

Clusterbildung in granularen Gasen

Von der Fakultät Mathematik und Physik
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde
eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von
Stefan Miller
aus Stuttgart

Fachbereich Physik, Universität Stuttgart
2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1	Algorithmik	7
2	Ereignisdynamik	9
2.1	Grundlegender Ablauf	11
2.2	Datenstrukturen	12
2.3	Simulationsraum	13
2.4	Zustandsaktualisierung	16
2.5	Ereignisberechnung	23
2.6	Zusammenfassung	26
3	Parallelisierung	29
3.1	Gebietszerlegung	30
3.2	Dynamische Lastverteilung	32
3.3	Kausale Ordnung	33
3.4	Fehlerkorrektur	36
3.5	Paralleler Algorithmus	37
3.6	Parallele Rechenleistung	43
3.7	Zusammenfassung	49

II Clusterbildung	51
4 Granulare Gase	53
4.1 Modellierung	54
4.2 Kinetische Gastheorie	59
4.3 Zustandsgleichung	68
4.4 Clusterbildungs-Instabilität	71
4.5 Zusammenfassung	75
5 Clusterwachstum	77
5.1 Abkühlung	79
5.2 Teilchencluster	88
5.3 Clusterpopulationen	103
5.4 Zusammenfassung	117
6 Zusammenfassung	119
Danksagungen	123
III Anhänge	125
A Berechnungen zur kinetischen Theorie	127
B Stabilitätsanalyse des homogenen Zustands	135
Symbolverzeichnis	139
Abbildungsverzeichnis	143
Literaturverzeichnis	145
English Abstract	155

1 Einleitung

Granulare Medien sind im täglichen Leben allgegenwärtig. Aber sei es nun die Physik des Sandburgenbaus, das Wandern der Dünen in der Wüste, die Bewegungen der Paranüsse im Müsli oder die Planetenbildung aus kosmischem Staub – das Verhalten von granularen Medien ist weit weniger gut verstanden als dasjenige einfacher Festkörper, Flüssigkeiten oder Gase – kann diesen Aggregatzuständen aber durchaus ähneln. Eine einfache analytische Beschreibung von granularen Medien gelingt nur selten; die wichtigsten Untersuchungsmethoden sind daher Computersimulationen.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit granularen Medien geringer mittlerer Dichte, den so genannten granularen Gasen. Von gewöhnlichen Gasen unterscheidet sich ein granulares Gas in erster Linie dadurch, dass es sich aus makroskopischen Teilchen zusammensetzt. Einerseits macht dies die Beschreibung einfacher, da man mit klassischer Physik auskommt und keine quantenmechanischen Effekte berücksichtigen muss, andererseits sind die Teilchenkollisionen wesentlich komplizierter und dissipative Effekte spielen dabei eine wichtige Rolle.

Betrachtet man ein granulares Gas mit homogener Dichte- und Temperaturverteilung¹, so führen die dissipativen Teilchenkollisionen nach und nach zu einer Abkühlung des Systems. Wenn die Dissipation ausreichend stark ist, beobachtet man darüber hinaus aber auch die Bildung von komplexen Strukturen, siehe beispielsweise Abb. 1.1. Es entstehen dichte Teilchencluster mit niedrigerer Temperatur und verdünnte Bereiche mit höherer Temperatur. Diese Inhomogenitäten wachsen immer weiter heran, bis sie schließlich Systemgröße erreicht

¹Mit „Temperatur“ ist hier und im Folgenden ein Maß für die mittlere kinetische Energie der Teilchen gemeint.

haben. Zur Untersuchung dieses Phänomens bedarf es einer sinnvollen Modellierung granularer Gase, der Beschäftigung mit theoretischen Konzepten zu deren Beschreibung und der Auswertung numerischer Experimente.

Ein weiterer Schwerpunkt unserer Untersuchungen soll dabei auch auf der algorithmischen Optimierung und Parallelisierung eines geeigneten Simulationsverfahrens liegen. Daher beschäftigt sich der erste Teil dieser Arbeit ausschließlich mit Algorithmik. Dazu wird in Kapitel 2 die Ereignisdynamik vorgestellt. Dabei handelt es sich um eine Variante der besser bekannten Molekulardynamik. Im Gegensatz zu dieser werden bei der Ereignisdynamik aber nicht stupide die Bewegungsgleichungen aller Teilchen numerisch gelöst. Stattdessen werden die Teilchentrajektorien in Abschnitte mit trivialer zeitlicher Entwicklung und in die Ereignisse, die die Teilchenwechselwirkungen bilden, aufgelöst. Diese werden dann jeweils in einem einzigen Rechenschritt abgearbeitet. Die Ereignisdynamik ist deshalb wesentlich effizienter als die Molekulardynamik, ist aber aufgrund ihrer inhärent seriellen Natur äußerst schwierig zu parallelisieren.

Mit dieser Problematik beschäftigen wir uns im 3. Kapitel. Wir erläutern die Schwierigkeiten, die einer einfachen Parallelisierung des Verfahrens im Wege stehen. Ausgehend von einigen bereits publizierten Vorüberlegungen entwickeln wir dann eine vollständig parallelisierte Version der Ereignisdynamik. Diese beinhaltet auch dynamische Lastverteilung und ist somit besonders gut an inhomogene Systeme (wie z. B. die zu untersuchende Clusterbildung) angepasst.

Im zweiten Teil der Arbeit wenden wir uns dann der Untersuchung granularer Gase zu. Zunächst führen wir in Kapitel 4 ein geeignetes Modell für granulare Gase ein und versuchen mittels kinetischer Gastheorie, hydrodynamischer Stabilitätsanalyse und anderen Verfahren dessen Verhalten zu verstehen. Diese Methoden beschreiben gewisse Aspekte der zeitlichen Entwicklung eines abkühlenden granularen Gases recht gut. Für den interessantesten Effekt, nämlich das Heranwachsen von Teilchenclustern, sind sie jedoch nicht ausreichend.

Das 5. Kapitel beschäftigt sich daher ausführlich mit Computersimulationen von granularen Gasen. Diese haben wir mit Hilfe der im ersten Teil beschriebenen Ereignisdynamik durchgeführt. Wir untersuchen dabei unter anderem das zeitliche Verhalten der Temperatur- und Dichte-Inhomogenitäten sowie die Dynamik der Clusterpopulationen. Bei der Interpretation der Ergebnisse interessieren wir uns insbesondere auch für die Unterschiede und Gemeinsamkeiten

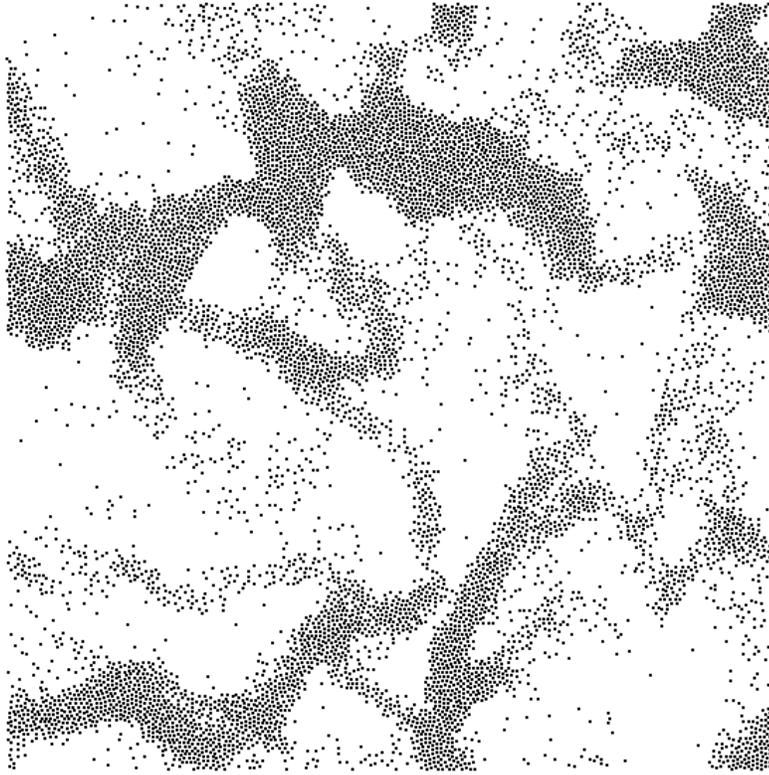


Abbildung 1.1: Beispiel für Clusterbildung: Die abgebildete Momentaufnahme zeigt ein zweidimensionales System aus 10000 Teilchen, die miteinander dissipativ wechselwirken. Nach einiger Zeit hat sich aus der anfänglich homogenen Verteilung eine komplexe, inhomogene Anordnung von Teilchenclustern gebildet. Diese werden im weiteren Verlauf noch weiter anwachsen, bis sie Systemgröße erreicht haben.

von zwei- und dreidimensionalen Systemen.

Schließlich geben wir in Kapitel 6 eine Zusammenfassung der erzielten Resultate.

Im letzten Teil der Arbeit sind dann noch einige mathematisch aufwändigeren Berechnungen und weitere Anhänge gebündelt. Dabei sei insbesondere auf das Symbolverzeichnis verwiesen, in dem sich der Leser über die benutzten mathematischen Konventionen und physikalischen Bezeichnungen informieren kann, sollten sich ihm diese nicht unmittelbar aus dem Text erschließen.

Teil I

Algorithmik: Ereignisdynamik

2 Ereignisdynamik

Die Ereignisdynamik ist ein äußerst effizienter Algorithmus zur Simulation von Vielteilchensystemen. Sie hat nur eine wesentliche Einschränkung: Es wird ein Modell vorausgesetzt, bei dem die Teilchen, abgesehen von diskreten, momentan erfolgenden Wechselwirkungen (den *Ereignissen*) unabhängig sind. Dies stellt eine sehr gute Näherung für all jene physikalischen Probleme dar, bei denen die Wechselwirkungsdauer vernachlässigbar klein gegenüber dem Zeitraum zwischen diesen Wechselwirkungen ist.¹

Ein einfaches Beispiel hierfür, das auch in den folgenden Kapiteln eine wichtige Rolle spielen wird, stellt die Kollision harter Kugeln dar [1, 2]. Aber natürlich ist das Verfahren weder auf Teilchen wie harte Kugeln, noch auf Wechselwirkungen wie Kollisionen beschränkt. Es lässt sich auf so unterschiedliche Gebiete wie granulare Gase [3–5], Flüssigkeiten im Temperaturgradienten [6–8], Polymere [9], biologische Membranen [10, 11], Proteinfaltung [12], Simulationen von Straßenverkehr [13], ökonomische Modelle [14], Kriegs-Simulationen [15, 16] und zahlreiche andere physikalische und nicht-physikalische Systeme erfolgreich anwenden. Der Einfachheit halber wird im Folgenden dennoch hauptsächlich von Kugeln und Stößen die Rede sein.

Die Ereignisdynamik stellt dabei eine schnelle Variante der Molekulardynamik dar. Letztere ist ein *zeitgesteuerter* Algorithmus, erstere ein *ereignisgesteuerter*. Die gewöhnliche Molekulardynamik versucht, die Simulation in einzelne Zeitschritte aufzulösen, in denen dann synchron für alle Teilchen die Bewegungsgleichungen näherungsweise gelöst werden. Die Ereignisdynamik dagegen löst

¹Aber auch bei Problemen mit eigentlich kontinuierlicher Wechselwirkung lässt sich diese oft in eine Reihe einzelner, sukzessiver Ereignisse auflösen. Dann ist die Simulation mit Hilfe der Ereignisdynamik dennoch möglich.

die Simulation in einzelne Ereignisse auf, an denen typischerweise jeweils nur zwei Teilchen beteiligt sind. Diese Ereignisse werden der Reihe nach asynchron abgearbeitet. Dabei brauchen nur die beteiligten Teilchen aktualisiert werden, da die zeitliche Entwicklung der übrigen Teilchen trivial ist.

Während also bei der Molekulardynamik beispielsweise eine einzelne Teilchen-Kollision in zahlreiche kleine Zeitschritte zerlegt werden muss und dies ebenso für alle nicht beteiligten Teilchen zu geschehen hat, ist bei der Ereignisdynamik hierfür nur ein einziger Rechenschritt, der nur zwei Teilchen betrifft, nötig.

In ihrer vereinfachten Form, in der bei jedem Rechenschritt analog zur Molekulardynamik *alle* Teilchen aktualisiert werden, wurde die Ereignisdynamik schon vor längerer Zeit publiziert [17] und schließlich nach und nach weiter entwickelt [18–21]. Die entscheidenden algorithmischen Verbesserungen, die dramatische Effizienz-Steigerungen mit sich brachten, wurden schließlich in [1] publiziert. Dieser Algorithmus, auf dem alle heute gebräuchlichen Ereignisdynamik-Verfahren mehr oder weniger beruhen, ist nunmehr aber auch schon über 10 Jahre lang bekannt.

Die gewöhnliche Molekulardynamik lässt sich einfacher auf beliebige Wechselwirkungen verallgemeinern als die Ereignisdynamik. Aber für zahlreiche physikalische Fragestellungen ist die Ereignisdynamik die bessere Wahl. Der Hauptgrund, warum dennoch das weitaus ineffizientere Molekulardynamik-Verfahren eine viel größere Verbreitung gefunden hat, liegt in dessen Einfachheit – insbesondere wenn man zu parallelisierten Implementierungen übergeht. Die Schwierigkeiten, die bei der Parallelisierung der Ereignisdynamik auftreten, sind in der Tat enorm. Wie sich diese dennoch überwinden lassen, wird in Kapitel 3 erläutert.

Zunächst soll hier aber erst einmal auf die Grundlagen der Ereignisdynamik eingegangen werden. Dazu geben wir in Kapitel 2.1 einen kurzen Überblick über den prinzipiellen Ablauf des Algorithmus. Dann werden in Kap. 2.2 die wesentlichen Datenstrukturen, die der Algorithmus benötigt, eingeführt und in Kap. 2.3 das Design des Simulationsraums vorgestellt. Damit können wir dann in den Kapiteln 2.4 und 2.5 zu den Details der beiden Hauptbestandteile des Algorithmus – *Zustandsaktualisierung* und *Ereignisberechnung* – kommen. Eine kurze Zusammenfassung dieser Ausführungen findet sich schließlich in Kapitel 2.6.

2.1 Grundlegender Ablauf der Ereignisdynamik

Die Ereignisdynamik verarbeitet eine Folge diskreter Ereignisse der Reihe nach eines nach dem anderen. Bei solch einem Ereignis kann es sich beispielsweise um die instantane Kollision zweier Teilchen handeln. Nur diese beiden Teilchen werden dann im aktuellen Iterationsschritt bearbeitet, alle anderen Teilchen bleiben unverändert. Das heißt, dass sich die Zustandsinformation der allermeisten Teilchen nicht auf die gerade aktuelle Simulationszeit bezieht, sondern auf einen Zeitpunkt in der Vergangenheit, an dem das jeweilige Teilchen zuletzt mit anderen Teilchen interagierte.

