Fluktuationen der Teilchengröße genügen, um Kontaktnetzwerke zu finden, in denen die Kontaktkräfte um mehrere Größenordnungen variieren. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung großer Kräfte stimmt mit komplizierteren Simulationsmethoden und theoretischen Vorhersagen überein.

Die hauptsächlich verwendete Simulationsmethode war die deterministische ED. Einige Probleme wurden mit der ebenfalls deterministischen MD, der stochastischen DSMC oder der stochastischen MC Methode behandelt. Der Vergleich von Ergebnissen, die durch unterschiedliche Verfahren gewonnen wurden, erlaubte die Prüfung der den Methoden zugrundeliegenden Annahmen. Die Verwendung eines quasi-statischen Ein-Teilchen-Modells zur Simulation von Sandhaufen erlaubte die Entwicklung einer Kontinuumsgleichung für die zeitliche Entwicklung der Materialoberfläche, was die Notwendigkeit vereinfachter Modelle deutlich macht.

Dem Hauptteil der numerischen Untersuchungen wurde das HK Modell zugrunde gelegt. Darum wurde die ED Methode verwendet, die der MD Methode im Bereich niedriger Dichte deutlich an Effizienz überlegen ist. Dem einfachen HK Wechselwirkungspotential bei ED steht eine Vielzahl möglicher Potentiale bei MD gegenüber. Die Wahl muß unter Umständen ohne Kenntnis des realen Potentials erfolgen. Das Skalierungsverhalten in vibrierten Behältern, Konvektion, Rohrfluß und Oberflächenwellen wurden an anderer Stelle mit MD untersucht, und die Resultate stimmen wenigstens qualitativ überein. Da das HK Modell den inelastischen Kollaps beinhaltet, der eine ED Simulation zum Anhalten bringt, wurde die TC Regel implementiert, was zur TCED Methode führte, ein deterministisches Verfahren zur Erforschung größerer Parameterbereiche. Neben den numerischen Vorteilen beinhaltet die TCED Methode die physikalisch begründete Zeitskala Kontaktdauer, die von der Steifigkeit, der Dichte und der Teilchengröße bestimmt wird. Mit anderen Worten können mit der TC Regel elastische Effekte in Systemen aus harten Kugeln modelliert werden.

20 Ausblick

Ein großer Schritt bei der Entwicklung einer allgemeinen Theorie granularer Medien ist die Bereitstellung eines Modells, das granulare Systeme in breiten Parameterbereichen beschreibt. Im folgenden werden einige gebräuchliche Verfahren kritisch in Hinblick auf ihre Anwendbarkeit, ihre Effizienz und ihren Nutzen beurteilt.

Stochastische Modelle und *Gittermodelle* sind in der Regel nur für spezielle Randbedingungen anwendbar und erfordern zudem die empirische Annahme von Verteilungsfunktionen, die nur für Teile des Parameterraums bekannt sind. Die hochgradige Spezialisierung erlaubt die Optimierung und Maßschneiderung dieser Methoden. Vorhersagen, die auf zu vielen Annahmen basieren, sind mit Vorsicht zu genießen. Die Parameter in stochastischen Modellen haben oft nichts mit den bekannten Materialparametern zu tun, was den quantitativen Vergleich mit experimentellen Daten schwierig macht. Dennoch sind solche vereinfachten Modelle nötig, um theoretische Beziehungen ableiten zu können, wie am Beispiel der Entstehung eines Sandhaufens gezeigt wurde. Solche anschaulichen, für kleine Parameterbereiche gültigen Modelle,

können als Testfälle für allgemeinere Theorien oder zur Identifizierung der wesentlichen Effekte und Parameter im System benutzt werden.

Deterministische Modelle wie ED oder MD sind auf den ersten Blick die Methode der Wahl. Zu beachten ist, daß ED bei hohen Dichten und MD bei niedrigen Dichten ineffektiv wird. Musterbildung in offenen Systemen mit periodischen Rändern konnte bisher noch nicht mit MD untersucht werden, da die Zeitskalen des Systems um zu viele Größenordnungen auseinanderlaufen. Dieses Beispiel zeigt, daß man mit der ED Methode in der Lage ist, Parameterbereiche zu modellieren, die mit der klassischen MD nicht zugänglich sind. Andererseits kann MD ohne weiteres für ortsabhängige Potentiale oder nicht-kugelförmige Teilchen eingesetzt werden, was mit ED noch nicht gelang. Vieldeutigkeiten oder Unsicherheiten bei der Wahl des Wechselwirkungsmodells machen MD unhandlich und eine theoretische Beschreibung eines Vielteilchensystems auf dieser Basis unnötig kompliziert. Die Anwendung der klassischen ED Methode ist auf den Bereich niedriger Dichte und schwacher Dissipation begrenzt, da sonst der inelastische Kollaps auftritt. Die TC Regel löst diese Beschränkung des Parameterraums auf. Bis auf Systeme, in denen Reibung essentiell ist, kann die neue TCED Methode große Parameterbereiche effektiv abdecken. In quasi-statischen Systemen ohne Reibung kann wieder MD benutzt werden. Allerdings gibt es zahlreiche schnellere implizite Verfahren zur Relaxation. In Systemen mit Reibung ist die Kontakt-Dynamik, die jeden Kontakt explizit beschreibt eine bewährte Simulationemethode.

Die Verallgemeinerung einer Methode ist nicht einfach, so daß vielleicht eine Hybridmethode, die die Vorteile verschiedener Verfahren und Modelle vereint, entwickelt werden muß. Die ED Methode ist besonders deshalb interessant, weil für den Grenzfall elastischer Punkt-Teilchen eine gut entwickelte Theorie, die kinetische Gastheorie (KGT) existiert. Diese Theorie wurde bisher um Dissipation erweitert, ist aber in den meisten Fällen auf relativ schwache Dissipation beschränkt. Die Erweiterung der KGT um die TC Regel sollte auch die Beschreibung dissipativer Systeme ohne diese Einschränkungen möglich machen. Außerdem liefert die TC Regel die in der KGT fehlende Zeitskala Kontaktdauer, die elastische Effekte wie die Schallgeschwindigkeit beeinflusst.

Kontinuumstheorien erfordern numerische Lösungsverfahren und empirische konstitutive Gesetze. Ein Ansatz für die Zukunft ist die Eichung von Kontinuumstheorien an numerischen Simulationen und Experimenten mit diskreten Teilchen. Die Eichung der Theorien an Experimenten ist nicht immer einfach, da die Bedeutung der in den Theorien enthaltenen Parameter nicht selten abstrakt und wenig anschaulich ist. Die Simulation mit diskreten Teilchen kann eine Brücke zwischen Experimenten und Theorien schlagen. Die Simulation realistischer Systeme mit ihren gigantischen Teilchenzahlen erfordert Kontinuumsansätze, da bereits eine handvoll Sand genug Teilchen enthält, um selbst moderne Computer bis an die Grenzen ihrer Leistungsfähigkeit zu fordern. Die Simulation diskreter Teilchen sollte als Ergänzung und nicht als Ersatz für Kontinuumsmethoden gesehen werden, denn alle Ansätze können sich in verschiedenen Bereichen ergänzen.

Teil IX

Anhänge

21 Anhang A:

Herleitung der Tangential-Restitution

Um die Tangential-Restitution β zu erklären, die die Gleichungen 18 und 19 verbindet, schreibt man Normal- und Tangentialkomponente der Geschwindigkeit in analoger Weise, d.h. $u_c^{(n)} = -\epsilon v_c^{(n)}$ und $u_c^{(t)} = -\beta v_c^{(t)}$. Die Relativgeschwindigkeit nach dem Stoß ist

$$\vec{u}_c = \vec{u}_1 - \vec{u}_2 - \left(\frac{d_1}{2} \vec{\omega}'_1 + \frac{d_2}{2} \vec{\omega}'_2 \right) \times \hat{n}. \quad (116)$$

Setzt man die Gleichungen 10-13 in Gleichung 116 ein, erhält man mit der Definition von \vec{v}_c die Beziehung

$$\vec{u}_c = \vec{v}_c + \Delta \vec{p} \frac{1}{m_{12}} + \Delta \vec{p}^{(t)} \left(\frac{d_1^2}{4I_1} + \frac{d_2^2}{4I_2} \right), \quad (117)$$

mit dem Trägheitsmoment $I_i = q_i m_i (d_i/2)^2$ bei Rotation um den Schwerpunkt des Teilchens i , wobei q_i die Struktur des Teilchens beschreibt. Für massive Kugeln ist $q = 2/5$, für massive Scheiben ist $q = 1/2$ und für einen Ring mit Drehachse senkrecht zur Ringebene durch den Schwerpunkt ist $q = 1$. Setzt man die Gleichungen 16 und 17 in Gleichung 117 ein, erhält man schließlich komponentenweise

$$\begin{aligned} \vec{u}_c &= -\epsilon \vec{v}_c^{(n)} + \left(1 + \mu(1 + \epsilon) \cot \gamma \left(1 + \frac{1}{q} \right) \right) \vec{v}_c^{(t)} \\ &= -\epsilon \vec{v}_c^{(n)} - \beta_1 \vec{v}_c^{(t)}. \end{aligned} \quad (118)$$

Von Gleichung 118 folgt die Tangential-Restitution für gleitende Kontakte

$$\beta_1 = -1 - \mu(1 + \epsilon) \cot \gamma \left(1 + \frac{1}{q} \right). \quad (119)$$

Im Fall massiver Kugeln mit $q = 2/5$ ist $\beta_1 = -1 - (7/2)\mu(1 + \epsilon) \cot \gamma$. Man beachte, daß $\cot \gamma \leq 0$ ist, so daß $-1 \leq \beta_1$ ist. Die untere Grenze von β_1 entspricht dem Grenzfall ideal glatter Oberflächen.

In Gleichung 119 hat man die Tangential-Restitution $\beta = \min[\beta_0, \beta_1]$, was bei großen Stoßwinkeln zu $\beta = \beta_0$ und bei kleinen Stoßwinkeln zu $\beta = \beta_1$ führt, wobei $\beta_1 = -1 - \frac{7}{2}\mu(1 + \epsilon) \cot \gamma$ ist. Letztere Beziehung in Gleichung 19 eingesetzt, führt

wieder zu Gleichung 18. β ist in Abb. 5(a) als Funktion von γ dargestellt. Positive Werte von β bedeuten, daß die Tangentialgeschwindigkeit beim Stoß das Vorzeichen ändert, während negative Werte lediglich eine Verminderung der Geschwindigkeit bedeuten. Der Winkel γ_0 , bei dem sich das Verhalten des Stoßes ändert, folgt aus der Beziehung $\beta_0 = \beta_1$ und ist

$$-\tan \gamma_0 = \left(1 + \frac{1}{q}\right) \mu \frac{1 + \epsilon}{1 + \beta_0}. \quad (120)$$

22 Anhang E: Berechnung der Energieänderung beim Stoß zweier Teilchen

Der Energieverlust beim Stoß zweier Kugeln mit den Parametern ϵ , μ und β_0 ist

$$\Delta e = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{1}{2} m_i [\vec{u}_i^2 - \vec{v}_i^2] + \frac{1}{2} I_i [(\vec{\omega}')^2 - \vec{\omega}_i^2] \right\}. \quad (121)$$

Drückt man die Energieänderung mit den Gleichungen 10-13 als Funktion der Impulsübertragung und der Geschwindigkeiten vor dem Stoß aus, so erhält man:

$$\Delta e = \sum_{i=1}^2 \left\{ \vec{v}_i \Delta \vec{p}_i + \frac{1}{2m_i} \Delta p^2 - \frac{d_i}{2} (\hat{n} \times \Delta \vec{p}) \vec{\omega}_i + \frac{d_i^2}{8I_i} (\hat{n} \times \Delta \vec{p})^2 \right\}, \quad (122)$$

wobei $\Delta \vec{p}_1 = -\Delta \vec{p}_2 = \Delta \vec{p}$ ist. Aufgelöst nach Normal- und Tangentialkomponente ist

$$\begin{aligned} \Delta e = \sum_{i=1}^2 \left\{ \vec{v}_i^{(n)} \Delta \vec{p}_i^{(n)} + \frac{1}{2m_i} (\Delta p^{(n)})^2 + \vec{v}_i^{(t)} \Delta \vec{p}_i^{(t)} \right\} + \frac{1}{2m_i} (\Delta p^{(t)})^2 \\ + \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{d_i^2}{8I_i} (\Delta p^{(t)})^2 - \frac{d_i}{2} (\hat{n} \times \Delta \vec{p}^{(t)}) \vec{\omega}_i \right\} \end{aligned}$$

und führt mit $I_i = q_i m_i (d_i/2)^2$, $m_{12} = 1/(1/m_1 + 1/m_2)$ und Gleichung 19 zu

$$\begin{aligned} \Delta e = \left[-m_{12}(1 + \epsilon) + \frac{m_{12}(1 + \epsilon)^2}{2} \right] (v_c^{(n)})^2 - \frac{m_{12}q(1 + \beta)}{1 + q} \vec{v}_c^{(t)} [\vec{v}_1^{(t)} - \vec{v}_2^{(t)}] \\ + \frac{m_{12}q^2(1 + \beta)^2}{2(1 + q)^2} (v_c^{(t)})^2 + \frac{m_{12}q(1 + \beta)}{2(1 + q)} [d_1 \vec{\omega}_1 + d_2 \vec{\omega}_2] (\hat{n} \times \vec{v}_c^{(t)}) \\ + \frac{m_{12}q^2(1 + \beta)^2}{2q(1 + q)^2} (v_c^{(t)})^2. \end{aligned}$$

Formt man das Kreuzprodukt um $\vec{\omega}_i (\hat{n} \times \vec{v}_c^{(t)}) = (\vec{\omega}_i \times \hat{n}) \vec{v}_c^{(t)}$, setzt $\vec{v}_c^{(t)}$ aus Gleichung 7 ein und faßt die anderen Terme zusammen, so ist

$$\Delta e = m_{12}(1 + \epsilon) \left[-1 + \frac{(1 + \epsilon)}{2} \right] (v_c^{(n)})^2 - \frac{m_{12}q(1 + \beta)}{1 + q} \left[1 - \frac{q(1 + \beta)}{2(1 + q)} \left(1 + \frac{1}{q} \right) \right] (v_c^{(t)})^2.$$

Die Terme in eckigen Klammern können noch auf einen Nenner gebracht werden, was zur Energieänderung bei einem Stoß führt

$$\Delta e = -\frac{m_{12}}{2} \left[(1 - \epsilon^2) (v_c^{(n)})^2 + \frac{q}{1 + q} (1 - \beta^2) (v_c^{(t)})^2 \right]. \quad (123)$$

Im elastischen Grenzfall mit $\epsilon = 1$ und $\beta = \pm 1$ ist $\Delta e = 0$.

23 Anhang V: Visualisierung der Simulationsdaten

Alle Farbbilder wurden mit dem Programm `xballs` erstellt. Der C-Quellcode und eine Beschreibung sind unter der WWW-Adresse

<http://www.ica1.uni-stuttgart.de/~lui/pictures/pictures.html>

verfügbar. Die Programmentwicklung begann am 10.12.1994 und ist bis heute noch nicht abgeschlossen.

Die Darstellung kugelförmiger Teilchen erfolgt als Scheiben mit einer Farbe, die die Geschwindigkeit, die Stoßrate oder die Anfangsposition bedeuten kann. Mit zunehmender Geschwindigkeit oder Stoßrate ändert sich die Farbe eines Teilchens von blau über grün bis hin zu rot. Die Behälterwände werden durch blaue Balken dargestellt und die momentane Richtung der Geschwindigkeit wird durch einen auf den Teilchenradius normierten Vektor angezeigt (siehe Abb. 16, 17, 56 und 57). Falls sich die Teilchen drehen wird ein Viertelkreis innerhalb der Scheibe gezeichnet, dessen Position die Orientierung und dessen Farbe die Winkelgeschwindigkeit anzeigt (siehe Abb. 16 und 17). Sind die Teilchen zu klein, wird die Richtung der Geschwindigkeit und die Rotation nicht angezeigt (siehe Abb. 56, 57, 66, 67 und 68).

24 Anhang S: Verwendete Symbole und Abkürzungen

Zur Systematik sei erwähnt, daß bis auf wenige Ausnahmen dimensionsbehaftete Größen durch Kleinbuchstaben, dimensionslose Größen durch Großbuchstaben abgekürzt werden. In der folgenden Tabelle sind arabische Buchstaben in alphabetischer Reihenfolge angeordnet, griechische Zeichen sind mit eventuellen Ausnahmen nach Aussprache in die alphabetische Ordnung eingefügt.

Erklärung	Parameter	Einheit
Dimension 1, 2 und 3	1D, 2D und 3D	[-]
Amplitude	a	[m]
Stoßparameter	b	[m]
Tangentialrestitution	β	[-]
Zahl der Kollisionen im System	C	[-]
Teilchendurchmesser	d	[m]
Dimension	D	[-]
Durchmesser einer Scheibe in 2D	D_s	[m]
Maximale Schrittweite (bei MC)	δ_m	[m]
Schrittweite entgegen der Gravitation (bei MC)	δ_o	[m]
Teilchenüberlappung	δ	[m]
Tangentialverschiebung des Kontaktpunktes	ϑ	[m]
Energie	e	[kg/m ² s ²]
Energierestitution	e_r	[-]
Einfangwahrscheinlichkeit	e_t	[-]
Elastizitätsmodul	E	[kg/m s ²]
Restitutionskoeffizient (konstant)	ϵ	[-]
Restitutionskoeffizient (nicht konstant)	ε	[-]
Dämpfungskonstante	η	[Hz]
Frequenz	f	[Hz]
Kollisionsfrequenz/-rate	f_c	[Hz]
Kraft	\vec{f}	[kg m/s ²]
Gravitationsbeschleunigung	g	[m/s ²]
Stoßwinkel ($\pi/2 \leq \gamma \leq \pi$)	γ	[rad]

Erklärung	Parameter	Einheit
Effektive Beschleunigung $a(2\pi f)^2/g$	Γ	[-]
Höhe des Massenschwerpunktes	$h_{c.m.}$	[m]
Füllhöhe	$h_{c.m.0}$	[m]
Reduzierte Höhe des Massenschwerpunktes	h_c	[m]
Fallhöhe	h_i	[m]
Rückprallhöhe	h_f	[m]
Dimensionslose Füllhöhe	H	[-]
Trägheitsmoment	I	[kg m ²]
Fluß- bzw. Konvektionsintensität	J	[1 m ⁻¹ s ⁻¹]
Federkonstante	k	[kg/s ²]
Tangential-Federkonstante	k_t	[kg/s ²]
Geometriefaktor	K	[-]
Potenz der Geschwindigkeit	κ	[-]
Systembreite	l	[m]
Dimensionslose Systembreite l/d	L	[-]
Zellenlänge	L_c	[m]
Wellenlänge bei Musterbildung	L_x	[-]
Typische Systemausdehnung	L_z	[-]
Mittlere freie Weglänge	λ	[m]
Reibungskoeffizient	μ	[-]
Reihennummerierung	M	[-]
Anzahl der Teilchen in einem Cluster	M_i	[-]
Anzahl der Stöße pro Zelle pro Zeit	M_c	[-]
Index für Normalrichtung	(n)	[-]
Normalvektor des Kontaktes zweier Kugeln	\hat{n}	[-]
Anzahl der Teilchen pro Zelle	N_c	[-]
Viskosität	ν	[kg/m s]
Tangential-Viskosität	ν_t	[kg/m s]
Phase	ϕ	[rad]
Orientierung des Spannungstensors	$\phi(1)$	[rad]
Druck	p	[kg/m s ²]
Horizontalspannung	p_x	[kg/m s ²]
Vertikalspannung	p_z	[kg/m s ²]
Impulsänderung	Δp	[kg m/s]
Größenverhältnis	Φ	[-]
Geschwindigkeitsverhältnis vor dem Stoß	Ψ_1	[-]
Geschwindigkeitsverhältnis nach dem Stoß	Ψ_2	[-]
Teilchenort	\vec{r}	[m]
Materialdichte	ρ	[kg/m ^D]
Volumenanteil oder Systemdichte	ϱ	[kg/m ^D]
Dimensionsloser Spannungstensor	S	[-]
Horizontalkomponente der Spannung	S_{xx}	[-]
Vertikalkomponente der Spannung	S_{zz}	[-]
Scherspannung	S_{xz}	[-]