Die Ereignisverarbeitungs-Schleife ist in Abb. 2.1 skizziert. Diese besteht im Wesentlichen lediglich aus zwei Hauptbestandteilen: Zunächst wird das aktuelle Ereignis aus der Warteschlange ausgelesen (Schritt 1) und der Zustand der daran beteiligten Teilchen entsprechend aktualisiert (Schritt 2). Die zugehörigen Details werden später in Kap. 2.4 erläutert. Anschließend werden für diese Teilchen auf Grundlage des neuen Zustandes neue Ereignisse ermittelt (Schritt 3) und diese in der Warteschlange gespeichert (Schritt 4). Die Details hierzu werden in Kap. 2.5 erörtert. Nun beginnt die ganze Prozedur wieder von vorn (Schritt 5) und wiederholt sich, bis die aktuelle Simulationszeit den gewünsch-

Ereignisverarbeitung:

1. Hole das nächste Ereignis aus der Warteschlange.
2. Ereignis ausführen: Aktualisiere den Zustand der beteiligten Teilchen.
3. Berechne neue Ereignisse für die beteiligten Teilchen.
4. Speichere das nächste Ereignis für jedes beteiligte Teilchen in der Warteschlange.
5. **gehe zu 1.**

Abbildung 2.1: Skizze der grundlegenden Ereignisdynamik-Routine

ten Endzeitpunkt erreicht hat.

Darüber hinaus ist für ein vollständiges (serielles) Programm nur noch eine der Ereignisverarbeitung vorangehende Daten-Initialisierung notwendig, bei der für jedes Teilchen ein Ereignis in die Warteschlange gestellt wird. Außerdem sollte die Ereignisverarbeitung bei Bedarf zur Datenausgabe unterbrochen werden. Da sich ja die Zustandsinformationen der allermeisten Teilchen auf einen Zeitpunkt in der Vergangenheit bezieht, muss für die Ausgabe dann allerdings erst der aktuelle Zustand mit Hilfe der (trivialen) Bewegungsgleichungen berechnet werden.

Die parallele Version dagegen ist wesentlich komplexer und wird in Kapitel 3 beschrieben. Zunächst sollen nun die benötigten Datenstrukturen im Detail betrachtet werden.

2.2 Datenstrukturen

Die wichtigsten Datenstrukturen, die der Algorithmus verwalten muss, sind ein Feld für die *Teilchenzustände* und die *Ereignis-Warteschlange*. Beide Felder enthalten für jedes Teilchen genau einen Eintrag (siehe Abb. 2.2).² Die Zustände beziehen sich dabei auf Zeitpunkte t_{st} in der Vergangenheit, die Ereignisse auf Zeitpunkte t_{ev} in der Zukunft:

$$t_{\text{st}}(i) \leq \text{aktuelle Zeit } t_0 \leq t_{\text{ev}}(i) \quad (2.1)$$

Der *Teilchenzustand* beschreibt den physikalischen Zustand für jedes Teilchen zu einem Zeitpunkt direkt nach dem jeweiligen letzten Teilchenereignis. Im Falle harter Kugeln umfasst dieser beispielsweise den Zeitpunkt t_{st} des Zustands, die Orts- und Geschwindigkeitsvektoren \mathbf{r} und \mathbf{v} , evtl. auch einen Rotationsgeschwindigkeitsvektor $\boldsymbol{\omega}$ oder weitere Eigenschaften. Physikalische Parameter, die für alle Teilchen gleich sind, wie beispielsweise die Teilchenmasse oder die Teilchengröße in einem monodispersen System, brauchen natürlich nicht in den Teilchenzustand mitaufgenommen werden.

²Diese Datenorganisation ist effizienter als diejenige in [1, 2], da wir keine Doppelpufferung der Daten benötigen. Unser Algorithmus hat demgegenüber also nur einen halb so großen Speicherbedarf. Siehe auch die Anmerkung auf Seite 36.

Teilchenzustand	: $\{t_{\text{st}}, \mathbf{r}(t_{\text{st}}), \mathbf{v}(t_{\text{st}}), \dots, \text{counter}, \text{cell}, \text{id}\}$
Ereignis	: $\{t_{\text{ev}}, \text{type}, \text{partner}, \text{counter}(\text{partner})\}$

Abbildung 2.2: Wichtigste Datenstrukturen

Darüber hinaus enthält der Teilchenzustand noch einige weitere Komponenten: Die Zellnummer (`cell`) und der Kollisionszähler (`counter`) werden in den Kapiteln 2.3.2 bzw. 2.4.3 erläutert. Für Systeme, in denen sich die Teilchenzahl ändern kann, sowie für parallele Implementierungen sollte das Feld für die Teilchenzustände dynamisch sein; dann enthält der Teilchenzustand auch noch eine Teilchenkennung (`id`) zur eindeutigen Identifizierung.

Die *Ereignis-Warteschlange* enthält für jedes Teilchen ein zugeordnetes Ereignis. Ein Ereignis besteht hierbei aus Ereigniszeitpunkt t_{ev} , Ereignistyp, Ereignispartner und einer Kopie des Kollisionszählers des Partners (siehe dazu Kap. 2.4.3). An der Spitze der Warteschlange steht jeweils das zeitlich nächste Ereignis, also dasjenige mit der kleinsten Zeit t_{ev} .

Eine derartige Prioritäts-Warteschlange lässt sich am effizientesten mit Hilfe einer impliziten *Heap*-Struktur realisieren [1, 22]; jedoch sind auch andere Implementierungen möglich [22–24]. Ein *Heap* ist ein binärer Baum, bei dem jeder Vaterknoten jeweils höhere Priorität (hier also einen früheren Ereigniszeitpunkt) hat als die beiden Söhne. Die Söhne selbst sind untereinander nicht geordnet. Somit steht an der Spitze des Baums immer das Ereignis mit höchster Priorität. Dieses lässt sich dann mit einem Rechenaufwand $\mathcal{O}(1)$ ermitteln. Ein neues Ereignis in eine Warteschlange mit N Elementen zu stellen, erfordert einen Aufwand $\mathcal{O}(\log N)$.

2.3 Simulationsraum

2.3.1 Randbedingungen

Das simulierte Volumen, in dem sich die Teilchen bewegen, besteht im Allgemeinen aus einem Quader mit den Kantenlängen $L_1 \times L_2 \times L_3$.

Dies stellt keine Beschränkung der Allgemeinheit dar; denn beliebig berandete Systeme erhält man, indem man *Wände* als zusätzliche, aber unbewegliche, Kollisionspartner einführt. Deren Eigenschaften können dabei an das zu Grunde liegende physikalische Problem angepasst werden.

Unendlich große Systeme lassen sich mittels periodischer Randbedingungen modellieren. Das bedeutet, wenn ein Teilchen den Simulationsraum verlässt, erscheint es umgehend wieder auf der gegenüberliegenden Seite des simulierten Volumens. Topologisch gesehen entspricht dies einem Simulationsraum in Form eines Hypertorus – oder anders betrachtet – einem Simulationsgebiet, das sich periodisch in alle Richtungen bis ins Unendliche fortsetzt. Dabei ist natürlich zu beachten, dass die zu untersuchenden physikalischen Längenskalen klein gegenüber der Kantenlänge des Systems sein sollten.

2.3.2 Zellen

Müsste der Algorithmus nach potentiellen Kollisionspartnern eines Teilchens unter allen anderen Teilchen suchen, würde ihn dies für große Teilchenzahlen N sehr langsam machen. Daher unterteilt man den Simulationsraum in C würfelförmige Zellen. Jedes Teilchen wird nun derjenigen Zelle zugeordnet, in der sein Mittelpunkt liegt.

Wenn die Kantenlänge der Zellen größer als die maximale Wechselwirkungsdistanz³ zweier Teilchen ist, genügt es, bei der Suche nach potentiellen Ereignispartnern, die Teilchen in derselben Zelle und deren Nachbarzellen⁴ zu berücksichtigen [17, 20].

Jedoch muss der Algorithmus immer die Zelleninformation auf dem aktuellen Stand halten (siehe Kap. 2.4.4) und dazu zusätzliche Ereignisse für jeden potentiellen Zellenwechsel berechnen (siehe Kap. 2.5.1). Diese zusätzlichen Ereignisse haben dabei keinen physikalischen Effekt.⁵

³Bei Stößen von Kugeln ist dies der Teilchendurchmesser.

⁴Eine Zelle hat 8 Nachbarn in 2D und 26 Nachbarn in 3D.

⁵Numerische Rundungsfehler bei Zellwechseln können in einem chaotischen System allerdings dennoch zu unterschiedlichen Endergebnissen führen.

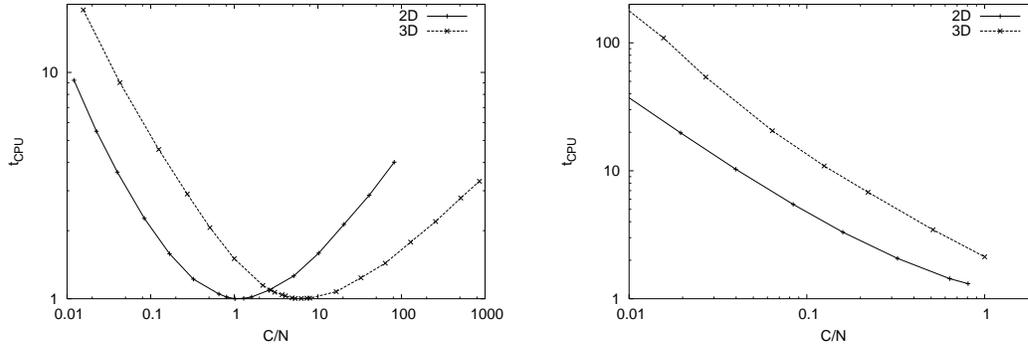


Abbildung 2.3: Rechenzeit t_{CPU} (in willkürlichen Einheiten) über Zellanzahl C in 2D und 3D. Zur Simulation wurde ein elastisches Harte-Kugel-Gas mit $N = 10000$ Teilchen (2D) und $N = 8000$ Teilchen (3D) benutzt – in der linken Abb. bei geringer Dichte (Volumenanteil $\nu = 0.008$ (2D), $\nu = 0.0005$ (3D)), in der rechten bei hoher Dichte ($\nu = 0.8$ (2D), $\nu = 0.5$ (3D)).

Optimale Zellanzahl

Im Durchschnitt befinden sich in der \mathcal{D} -dimensionalen Nachbarschaft eines Teilchens $3^{\mathcal{D}}N/C - 1$ weitere Teilchen. Im Grenzfall $C \ll N$ wird diese Zahl sehr groß und der Algorithmus muss bei jeder Ereignisberechnung eine Vielzahl potentieller Kollisionen berücksichtigen. Im Falle $C \gg N$ andererseits muss ein Teilchen zwischen jeder Kollision viele Zellgrenzen überqueren. Damit muss dann eine große Zahl zusätzlicher Ereignisse abgearbeitet werden, um die Simulation zu Ende zu führen. Diese beiden Beiträge zur Rechenzeit konkurrieren miteinander: Der erste ist proportional zu $(C/N)^{-1}$, der zweite proportional zu $(C/N)^{1/\mathcal{D}}$.

Man kann Abb. 2.3 entnehmen, dass dies bei niedrigen Dichten zu einem breiten Minimum der Simulationsdauer bei $C/N \approx 1.5$ in zwei Dimensionen und $C/N \approx 8$ in drei Dimensionen führt. Die genauen Zahlenwerte hängen natürlich von den Details der Implementierung und zahlreichen Simulationsparametern ab – aufgrund des breiten Minimums jedoch nur schwach.⁶

Bei hohen Dichten kann der Minimalwert nicht erreicht werden, da ja die Zellen

⁶Vergleiche auch [25], dort wird der optimale Wert von C/N in 2D auf $1 \dots 3$ abgeschätzt.

größer als die Teilchen sein müssen. Hier sollte man C einfach so groß wie möglich wählen.

2.4 Zustandsaktualisierung

Bei der Ereignisverarbeitung (siehe Abb. 2.1) wird zunächst ein neues Ereignis aus der Warteschlange (siehe Abb. 2.2) geholt. Danach werden die Zustände des zugehörigen Teilchens und dessen Partners vom Zeitpunkt t_{st} auf $t_0 = t_{\text{ev}}$ aktualisiert; diese Aktualisierung geschieht in zwei Schritten: der *Teilchen-Bewegung* und der *Teilchen-Kollision*. Diese werden in den folgenden Unterkapiteln erläutert. Die anschließende Berechnung neuer Ereignisse ist in Kapitel 2.5 dargestellt.

2.4.1 Teilchen-Bewegungen

Um die Kollision zweier Teilchen auszuführen, wird erst einmal der Zustand der Teilchen unmittelbar vor der Kollision ermittelt. Dieser ergibt sich, indem man den alten Zustand zum Zeitpunkt t_{st} und die Zeitdifferenz $(t_0 - t_{\text{st}})$ in die Bewegungsgleichungen einsetzt. Für Teilchen, die sich auf ballistischen Bahnen in einem homogenen Feld \mathbf{g} bewegen, gilt beispielsweise

$$\mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}(t_{\text{st}}) + (t_0 - t_{\text{st}}) \mathbf{v}(t_{\text{st}}) + \frac{1}{2}(t_0 - t_{\text{st}})^2 \mathbf{g} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}(t_{\text{st}}) + (t_0 - t_{\text{st}}) \mathbf{g} \quad (2.3)$$

$$\boldsymbol{\omega}(t_0) = \boldsymbol{\omega}(t_{\text{st}}) \quad (2.4)$$

2.4.2 Teilchen-Kollisionen

Nun berühren sich die Teilchen und können miteinander wechselwirken. Da die Wechselwirkungen instantan stattfinden müssen, brauchen nur Zweiteilchen-Wechselwirkungen berücksichtigt werden. Einige beispielhafte Teilchen-Modelle sollen hier diskutiert werden:

Harte Kugeln

Für harte Kugeln mit dem Wechselwirkungspotential

$$\mathcal{V}_{\text{HC}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \begin{cases} \infty & \text{für } |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < 2a \\ 0 & \text{für } |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > 2a \end{cases} \quad (2.5)$$

ist die Ereignisdynamik besonders geeignet – wohingegen gewöhnliche zeitgesteuerte Molekulardynamik dieses Modell aufgrund der dabei auftretenden Divergenzen ja gar nicht bewältigen kann.

Für die Kollision zweier harter Kugeln mit Masse m , Radius a und Trägheitsmoment I gelten folgende Stoßgesetze [26–30]:

$$\mathbf{r}'_{1/2} = \mathbf{r}_{1/2} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{v}'_{1/2} = \mathbf{v}_{1/2} \mp \frac{1 + \epsilon}{2} \mathbf{v}_n \mp \frac{z(1 + \varphi)}{2z + 2} (\mathbf{v}_t + \mathbf{v}_r) \quad (2.7)$$

$$\boldsymbol{\omega}'_{1/2} = \boldsymbol{\omega}_{1/2} + \frac{1 + \varphi}{a(2z + 2)} (\hat{\mathbf{k}} \times (\mathbf{v}_t + \mathbf{v}_r)) \quad (2.8)$$

Dabei beziehen sich die gestrichenen Größen auf den Zeitpunkt unmittelbar nach der Kollision und die ungestrichenen auf den Zeitpunkt unmittelbar davor. Die Stoßrichtung $\hat{\mathbf{k}}$ ist ein Einheitsvektor, der vom Zentrum des Teilchens 1 zum Zentrum des Teilchens 2 zeigt. $\mathbf{v}_n = ((\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{k}}$ ist die relative Geschwindigkeit in Normalenrichtung, $\mathbf{v}_t = (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) - \mathbf{v}_n$ die relative Geschwindigkeit in Tangentialrichtung und $\mathbf{v}_r = a\hat{\mathbf{k}} \times (\boldsymbol{\omega}_1 + \boldsymbol{\omega}_2)$ die relative Rotationsgeschwindigkeit. ϵ und φ sind der normale bzw. tangentielle Restitutionskoeffizient. Die Massenverteilung innerhalb der Teilchen wird durch $z = I/ma^2$ beschrieben; bei einer homogenen Vollkugel ist beispielweise $z = 0.4$.