Erklärung	Parameter	Einheit
Spannungstensor	σ	[kg/m s ²]
Spannung (maximaler Eigenwert)	σ_{\max}	[kg/m s ²]
Spannung (minimaler Eigenwert)	σ_{\min}	[kg/m s ²]
Abschirmlänge in Rohren	ς	[m]
Index für Tangentialrichtung	(t)	[-]
Tangentialvektor des Kontaktes zweier Kugeln	\hat{t}	[-]
Zeit bzw. Dauer eines Stoßes	t_c	[s]
Zeit zwischen zwei Ereignissen	t_n	[s]
Ereigniszahl t_n/t_c	τ	[-]
Zeitschritt (bei DSMC)	$\Delta\tau$	[s]
Geschwindigkeit nach dem Stoß	u	[m/s]
Geschwindigkeit vor dem Stoß	v	[m/s]
Potenz der Teilchenzahl	φ	[-]
Geschwindigkeit der Bodenplatte	v_b	[m/s]
Maximale Geschwindigkeit der Bodenplatte	V	[m/s]
Separationsgeschwindigkeit	V_s	[-]
Teilchenvolumen pro Zelle	V_0	[m ^D]
Zellenvolumen	V_c	[m ^D]
Winkelgeschwindigkeit	ω	[rad/s]
Volumenanteil	Ω	[-]
Effektive Dissipation	ξ	[-]
Horizontalkoordinate	x	[m]
Dimensionslose Horizontalkoordinate	X	[-]
Schrittweite (MC Methode)	χ	[-]
Elastizitätsmodul	Y	[kg/m s ²]
Vertikalkoordinate	z	[m]
Dimensionslose Vertikalkoordinate	Z	[-]
Ereignisrate	\mathcal{Z}	[Hz]

25 Anhang L: Literatur

Zur Erstellung der Literaturliste wurde BibTeX verwendet. Eine umfangreichere Literaturdatei in BibTeX Format und mit ca. 1000 Einträgen zum Thema granulare Medien ist unter der WWW-Adresse

<http://www.ica1.uni-stuttgart.de/~lui/REFS/references.html>

zu finden. Die darin enthaltenen Einträge zeigen eine deutliche Zunahme des Interesses an der Physik granularer Medien in den letzten Jahren. In Abb. 84 ist die Anzahl der in der Literaturdatenbank enthaltenen Veröffentlichungen gegen das Erscheinungsjahr aufgetragen. Die Statistik wurde im Juni 1997 erstellt, weshalb die hier gezeigten unkorrigierten Daten für das Jahr 1997 zu niedrig liegen.

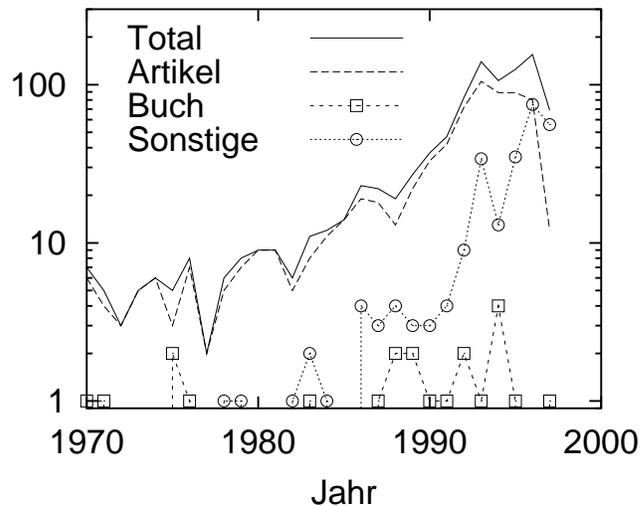


Abbildung 84: Anzahl der Veröffentlichungen pro Jahr. Die Untergruppen sind *Artikel* in einer referierten Zeitschrift, *Buch*, und *Sonstige*, d.h. Artikel in Tagungsbänden oder Büchern sowie Vorabdrucke (diese tragen nur in den letzten drei Jahren zur Statistik bei).

Literatur

- [AA95] K. M. Aoki und T. Akiyama. Simulation studies of pressure and density wave propagations in vertically vibrated beds of granules. *Phys. Rev. E*, 52(3):3288–3291, 1995.
- [AAMW96] K. M. Aoki, T. Akiyama, Y. Maki und T. Watanabe. Convective roll patterns in vertically vibrated beds of granules. Vorabdruck, 1996.
- [ABS91] H. Ahn, C. E. Brennen und R. H. Sabersky. Observation of particle segregation in vibrated granular systems. *J. Appl. Mech.*, 58:792, 1991.
- [AGA95a] F. J. Alexander, A. L. Garcia und B. J. Alder. A consistent Boltzmann algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 74:5212, 1995.
- [AGA95b] F. J. Alexander, A. L. Garcia und B. J. Alder. Simulation of the consistent Boltzmann equation for hard spheres and its extension to dense gases. In *Lecture Notes in Physics*, Berlin, 1995. Springer Verlag.
- [AH96] J. J. Alonso und H. J. Herrmann. On the shape of the tail of a sand pile. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4911–4914, 1996.
- [AL90] F. J. Alexander und J. L. Lebowitz. Driven diffusive systems with a moving obstacle: a variation on the Brazil nuts problem. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 23:L375–L381, 1990.
- [AS66] J. E. Ayer und F. E. Soppet. Vibratory compaction II: Compaction of angular shapes. *J. Am. Ceramic Soc.*, 49:207, 1966.
- [AS73] K. Ahmad und I. J. Smalley. Observation of particle segregation in vibrated granular systems. *Powder Technol.*, 8:69, 1973.
- [AT87] M. P. Allen und D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, Oxford, 1987.
- [BBFJ89] G. W. Baxter, R. P. Behringer, T. Fagert und G. A. Johnson. Pattern formation in flowing sand. *Phys. Rev. Lett.*, 62(24):2825, 1989.
- [BCC95] J.-P. Bouchaud, M. E. Cates und P. Claudin. Stress distribution in granular media and nonlinear wave equation. *J. Phys. I*, 5:639–656, 1995.

- [BCPE95] J.-P. Bouchaud, M. E. Cates, J. R. Prakash und S. F. Edwards. Hysteresis and metastability in a continuum sandpile model. *Phys. Rev. Lett.*, 74(11):1982–1985, 1995.
- [BdG96] T. Bouteux und P. G. de Gennes. Surface flows of granular mixtures: I. General principles and minimal model. *J. Phys. I*, 6:1295, 1996.
- [Bes83] H. Besler. Der Wind als Erzeuger von Wüsten. *Geowissenschaften in unserer Zeit*, 1:109, 1983.
- [Bes86] H. Besler. The Toshka-canal dune: Analysis of development and dynamics. In W. G. Nickling, ed., *Aeolian Geomorphology*, Seite 113, London, September 1986. Proceedings of the 17th Annual Binghamton Geomorphology Symposium, Allen and Unwin.
- [Bes87] H. Besler. Entstehung und Dynamik von Dünen in warmen Wüsten. *Geographische Rundschau*, 39:422, 1987.
- [Bes95] H. Besler. The keriya dunes in the taklimakan sand sea: Sedimentological evidence for a polygenetic evolution. *Die Erde*, 126:205, 1995.
- [BG90] G. Barker und M. Grimson. The physics of muesli. *New Scientist*, 26:37–40, 1990.
- [BG91] Y. M. Bashir und J. D. Goddard. A novel simulation method for the quasi-static mechanics of granular assemblages. *J. Rheol.*, 35(5):849, 1991.
- [BGT85] N. Borderies, P. Goldreich und S. Tremaine. A granular flow model for dense planetary rings. *Icarus*, 63:406, 1985.
- [BGW93] C. E. Brennen, S. Ghosh und C. Wassgren. Vertical oscillation of a bed of granular material. In C. Thornton, ed., *Powders & Grains 93*, Rotterdam, 1993. Balkema.
- [Bir94] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon, Oxford, 1994.
- [BJW94] G. Baumann, I. Jánosi und D. E. Wolf. Particle trajectories and segregation in a two-dimensional rotating drum. *Europhys. Lett.*, 27(3):203, 1994.
- [BLB93] G. W. Baxter, R. Leone und R. P. Behringer. Experimental test of time scales in flowing sand. *Europhys. Lett.*, 21(5):569–574, 1993.
- [BM90] B. Bernu und R. Mazighi. One-dimensional bounce of inelastically colliding marbles on a wall. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 23:5745, 1990.
- [BM93] G. C. Barker und A. Mehta. Size segregation mechanisms. *Nature*, 364:486, 1993.

- [BM95] M. Bourzutschky und J. Miller. Granular convection in a vibrated fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 74:2216, 1995.
- [BMG93] G. C. Barker, A. Mehta und M. J. Grimson. Comment on “three-dimensional model for particle size segregation by shaking”. *Phys. Rev. Lett.*, 70(14):2194, 1993.
- [BNKN96] E. Ben-Naim, J. B. Knight und E. R. Nowak. Slow relaxation in granular compaction. *J. Chem. Phys.*, 100:6778, 1996.
- [BP93] H. Besler und L. Pfeiffer. The tertiary Proto-Erg of the Namib: Depositional environment of the Tsondab sandstone in Namibia. *J. Namibia Scient. Soc.*, 44:7, 1993.
- [BPT95] V. Buchholtz, T. Pöschel und H.-J. Tillemans. Simulation of rotating drum experiments using non-circular particles. *Physica A*, 216:199, 1995.
- [BR70] R. L. Brown und J. C. Richards. *Principles of Powder Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1970.
- [BR88] R. J. Bathurst und L. Rothenburg. Micromechanical aspects of isotropic granular assemblies with linear contact interactions. *J. Appl. Mech.*, 55:17, 1988.
- [Bri45] L. J. Briggs. Methods for measuring the coefficient of restitution and the spin of a ball. *J. of Research of the National Bureau of Standards*, 34:1–23, 1945.
- [BSHP96] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. M. Hertzsch und T. Pöschel. Model for collisions in granular gases. *Phys. Rev. E*, 53(5):5382, 1996.
- [BTW87] P. Bak, C. Tang und K. Wiesenfeld. Self-organized criticality: An explanation of $1/f$ noise. *Phys. Rev. Lett.*, 59(4):381–384, 1987.
- [Bug84] H. Buggisch. Langsame Relativbewegung von festen Partikeln in Strömungsfeldern - Anwendungsbeispiele aus der mechanischen Verfahrenstechnik. *Zeitsch. f. angew. Math. u. Mech.*, 64:T3, 1984.
- [Cam90] C. S. Campbell. Rapid granular flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 22:57, 1990.
- [CB85] C. S. Campbell und C. E. Brennen. Computer simulation of granular shear flows. *J. Fluid. Mech.*, 151:167, 1985.
- [CB95] F. Cantelaube und D. Bideau. Radial segregation in a 2d drum: Experimental analysis. *Europhys. Lett.*, 30:133, 1995.
- [CDBR95] F. Cantelaube, Y. L. Duparcmeur, D. Bideau und G. H. Ristow. Geometrical analysis of avalanches in a 2d drum. *J. Phys. I France*, 5:581–596, 1995.

- [CDFL93] M. Caponeri, S. Douady, S. Fauve und C. Laroche. Spatiotemporal dynamics of avalanches in a rotating cylinder. Vorabdruck, 1993.
- [CDR92] E. Clément, J. Duran und J. Rajchenbach. Experimental study of heaping in a two-dimensional “sandpile”. *Phys. Rev. Lett.*, 69(8):1189, 1992.
- [CF70] P. K. Chaudhuri und D. W. Fuerstenau. The effect of mixing aids on the kinetics of mixing in a rotating drum. *Powder Technol.*, 4:146, 1970.
- [CFH⁺66] D. S. Cahn, D. W. Fuerstenau, T. W. Healy, R. Hogg und H. E. Rose. Diffusional mixing of solid-solid mixing. *Nature*, 209:494, 1966.
- [CH93] M. C. Cross und P. C. Hohenberg. *Rev. Mod. Phys.*, 65:851, 1993.
- [Cho95] Z. T. Chowhan. Segregation of particulate solids Part I. *Pharm. Technol.*, 19:56, 1995.
- [CLB⁺93] E. Clément, S. Luding, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran. Fluidization, condensation and clusterization of a vibrating column of beads. *Int. J. of Mod. Phys. B*, 7(9 & 10):1807–1827, 1993.
- [Cou81] M. Coulomb. Theorie des Machines Simples. *Academie des Sciences*, 10:166, 1781.
- [CR91] E. Clément und J. Rajchenbach. Fluidization of a bidimensional powder. *Europhys. Lett.*, 16(2):133, 1991.
- [CRD95] E. Clément, J. Rajchenbach und J. Duran. Mixing of a granular material in a bidimensional rotating drum. *Europhys.Lett.*, 30(1):7–12, 1995.
- [CS79] P. A. Cundall und O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47, 1979.
- [CSB76] M. H. Cooke, D. J. Stephens und J. Bridgewater. Powder mixing - a literature survey. *Powder Technol.*, 15:1, 1976.
- [CVRD96] E. Clément, L. Vanel, J. Rajchenbach und J. Duran. Pattern formation in a vibrated granular layer. *Phys Rev. E*, 53(3):2972–2975, 1996.
- [CW67] J. F. Carr und D. M. Walker. An annular shear cell for granular materials. *Powder Technol.*, 1:369, 1967.
- [CWHB96] W. Cooke, S. Warr, J. M. Huntley und R. C. Ball. Particle size segregation in a two-dimensional bed undergoing vertical vibration. *Phys. Rev. E*, 53:2812, 1996.
- [CZ92] C. S. Campbell und Y. Zhang. The interface between fluid-like and solid-like behavior in granular flows. In *Advances in Micromechanics of Granular Materials - Proc. 2nd Japan Sem.*, Seite 261, Amsterdam, 1992. Elsevier.
- [DB97] P. Deltour und J.-L. Barrat. Quantitative study of a freely cooling granular medium. *J. Phys. I France*, 7:137–151, 1997.

- [DBW96] S. Dippel, G. G. Batrouni und D. E. Wolf. Collision-induced friction in the motion of a single particle on a bumpy inclined line. *Phys. Rev. E*, 54:6845, 1996.
- [DE96] S. Diebels und W. Ehlers. On basic equations of multiphase micropolar materials. *Technische Mechanik*, 16:77–88, 1996.
- [Dev90] P. Devillard. Scaling behaviour in size segregation („Brazil Nuts“). *J. Phys. France*, 51:369, 1990.
- [DFL89] S. Douady, S. Fauve und C. Laroche. Subharmonic instabilities and defects in a granular layer under vertical vibrations. *Europhys. Lett.*, 8(7):621, 1989.
- [DL95] S. Dippel und S. Luding. Simulations on size segregation: Geometrical effects in the absence of convection. *J. Phys. I France*, 5:1527, 1995.
- [DLK95] Y. Du, H. Li und L. P. Kadanoff. Breakdown of hydrodynamics in a one-dimensional system of inelastic particles. *Phys. Rev. Lett.*, 74(8):1268–1271, 1995.
- [DMCR94a] J. Duran, T. Mazozi, E. Clément und J. Rajchenbach. Decompaction modes of a two-dimensional “sandpile” under vibration: model and experiments. *Phys. Rev. E*, 50(4):3092–3099, 1994.
- [DMCR94b] J. Duran, T. Mazozi, E. Clément und J. Rajchenbach. Size segregation in a two-dimensional sandpile: convection and arching effects. *Phys. Rev. E*, 50(6):5138–5141, 1994.
- [DML⁺96] J. Duran, T. Mazozi, S. Luding, E. Clément und J. Rajchenbach. Discontinuous decompaction of a falling sandpile. *Phys. Rev. E*, 53(2):1923, 1996.
- [DR62] M. B. Donald und B. Roseman. Mixing and de-mixing of solid particles; Part I, II, III. *Brit. Chem. Eng.*, 7(10):749, 823, 922, 1962.
- [Dra90] T. G. Drake. Structural features in granular flows. *J. of Geophysical Research*, 95(B6):8681–8696, 1990.
- [DRC93] J. Duran, J. Rajchenbach und E. Clément. Arching effect model for particle size segregation. *Phys. Rev. Lett.*, 70(16):2431–2434, 1993.
- [DYR94] R. N. Dave, J. Yu und A. D. Rosato. Measurement of collisional properties of spheres using high-speed video analysis. Vorabdruck, 1994.
- [Ehl96] W. Ehlers. Grundlegende Konzepte in der Theorie Poröser Medien. *Technische Mechanik* 16, 16(16):63–76, 1996.
- [EJK⁺95] E. E. Ehrichs, H. M. Jaeger, G. S. Karczmar, J. B. Knight, V. Yu. Kuperman und S. R. Nagel. Granular convection observed by magnetic resonance imaging. *Science*, 267:1632–1634, 1995.

- [EM96] S. F. Edwards und C. C. Mounfield. A theoretical model for the stress distribution in granular matter. III: Forces in sandpiles. *Physica A*, 226:25, 1996.
- [EO89a] S. F. Edwards und R. B. S. Oakeshott. Theory of powders. *Physica A*, 157:1080, 1989.
- [EO89b] S. F. Edwards und R. B. S. Oakeshott. The transmission of stress in an aggregate. *Physica D*, 38:88–92, 1989.
- [ER89] P. Evesque und J. Rajchenbach. Instability in a sand heap. *Phys. Rev. Lett.*, 62(1):44, 1989.
- [Eve85] R. M. Everson. Chaotic dynamics of a bouncing ball. *Physica D*, 19:355, 1985.
- [Far31] M. Faraday. *Philos. Trans. R. Soc. London*, 52:299, 1831.
- [FB90] G. Fütterer und H. Buggisch. Schnelles Fließen von trockenen Schüttgütern in konvergenten Schächten. *Z. angew. Math. Mech.*, 70:T 385, 1990.
- [FCMS⁺96] V. Frette, K. Christensen, A. Malthe-Sorensen, J. Feder, T. Jossang und P. Meakin. Avalanche dynamics in a pile of rice. *Nature*, 379:49–51, 1996.
- [FDL89] S. Fauve, S. Douady und C. Laroche. Collective behaviours of granular masses under vertical vibrations. *J. Phys. C3*, 50:187–189, 1989.
- [FH93] E. G. Flekkoy und H. J. Herrmann. Lattice Boltzmann models for complex fluids. *Physica A*, 199:1, 1993.
- [FLCA94] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang und K. Allia. Measurements of the collision properties of small spheres. *Phys. Fluids*, 6(3):1108–1115, 1994.
- [GB92] A. Gervois und D. Bideau. Some geometrical properties of two-dimensional hard disk packings. In D. Bideau, ed., *Disorder and Granular Media*, Amsterdam, 1992. North Holland.
- [GDZ95] J. D. Goddard, A. K. Didwania und X. Zhuang. Computer simulations and experiment on the quasistatic mechanics and transport properties of granular materials. In E. Guazzelli and L. Oger, eds., *Mobile Particulate Systems*, Seite 261, Dordrecht, 1995. Kluwer Academic Publishers.
- [GH93] R. Greve und K. Hutter. Motion of a granular avalanche in a convex and concave chute: Experiments and theoretical predictions. *Phil. Trans. Royal Soc. London A*, 342:573–600, 1993.
- [GHo92a] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann und S. Sokołowski. Molecular dynamics simulation of powder fluidization in two dimensions. *Physica A*, 189:437, 1992.

- [GHo92b] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann und S. Sokołowski. Two-dimensional powder transport on a vibrating belt. *J. Phys. II*, 2:1389, 1992.
- [GHPo96] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann, T. Pöschel und S. Sokołowski. Molecular dynamics simulation of size segregation in three dimensions. *J. Stat. Phys.*, 82:443, 1996.
- [GHS92] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann und S. Sokołowski. Convection cells in vibrating granular media. *Phys. Rev. Lett.*, 69(9):1371, 1992.
- [GKB91a] S. D. Gupta, D. V. Khakhar und S. K. Bhatia. Axial segregation of particles in a horizontal rotating cylinder. *Chemical Engineering Science*, 46(5/6):1513, 1991.
- [GKB91b] S. D. Gupta, D. V. Khakhar und S. K. Bhatia. Axial transport of granular solids in horizontal rotating cylinders. *Powder Technol.*, 67:145, 1991.
- [God86] J. D. Goddard. Microstructural origins of continuum stress fields- a brief history and some unresolved issues. In D. DeKee and P. N. Kaloni, eds., *Recent Developments in Structered Continua. Pitman Research Notes in Mathematics No. 143*, Seite 179, New York, 1986. Longman, J. Wiley.
- [Gol64] W. Goldsmith. *IMPACT, The theory and physical behavior of colliding solids*. Edward Arnold, London, 1964.
- [GR96] E. L. Grossman und B. Roman. Density variations in a one-dimensional granular system. *Phys. Fluids*, 8:3218, 1996.
- [Gro97] E. L. Grossman. The effects of container geometry on granular convection. Vorabdruck, 1997.
- [GS94] C. L. Gardner und D. G. Schaeffer. Numerical simulation of uniaxial compression of a granular material with wall friction. *SIAM J. Appl. Math.*, 54(6):1676, 1994.
- [GS95] A. Goldshtein und M. Shapiro. Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 1. General hydrodynamic equations. *J. Fluid Mech.*, 282:75–114, 1995.
- [GSG95] A. Goldshtein, M. Shapiro und C. Gutfinger. Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 3. Self-similar shock-wave propagation. Vorabdruck, 1995.
- [GSMF95] A. Goldshtein, M. Shapiro, L. Moldavsky und M. Fichman. Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 2. Wave propagation through vibrofluidized granular layers. *J. Fluid Mech.*, 287:349–382, 1995.
- [GT96] I. Goldhirsch und M.-L. Tan. The single-particle distribution function for rapid granular shear flows of smooth inelastic disks. Vorabdruck, 1996.