Für elastische, reibungsfreie Kollisionen gilt $\epsilon = 1$ und $\varphi = -1$; dann reduzieren sich die Stoßgesetze auf

$$\mathbf{r}'_{1/2} = \mathbf{r}_{1/2} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{v}'_{1/2} = \mathbf{v}_{1/2} \mp \mathbf{v}_n \quad (2.10)$$

$$\boldsymbol{\omega}'_{1/2} = \boldsymbol{\omega}_{1/2} \quad (2.11)$$

Weiche Kugeln

Für weiche Kugeln mit einem kontinuierlichen Wechselwirkungspotential wie beispielsweise dem beliebten Lennard-Jones-Potential ist die Ereignisdynamik zunächst einmal nicht geeignet. Denn wenn eine Vielzahl von Teilchen sich gegenseitig kontinuierlich beeinflussen, erhält man ein System von gekoppelten Bewegungsgleichungen, anstatt eine Abfolge von diskreten Ereignissen mit trivialen Bewegungsgleichungen zwischen den Ereignissen.

Jedoch lässt sich solch ein kontinuierliches Wechselwirkungspotential durch ein stückweise konstantes Potential

$$\mathcal{V}_{\text{PC}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \left\{ \mathcal{V}_i \quad \text{für } \frac{i-1}{n} a < |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < \frac{i}{n} a \right. \quad (2.12)$$

mit $i = 1, \dots, 2n$, das zwischen den konzentrischen Kugelschalen mit den Radien $0, \frac{a}{n}, \frac{2a}{n}, \dots, a$ wirkt, beliebig genau approximieren. Wenn man beispielsweise $\mathcal{V}_1 = \infty$ wählt, erhält man weiche Teilchen mit einem harten Kern vom Radius a/n .

Jeder Potentialsprung $\Delta\mathcal{V}_i = \pm(\mathcal{V}_{i+1} - \mathcal{V}_i)$ am Rande einer Kugelschale löst damit ein eigenes Ereignis aus, siehe dazu auch Abb. 2.4. (Zur Unterscheidung können diesen Ereignissen beispielsweise unterschiedliche Ereignistypen zugeordnet werden.)

Das hat jedoch zur Folge, dass eine einzelne physikalische Kollision bis zu $4n - 1$ Ereignisse erfordert und sich damit die Rechenzeit entsprechend verlängert. Jedoch sollte dies für kleine n immer noch deutlich effizienter als gewöhnliche, zeitgesteuerte Molekulardynamik sein, bei der ja eine einzelne Kollision ebenfalls in eine größere Zahl einzelner Zeitschritte aufgelöst werden muss – wobei bei jedem Zeitschritt nicht nur zwei, sondern *alle* Teilchen aktualisiert werden müssen.

Das sich hierbei ergebende Stoßgesetz lautet:

$$\mathbf{v}'_{1/2} = \mathbf{v}_{1/2} \mp \mathbf{v}_n \pm \begin{cases} 0 & \text{für } v_n^2 \leq 2\Delta\mathcal{V}_i/m \\ \hat{\mathbf{k}} \sqrt{v_n^2 - 2\Delta\mathcal{V}_i/m} & \text{für } v_n^2 > 2\Delta\mathcal{V}_i/m \end{cases} \quad (2.13)$$

Man erhält also eine Reflexion an der Kugelschale, wenn die Teilchengeschwindigkeit nicht ausreicht, den Potentialwall zu überwinden, und ansonsten eine entsprechend verringerte bzw. erhöhte Teilchengeschwindigkeit.

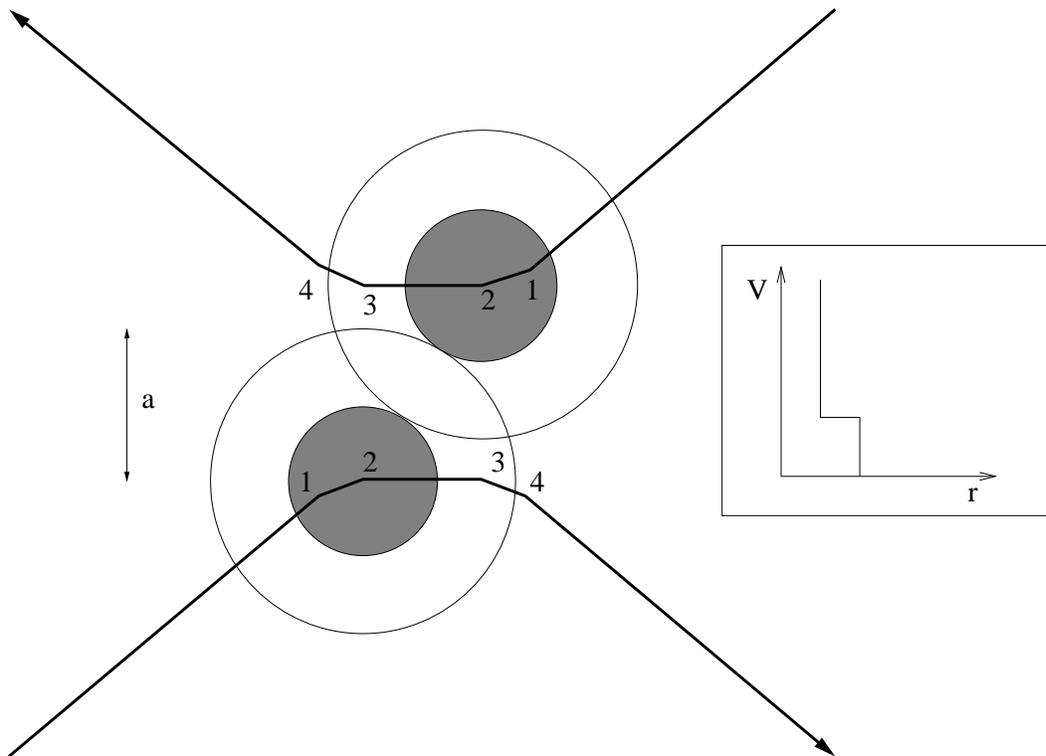


Abbildung 2.4: Beispiel für die Kollision zweier weicher Kugeln:

Die Kugeln bestehen hier aus $n = 2$ Schalen. Ereignisse und damit Geschwindigkeitsänderungen finden immer dann statt, wenn sich zwei solche Schalengrenze berühren. Im Bild sind die Trajektorien der Kugeln eingezeichnet; die vier Ereignisse, aus der die Kollision besteht, sind mit $1, \dots, 4$ durchnummeriert. Die Ereignisse 1 und 4 finden beim Abstand $2a$ der Teilchenmittelpunkte statt, die Ereignisse 2 und 3 beim Abstand $3a/2$. Die Kugeln selbst sind zum Zeitpunkt des Ereignisses Nummer 2 eingezeichnet.

Rechts im Bild ist außerdem das Wechselwirkungspotential der Kugeln skizziert.

Kugel-Faden-Modell

Neben harten und weichen Kugeln sind noch ganz andere Modelle denkbar. Mit dem Kugel-Faden-Modell lassen sich beispielsweise Polymere [9] und polymerisierte Membranen [10, 11] simulieren. Dabei bilden durch Fäden verbundene Kugeln die Polymerkette bzw. das Membran-Netzwerk (vgl. Abb. 2.5) mit dem Potential [31]:

$$\mathcal{V}_{\text{TB}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \mathcal{V}_{\text{HC}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + \mathcal{V}_{\text{NN}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (2.14)$$

\mathcal{V}_{HC} ist dabei das Harte-Kugel-Potential (Gl. 2.5) und \mathcal{V}_{NN} ist ein Fadenpotential, das nur zwischen topologisch benachbarten Teilchen wirkt:

$$\mathcal{V}_{\text{NN}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \begin{cases} \infty & \text{wenn 1,2 benachbart und } |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > a^* \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.15)$$

Die Fadenlänge beträgt dabei $a^* - a$.

Die Stoßgesetze entsprechen denen des Harte-Kugel-Modells, werden aber nicht nur beim Abstand $2a$, sondern für topologisch benachbarte Teilchen auch bei $2a^*$ wirksam (dann aber mit entsprechend umgekehrter Richtung).

Erweitertes Kugel-Faden-Modell

Ein noch komplexeres Modell wird für Proteinfaltung benötigt [12]. Die Proteine lassen sich mit einer Variante des Kugel-Faden-Modells simulieren, wobei jedoch elektrostatische Wechselwirkungen im Modell noch durch zusätzliche attraktive oder repulsive Potentiale zwischen ausgewählten Kugeln berücksichtigt werden, wobei auch noch Richtungs- und Orientierungsabhängigkeiten mit eingebaut werden können.

Wachsende Kugeln

In Kapitel 4.3 wird ein Modell mit harten Kugeln benutzt, deren Radien gemäß

$$a(t) = a(0) + u_a t \quad (2.16)$$

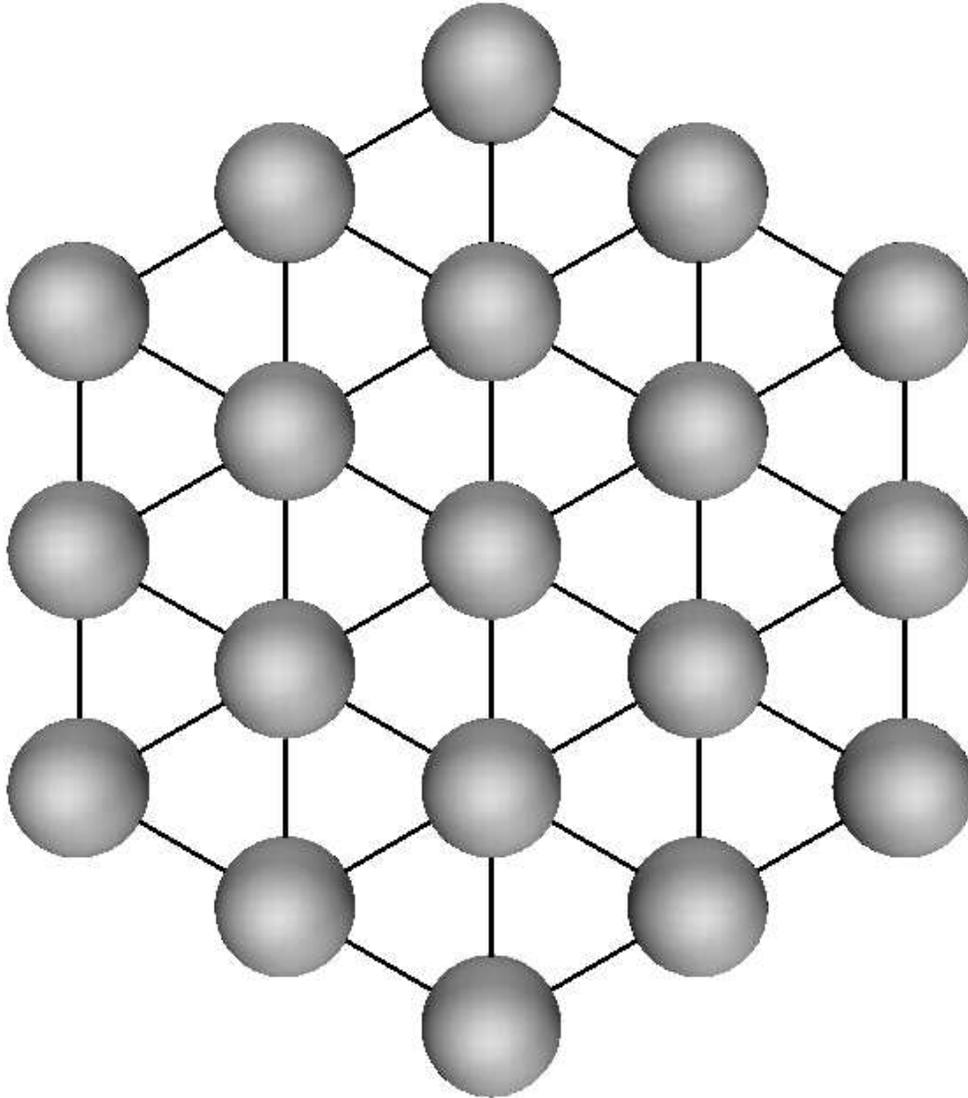


Abbildung 2.5: Membran-Netzwerk mit dem Kugel-Faden-Modell [10].

linear wachsen bzw. schrumpfen. Das Stoßgesetz (2.10) wird dann modifiziert zu

$$\mathbf{v}'_{1/2} = \mathbf{v}_{1/2} \mp (\mathbf{v}_n - 2u_a \hat{\mathbf{k}}) . \quad (2.17)$$

Obwohl die Stöße hier als elastisch angesetzt wurden, bleibt die Energie bei einer Kollision nicht erhalten, sondern nimmt für $u_a > 0$ zu und für $u_a < 0$ ab.

2.4.3 Annullierte Kollisionen

Es kann vorkommen, dass der Ereignispartner zwischen der Planung und Abarbeitung des Ereignisses bereits mit einem anderen Teilchen kollidiert ist und nun gar nicht mehr als Kollisionspartner zur Verfügung steht. In einem solchen Fall wird das geplante Ereignis ungültig. Stattdessen wird nur für das eine Teilchen eine Zustandsaktualisierung durchgeführt, die dann lediglich aus der Teilchen-Bewegung besteht. Es gibt keinen Ereignis-Partner und demzufolge auch keine Teilchen-Kollision.

Um solche annullierten Kollisionen zu erkennen, wird bei der Planung des Ereignisses immer auch der Kollisionszähler des geplanten Kollisionspartner gespeichert. Wenn dann das Ereignis abgearbeitet werden soll, lässt sich damit schnell überprüfen, ob der Partner in der Zwischenzeit an einem anderen Ereignis teilgenommen hat oder nicht.⁷

2.4.4 Zellenwechsel

Wie in Abschnitt 2.3.2 dargelegt wird, ist es günstig, den Simulationsraum in Zellen zu unterteilen. Damit die Zuordnung der Teilchen zu Zellen immer auf dem aktuellen Stand ist, muss ein weiterer Ereignistyp *Zellenwechsel* eingeführt werden. Statt eines anderen Teilchens ist der Ereignispartner hier eine andere Zelle. Die Zustandsaktualisierung besteht dann lediglich aus der Teilchen-Bewegung für ein Teilchen und der Aktualisierung der Zelleninformation.

Gleichzeitig kann auf diese Weise auch den periodischen Randbedingungen Rechnung getragen werden. Wenn ein Teilchen den Simulationsraum verlässt, wird dessen Ortsvektor so modifiziert, dass das Teilchen auf der gegenüberliegenden Seite wieder eintritt.

⁷Eine andere Strategie, um ungültige Ereignisse zu detektieren, verfolgt [1, 2]. Dort wird bei jeder Kollision überprüft, ob damit andere Ereignisse ungültig werden und diese werden dann gegebenenfalls entsprechend markiert. Dieses Verfahren ist jedoch ineffizienter, da unter Umständen dasselbe Ereignis mehrmals für ungültig erklärt werden muss und in einer parallelen Implementierung dafür auch noch Kommunikation zwischen verschiedenen Prozessen erforderlich sein kann.

2.4.5 Zusammenfassung

Wir haben nun drei verschiedene Ereignistypen eingeführt: Kollisionen, annullierte Kollisionen und Zellenwechsel. Gemeinsamer Bestandteil der Zustandsaktualisierung bei allen drei Typen ist die Teilchen-Bewegung, bei der t_{st} , \mathbf{r} und \mathbf{v} aktualisiert werden. Bei der annullierten Kollision ist die Zustandsaktualisierung damit abgeschlossen. Beim Zellenwechsel muss noch zusätzlich die Zelleninformation auf den aktuellen Stand gebracht werden. Bei der Kollision muss die Teilchen-Bewegung auch noch für den Kollisionspartner durchgeführt werden und in einem zweiten Schritt die Kollision selbst. Dabei werden dann \mathbf{v} , ω und die Kollisionszähler für beide Teilchen aktualisiert.

2.5 Ereignisberechnung

Wenn ein Ereignis abgearbeitet ist, müssen neue zukünftige Ereignisse für die beteiligten Teilchen berechnet werden.

2.5.1 Beispiele

Für jeden möglichen Ereignispartner muss hierzu ein potentieller Kollisionszeitpunkt ermittelt werden. Dies sei wieder anhand einiger Beispiele veranschaulicht.

Kollision von Kugeln

Für zwei Kugeln mit Radius a_i , die sich auf ballistischen Bahnen in einem homogenen Feld \mathbf{g} bewegen, ergibt sich ein potentieller *Kollisionszeitpunkt* t_{12} aus

$$(\mathbf{r}_{12} + (t_{12} - t_0) \mathbf{v}_{12})^2 = (a_1 + a_2)^2 \quad (2.18)$$

mit dem Abstand $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1(t_0) - \mathbf{r}_2(t_0)$ und der Relativgeschwindigkeit $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1(t_0) - \mathbf{v}_2(t_0)$ zu

$$t_{12} = t_0 + \left(-\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{v}_{12} - \sqrt{(\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{v}_{12})^2 - [r_{12}^2 - (a_1 + a_2)^2] v_{12}^2} \right) / v_{12}^2. \quad (2.19)$$

Wenn $t_{12} < t_0$ ist, liegt der Kollisionszeitpunkt in der Vergangenheit und kann verworfen werden. Wenn t_{12} nicht reell ist, begegnen sich die Teilchen auf ihren Bahnen nicht; t_{12} kann dann ebenfalls verworfen werden.

Kollision von wachsenden Kugeln

Für linear gemäß Gleichung (2.16) wachsende Kugeln mit Radius $a(t)$ erhält man den Kollisionszeitpunkt aus

$$(\mathbf{r}_{12} + (t_{12} - t_0) \mathbf{v}_{12})^2 = 4(a(t_0) + (t_{12} - t_0) u_a)^2 \quad (2.20)$$

zu

$$t_{12} = t_0 - \frac{\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{v}_{12} - 4u_a a(t_0)}{v_{12}^2 - 4u_a^2} - \frac{\sqrt{[\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{v}_{12} - 4u_a a(t_0)]^2 - [r_{12}^2 - 4a^2(t_0)][v_{12}^2 - 4u_a^2]}}{v_{12}^2 - 4u_a^2}. \quad (2.21)$$

Zellenwechsel von Kugeln

Ganz analog dazu sind für potentielle Zellenwechsel von Kugeln ebenfalls Gleichungen zweiten Grades⁸ zu lösen. Wenn die Zellwand durch den Punkt \mathbf{r}_2 und den Normalenvektor $\hat{\mathbf{k}}$ gegeben ist, ergibt sich aus

$$\left(\mathbf{r}_{12} + (t_{12} - t_0) \mathbf{v}_1 + \frac{1}{2}(t_{12} - t_0)^2 \mathbf{g} \right) \cdot \hat{\mathbf{k}} = 0 \quad (2.22)$$

für den Zeitpunkt eines Zellenwechsels

$$t_{12} = t_0 + \left(-\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_1 \pm \sqrt{(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_1)^2 - 2(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g})(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}_{12})} \right) / \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g}. \quad (2.23)$$

⁸Bzw. Gleichungen ersten Grades für $\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g} = 0$.

Kollision von Kugeln mit ebenen Wänden

Entsprechend gilt für die Kollision von Kugeln mit fixierten, ebenen Wänden, die ebenfalls wieder durch \mathbf{r}_2 und $\hat{\mathbf{k}}$ gegeben seien,

$$\left(\mathbf{r}_{12} + (t_{12} - t_0) \mathbf{v}_1 + \frac{1}{2}(t_{12} - t_0)^2 \mathbf{g} \right) \cdot \hat{\mathbf{k}} = a \quad (2.24)$$

und damit

$$t_{12} = t_0 + \left(-\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_1 \pm \sqrt{(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_1)^2 - 2(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g})(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}_{12} - a)} \right) / \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g} . \quad (2.25)$$

Für gekrümmte oder gar bewegte Wände sind die Berechnungen entsprechend komplizierter.

2.5.2 Ablauf der Berechnungen

Die Berechnung von t_{12} wird jeweils für alle potentiellen Ereignispartner in der Teilchen-Nachbarschaft durchgeführt, also für alle Teilchen, Zellgrenzen und Wände, die sich innerhalb der Teilchen-Zelle und deren Nachbarzellen befinden. Das nächste Ereignis ist nun dasjenige mit dem kleinsten gültigen Kollisionszeitpunkt t_{12} . Dieses wird jeweils in die Ereignis-Warteschlange gestellt und ersetzt dabei das den beteiligten Teilchen bisher zugeordnete Ereignis.⁹ Alle übrigen potentiellen Ereignisse werden verworfen.¹⁰ Waren am zuvor verarbeiteten Ereignis zwei Teilchen beteiligt, so wird die komplette Ereignisberechnung auch noch für das andere Teilchen durchgeführt.

⁹Wovon eines ja im vorherigen Schritt ausgeführt wurde. Das andere – zum Partnerteilchen gehörende Ereignis – ist mit diesem entweder identisch und wurde daher auch ausgeführt oder bezieht sich auf eine zukünftige, aber zu annullierende Kollision.

¹⁰Das Speichern weiterer potentieller Ereignisse könnte zwar im Falle annullierter Kollisionen einen Geschwindigkeitsvorteil mit sich bringen. Derartige Verfahren werden beispielsweise im Time-Warp-Algorithmus [18, 19] genutzt. Es zeigt sich jedoch, dass der damit verbundene zusätzliche Verwaltungsaufwand den Nutzen bei weitem übersteigt und der Algorithmus nicht nur unübersichtlicher, sondern unter dem Strich auch langsamer wird [1].

2.6 Zusammenfassung

Wir haben in diesem Kapitel gezeigt, dass die Ereignisdynamik ein interessanter und effizienter Algorithmus zur Simulation von Vielteilchen-Systemen ist. Sie ist besonders für solche physikalischen Probleme geeignet, bei denen die wesentliche Wechselwirkungsdauer klein gegenüber dem Zeitraum zwischen den Wechselwirkungen ist, lässt sich aber auch in solchen Fällen nutzen, bei denen die Wechselwirkung diskretisiert werden kann.

Der Algorithmus modelliert die Wechselwirkungen als eine Reihe diskreter Ereignisse, die in einer Warteschlange gespeichert werden und nacheinander asynchron verarbeitet werden. Die Verarbeitung besteht dabei im Wesentlichen aus zwei Schritten, der Zustandsaktualisierung und der Ereignisberechnung: Die Aktualisierung des Teilchenzustands wird mit Hilfe der gelösten Bewegungsgleichungen und Stoßgesetze der Teilchen durchgeführt; dies wurde an einigen beispielhaften Teilchenmodellen veranschaulicht. Die Berechnung neuer potentieller Ereignisse für ein Teilchen erfordert in einfachen Fällen, wie der ballistischen Bewegung von Kugeln in einem homogenen Feld, lediglich die Lösung einer Gleichung zweiten Grades. Zur Beschleunigung des Verfahrens unterteilt man den Raum in Zellen und kann damit die Berechnungen auf Teilchen in Nachbarzellen beschränken. Die optimale Zellenzahl liegt dabei in der Größenordnung der Teilchenzahl oder etwas darüber.

Insgesamt skalieren damit die meisten Operationen dieses Algorithmus mit der Teilchenzahl N ; lediglich die Speicherung neuer Ereignisse in der Warteschlange geschieht bezogen auf alle N Teilchen mit $\mathcal{O}(N \log N)$. Das heißt, die Rechenzeit geht für kleine Teilchenzahlen mit $\mathcal{O}(N)$, für große mit $\mathcal{O}(N \log N)$. Genau dieses Verhalten ist in Abb. 2.6 zu beobachten.

Alles in allem ist die Ereignisdynamik in zahlreichen Fällen sehr viel leistungsfähiger als gewöhnliche Molekulardynamik, da jede Kollision in der Regel in einem einzigen Rechenschritt abgearbeitet werden kann, während dies bei der Molekulardynamik zahlreiche kleine Zeitschritte erfordert und auch die eigentlich trivialen Teilchentrajektorien zwischen den Wechselwirkungen viel Rechenzeit benötigen. Die Hauptproblematik der Ereignisdynamik liegt in der schwierigen Parallelisierung. Dem soll im folgenden Kapitel nachgegangen werden.

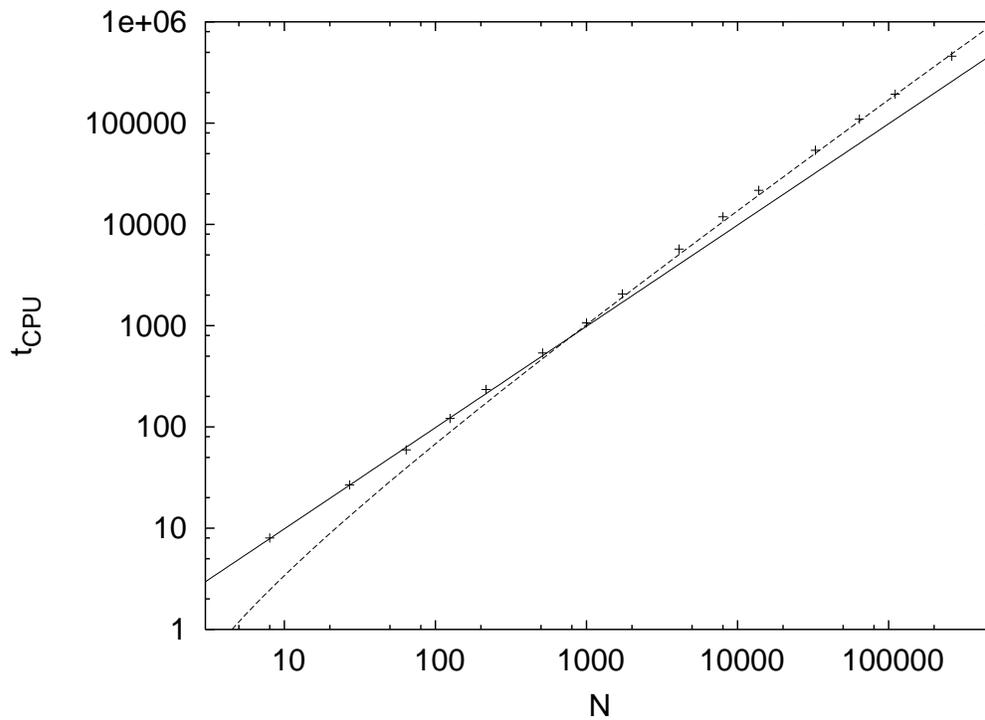


Abbildung 2.6: Rechenzeit t_{CPU} (in willkürlichen Einheiten) über Teilchenzahl N für ein dreidimensionales, elastisches Harte-Kugel-Gas bei einem Volumenanteil von $\nu = 0.07$ und einer Zellenzahl $C = N$. Die Vergleichskurven sind proportional zu N (durchgezogene Linie) bzw. $N \log N$ (gestrichelte Linie).

3 Parallelisierung der Ereignisdynamik

Das Ziel der Parallelisierung eines Algorithmus besteht darin, begrenzte Ressourcen wie Rechenzeit, Speicherbedarf, etc. durch Zusammenarbeit mehrerer Prozesse zu vervielfachen und damit größere oder schnellere Simulationen zu ermöglichen.

Im Gegensatz zu herkömmlicher Molekulardynamik und zahlreichen anderen gebräuchlichen Simulationsverfahren, wo sich dies auf mehr oder weniger triviale Weise umsetzen lässt, stellt die Parallelisierung bei der Ereignisdynamik eine interessante Herausforderung dar. Denn dieser Algorithmus ist intrinsisch seriell, da die Ereignisse der Reihe nach abgearbeitet werden und jedes zukünftige Ereignis von vergangenen Ereignissen kausal abhängig sein kann. Die paradoxe Aufgabe besteht also darin, physikalisch nicht-parallele Dynamik algorithmisch dennoch zu parallelisieren.

So gibt es denn unseres Wissens bisher keine vollständig realisierte Parallelisierung der Ereignisdynamik. Es existieren lediglich einige theoretische Vorüberlegungen, wie sich auch bei paralleler Verarbeitung die korrekte kausale Ordnung garantieren lässt, vgl. [2]. Diese Publikation setzt ein *Shared-Memory*-System voraus, das heißt, dass alle Prozesse ihre Daten gemeinsam verwalten. Prinzipiell lassen sich diese Ideen aber auch auf die häufiger anzutreffenden *Distributed-Memory*-Architekturen übertragen, bei denen jedem Prozess ein eigener Speicherbereich zugeordnet ist, auf den andere Prozesse keinen Zugriff haben. Dieser Versuch wurde in [25] gemacht und in eine rudimentäre Version eines parallelisierten Algorithmus umgesetzt.

Wir haben nun Ideen aus [2, 25] aufgegriffen, um daraus eine vollständige, parallelisierte Version der Ereignisdynamik inklusive dynamischer Lastverteilung zu entwickeln, siehe auch [32]. Dabei haben wir besonderen Wert auf Portabilität gelegt; das heißt, dass unser Algorithmus unabhängig von der zu Grunde liegenden Systemarchitektur funktionieren soll und dabei lediglich auf standardisierte Software zurückgreift.

Als Lösung hierfür hat sich mittlerweile MPI – „Message-Passing Interface“ – etabliert. MPI stellt eine plattformübergreifende Schnittstelle für die gängigsten Programmiersprachen bereit. Diese erlaubt die effiziente Kommunikation zwischen verschiedenen parallelen Prozessen mittels Nachrichtenaustausch. Damit lassen sich sowohl Shared-Memory-Systeme, Distributed-Memory-Systeme und Systeme, die beide Ansätze kombinieren, wirkungsvoll parallelisieren – seien sie nun mit spezieller Kommunikations-Hardware ausgestattet oder nicht. Um maximale Portabilität zu gewährleisten, verwendet unsere Implementierung außer der MPI-Bibliothek [33, 34] und den C/C++-Standard-Bibliotheken [35] keine weitere Software.

Die Umsetzung des Algorithmus folgt zunächst einmal dem klassischen Verfahren der Gebietszerlegung, siehe Kap. 3.1. Wie sich dabei dynamische Lastverteilung realisieren lässt, ist in Kap. 3.2 dargestellt. In Kap. 3.3 werden dann die spezifischen Schwierigkeiten, die die Parallelisierung der Ereignisdynamik in Bezug auf die korrekte kausale Ordnung der Ereignisse mit sich bringt, erläutert und in Kap. 3.4 die Lösung hierfür skizziert. Im Detail wird der ganze Algorithmus schließlich in Kap. 3.5 vorgestellt. In Kap. 3.6 diskutieren wir die Leistungssteigerung, die die Parallelisierung letztendlich mit sich bringt. Zum Schluss werden die wichtigsten Überlegungen noch einmal in Kap. 3.7 zusammengefasst.