- [GTZ93] I. Goldhirsch, M.-L. Tan und G. Zanetti. A molecular dynamical study of granular fluids I: The unforced granular gas in two dimensions. *Journal of Scientific Computing*, 8:1, 1993.
- [Gud96a] G. Gudehus. A comprehensive constitutive equation for granular materials. *Soils and Foundations*, 36(1):1–12, 1996.
- [Gud96b] G. Gudehus. Constitutive relations for granulate-liquid mixtures with a pectic constituent. *Mechanics of Materials*, 22:93–103, 1996.
- [Gud96c] G. Gudehus, ed. *Silos -Research and Practice*, SFB 219 - Universität Karlsruhe, 1996. Universität Karlsruhe.
- [GZ87] G. Guercio und V. Zanetti. Determination of gravitational acceleration using a rubber ball. *Am. J. Phys.*, 55((1)):59, 1987.
- [GZ93] J. Goldhirsch und G. Zanetti. Clustering instability in dissipative gases. *Phys. Rev. Lett.*, 70(11):1619–1622, 1993.
- [GZ96] G. Giese und A. Zippelius. Collision properties of one-dimensional granular particles with internal degrees of freedom. *Phys. Rev. E*, 54:4828, 1996.
- [GZBN97] E. L. Grossman, T. Zhou und E. Ben-Naim. Towards granular hydrodynamics in two-dimensions. *Phys. Rev. E*, erscheint im April 1997.
- [Haf83] P. K. Haff. Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon. *J. Fluid Mech.*, 134:401–430, 1983.
- [Hag52] Hagen. Über den Druck und die Bewegung des trockenen Sandes. *Monatsberichte der königlich, preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, Seite 35, 19. Jan. 1852.
- [HCHF66] R. Hogg, D. S. Cahn, T. W. Healy und D. W. Fuerstenau. Diffusional mixing in an ideal system. *Chem. Eng. Sc.*, 21:1025, 1966.
- [Her82] H. Hertz. *J. für die reine u. angew. Math.*, 92:136, 1882.
- [Her92] H. J. Herrmann. Simulation of granular media. *Physica A*, 191:263, 1992.
- [Her93] H. J. Herrmann. On the thermodynamics of granular media. *J. Phys. II France*, 3:427, 1993.
- [HHR97] J. Hemmingsson, H. J. Herrmann und S. Roux. On stress networks in granular media. *J. Phys. I*, 7:291–302, 1997.
- [HK92] P. J. Hoogerbrugge und J. M. V. A. Koelman. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *Europhys. Lett.*, 19:155–160, 1992.
- [HK94] K. M. Hill und J. Kakalios. Reversible axial segregation of binary mixtures of granular materials. *Phys. Rev. E*, 49(5):R3610, 1994.

- [HK95a] K. M. Hill und J. Kakalios. Reversible axial segregation of rotating granular media. *Phys. Rev. E*, 52(4):4393, 1995.
- [HK95b] W. G. Hoover und O. Kum. Non-equilibrium simulations. *Molecular Physics*, 86:685–695, 1995.
- [HKPS95] K. Hutter, T. Koch, C. Pluess und S. B. Savage. The dynamics of avalanches of granular materials from initiation to runout. Part II. Experiments. *Acta Mechanica*, 109:127–165, 1995.
- [Hon93] D. C. Hong. Stress distribution of a hexagonally packed granular pile. *Phys. Rev. E*, 47(1):760–762, 1993.
- [HPH+94] W. G. Hoover, T. G. Pierce, C. G. Hoover, J. O. Shugart, et al. Molecular dynamics, smoothed-particle applied mechanics und irreversibility. *Computers & Mathematics with Applications*, 28:155–174, 1994.
- [HR94] K. Hutter und K. R. Rajagopal. On flows of granular materials. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 6:81–139, 1994.
- [HS83] K. Hutter und T. Scheiwiler. Rapid plane flow of granular materials down a chute. In *Mechanics of granular media – New models and constitutive relations*, Amsterdam, 1983. Elsevier.
- [HSR96] K. Hutter, B. Svendsen und D. Rickenmann. Debris flow modeling, a review. *Continuum Mech. and Thermod.*, 8:1–35, 1996.
- [HSY86] K. Hutter, F. Szidarovszky und S. Yakowitz. Plane steady shear flow of a cohesionless granular material down an inclined plane: A model for flow avalanches. part I: Theory. *Acta Mechanica*, 63:87–112, 1986.
- [Hun93] J. M. Huntley. Vacancy effects on the force distribution in a two-dimensional granular pile. *Phys. Rev. E*, 48(5):4099–4101, 1993.
- [HW86] P. K. Haff und B. T. Werner. Computer simulation of the mechanical sorting of grains. *Powder Technol.*, 48:239–245, 1986.
- [HYH95] H. Hayakawa, S. Yue und D. C. Hong. Hydrodynamic description of granular convection. *Phys. Rev. Lett.*, 75(12):2328, 1995.
- [HYR+92] D. C. Hong, S. Yue, J. K. Rudra, M. Y. Choi und Y. W. Kim. Granular relaxation under tapping and the traffic problem. *Mod. Phys. Lett. B*, 6:761–771, 1992.
- [Jan95] H. A. Janssen. Versuche über Getreidedruck in Silozellen. *Zeitschr. Vereines deutscher Ingenieure*, 39(35):1045–1049, 1895.
- [JC79] J. T. Jenkins und S. C. Cowin. Theories for flowing granular materials. In S. C. Cowin, ed., *Mechanics Applied to the Transport of Bulk Materials*, New York, 1979. Am. Soc. Mech. Eng.

- [JLN89] H. M. Jaeger, C.-h. Liu und S. R. Nagel. Relaxation at the angle of repose. *Phys. Rev. Lett.*, 62(1):40–43, 1989.
- [JM88] R. Jullien und P. Meakin. Ballistic deposition and segregation of poly-disperse spheres. *Europhys. Lett.*, 6(7):629, 1988.
- [JM90] R. Jullien und P. Meakin. Mechanisms for particle size segregation in three dimensions. *Nature*, 344:425, 1990.
- [JM91] R. Jullien und P. Meakin. Stability of two-dimensional packings of disks built with ballistic deposition. *J. Phys. I*, 1:1263, 1991.
- [JM92a] M. Jean und J. J. Moreau. Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*, Seiten 31–48, Lausanne, Switzerland, 1992. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- [JM92b] R. Jullien und P. Meakin. Three-dimensional model for particle-size segregation by shaking. *Phys. Rev. Lett.*, 69(4):640, 1992.
- [JMP93a] R. Jullien, P. Meakin und A. Pavlovitch. Jullien and meakin and pavlovitch reply. *Phys. Rev. Lett.*, 70(14):2195, 1993.
- [JMP93b] R. Jullien, P. Meakin und A. Pavlovitch. Particle size segregation by shaking in two- dimensional disc packings. *Europhys. Lett.*, 22(7):523, 1993.
- [JN92] H. M. Jaeger und S. R. Nagel. Physics of the granular state. *Science*, 255:1523, 1992.
- [JS83] J. T. Jenkins und S. B. Savage. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *J. Fluid Mech.*, 130:187–202, 1983.
- [KEJK95] V.Yu. Kuperman, E. E. Ehrichs, H. M. Jaeger und G. S. Karczmar. A new technique for differentiating between diffusion and flow in granular media using magnetic resonance imaging. *Rev. Sci. Instrum.*, 66(8):4350–4355, 1995.
- [KEK⁺96] J. B. Knight, E. E. Ehrichs, V.Yu. Kuperman, J. K. Flint, H. M. Jaeger und S. R. Nagel. Experimental study of granular convection. *Phys. Rev. E*, 54(5):5726–5738, 1996.
- [KFL⁺95] J. B. Knight, C. G. Fandrich, C. N. Lau, H. M. Jaeger und S. R. Nagel. Density relaxation in a vibrated granular material. *Phys. Rev. E*, 51(5):3957–3962, 1995.
- [KGH94] T. Koch, R. Greve und K. Hutter. Unconfined flow of granular avalanches along a partly curved surface. II. Experiments and numerical computations. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 445:415–435, 1994.

- [KJN93] J. B. Knight, H. M. Jaeger und S. R. Nagel. Vibration-induced size separation in granular media: The convection connection. *Phys. Rev. Lett.*, 70(24):3728–3731, 1993.
- [KK87] G. Kuwabara und K. Kono. Restitution coefficient in a collision between two spheres. *Japanese Journal of Applied Physics*, 26(8):1230–1233, 1987.
- [KMP⁺95] G. A. Kohring, S. Melin, H. Puhl, H. J. Tillemans und W. Vermöhlen. Computer simulations of critical, non-stationary granular flow through a hopper. *Comput. Methods in Appl. Mechanics and Eng.*, 124:2273, 1995.
- [Kni97] J. B. Knight. The boundaries of granular convection. *Phys. Rev. E*, erscheint im März 1997.
- [Koh94] G. A. Kohring. Computer simulations of granular materials: the effect of mesoscopic forces. *J. Phys. I*, 4:1779, 1994.
- [Koh95] G. A. Kohring. Studies of diffusional mixing in rotating drums via computer simulations. *J. Phys. I France*, 5:1551, 1995.
- [Kol91] D. Kolymbas. An outline of hypoplasticity. *Arch. App. Mech.*, 61:143–154, 1991.
- [KWG96] A. Kudrolli, M. Wolpert und J. P. Gollub. Cluster formation due to collisions in granular media. Vorabdruck, 1996.
- [Lac54] P. M. C. Lacey. Developments in the theory of particle mixing. *J. Appl. Chem.*, 4:257, 1954.
- [LCB⁺94a] 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*, 50:4113, 1994.
- [LCB⁺94b] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran. The onset of convection in molecular dynamics simulations of grains. *Phys. Rev. E*, 50:R1762, 1994.
- [LCB⁺94c] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran. Studies of columns of beads under external vibrations. *Phys. Rev. E*, 49(2):1634, 1994.
- [LCB⁺95] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran. Interaction laws and the detachment effect in granular media. In *Fractal Aspects of Materials*, Vol. 367, Seite 495, Pittsburgh, Pennsylvania, 1995. Materials Research Society, Symposium Proceedings.
- [LCH92] K. Liffman, D.Y.C. Chan und B. D. Hughes. Force distribution in a two dimensional sandpile. *Powder Technol.*, 72:255–267, 1992.