3.1 Gebietszerlegung

Um die Berechnungen auf mehrere Prozesse zu verteilen, wird jedem Prozess ein bestimmtes Gebiet des Simulationsraums zugeordnet. Diese Zerlegung erfolgt am einfachsten auf Zellenebene, sodass jede Zelle zu einem bestimmten Prozess gehört. Bei der Aufteilung sind mehrere Punkte zu beachten:

Zum einen sollte die Rechenlast möglichst gleichmäßig auf die Prozesse verteilt werden. In einem homogenen System lässt sich dies ganz einfach erreichen, indem jedem Prozess die gleiche Anzahl an Zellen zugeordnet wird. In inhomogenen Systemen ist die Lastverteilung komplizierter und sollte am besten dynamisch erfolgen [36], siehe dazu Kapitel 3.2.

Zum zweiten sollten die Grenzen zwischen den verschiedenen Gebieten so klein wie möglich sein, um die notwendige Kommunikation zwischen den verschiedenen Prozessen auf ein Mindestmaß zu beschränken. Das bedeutet, die Zellen eines Gebietes sollten zusammenhängend sein und möglichst einen Würfel (bzw. ein Quadrat in 2D) bilden.

Drittens sollte die Zuordnung von Zellen zu Prozessen eine möglichst triviale Abbildung sein, die sich schnell berechnen lässt.

Natürlich widersprechen sich diese Anforderungen teilweise. Um sowohl eine gleichmäßige dynamische Lastverteilung, kleine Grenzflächen zwischen den Gebieten und eine unkomplizierte Zuordnung der Zellen zu den Prozessen zu gewährleisten, haben wir folgende hierarchische Gebietszerlegung entwickelt [32]: Jedem Prozess werden in dynamischer Weise 2^n aufeinander folgende Zellnummern zugeordnet, wobei $n \in \mathbb{N}$ für jeden Prozess unterschiedlich gewählt werden kann. Die zugehörigen Zellen umschließen dabei jeweils ein quaderförmiges Gebiet mit den Seitenverhältnissen 1:1:1, 1:1:2 oder 1:2:2. Dies lässt sich mit einer einfachen, statischen Zuordnung von Zellnummern zu Zellkoordinaten erreichen, wie sie beispielhaft in Abb. 3.1 dargestellt ist.

Rechnerisch ergibt sich die Zellnummer dabei durch Verschachtelung der Bits der Zellkoordinaten: Die Bits k bis 1 der Koordinaten x, y, z werden in der Reihenfolge $z[k], y[k], x[k], z[k-1], y[k-1], x[k-1], \dots, z[1], y[1], x[1]$ neu angeordnet und ergeben eine neue Zahl – die Zellnummer. Dies sei anhand eines kleinen zweidimensionalen Beispieles verdeutlicht: Die Zelle 40 in Abb. 3.1 hat die Koordinaten 0/6. Das entspricht dem Bitmuster 000/110. Die Bit-Verschachtelung liefert 101000; das entspricht dezimal 40, also der Zellnummer.

Dieses Verfahren setzt voraus, dass sich der Simulationsraum in $2^k \times 2^k \times 2^k$ Zellen zerlegen lässt. Sollte sich die Zellgröße nicht dementsprechend sinnvoll wählen lassen, ist folgende Lösung möglich: Die Zellnummern werden trotzdem anhand des dargestellten Schemas mit der nächst größeren Zweierpotenz ver-

42	43	46	47	58	59	62	63
40	41	44	45	56	57	60	61
34	35	38	39	50	51	54	55
32	33	36	37	48	49	52	53
10	11	14	15	26	27	30	31
8	9	12	13	24	25	28	29
2	3	6	7	18	19	22	23
0	1	4	5	16	17	20	21

Abbildung 3.1: Zellnummerierung für ein sehr kleines zweidimensionales System mit beispielhafter Gebietszerlegung bei inhomogener Lastverteilung.

geben, sodass nun einige Zellnummern außerhalb des eigentlichen Simulationsraums liegen und damit auch zu keinem Zeitpunkt Teilchen enthalten können. Dies stellt bis auf den in der Zellen-Datenstruktur dabei verschwendeten Speicherplatz aber ja kein Problem dar.

3.2 Dynamische Lastverteilung

Die Lastverteilung soll eine gleichmäßige Auslastung der Prozessoren gewährleisten – insbesondere auch in inhomogenen Systemen. Das benutzte Verfahren soll wiederum anhand eines kleinen Beispiels erläutert werden:

Angenommen die Zellen in Abb. 3.1 sollen auf vier Prozesse verteilt werden. Wenn sich in der oberen rechten Ecke des Systems besonders viele Teilchen befinden, könnte die Lastverteilung folgende Gebietszerlegung ergeben: Prozess I erhält die Zellen 0-31, Prozess II die Zellen 32-47, Prozess III die Zellen 48-55 und Prozess IV die Zellen 56-63. Dieser Fall ist in Abb. 3.1 dargestellt.

Um die Lastverteilung dynamisch zu gestalten, muss regelmäßig die aktuelle Rechenlast bestimmt werden. Ein einfaches Maß hierfür ist die Teilchenzahl pro Prozess – oder besser die aktuelle Kollisionsfrequenz aller Teilchen pro Prozess. Wenn eine Umverteilung der Gebiete eine signifikant bessere Lastverteilung erwarten lässt, werden die Zellen neu verteilt.

Dabei tauschen jeweils drei Prozesse Informationen über ihre Zellen und Teilchen aus: Zwei wenig belastete Prozesse mit benachbarten Gebieten legen diese zu einem größeren Gebiet zusammen und einer der Prozesse übernimmt stattdessen die Hälfte des Gebiets eines Prozesses mit hoher Rechenlast.

Nehmen wir noch einmal obiges Beispiel heran und gehen wir davon aus, dass sich das System nach einiger Zeit in Richtung größerer Homogenität geändert habe, sodass nun Prozess I eine sehr hohe Rechenlast trage und Prozess III und IV eine niedrige. Dann können die Gebiete der Prozesse III und IV zu einem größeren zusammengelegt werden und das Gebiet von Prozess I wird aufgeteilt. Letztendlich ergibt sich damit folgende neue Zuordnung: Zu Prozess I gehören die Zellen 0-15, zu Prozess III die Zellen 16-31 und zu Prozess IV die Zellen 48-63. Prozess II ist an dem ganzen Vorgang nicht beteiligt und bleibt nach wie vor mit den Zellen 32-47 verknüpft. Er sollte jedoch zumindest davon informiert werden, dass sich seine Nachbarprozesse verändert haben, damit er die entsprechenden Datenstrukturen anpassen kann.

Bei Simulationen mit mehr Prozessen kann diese Neuverteilung an mehreren Stellen gleichzeitig stattfinden, aber immer so, dass jeweils nur drei Prozesse ihre Zell- und Teilchen-Daten austauschen.

3.3 Kausale Ordnung

In diesem Abschnitt seien die besonderen Probleme, die einer simplen Parallelisierung der Ereignisdynamik im Wege stehen erläutert:

Ein paralleler Ansatz, um Ereignisse asynchron zu simulieren, muss auf das Konzept lokaler Simulationszeiten zurückgreifen. Dabei verarbeitet jeder Prozess die Ereignisse in seinem Gebiet und lässt die lokale Zeit voranschreiten. Wenn ein Teilchen die Grenze zwischen zwei verschiedenen Prozessgebieten überquert, kommunizieren die beiden Prozesse miteinander und neue Ereignisse

werden bei einem Prozess in die Ereignisliste eingefügt und beim anderen Prozess aus der Ereignisliste gelöscht. Wenn der Zeitpunkt eines neu eingefügten Ereignisses vor der lokalen Simulationszeit liegt, ist die Kausalität verletzt: Denn eine Kollision dieses Teilchens mit einem anderen Teilchen des lokalen Prozesses *vor* der aktuellen lokalen Simulationszeit, könnte dabei verpasst worden sein; siehe auch Abb. 3.2.

Es gibt im Allgemeinen zwei Strategien, um mit diesem Problem umzugehen:

In einem *konservativen* Ansatz ist nur denjenigen Prozessen die Ereignisverarbeitung erlaubt, bei denen sichergestellt ist, dass keine Kausalitätsfehler auftreten können; die übrigen Prozesse müssen auf ihre Nachbarprozesse warten.

Weniger streng ist eine *optimistische* Strategie, die lediglich versucht, Kausalitätsfehler unwahrscheinlich zu machen. Wenn nun während einer Simulation doch die Kausalität verletzt wird, wird der fehlerhafte Simulationsabschnitt – ausgehend von einem gespeicherten Zwischenstand, der die korrekte kausale Ordnung garantiert – wiederholt.

Welcher Ansatz nun der effizientere ist, hängt stark von der maximalen Ereignis-Ausbreitungsgeschwindigkeit ab, da diese festlegt, welche Raumzeiten miteinander kausal verknüpft sind. Je größer diese ist, umso mehr Prozesse müssen bei der konservativen Strategie warten. Unglücklicherweise kann die Ereignis-Ausbreitungsgeschwindigkeit bei instantan erfolgenden Ereignissen jedoch beliebig groß werden – selbst wenn die Teilchen-Geschwindigkeiten nur sehr klein sind. Dies sieht man leicht ein, wenn man sich eine Kette dicht beieinander liegender Teilchen vorstellt. Seien die Teilchenradien beispielsweise durch a , die Teilchenzwischenräume durch d und die Teilchengeschwindigkeit des ersten Teilchens durch v gegeben, so wandert eine Stoßfront mit der Geschwindigkeit $(1 + 2a/d)v$ voran, was bei $d \ll a$ zu riesigen Geschwindigkeiten führt.

Ohne eine obere Schranke für die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Ereignissen darf nun aber beim konservativen Ansatz nur ein einziger Prozess – nämlich der mit der kleinsten lokalen Simulationszeit – Ereignisse verarbeiten; alle anderen müssen warten. Dies führt uns zurück zum seriellen Algorithmus; eine Parallelisierung ist also auf diese Weise nicht möglich. Daher ist für die Ereignisdynamik die Implementierung des komplizierteren optimistischen Ansatzes mitsamt Fehlerkorrektur notwendig.

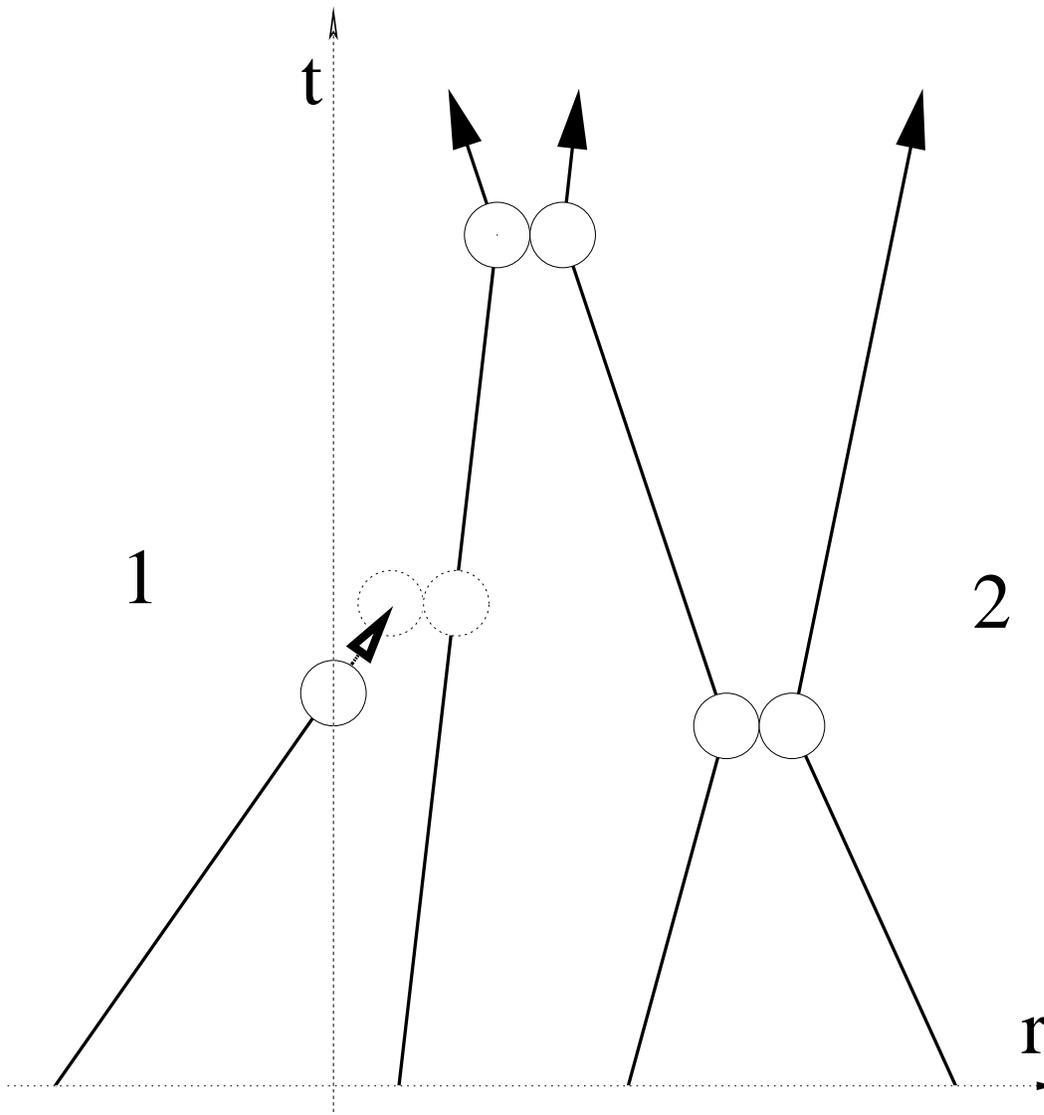


Abbildung 3.2: Raum-Zeit-Ereignisdiagramm mit zwei Prozessen:
 Wenn ein Teilchen von Prozess 1 (links) zu Prozess 2 (rechts) überwechselt, kann dies zur Verletzung der kausalen Ordnung führen, wenn dort die lokale Simulationszeit schon weiter fortgeschritten ist und dadurch eine Kollision verpasst wurde.

3.4 Fehlerkorrektur

Wie die Fehlerkorrektur abläuft, soll zunächst einmal kurz skizziert werden; für die Einzelheiten, insbesondere was die Fehlerdetektion anbelangt, sei auf die folgenden Kapitel verwiesen.

Wenn ein Kausalitätsfehler detektiert wird, muss der fehlerhafte Simulationsabschnitt wiederholt werden. Dazu ist es notwendig, die Simulationsdaten regelmäßig zwischenspeichern und dabei sicherzustellen, dass diese Kopien keine latenten Kausalitätsfehler enthalten [37].

Am einfachsten lässt sich dies dadurch erreichen, dass alle Prozesse zum Zeitpunkt der Speicherung synchronisiert werden. Das heißt, Prozesse die den Synchronisationszeitpunkt erreicht haben, warten auf die anderen Prozesse. Erst wenn alle Prozesse die gleiche lokale Simulationszeit haben, können die Daten gespeichert werden.

Es ist prinzipiell auch möglich, die kausale Ordnung ohne Synchronisation zu garantieren [2]. Jedoch gibt es noch eine Reihe anderer Aufgaben, die ohnehin eine periodische Synchronisation erfordern, wie z. B. Datenausgabe, dynamische Lastverteilung, etc., sodass auf diese komplexen und speicheraufwändigen¹ Alternativen verzichtet werden kann. Außerdem würden die lokalen Zeiten ganz ohne Synchronisation mit der Zeit auseinanderdriften [38] und damit Kausalitätsfehler begünstigen.

Das Synchronisationsintervall – soweit es nicht bereits durch die genannten anderen Aufgaben festgelegt ist – wird hierbei durch ein adaptives Verfahren bestimmt: Dazu wird die Intervalllänge vergrößert, wenn während eines Simulationsabschnittes kein Kausalitätsfehler auftritt, und im anderen Fall verkürzt.²

Wenn nun ein Kausalitätsfehler auftritt, brechen alle Prozesse ihre Berechnungen ab und wiederholen den Simulationsabschnitt ausgehend vom letzten

¹Der Algorithmus in [2] benötigt zwei Kopien der Simulationsdaten, der hier vorgestellte lediglich eine. Unser Verfahren verringert also den Speicheraufwand gegenüber [2] noch einmal um den Faktor 2/3. Hinzu kommt noch der verminderte Speicheraufwand durch den Verzicht auf Doppelpufferung des Teilchenzustands. Siehe hierzu die Anmerkung auf Seite 12.

²Die Faktoren hierfür sind prinzipiell frei wählbar. Günstige Ergebnisse haben wir aber beispielsweise mit 1.1 für den fehlerfreien Fall und 0.5 für den fehlerhaften Fall erzielt.

gespeicherten Zwischenstand. Außerdem wird eine Synchronisationsbarriere für den Zeitpunkt, zu dem sich der Fehler ereignet hat, gesetzt, damit nicht derselbe Fehler erneut auftritt. In seltenen Fällen kann es jedoch vorkommen, dass nun ein *anderer* Kausalitätsfehler zu einem früheren Zeitpunkt auftritt. Dann muss eben der Simulationsabschnitt ein zweites Mal wiederholt werden, dieses Mal mit einer früheren Synchronisationsbarriere.

3.5 Paralleler Algorithmus

Der parallele Algorithmus ist in Abbildung Abb. 3.3 schematisch dargestellt. Die Simulation wird dabei in Abschnitte unterteilt, die allen Prozessen gemeinsam sind. Das Ende eines derartigen Abschnitts ist durch eine Synchronisationsbarriere gekennzeichnet (Punkt I). Der Zeitpunkt dieser Barriere wird durch verschiedene Aufgaben bedingt, die Synchronität erfordern (darunter Punkt III-V).

Die Abschnitte selbst werden von den einzelnen Prozessen asynchron abgearbeitet (Punkt II). Die Details hierzu werden in Kapitel 3.5.4 erläutert. Einen solchen Simulationsabschnitt können die Prozesse nur synchronisiert wieder verlassen, d. h. diejenigen Prozesse die die Barriere erreicht haben, warten, bis auch alle übrigen Prozesse an diesem Punkt angekommen sind, um dann gemeinsam fortzufahren.

Im Anschluss daran wird der aktuelle Zustand der Prozesse zwischengespeichert (Punkt III), um eventuelle Kausalitätsfehler abfangen zu können (siehe dazu Kap. 3.4). Falls erforderlich können nun auch verschiedene Simulationsergebnisse ausgegeben werden (Punkt IV). Bei ungleich verteilter Rechenlast können anschließend die Gebiete der Prozesse neu gegliedert werden (Punkt V, vgl. auch Kap. 3.2).

Im nächsten Schritt (Punkt VI) beginnt der Ablauf wieder von vorn. Punkt VII wird nur bearbeitet, wenn ein Kausalitätsfehler aufgetreten ist. Dann wird der zuletzt gespeicherte Zustand wiederhergestellt und der Simulationsabschnitt mit neuer Synchronisationsbarriere wiederholt (siehe Kap. 3.4).

Während der Bearbeitung eines Simulationsabschnitts (Punkt II), haben die einzelnen Prozesse unterschiedliche lokale Simulationszeiten. Jeder Prozess zer-

paralleler Algorithmus:

I. Synchronisationsbarriere setzen

II. Simulationsabschnitt berechnen:

während lokale Zeit < Synchronisationsbarriere:

1. Kommunikation über Randzonen-Ereignisse

2. lokalen Zeitschritt festlegen

3. während des Zeitschritts:
Ereignisverarbeitung (siehe Abb. 2.1)

4. Teilchen-Informationen verschicken

5. Informationen empfangen und verarbeiten

6. Kausalitätsfehler detektieren

7. wenn Fehler, dann gehe zu VII.

8. gehe zu 1.

III. Zustandsspeicherung

IV. Datenausgabe

V. dynamische Lastverteilung

VI. gehe zu I.

VII. gespeicherten Zustand wiederherstellen, gehe zu I.

Abbildung 3.3: Skizze des parallelen Algorithmus

legt die Simulationsabschnitte in mehrere lokale Zeitschritte, die sich aus der Kommunikation mit Nachbarprozessen ergeben. Jeder Zeitschritt setzt sich wiederum aus einer Vielzahl von einzelnen Ereignissen zusammensetzen. Zwischen der Abarbeitung dieser Ereignisse (Punkt 3) tauschen die einzelnen Prozesse Informationen untereinander aus (Punkt 1,4,5). Sollte dabei ein Kausalitätsfehler detektiert werden (Punkt 6), wird der aktuelle Simulationsabschnitt beendet (Punkt 7) und wiederholt. Für Details siehe auch die folgenden Kapitel.

3.5.1 Kommunikation

Ereignisse, die an der Grenze zwischen zwei Prozessen stattfinden, machen es erforderlich, dass die Prozesse miteinander kommunizieren. Jedoch wäre es höchst ineffizient, wenn ein Prozess nach jedem einzelnen Ereignis mit seinen Nachbarn kommunizieren müsste. Daher werden so viele Ereignisse wie möglich abgearbeitet, bevor die Prozesse Nachrichten austauschen.

Die Kommunikation sollte dabei asynchron mit entkoppelten Send- und Empfangs-Routinen ablaufen, damit Prozesse nicht unnötigerweise aufeinander warten müssen und stattdessen mit ihren Berechnungen fortfahren. Dies lässt sich mit Hilfe von MPI, das die erforderlichen asynchronen Routinen zur Verfügung stellt, leicht implementieren.

Je seltener kommuniziert wird, desto effizienter verläuft die Ereignisverarbeitung, desto später treffen allerdings auch Nachrichten von Nachbarprozessen ein und begünstigen damit Kausalitätsfehler. Also wird die Dauer des Zeitschritts, während dessen Ereignisse verarbeitet werden, so festgelegt, dass Kausalitätsfehler möglichst unwahrscheinlich sind, der Zeitschritt aber gleichzeitig möglichst lang ist. Dazu führen wir das Konzept der Randzone ein [2, 25, 39].

3.5.2 Die Randzone und zugehörige Datenstrukturen

Die *Randzone* eines Prozesses besteht aus denjenigen Zellen, die Nachbarzellen haben, die zu einem anderen Prozess gehören. Somit ergibt sich eine ein Zellen breite Randzone für jedes Prozessgebiet (siehe Abb. 3.4).

Jeder Prozess verwaltet zusätzlich zu seinen eigenen Zellen eine Liste mit *virtuellen Randzellen*, die tatsächlich zur Randzone seiner Nachbarprozesse gehören.

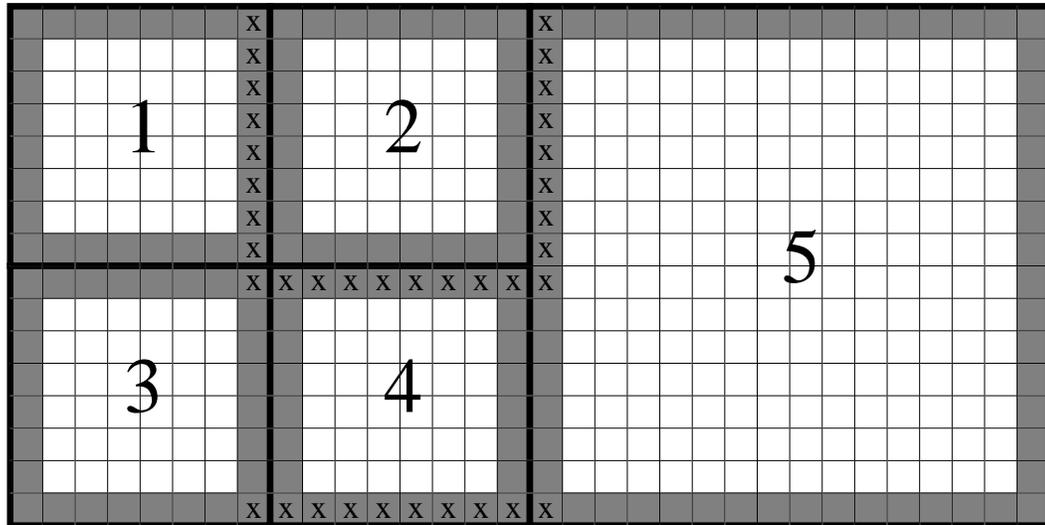


Abbildung 3.4: Beispiel für ein Simulationsgebiet mit 5 Prozessen und 512 Zellen. Die Randzonen-Zellen sind dunkel eingefärbt. Die virtuellen Randzellen von Prozess 2 sind mit einem x markiert. Dabei wurden periodische Randbedingungen vorausgesetzt.

Ebenso verwaltet er eine Liste mit *virtuellen Teilchen*, die sich in diesen virtuellen Randzellen befinden. Diese virtuellen Teilchen können als Kollisionspartner realer Teilchen agieren, aber für sie wird keine eigene Ereignisliste angelegt. Denn die zugehörigen Ereignisse werden ja schon im Nachbarprozess, wo diese Teilchen real sind, berechnet und von diesem gegebenenfalls übermittelt.

Des Weiteren wird für die Ereignisse, die in der (realen) Randzone stattfinden,³ eine *eigene Ereignis-Warteschlange* angelegt, vergleichbar derjenigen aus Kap. 2.2. Diese liefert immer dasjenige Ereignis zurück, das *voraussichtlich* als nächstes innerhalb der Randzone stattfinden wird. Tatsächlich kann es natürlich aber auch vorkommen, dass dieses Ereignis später noch annulliert wird oder ein anderes, bisher nicht vorhergesehenes Ereignis früher innerhalb der Randzone stattfindet.

³Damit ist gemeint, dass bei einer Teilchenkollision sich mindestens eines der Teilchen in einer Randzonenzone befindet bzw. bei einem Zellenwechsel mindestens eine der beteiligten Zellen zur Randzone gehört.

3.5.3 Festlegen des Zeitschritts

Der optimistische Ansatz für die Parallelisierung geht zunächst davon aus, dass diese Prognose für das nächste Randzonen-Ereignis verlässlich ist und legt dementsprechend den Zeitschritt fest, während dessen Ereignisse abgearbeitet werden können [40].

Dieser Zeitschritt sollte nicht länger als bis zum nächsten Randzonen-Ereignis sein, denn danach ist ja mit Wechselwirkungen mit Nachbarprozessen zu rechnen – sei es, dass ein Teilchen mit Teilchen des Nachbarprozesses kollidiert oder aber einfach die Gebietsgrenze zum Nachbarprozess überquert.

Wenn in den zum Randzonen-Ereignis benachbarten Zellen (auf einem Nachbarprozess) ein früheres Ereignis stattfinden sollte, ist selbst dieser Zeitschritt schon zu lange; denn nach diesem früheren Ereignis ändern sich ja die Daten der virtuellen Teilchen, auf denen die ursprüngliche Abschätzung beruhte. Daher sollte der Zeitschritt in diesem Fall nur bis zu jenem früheren Ereignis dauern. Mit diesem Verfahren ist sichergestellt, dass Kausalitätsfehler nur selten auftreten.⁴

3.5.4 Berechnung eines Simulationsabschnitts

Die Berechnung eines Simulationsabschnitts (Abb. 3.3, Punkt II) läuft im Einzelnen folgendermaßen ab: Zunächst wird der Zeitschritt für den Simulationsabschnitt festgelegt. Dazu schicken alle Prozesse ihren Nachbarprozessen Informationen über das als nächstes anstehende Randzonen-Ereignis. Diese antworten mit dem nächsten geplanten Ereignis in den dazu benachbarten Zellen (Punkt 1). Jeder Prozess kann dann damit seinen lokalen Zeitschritt festlegen (Punkt 2), vgl. Kap. 3.5.3. Dabei sollte auch noch berücksichtigt, dass der Zeitschritt die Synchronisationsbarriere nicht überschreitet, es sei denn alle anderen Prozesse hätten diese ebenfalls schon erreicht.

⁴Man kann auch pessimistischere Maßstäbe anlegen, die den Zeitschritt noch weiter verkürzen, wie z. B. [2], und damit Kausalitätsfehler noch unwahrscheinlicher machen. Allerdings geht dies auf Kosten der Parallelität, da viele Prozesse dann nur mit Warten beschäftigt sind, und führt unter dem Strich zu geringerer Leistung.

Anschließend beginnt die Verarbeitung der Ereignisse, die während dieses Zeitschritts stattfinden (Punkt 3). Diese Phase läuft genauso wie beim seriellen Algorithmus ab, siehe dazu Kap. 2. Wenn dabei ein Randzonen-Ereignis auftreten sollte, das nicht vorhergesehen war, wird diese Phase vor dessen Bearbeitung vorzeitig abgebrochen, um einen eventuellen Kausalitätsfehler zu vermeiden. Ansonsten läuft sie bis zum zuvor festgelegten Ende des Zeitschritts.

Ein Randzonen-Ereignis kann also während dieser Phase allenfalls als letztes Ereignis auftreten. Falls dies der Fall ist, werden im Anschluss daran die aktualisierten Informationen zu den beteiligten Teilchen an die entsprechenden Nachbarprozesse⁵ verschickt (Punkt 4).

Mit den empfangenen Nachrichten kann nun jeder Prozess seine Datenstrukturen anpassen (Punkt 5). Davon können reale Teilchen betroffen sein, wenn sie mit einem virtuellen Teilchen kollidiert sind; dann muss die Teilchengeschwindigkeit entsprechend angepasst werden. Bei virtuellen Teilchen gibt es eine Vielzahl weiterer Möglichkeiten: Bei ihnen kann sich beispielsweise auch der Ort und die Zellnummer ändern. Sie können sogar neu in der Liste der virtuellen Teilchen auftauchen oder daraus verschwinden, wenn sie in die virtuelle Randzone eintreten oder diese verlassen. Und schließlich kann ein virtuelles Teilchen auch zu einem realen Teilchen werden, wenn es die Gebietsgrenze überschreitet.

In diesem Fall müssen für das neue reale Teilchen Ereignisse berechnet werden. Wenn diese die Kausalität verletzen, also vor der lokalen Simulationszeit liegen, wird ein Fehler signalisiert.

Die zweite Quelle potentieller Kausalitätsfehler ergibt sich, wenn sich die anfangs übermittelten Informationen zu Randzonen-Ereignissen im Nachhinein als inkorrekt erweisen. Diese sollten ja die Länge des Zeitschritts begrenzen, wenn vor einem Randzonen-Ereignis in einer Nachbarzelle ein früheres Ereignis stattfindet. Ergibt nun die Fehlerdetektion (Punkt 6), dass ein solches stattfand, aber dem Nachbarprozess nicht rechtzeitig mitgeteilt wurde, so wird ebenfalls ein Kausalitätsfehler signalisiert, weil dadurch möglicherweise eine Kollision verpasst wurde.

⁵In der Regel ist dies nur ein einziger Prozess; bei Zellen die an der Ecke eines Gebiets liegen, können es jedoch auch bis zu sieben Nachbarprozesse sein.

Wenn ein Fehler aufgetreten ist, wird der ganze Simulationsabschnitt abgebrochen (Punkt 7) und wiederholt; ansonsten geht es mit dem nächsten Zeitschritt weiter (Punkt 8).

3.6 Parallele Rechenleistung

Wie wir nun gesehen haben, ist der parallele Algorithmus weitaus komplexer als der serielle. Zu den eigentlichen Berechnungen kommen hier noch Prozesskommunikation, Zustandsspeicherung, Fehlerkorrektur, Lastneuverteilung, Wartezeiten etc. hinzu.