- [LCH94] K. Liffman, D.Y.C. Chan und B. D. Hughes. On the stress depression under a sandpile. *Powder Technol.*, 78:263–271, 1994.
- [LCRD96] S. Luding, E. Clément, J. Rajchenbach und J. Duran. Simulations of pattern formation in vibrated granular media. *Europhys. Lett.*, 36(4):247–252, 1996.
- [LD96] M. Lee und J. W. Dufty. Long wavelength instability for uniform shear flow. Vorabdruck, 1996.
- [LDCR96a] S. Luding, J. Duran, E. Clément und J. Rajchenbach. Computer simulations and experiments of dry granular media: Polydisperse disks in a vertical pipe. In *Proc. of the 5th Chemical Engineering World Congress*, San Diego, 1996. AIChE.
- [LDCR96b] S. Luding, J. Duran, E. Clément und J. Rajchenbach. Segregation of particulate solids: Segregation via convection. *Pharm. Technol.*, 20(8):42–44, 1996.
- [LDCR96c] S. Luding, J. Duran, E. Clément und J. Rajchenbach. Simulations of dense granular flow: Dynamic arches and spin organization. *J. Phys. I France*, 6:823–836, 1996.
- [LDF89] C. Laroche, S. Douady und S. Fauve. Convective flow of granular masses under vertical vibrations. *J. Phys.*, 50:699–706, 1989.
- [LDM⁺96] S. Luding, J. Duran, T. Mazozi, E. Clément und J. Rajchenbach. Simulations of granular flow: Cracks in a falling sandpile. In D. E. Wolf, M. Schreckenberg und A. Bachem, eds., *Traffic and Granular Flow*, Singapore, 1996. World Scientific.
- [Lee95] J. Lee. Scaling behavior of granular particles in a vibrating box. *Physica A*, 219:305–326, 1995.
- [Lei94] M. Leibig. Model for the propagation of sound in granular materials. *Phys. Rev. E*, 49(2):1647–1656, 1994.
- [LH93] J. Lee und H. J. Herrmann. Angle of repose and angle of marginal stability: Molecular dynamics of granular particles. *J. Phys. A*, 26:373, 1993.
- [LH94] S. J. Linz und P. Hänggi. Effect of vertical vibrations on avalanches in granular systems. *Phys. Rev. E*, 50:3464, 1994.
- [LH95] S. J. Linz und P. Hänggi. A minimal model for avalanches in granular systems. *Phys. Rev. E*, 51:2538, 1995.
- [LHB94] S. Luding, H. J. Herrmann und A. Blumen. Scaling behavior of 2-dimensional arrays of beads under external vibrations. *Phys. Rev. E*, 50:3100, 1994.

- [Lin96] S. Linz. Phenomenological modeling of the compaction dynamics of shaken granular systems. *Phys. Rev. E*, 54:2925–2930, 1996.
- [LJN91] C.-h. Liu, H. M. Jaeger und S. R. Nagel. Finite-size effects in a sandpile. *Phys. Rev. A*, 43(12):7091, 1991.
- [LL89] L. D. Landau und E. M. Lifschitz. *Elastizitätstheorie*. Akademie Verlag Dresden, Berlin, 1989.
- [LL94] J. Lee und M. Leibig. Density waves in granular flow: a kinetic wave approach. *J. Phys. I France*, 4:507, 1994.
- [LM93] J. M. Luck und A. Mehta. The bouncing ball with finite restitution: Chattering, locking and chaos. *Phys. Rev. E*, 48(5):3988, 1993.
- [LM97] S. Luding und H.-G. Matuttis. The effect of interaction laws on the stresses in frictionless granular media. In D. E. Wolf and P. Grassberger, eds., *Friction, Arching and Contact Dynamics*, Singapore, 1997. World Scientific.
- [LNS⁺95] C.-h. Liu, S. R. Nagel, D. A. Schecter, S. N. Coppersmith, S. Majumdar, O. Narayan und T. A. Witten. Force fluctuations in bead packs. *Science*, 269:513, 1995.
- [Lub91] B. D. Lubachevsky. How to simulate billiards and similar systems. *J. of Comp. Phys.*, 94(2):255, 1991.
- [Lud95] S. Luding. Granular materials under vibration: Simulations of rotating spheres. *Phys. Rev. E*, 52(4):4442, 1995.
- [Lud96] S. Luding. Langkorn- oder Kurzkornreis ? Lawinenstatistik in Reishau- fen hängt von der Kornform ab. *Physikalische Blätter*, 52(3):203, 1996.
- [Lud97a] S. Luding. Stress distribution in static two dimensional granular model media in the absence of friction. *Phys. Rev. E*, 55:4720–4729, 1997.
- [Lud97b] S. Luding. Surface waves and pattern formation in vibrated granular media. In *Powders & Grains 97*, Amsterdam, 1997. Balkema.
- [Mad95] J. Maddox. Towards unequal partition of energy? *Nature*, 374:11–11, 1995.
- [Mat65] H. Matthée. Segregation phenomena relating to bunkering of bulk materials: theoretical considerations and experimental investigations. *Powder Technol.*, 1:265, 1965.
- [MB91] A. Mehta und G. C. Barker. Vibrated powders: A microscopic approach. *Phys. Rev. Lett.*, 67(3):364, 1991.
- [MB97] S. McNamara und J.-L. Barrat. The energy flux into a fluidized granular medium at a vibrating wall. *Phys. Rev. E*, 55:7767, 1997.

- [MBD94] R. Mazighi, B. Bernu und F. Delyon. Steady state of a column of shaked inelastic spheres. *Phys. Rev. E*, 50:4551, 1994.
- [MBF76] N. Maw, J. R. Barber und J. N. Fawcett. The oblique impact of elastic spheres. *Wear*, 38:101, 1976.
- [MBF81] N. Maw, J. R. Barber und J. N. Fawcett. The role of elastic tangential compliance in oblique impact. *J. Lubrication Tech.*, 103:74, 1981.
- [McN96] S. McNamara. Two dimensional granular medium driven by a vibrating wall. Vorabdruck, 1996.
- [MD53] R. D. Mindlin und H. Deresiewicz. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. *J. of Appl. Mech.*, 20:327, 1953.
- [ME89] A. Mehta und S. F. Edwards. Statistical mechanics of powder mixtures. *Physica A*, 157:1091, 1989.
- [ME90] A. Mehta und S. F. Edwards. A phenomenological approach to relaxation in powders. *Physica A*, 168:714, 1990.
- [Mel94] S. Melin. Wave propagation in granular assemblies. *Phys. Rev. E*, 49:2353, 1994.
- [MHKS96] H. A. Makse, S. Havlin, P. R. King und H. E. Stanley. Stratification patterns in sandstone. Vorabdruck, 1996.
- [MHKS97] H. A. Makse, S. Havlin, P. R. King und H. E. Stanley. Spontaneous stratification in granular mixtures. Vorabdruck, 1997.
- [Min49] R. D. Mindlin. Compliance of elastic bodies in contact. *J. of Appl. Mech.*, 16:259, 1949.
- [MKJ97] T.H. Metcalf, J. B. Knight und H. M. Jaeger. Standing wave patterns in shallow beds of vibrated granular material. *Physica A*, 236:202–210, 1997.
- [ML90] A. Mehta und J. M. Luck. Novel temporal behavior of a nonlinear dynamical system: The completely inelastic bouncing ball. *Phys. Rev. Lett.*, 65(4):393, 1990.
- [ML97a] H.-G. Matuttis und S. Luding. Stresses in piles of polygonal granular particles. In D. E. Wolf und P. Grassberger, eds., *Friction, Arching and Contact Dynamics*, Singapore, 1997. World Scientific.
- [ML97b] S. McNamara und S. Luding. The ratio of kinetic and rotational energy in granular materials. in Vorbereitung, 1997.
- [MLH97] M. Müller, S. Luding und H. J. Herrmann. Simulations of vibrated granular media in 2d and 3d. In D. E. Wolf und P. Grassberger, eds., *Friction, Arching and Contact Dynamics*, Singapore, 1997. World Scientific.

- [MML97] M. Müller, S. McNamara und S. Luding. Analysis of cooling granular materials. in Vorbereitung, 1997.
- [Mon92] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [Mor93] J. J. Moreau. New computation methods in granular dynamics. In *Powders & Grains 93*, Seite 227, Rotterdam, 1993. Balkema.
- [MSMO95] G. Metcalfe, T. Shinbrot, J. J. McCarthy und J. M. Ottino. Avalanche mixing of granular solids. *Nature*, 374:39–42, 1995.
- [MUS94] F. Melo, P. Umbanhowar und H.L. Swinney. Transition to parametric wave patterns in a vertically oscillated granular layer. *Phys. Rev. Lett.*, 72(1):172–175, 1994.
- [MUS95] F. Melo, P. Umbanhowar und H.L. Swinney. Hexagons, kinks und disorder in oscillated granular layers. *Phys. Rev. Lett.*, 75(21):3838–3841, 1995.
- [MY92] S. McNamara und W. R. Young. Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium. *Phys. Fluids A*, 4(3):496, 1992.
- [MY93] S. McNamara und W. R. Young. Kinetics of a one-dimensional granular medium in the quasielastic limit. *Phys. Fluids A*, 5((1)):34, 1993.
- [MY94] S. McNamara und W.R. Young. Inelastic collapse in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 50(1):R28–R31, 1994.
- [MY96] S. McNamara und W.R. Young. Dynamics of a freely evolving, two-dimensional granular medium. *Phys. Rev. E*, 53(5):5089–5100, 1996.
- [Nak94] N. Nakagawa. Axial segregation in a horizontal rotating cylinder. *Chem. Eng. Scien.-Shorter Commun.*, 49:2544, 1994.
- [NCH97] M. Nicodemi, A. Coniglio und H. J. Herrmann. A model for the compaction of granular media. *Physica A* (in Druck), 1997.
- [Ned92] R. M. Nedderman. *Statics and kinematics of granular materials*. Cambr. Univ. Press, Cambridge, 1992.
- [Nes83] V.F. Nesterenko. Propagation of nonlinear compression pulses in granular media. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 24(5):733–743, 1983.
- [NKP+97] E. R. Nowak, J. B. Knight, M. Povinelli, H. M. Jaeger und S. R. Nagel. Density fluctuations in vibrated granular materials. Vorabdruck, 1997.
- [NO93] H. Nishimori und N. Ouchi. Formation of ripple patterns and dunes by wind-blown sand. *Phys. Rev. Lett.*, 71(1):197, 1993.
- [NPJ+97] E. R. Nowak, M. Povinelli, H. M. Jaeger, S. R. Nagel, J. B. Knight und E. Ben-Naim. Studies of granular compaction. In *Powders & Grains*, Seiten 377–380, Rotterdam, 1997. Balkema.