Letztendlich muss sich erst bei der Anwendung erweisen, dass die kombinierte Rechenleistung der verschiedenen Prozesse diesen Zusatzaufwand wett machen kann und sich unter dem Strich eine deutliche Leistungssteigerung ergibt. Für den Speicherbedarf gilt im Prinzip dasselbe, da sich die gesteigerte Komplexität auch in mehr notwendigen Datenstrukturen niederschlägt. Im Folgenden seien die benötigten Ressourcen in Abhängigkeit von der Prozessanzahl \mathcal{P} untersucht.

3.6.1 Rechenzeit

Die Geschwindigkeitstest wurden auf einem PC-Cluster mit Pentium-III-CPU's mit 650 MHz Taktfrequenz und einem mit 1.28 GBit/s geschalteten Myrinet-LAN durchgeführt. Das Test-System bestand dabei aus harten Kugeln, die – soweit in den Bildunterschriften nichts anderes vermerkt ist – ideal elastisch miteinander stoßen konnten (Restitutionskoeffizient $\epsilon = 1$).

Die beschriebene Rechnerarchitektur stellt keine ideale Konfiguration für Ereignisdynamik-Simulationen dar, da diese trotz aller Optimierungen doch noch relativ viel Kommunikation zwischen den Prozessen benötigen. Besser geeignet wäre ein Supercomputer mit optimierter Kommunikations-Hardware wie beispielsweise eine Cray T3E oder auch ein Shared-Memory-System. Umso besser eignet es sich dagegen als Bewertungsmaßstab. Wenn hier die Parallelisierung eine Leistungssteigerung erbringt, ist diese auf anderen Supercomputern erst recht zu erwarten.

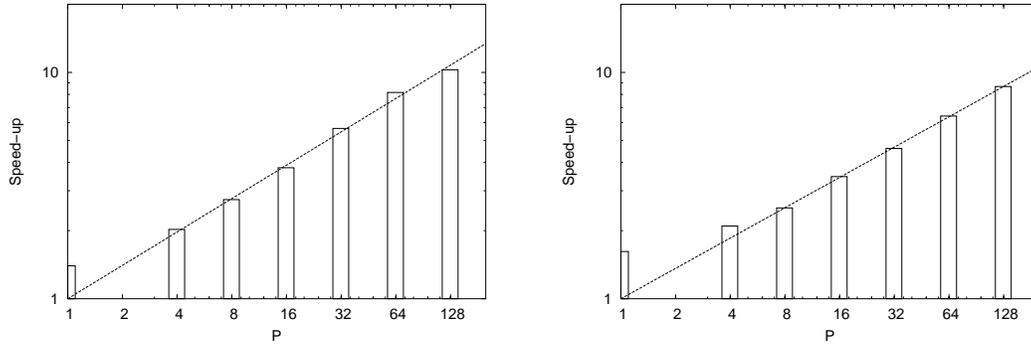


Abbildung 3.5: Beschleunigung der Rechenleistung auf einem PC-Cluster bei \mathcal{P} Prozessen (im Vergleich zu einem fiktiven Ein-Prozess-System). Der tatsächliche Messwert für $\mathcal{P} = 1$ ist mit den anderen Werten nur bedingt vergleichbar.

Man beachte den logarithmischen Maßstab.

(links) 2D-System mit $N = 5 \cdot 10^5$ Teilchen, Volumenanteil $\nu = 0.3$, $C = 1024^2 \approx 10^6$ Zellen. Die Gerade hat eine Steigung von 0.49.

(rechts) 3D-System mit $N = 2 \cdot 10^6$ Teilchen, Volumenanteil $\nu = 0.25$, $C = 128^3 \approx 2 \cdot 10^6$ Zellen. Die Gerade hat eine Steigung von 0.45.

Wie man nun Abb. 3.5 entnehmen kann, erhalten wir in einem homogenen System mit konstanter Teilchenzahl im Bereich $4 \leq \mathcal{P} \leq 128$ eine Steigerung der Rechenleistung proportional zu $\mathcal{P}^{1/2}$, sowohl in zwei als auch in drei Dimensionen.⁶

In Abb. 3.6 ist die Rechenleistung eines dissipativen und damit inhomogenen⁷ Systems aufgetragen; hier wurde die Teilchenzahl proportional zur Prozessanzahl \mathcal{P} gewählt. Dabei ist ebenso eine Beschleunigung der Rechenleistung pro-

⁶Zum Vergleich ist auch die Rechenleistung des seriellen Algorithmus auf einer ähnlichen Rechnerarchitektur eingezeichnet. Diese ist größer als es das Skalierungsverhalten der parallelen Version erwarten ließe, was damit zusammenhängt, dass der serielle Algorithmus auf einige Routinen wie Prozesskommunikation, Zustandssicherung, Fehlerbehebung, etc. verzichten kann.

⁷Inwiefern Dissipation zu Inhomogenitäten führt, wird in Teil II dieser Arbeit ausführlich diskutiert.

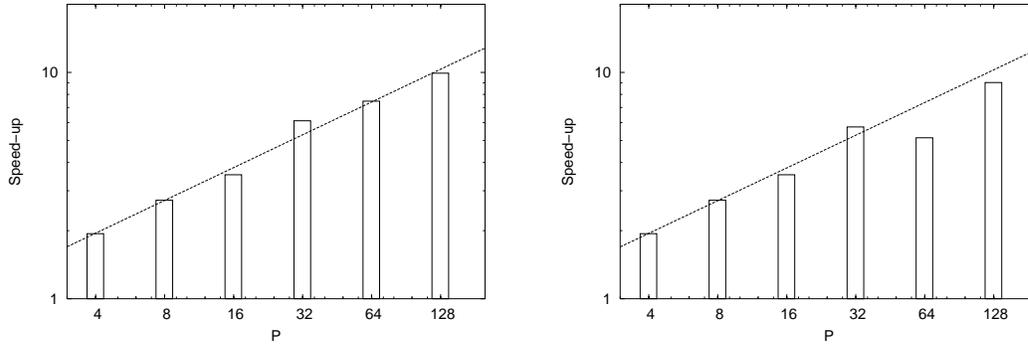


Abbildung 3.6: Beschleunigung der Rechenleistung auf einem PC-Cluster bei \mathcal{P} Prozessen.

Dissipatives 2D-System mit $N = \mathcal{P} \cdot 10^4$ Teilchen, Volumenanteil $\nu = 0.25$, Restitutionskoeffizient $\epsilon = 0.5$.

Die Gerade hat eine Steigung von 0.48.

(links) mit dynamischer Lastverteilung

(rechts) ohne dynamische Lastverteilung

portional zu $\mathcal{P}^{1/2}$ erkennbar – sofern die dynamische Lastverteilung aktiviert ist. Ansonsten ist demgegenüber für große \mathcal{P} teilweise ein deutlicher Leistungsabfall zu verzeichnen; bei noch ausgeprägteren Inhomogenitäten sollte dieser noch stärker ins Gewicht fallen. Für kleine \mathcal{P} ergibt sich hier kein Unterschied, da die Prozess-Gebiete größer als die Größenskalen der Inhomogenitäten sind.

Mit aktivierter dynamischer Lastverteilung ist den Daten kein Sättigungsverhalten für große \mathcal{P} anzusehen, sodass auch für noch größere \mathcal{P} weitere Leistungssteigerungen zu erwarten sind.

3.6.2 Speicherbedarf

Wichtiger als die Rechenzeit ist bei großen Ereignisdynamik-Simulationen aber oft der Speicherbedarf. Dieser lässt sich bei vorliegendem Code einfach analytisch abschätzen. Der wesentlichen Beitrag zum Speicherbedarf ist proportional zur Teilchenzahl pro Prozess ($\propto N/\mathcal{P}$); dies ist der Speicherbedarf der realen Teilchen. Dazu kommen noch die virtuellen Teilchen am Rande eines Prozessgebiets ($\propto (N/\mathcal{P})^{1-1/\mathcal{D}}$) und globale Teilchendaten ($\propto N$). Wir überprüfen

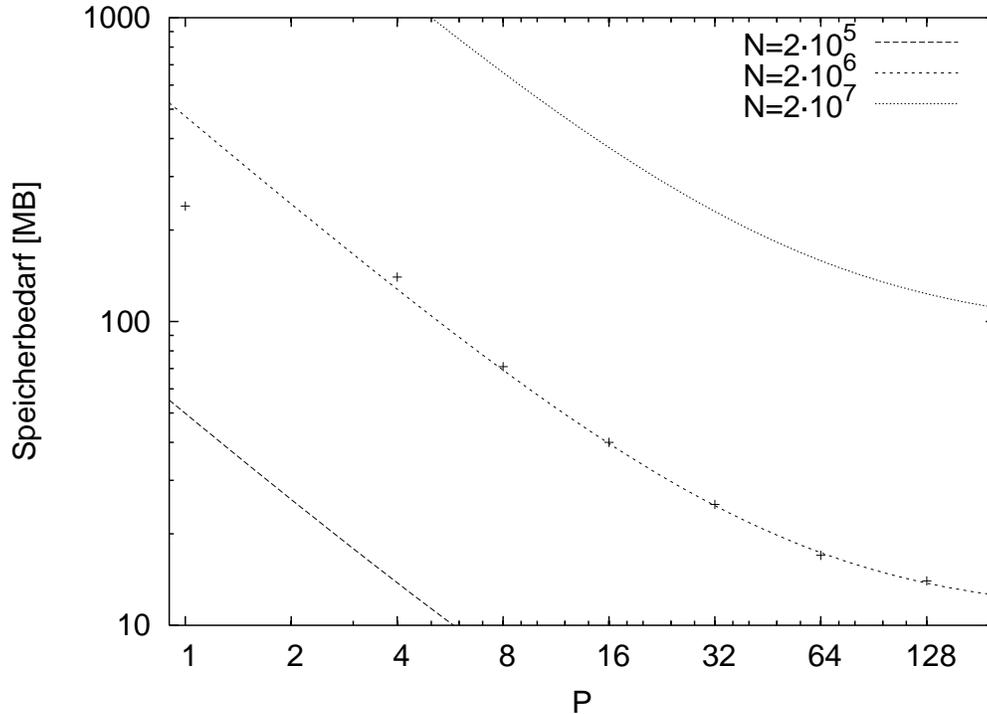


Abbildung 3.7: Typischer Speicherbedarf pro Prozess bei einem 3D-System mit \mathcal{P} Prozessen.

Die Datenpunkte sind tatsächliche Messwerte für $N = 2 \cdot 10^6$ Teilchen; die Kurven ergeben sich aus der Abschätzung $c_1 N/\mathcal{P} + c_2 (N/\mathcal{P})^{2/3} + c_3 N$, wobei der erste Term den Speicherbedarf realer Teilchen berücksichtigt, der zweite denjenigen der virtuellen Teilchen und der dritte die globalen Teilchendaten. Der Datenpunkt für einen einzigen Prozess liegt abseits des Schätzwertes für den parallelen Algorithmus, da der serielle Algorithmus auf einige Datenstrukturen verzichten kann.

diese Abschätzung anhand einiger gemessener Werte (siehe Abb. 3.7) und zeigen, dass sie die tatsächlichen Werte überzeugend wiedergibt. Zum Vergleich ist auch der Speicherbedarf des seriellen Algorithmus eingezeichnet; dieser ist beinahe um den Faktor 2 geringer, da der serielle Algorithmus keine Kopie der Daten für die Korrektur von Kausalitätsfehlern benötigt.

Man erkennt, dass der Speicherbedarf virtueller Teilchen für sinnvolle Werte $N/\mathcal{P} \gg 10^3$ nicht ins Gewicht fällt. Für nicht allzu große \mathcal{P} skaliert damit der Speicherbedarf praktisch mit N/\mathcal{P} . Ein Problem stellen lediglich die globalen Teilchendaten dar. Selbst in unserem Programm, in dem lediglich 4 Byte an globalen Daten⁸ pro Teilchen benutzt werden, sinkt der benötigte Speicher pro Prozess für $\mathcal{P} > 128$ praktisch nicht mehr ab. Glücklicherweise lassen sich die globalen Teilchendaten mit geänderter Speicherverwaltung ohne allzu große Leistungseinbußen aber auch ganz vermeiden. Für Architekturen mit extrem vielen Prozessen kann das sinnvoll sein. Da unser Rechner auf 128 Prozesse beschränkt war, haben wir hierauf verzichtet.

3.6.3 Kommunikation

Kommunikation zwischen den Prozessen ist immer dann nötig, wenn ein Ereignis in einer der C_{border} Zellen der Randzone stattfindet. Dies ist (für große \mathcal{P}) ungefähr bei einem Anteil $C_{\text{border}}/C \approx 2\mathcal{D}(\mathcal{P}/C)^{1/\mathcal{D}}$ der Ereignisse der Fall. Anders ausgedrückt: Zwischen den Kommunikationsphasen werden ca. $\mathcal{P}C/C_{\text{border}} \sim C^{1/\mathcal{D}}\mathcal{P}^{1-1/\mathcal{D}}$ Ereignisse abgearbeitet. (Für das System aus Abb. 3.5 (rechts), $\mathcal{P} = 64$, erhalten wir beispielsweise ca. 200 Ereignisse zwischen zwei Kommunikationsphasen.) Die Anzahl der Kommunikationspartner richtet sich dabei nach der Anzahl der Nachbarprozesse, für große \mathcal{P} sind das im Mittel $3^{\mathcal{D}} - 1$.

⁸Diese globalen Daten werden zur Zuordnung von globaler Teilchennummer (`id`) zur lokalen Teilchennummer benötigt. Dies haben wir als einfaches Datenfeld mit N Einträgen realisiert. Bei einer großen Anzahl von Prozessen kann es jedoch sinnvoll sein, dies durch eine speichersparende Datenstruktur für dünn besetzte Felder zu ersetzen. (Jeder Prozess benötigt ja lediglich die Einträge für die lokalen Teilchen.) Solche Strukturen sind nicht weiter kompliziert, haben aber eine etwas geringere Zugriffsgeschwindigkeit als einfache Datenfelder.

Synchronisation der Prozesse ist seltener nötig. Durch das adaptive Verfahren, mit dem das Synchronisationsintervall t_{sync} festgelegt wird, ist dessen Länge an die Häufigkeit der Kausalitätsfehler gekoppelt. Eine sinnvolle Wahl der Parameter liefert dann etwa eine Größenordnung mehr Synchronisationen als Kausalitätsfehler.

Die Häufigkeit der Kausalitätsfehler und damit verbundenen Wiederholungen des Simulationsabschnitts hängt von zahlreichen Größen ab. Für unsere typischen Testsysteme erhalten wir in etwa $10^2(N/\mathcal{P})^{1-1/\mathcal{D}}$ Ereignisse in der Zeit t_{err} zwischen zwei Kausalitätsfehlern. (Für das System aus Abb. 3.5 (rechts), $\mathcal{P} = 64$, erhalten wir beispielsweise ca. 27000 Ereignisse zwischen zwei Kausalitätsfehlern.)

Der Anteil der wiederholten Simulationsabschnitte an der gesamten Simulation beträgt dabei ungefähr $t_{\text{sync}}/t_{\text{err}}$. Dieses Verhältnis lässt sich durch häufigere Synchronisationen zwar verringern, sodass der Anteil der wiederholten Abschnitte sinkt; andererseits wächst dadurch die Zeit an, in der Prozesse untätig auf andere warten.