- [OBvNE97] J. A. G. Orza, R. Brito, T. P. C. van Noije und M. H. Ernst. Patterns and long range correlations in idealized granular flows. Vorabdruck, 1997.
- [OR95] S. Ouaguenouni und J.-N. Roux. Compaction of well-coordinated lubricated granular pilings. *Europhys. Lett.*, 32(5):449–453, 1995.
- [OR97] S. Ouaguenouni und J.-N. Roux. Arching without friction: a simple model. In D. E. Wolf and P. Grassberger, eds., *Friction, Arching and Contact Dynamics*, Singapore, 1997. World Scientific.
- [OTH⁺93] T. Ohtsuki, Y. Takemoto, T. Hata, S. Kawai und A. Hayashi. Molecular dynamics study of cohesionless granular materials: Size segregation by shaking. *Int. J. of Mod. Phys. B*, 7(9 & 10):1865–1872, 1993.
- [OUO80] S. Ogawa, A. Umemura und N. Oshima. On the equations of fully fluidized granular materials. *J. Appl. Math. Phys.*, 31:483, 1980.
- [Oya39] Y. Oyama. Horizontal rotating cylinder. *Bull. Inst. Phys. Chem. Res. (Tokyo), Rep.*, 18:600, 1939.
- [PB85a] P. Pieranski und R. Bartolino. Jumping particle model. modulation modes and resonant response to a periodic perturbation. *J. Phys.*, 46:687, 1985.
- [PB85b] P. Pieranski und R. Bartolino. Jumping particle model. modulation modes and resonant response to a periodic perturbation. *J. Phys.*, 46:687, 1985.
- [PB93] H.K. Pak und R. P. Behringer. Surface waves in vertically vibrated granular materials. *Phys. Rev. Lett.*, 71(12):1832–1835, 1993.
- [PB95a] T. Pöschel und V. Buchholtz. Complex flow of granular material in a rotating cylinder. *Chaos, Solitons und Fractals*, 5:1901, 1995.
- [PB95b] T. Pöschel und V. Buchholtz. Molecular dynamics of arbitrarily shaped granular particles. *J. Phys. I France*, 5(11):1431–1455, 1995.
- [PG96] O. Pouliquen und R. Gutfraind. Stress fluctuations and shear zones in quasi-static granular chute flows. *Phys. Rev. E*, 53(1):552, 1996.
- [PH94] G. Peng und H. J. Herrmann. Density waves of granular flow in a pipe using lattice-gas automata. *Phys. Rev. E*, 49(3):1796, 1994.
- [PH95] T. Pöschel und H. J. Herrmann. Size segregation and convection. *Europhys. Lett.*, 29:123, 1995.
- [PHK95] H. A. Posch, W. G. Hoover und O. Kum. Steady-state shear flows via nonequilibrium molecular dynamics and smooth-particle applied mechanics. *Phys. Rev. E*, 52:1711–1720, 1995.

- [Pie83] P. Pieranski. Jumping particle model. period doubling cascade in an experimental system. *J. Phys.*, 44:573, 1983.
- [Pie88] P. Pieranski. Direct evidence for the suppression of period doubling in the bouncing-ball model. *Phys. Rev. A*, 37(5):1782, 1988.
- [Pie97a] P. Pieranski. How much power is needed to make the bouncing ball bounce? Vorabdruck, 1997.
- [Pie97b] P. Pieranski. Models of nonlinear dynamics. the silent juggler modes of the bouncing ball. Vorabdruck, 1997.
- [PKF85] P. Pieranski, Z. J. Kowalik und M. Franaszek. Jumping particle model. a study of the phase space of a non-linear dynamical system below its transition to chaos. *J. Phys.*, 46:681, 1985.
- [Pö94] T. Pöschel. Recurrent clogging and density waves in granular material flowing through a narrow pipe. *J. Phys. I France*, 4:499, 1994.
- [PT90] K. Pye und H. Tsoar. *Aeolian sand and desert dunes*. Unwin Hyman, London, 1990.
- [Puh92] H. Puhl. On the modelling of real sand piles. *Physica A*, 182:295, 1992.
- [Puh93] H. Puhl. Sandpiles on random lattices. *Physica A*, 197:14, 1993.
- [PvDB95] H.K. Pak, E. van Doorn und R. P. Behringer. Effects of ambient gases on granular materials under vertical vibration. *Phys. Rev. Lett.*, 74(23):4643–4646, 1995.
- [Raj90] J. Rajchenbach. Flow in powders: From discrete avalanches to continuous regime. *Phys. Rev. Lett.*, 65(18):2221–2224, 1990.
- [Raj91] J. Rajchenbach. Dilatant process for convective motion in a sand heap. *Europhys. Lett.*, 16(2):149, 1991.
- [Ram18] C. V. Raman. The photographic study of impact at minimal velocities. *Phys. Rev.*, 12:442–447, 1918.
- [Rap95] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [Ray06] O. M. Rayleigh. On the production of vibrations by forces of relatively long duration, with application to the theory of collisions. *Phil. Mag. Series 6*, 11:283–291, 1906.
- [RBR96] F. Radjai, L. Brendel und S. Roux. Nonsmoothness, indeterminacy und friction in two- dimensional arrays of rigid particle. *Phys. Rev. E*, 54(1):861, 1996.
- [RC71] A. R. Rogers und J. A. Clements. The examination of segregation of granular materials in a tumbling mixer. *Powder Technol.*, 5:167, 1971.

- [RCLB94] G. H. Ristow, F. Cantelaube-Lebec und D. Bideau. Particle size segregation in a two-dimensional rotating drum. *Europhys. Lett.*, 0:0, 1994.
- [Ree85] J. Reed. Energy losses due to elastic wave propagation during an elastic impact. *J. Phys. D*, 18:2329, 1985.
- [Rey85] O. Reynolds. On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. *Philos. Mag. Ser. 5*, 50-20:469, 1885.
- [RH94] G. H. Ristow und H. J. Herrmann. Density patterns in two-dimensional hoppers. *Phys. Rev. E*, 50(1):R5–R8, 1994.
- [RHB94] F.-X. Rigidel, A. Hansen und D. Bideau. Gravity-driven motion of a particle on an inclined plane with controlled roughness. *Europhys. Lett.*, 28:13, 1994.
- [RHH96] T. Raafat, J. P. Hulin und H. J. Herrmann. Density waves in dry granular media falling through a vertical pipe. *Phys. Rev. E*, 53:4345–4355, 1996.
- [Rim97] M. Rimele. *Zellularautomaten für Sandhaufen*. 1997.
- [Ris96] G. H. Ristow. Dynamics of granular material in a rotating drum. *Europhys. Lett.*, 34(4):263–268, 1996.
- [RJMR96] F. Radjai, M. Jean, J. J. Moreau und S. Roux. Force distribution in dense two-dimensional granular systems. *Phys. Rev. Lett.*, 77(2):274, 1996.
- [RJR⁺94] F.-X. Rigidel, R. Jullien, G. H. Ristow, A. Hansen und D. Bideau. Behaviour of a sphere on a rough inclined plane. *J. Phys. I*, 4:261, 1994.
- [RL93] A. D. Rosato und Y. Lan. Discrete element modeling of vibrating granular beds. In C. Thornton, ed., *Powders & Grains 93*, Seite 241, Rotterdam, 1993. Balkema.
- [RLW91] A. D. Rosato, Y. Lan und D. T. Wang. Vibratory particle size sorting in multi-component systems. *Powder Technol.*, 66:149, 1991.
- [RPS⁺86] A. Rosato, F. Prinz, K. J. Standburg, und R. Swendsen. Monte carlo simulation of particulate matter segregation. *Powder Technol.*, 49:59, 1986.
- [RSDW96] F. Radjai, J. Schäfer, S. Dippel und D. Wolf. Collective friction of an array of particles: A crucial test for numerical algorithms. *Vorabdruck*, 1996.
- [RSP⁺87] A. D. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz, und R. H. Swendsen. Why the Brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking. *Phys. Rev. Lett.*, 58(10):1038, 1987.

- [RTHH97] T. Raafat, V. Terminassian, J. P. Hulin und H. J. Herrmann. Pressure analysis for pneumatic instabilities during dry granular flows in vertical pipes. Vorabdruck, 1997.
- [Sav79] S. B. Savage. Gravity flow of cohesionless granular materials in chutes and channels. *J. Fluid Mech.*, 92:53, 1979.
- [Sav84] S. B. Savage. The mechanics of rapid granular flows. *Adv. Appl. Mech.*, 24:289, 1984.
- [Sav88] S. B. Savage. Streaming motions in a bed of vibrationally fluidized dry granular material. *J. Fluid Mech.*, 194:457–478, 1988.
- [Sav97] S. B. Savage. Problems in the statics and dynamics of granular materials. In *Powders & Grains*, Rotterdam, 1997. Balkema.
- [SB78] D. J. Stephens und J. Bridgwater. The mixing and segregation of cohesionless particulate materials. part i. failure zone formation. *Powder Technol.*, 21:17, 1978.
- [SBU⁺97] M. D. Shattuck, C. Bizon, P. B. Umbanhowar, J. B. Swift und H. L. Swinney. 2d vertically vibrated granular media: Experiment and simulation. In *Powders & Grains*, Rotterdam, 1997. Balkema.
- [SCB90] R. Sondergaard, K. Chaney und C.E. Brennen. Measurements of solid spheres bouncing off flat plates. *Journal of Applied Mechanics*, 57:694–699, 1990.
- [Sch68] J. Schwedes. *Fließverhalten von Schüttgütern in Bunkern*. Verlag Chemie, Weinheim, 1968.
- [Sch97] S. Schöllmann. Modellierung von Reibungsmaterialien. 1997.
- [SDW96] J. Schäfer, S. Dippel und D. E. Wolf. Force schemes in simulations of granular materials. *J.Phys. I France*, 6:5–20, 1996.
- [SF88] S. B. Savage und M. Franaszek. Streaming motions in a bed of vibrationally fluidized dry granular material. *J. Fluid. Mech.*, 194:457, 1988.
- [SH89] S. B. Savage und K. Hutter. The motion of a finite mass of granular material down a rough incline. *J. Fluid Mech.*, 199:177, 1989.
- [SH95] B. Svendsen und K. Hutter. On the thermodynamics of a mixture of isotropic materials with constraints. *Int. J. Eng. Sci.*, 33:2021, 1995.
- [SHB95] F. Spahn, J. M. Hertzsch und N. V. Brilliantov. The role of particle collisions for the dynamics in planetary rings. *Chaos, Solitons & Fractals*, 5:1945, 1995.
- [Shi97] T. Shinbrot. Granular patterns: A competition between randomizing impacts and inelastic collisions. Vorabdruck, 1997.

- [SJF84] L. M. Schwartz, D. L. Johnson und S. Feng. Vibrational modes in granular materials. *Phys. Rev. Lett.*, 52(10):831–834, 1984.
- [SKS90] M. Sibuya, T. Kawai und K. Shida. Equipartition of particles forming clusters by inelastic collisions. *Physica A*, 167:676, 1990.
- [SL88] S. B. Savage und C. K. K. Lun. Particle size segregation in inclined chute flow of dry cohesionless granular solids. *J. Fluid. Mech.*, 189:311, 1988.
- [SN81] J. Smid und J. Novosad. Pressure distribution under heaped bulk solids. *I. Chem. E. Symposium Series*, 63:D3/V/1–12, 1981.
- [Som79] K. Sommer. Powder mixing mechanisms. *J. of Powder & Bulk Solids Technol.*, 3:2–9, 1979.
- [SSJ81] P. A. Smith, C. D. Spencer und D. E. Jones. Microcomputer listens to the coefficient of restitution. *Am. J. Phys.*, 49((2)):136, 1981.
- [SSK96] F. Spahn, U. Schwarz und J. Kurths. Clustering of granular assemblies with temperature dependent restitution and under keplerian differential rotation. Vorabdruck, 1996.
- [SSK97] F. Spahn, U. Schwarz und J. Kurths. Clustering of granular assemblies with temperature restitution under keplerian differential rotation. *Phys. Rev. Lett.*, erscheint 1997.
- [STS93] M. H. Sadd, Q. M. Tai und A. Shukla. Contact law effects on wave propagation in particulate materials using distinct element modeling. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 28(2):251, 1993.
- [SV96] T. Schanz und P. A. Vermeer. Angles of friction and dilatancy of sand. *Geotechnique*, 46:145–152, 1996.
- [SW87] J. Schwedes und H. Wilms. Fließeigenschaften von Schüttgütern. Die verfahrenstechnische Silodimensionierung. *Farbe+Lack*, 93(3):202–206, 1987.
- [Tag92] Y.-h. Taguchi. New origin of a convective motion: Elastically induced convection in granular materials. *Phys. Rev. Lett.*, 69(9):1367, 1992.
- [TB80] D. H. Trollope und B. C. Burman. Physical and numerical experiments with granular wedges. *Géotechnique*, 30(2):137–157, 1980.
- [Ter43] K. Terzaghi. *Theoretical soil mechanics*. J. Wiley, New York, 1943.
- [TG91] P. A. Thompson und G. S. Grest. Granular flow: Friction and the dilatancy transition. *Phys. Rev. Lett.*, 67(13):1751, 1991.
- [TG93] J. Tejchman und G. Gudehus. Silo music and silo-quake experiments and a numerical cosserat approach. *Powder Technol.*, 76:201, 1993.

- [TH95a] H.-J. Tillemans und H. J. Herrmann. Simulating deformations of granular solids under shear. *Physica A*, 217:261–288, 1995.
- [TH95b] E. Trizac und J. P. Hansen. Dynamic scaling behavior of ballistic coalescence. *Phys. Rev. Lett.*, 74(21):4114–4117, 1995.
- [TH95c] E. Trizac und J. P. Hansen. Dynamics and growth of particles undergoing ballistic coalescence. Vorabdruck, 1995.
- [TMC⁺86] N. B. Tuffillaro, T. M. Mello, Y. M. Choi, und A. M. Albano. Period doubling boundaries of a bouncing ball. *J. Phys.*, 47:1477, 1986.
- [TYYT96] T. Tanaka, S. Yonemura, K. Kiriba Yashi und Y. Tsuji. Cluster formation and particle-induced instability in gas-solid flows predicted by the dsmc method. *JSME Int. Journal B*, 39(2):239–245, 1996.
- [UMS96] P.B. Umbanhowar, F. Melo und H.L. Swinney. Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382:793–796, 1996.
- [vB96] S. van Baars. *Discrete Element Analysis of Granular Materials*. Doktorarbeit, Technische Universiteit Delft, Delft, Nederlands, 1996.
- [Ver90] P. A. Vermeer. The orientation of shear bands in biaxial tests. *Géotechnique*, 40:223, 1990.
- [VRD97] L. Vanel, A. D. Rosato und R. N. Dave. Rise regimes of a large sphere in vibrated bulk solids. Vorabdruck, 1997.
- [Was97] C. R. Wassgren. *Vibration of Granular Materials*. Doktorarbeit, California Institute of Technology, Pasadena, California, 1997.
- [WB86] O. R. Walton und R.L. Braun. Viscosity, granular-temperature und stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *Journal of Rheology*, 30(5):949–980, 1986.
- [WB93] O. R. Walton und R.L. Braun. Simulation of rotary-drum and repose tests for frictional spheres and rigid sphere clusters. In *DOE/NSF Workshop on Flow of Particulates and Fluids*, Seiten 1–17, 1993.
- [WBH96] C. Wassgren, C. E. Brennen und M. L. Hunt. A discrete element simulation of a deep bed of granular material subjected to vertical vibrations. Vorabdruck, 1996.
- [WCC97] J. P. Wittmer, M. E. Cates und P. Claudin. Stress propagation and arching in static sandpiles. *J. Phys. I*, 7:39–80, 1997.
- [WCCB96] J. P. Wittmer, P. Claudin, M. E. Cates und J.-P. Bouchaud. An explanation for the central stress minimum in sand piles. *Nature*, 382:336–338, 1996.
- [WD88] H. A. Weaver und L. Dany, eds. *The formation and evolution of planetary systems*. 1988. ISBN 0 521 36633 X.

- [WG97] D. E. Wolf und P. Grassberger, eds. *Friction, Arching and Contact Dynamics*. World Scientific, Singapore, 1997.
- [WH95] S. Warr und J. M. Huntley. Energy input and scaling laws for a single particle vibrating in one dimension. *Phys. Rev. E*, 52(5):5596–5601, 1995.
- [WH96] S. Warr und J.-P. Hansen. Relaxation of local density fluctuations in a fluidized granular medium. *Europhys. Lett.*, 36(8):589–594, 1996.
- [WHB97] C. R. Wassgren, M. L. Hunt und C. E. Brennen. Investigation of $f/2$ and $f/4$ waves in granular beds subject to vertical, sinusoidal oscillations. In *Powders & Grains*, Rotterdam, 1997. Balkema.
- [WHJ95] S. Warr, J. M. Huntley und G. T. H. Jacques. Fluidization of a two-dimensional granular system: Experimental study and scaling behavior. *Phys. Rev. E*, 52(5):5583–5595, 1995.
- [Wie87] W. Wiesel. Inelastic collisions in narrow planetary rings. *Icarus*, 71:78, 1987.
- [Wil76] J. C. Williams. The segregation of particulate materials. a review. *Powder Technol.*, 15:245, 1976.
- [WJH94] S. Warr, G. T. H. Jacques und J. M. Huntley. Tracking the translational and rotational motion of granular particles: use of high-speed photography and image processing. *Powder Technol.*, 81:41–56, 1994.
- [ZC92] Y. Zhang und C. S. Campbell. The interface between fluid-like and solid-like behaviour in two-dimensional granular flows. *J. Fluid Mech.*, 237:541, 1992.
- [ZLL⁺94] O. Zik, D. Levine, S. G. Lipson, S. Shtirkman und J. Stavans. Rotationally induced segregation of granular material in a horizontal rotating cylinder. *Phys. Rev. Lett.*, 73(5):644, 1994.
- [ZSS91] C. Y. Zhu, A. Shukla und M. H. Sadd. Prediction of dynamic contact loads in granular assemblies. *J. of Applied Mechanics*, 58:341, 1991.

26 Danksagung

Zuerst sei Dr. Eric Clément gedankt, der mich im Frühjahr 1991 zur Erforschung granularer Medien angeregt und mich auch später im Laufe unserer Zusammenarbeit oft inspiriert hat. Während meiner Laufbahn habe ich immer wieder von den Qualitäten meiner Vorgesetzten profitiert. Unter anderem habe ich von Prof. Blumen gelernt, wie man eine Publikation sorgfältig vorbereitet, bei Prof. Jacques Duran habe ich neben seiner gesunden Einstellung zur Arbeit und seinen inspirierten Fragestellungen auch das Fliegen genossen, und durch Prof. Herrmann habe ich erst erkannt wie wichtig Zeit ist. Prof. Hans Herrmann der mir die Gelegenheit gegeben hat, meine Habilitation in Stuttgart an seinem Lehrstuhl vorzubereiten, unterstützte mich immer wieder durch zahlreiche Ermunterungen und fachliche Diskussionen.

Bei der Verbesserung der Qualität dieser Arbeit und insbesondere bei der Suche nach einem seltsamen Strich, den ich immer wieder an interessanten Stellen anzu bringen verstand, haben (in zufälliger Reihenfolge) Sabine Dippel, Gerlinde Luding, Marlies Parsons, Regina Luding, Dirk Ammerlahn, Stefan Schwarzer, Reinhard Fischer und Steffen Schöllmann mitgewirkt. Unsere Systemadministratoren, darunter vor allem Matthias Müller und Stefan Schwarzer, haben viele Tage und vor allem Nächte ihres Lebens damit zugebracht unserer Arbeitsgruppe am ICA 1 die Arbeit überhaupt zu ermöglichen.

An dieser Stelle möchte ich mich auch bei meinen Eltern bedanken, die mich auf die rechte Bahn gebracht haben. Mit meiner Frau Gerlinde konnte ich immer über Sand diskutieren und meine Theorien an ihrem, nicht durch ein Physikstudium vorbelasteten, Intellekt erproben. Sie hatte immer Verständnis für meine Arbeit und war manchmal schon zufrieden, wenn ich an einem Tag in der Woche Zeit für sie fand.