3.6.4 Skalierbarkeit

Zusammengefasst lässt sich also feststellen, dass die Parallelisierung gegenüber dem seriellen Algorithmus naturgemäß zunächst einmal zusätzliche Kosten in Bezug auf Rechenleistung und Speicherbedarf verursacht. Durch die Verteilung auf mehrere Prozesse, ergibt sich dennoch eine deutliche Leistungssteigerung gegenüber dem seriellen Algorithmus. Diese haben wir im Bereich $4 \leq \mathcal{P} \leq 128$ aufgezeigt und es spricht nichts dagegen, für $\mathcal{P} > 128$ mit weiteren Leistungssteigerungen zu rechnen.⁹ Für Rechner-Architekturen mit optimierter Kommunikationshardware ist für die parallele Implementierung außerdem eine weitere Beschleunigung der Berechnungen zu erwarten.

Auf der Referenzarchitektur war es uns möglich, reale physikalische Probleme mit $N/\mathcal{P} \lesssim 10^6$, also bis zu $N \approx 10^8$ Teilchen zu simulieren.

⁹Was den Speicherbedarf angeht, sind dann jedoch geringfügige Modifikationen der Datenstrukturen angeraten, sodass diese ganz ohne globale Teilchendaten auskommen.

3.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde eine Parallelisierung der Ereignisdynamik vorgestellt. Die Implementierung beruht auf MPI und verwendet ansonsten nur die C/C++-Standard-Bibliotheken; der zu Grunde liegende Code ist portabel und sollte damit auf allen Rechnerarchitekturen lauffähig sein.

Parallelisierung wird durch Gebietszerlegung erreicht. Um auch inhomogene Systeme effizient simulieren zu können, ist diese Zerlegung nicht statisch, sondern wird durch dynamische Lastverteilung ständig optimiert.

Da bei der Ereignisdynamik die Teilchen asynchron bearbeitet werden, muss jeder Prozess seine eigene lokale Simulationszeit verwenden. Wegen der prinzipiell nach oben nicht beschränkten Ereignis-Ausbreitungsgeschwindigkeit ist es nicht möglich, die kausale Ordnung während der parallelen Simulation unter allen Umständen aufrecht zu erhalten. Daher muss der Algorithmus eine optimistische Strategie verfolgen, bei der er zunächst einmal von einer kausal korrekten Verarbeitung ausgeht, eventuelle Fehler detektiert und dann den fehlerhaften Simulationsabschnitt wiederholt. Dazu ist es notwendig, den Simulationszustand regelmäßig zu speichern; das Speicherintervall wird durch ein adaptives Verfahren an die typische Frequenz, mit der Kausalitätsfehler auftreten, optimal angepasst. Die korrekte kausale Ordnung der gespeicherten Kopien wird dabei durch vorhergehende Synchronisation der Prozesse garantiert.

Ansonsten sieht die wesentliche Verarbeitungsroutine für die Ereignisse ähnlich wie beim seriellen Algorithmus aus. Jedoch wird die Ereignisverarbeitung regelmäßig durch eine Phase der Kommunikation zwischen den Prozessen unterbrochen; die Länge der Ereignisverarbeitungsphase wird dabei anhand von Randzonen-Ereignissen festgelegt.

Die damit auf einem PC-Cluster mit \mathcal{P} Prozessoren erzielte Leistung ist ungefähr proportional zu $\mathcal{P}^{1/2}$; auf Maschinen mit optimierter Kommunikationshardware sollte die Leistungsfähigkeit noch deutlich besser skalieren. Dieses Verhalten wurde zumindest bis $\mathcal{P} = 128$ nachgewiesen, ist aber auch für noch größere Prozesszahlen zu erwarten.

Der Nutzen der dynamischen Lastverteilung ist stark abhängig vom Grad der Inhomogenität des simulierten Systems und der Anzahl der Prozesse. Sie ent-

faltet ihre größte Effektivität bei stark inhomogenen Systemen und vielen Prozessen.

Der Speicherbedarf wurde gegenüber [2] um den Faktor 3 reduziert; er ist im Wesentlichen proportional zu N/\mathcal{P} . Bei sehr großen \mathcal{P} fallen die wenigen globalen Teilchendaten störend ins Gewicht; auf diese kann man allerdings auch verzichten, ohne dafür allzu große Geschwindigkeitseinbußen in Kauf zu nehmen.

Insgesamt konnten wir mit dieser Implementierung auf dem zur Verfügung stehenden PC-Cluster realistische physikalische Probleme mit bis zu $N = 10^8$ Teilchen untersuchen.

Teil II

**Clusterbildung
in granularen Gasen**

4 Granulare Gase

Granulare Medien bestehen aus einer Vielzahl kleiner, aber makroskopischer Teilchen. Sand, Staub, Zucker und Mehl sind einige Beispiele aus dem alltäglichen Leben. In Anlehnung an die Thermodynamik unterscheidet man drei qualitativ unterschiedliche Verhaltensweisen: gasförmig, flüssig und fest. Es handelt sich dabei jedoch nicht wirklich um thermodynamische Phasen mit scharfen Phasenübergängen, sondern lediglich um suggestive Bezeichnungen [41–46].

Bei hohen Dichten verhalten sich granulare Medien wie Festkörper. Die Teilchen sind in permanentem Kontakt miteinander und bilden einen metastabilen Zustand. Reibung und geometrische Beschränkungen verhindern ein Fließen. Deshalb ist es beispielsweise möglich, auf Deichen oder Dünen spazieren zu gehen.

Bei mittleren Dichten sind die Teilchen zwar auch noch in engem Kontakt, aber eine äußere Krafteinwirkung, wie z.B. die Gravitation, führt zu einem Fließen des Mediums. Beispiele hierfür sind Lawinen oder der Fluss eines Granulats durch ein Rohr. Die Dynamik wird dabei im Wesentlichen durch die Reibungskräfte zwischen den Teilchen bestimmt.

Beim Übergang zu noch geringeren Dichten berühren sich die Teilchen nur noch selten. In diesem Fall spricht man von *granularen Gasen*. Für deren Dynamik sind vor allem Teilchenkollisionen verantwortlich. Bei extremer Verdünnung ähneln die Eigenschaften granularer Gase denen von idealen Gasen. Interessanter ist jedoch der Fall, bei dem Teilchenabstände und freie Weglängen in einer ähnlichen Größenordnung wie die Teilchen selbst liegen. Dann beobachtet man komplexe Strukturbildungseffekte [27, 47, 48], mit denen wir uns in den folgenden Kapiteln näher beschäftigen wollen.

Da es sich bei granularen Gasen um makroskopische Teilchen handelt, reicht die klassische Mechanik zu deren Beschreibung aus. Viele Methoden aus der klassischen statistischen Physik können auf granulare Gase übertragen werden, wie z. B. der Liouville-Operator-Formalismus. Allerdings müssen dabei dissipative Prozesse berücksichtigt werden, die bei molekularen Kollisionen nicht auftreten.

Zunächst beschäftigen wir uns in Kapitel 4.1 mit einem geeigneten Modell für granulare Gase. Anschließend wenden wir in Kapitel 4.2 Methoden der statistischen Physik auf granulare Gase an und versuchen daraus Aussagen über deren Eigenschaften zu gewinnen. In Kapitel 4.3 schieben wir einen kurzen Überblick über die Zustandsgleichung unseres Modellsystems ein. Im Kapitel 4.4 widmen wir uns dann speziell den Mechanismen, die der Strukturbildung in granularen Gasen zu Grunde liegen. Schließlich geben wir in Kapitel 4.5 eine kurze Zusammenfassung dieser Überlegungen.

4.1 Modellierung

Reale granulare Medien bestehen aus einer Vielzahl von Teilchen unterschiedlichster Form, Größe und Masse. Kollisionen und Berührungen der Teilchen führen zu Reibung, Kohäsion, Deformationen, inneren Schwingungen, Abrieb und Fragmentierung. In der Regel befinden sich die Teilchen dabei innerhalb eines Mediums (beispielsweise Luft), mit dem die Teilchen ebenfalls interagieren. Zwischen den Teilchen wirken Van-der-Waals- und elektrostatische Kräfte; von außen wirken typischerweise Kräfte wie die Gravitation auf die Teilchen ein.

Bei solch einem komplexen System erscheint es nicht überraschend, dass man ein kompliziertes Verhalten beobachtet. Aber sind all diese Beiträge auch wirklich notwendig, um das typische Verhalten eines granularen Gases zu reproduzieren? Und welche eigentliche Ursache liegt den beobachteten Strukturen zu Grunde? Um diesen Fragen nachzugehen, ist es notwendig, sich bei der Modellierung granularer Gase auf das Wesentliche zu beschränken und deren komplexe Realität auf ein möglichst einfaches Modell abzubilden.

4.1.1 Teilchen

Diesem Prinzip folgend, modellieren wir die Teilchen des granularen Gases als identische, unendlich harte Kugeln. Alle N Teilchen erhalten dieselbe Masse m und denselben Radius a . Die Teilchen werden bei einer Kollision nicht deformiert und als glatt angesehen; die Kollisionen verlaufen also reibungsfrei. Damit brauchen Eigendrehimpulse der Teilchen nicht berücksichtigt zu werden.¹ Ebenso werden innere Freiheitsgrade der Teilchen vernachlässigt. Außer dem geometrischen Effekt des ausgeschlossenen Volumens wechselwirken die Teilchen also nicht miteinander und es wirken auch keine äußeren Kräfte. Die Dynamik der Teilchen wird somit allein von der Entropie dirigiert und ist – von der Zeitskala abgesehen – temperaturunabhängig.

Dissipation ist ein wesentlicher Bestandteil der Dynamik granularer Gase. Wir beschränken uns bei der Modellierung auf einen einzigen Parameter – den Restitutionskoeffizienten ϵ . Dieser beschreibt das Verhältnis der Teilchengeschwindigkeiten vor und nach einer Kollision (siehe auch Kap. 2.4.2):

$$\epsilon = \frac{|\mathbf{v}'_n|}{|\mathbf{v}_n|} \quad (4.1)$$

Dabei ist \mathbf{v}_n die relative Normalengeschwindigkeit der beiden Teilchen bei der Kollision. Die ungestrichene Größe gilt unmittelbar vor, die gestrichene unmittelbar nach der Kollision.

Als numerische Simulationemethode für dieses System wird die im ersten Teil dieser Arbeit vorgestellte Ereignisdynamik benutzt.

4.1.2 Anfangs- und Randbedingungen

Um den Einfluss von Rand- und Größeneffekten möglichst klein zu halten, verwenden wir periodische Randbedingungen (siehe Kap. 2.3.1) in einem \mathcal{D} -dimensionalen Simulationsvolumen $V = L^{\mathcal{D}}$.

¹Beispielhafte Simulationen haben gezeigt, dass Modelle mit Rotation etc. qualitativ zu denselben Ergebnissen führen [29, 49].

Der Volumenanteil ν der Teilchen mit Volumen V_{part} am simulierten Volumen beträgt damit

$$\nu := N \frac{V_{\text{part}}}{V} \quad (4.2)$$

$$= N \left(\frac{a}{L}\right)^{\mathcal{D}} \frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \quad (4.3)$$

$$= \begin{cases} N(a/L)^2 \pi & (2\text{D}) \\ N(a/L)^3 4\pi/3 & (3\text{D}). \end{cases} \quad (4.4)$$

Dieser wird so gewählt, dass die mittlere freie Weglänge l_E der Teilchen klein gegenüber der Systemgröße L ist, siehe dazu Gleichung (4.38), aber natürlich nicht so klein, dass das System einfriert (siehe Kap. 4.3).

Einen zufälligen homogenen Anfangszustand präparieren wir in der folgenden Weise: Zunächst werden alle Teilchen auf die Positionen eines regelmäßigen Gitters verteilt. Den Teilchen werden zufällige, maxwellverteilte Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i zugewiesen. Dabei wird außerdem sichergestellt, dass der Gesamtimpuls aller Teilchen $\sum_i m\mathbf{v}_i = \mathbf{0}$ ist. Um nun auch eine zufällige räumliche Verteilung der Teilchen zu erhalten, wird eine vorbereitende Simulation durchgeführt, bei der die Dissipation ausgeschaltet bleibt ($\epsilon = 1$). Schon nach wenigen Kollisionen stellt sich eine zufällige Verteilung der Orte und Geschwindigkeiten ein; der Sicherheit halber wählen wir eine Simulationsdauer von 10^2 Kollisionen pro Teilchen. Die damit erzielte Konfiguration wird nun als Ausgangszustand für die eigentliche Simulation benutzt.

Typische Werte für die Dichte und die Systemgröße liegen dabei in der Größenordnung $\nu = 0.25$ und $N = 10^5 \dots 10^6$.

4.1.3 Mikroskopische Dynamik

Die mikroskopische Dynamik dieses Modells ergibt sich aus einer vereinfachten Version der Gleichungen aus Kap. 2.4.1 und Kap. 2.4.2. Zwischen den Stößen wirken keine Kräfte auf die Teilchen; sie bewegen sich mit konstanter Geschwindigkeit:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}t. \quad (4.5)$$

Die Kollisionen selbst finden in infinitesimal kurzer Zeit statt und gehorchen dem Stoßgesetz

$$\mathbf{v}'_{1/2} = \mathbf{v}_{1/2} \mp \frac{1 + \epsilon}{2} \mathbf{v}_n . \quad (4.6)$$

Der Gesamtimpuls bleibt dabei erhalten. Die kinetische Energie nimmt ab; die Stärke der Dissipation ist dabei proportional zu

$$\lambda := 1 - \epsilon^2 . \quad (4.7)$$

Im Fall elastischer Kollisionen $\epsilon = 1$ ist die Dissipation $\lambda = 0$; maximale Dissipation erhält man für $\epsilon = 0$.

4.1.4 Inelastischer Kollaps und TC-Modell

Wie sich in den folgenden Kapiteln zeigen wird, ist dieses einfache Modell ausreichend, um die charakteristischen Eigenschaften von granularen Gasen wiederzugeben. Jedoch kann die Idealisierung der Wechselwirkungen durch ein unendlich steifes Potential zu einem pathologischen Verhalten führen – dem inelastischen Kollaps. Damit ist gemeint, dass unendlich viele Teilchenkollisionen in endlicher Zeit stattfinden. Diese Singularität ist sowohl unphysikalisch als auch problematisch für die numerische Simulation mit der Ereignisdynamik.

Eine genaue Untersuchung dieses Phänomens [50–52] zeigt, dass der inelastische Kollaps immer dann auftreten kann, wenn Systemgröße N , Dichte ν und Dissipation λ groß genug sind. Es handelt sich dabei im Wesentlichen um ein eindimensionales Phänomen; das heißt, der Kollaps tritt entlang einer linearen Kette von wenigen Teilchen auf, während der große Rest der Teilchen nicht betroffen ist. Dies macht es möglich, den kritischen Restitutionskoeffizienten ϵ_{ic} , unterhalb dessen der inelastische Kollaps auftreten kann, anhand eines eindimensionalen Modells abzuschätzen [47, 52]:

$$\epsilon_{ic} = \tan^2 \left(\frac{\pi}{4} \left(1 - \frac{1}{l_{opt}} \right) \right) . \quad (4.8)$$

Dabei ist

$$l_{opt} := \frac{\nu L}{2a} = \begin{cases} \sqrt{N\nu\pi/4} & (2D) \\ \sqrt[3]{N\nu^2\pi/6} & (3D) \end{cases} \quad (4.9)$$

die dimensionslose optische Tiefe² des Systems.

Für $l_{\text{opt}} \gg 1$ erhält man

$$\epsilon_{\text{ic}} \approx 1 - \frac{\pi}{l_{\text{opt}}} \quad (4.10)$$

oder

$$\lambda_{\text{ic}} = 1 - \epsilon_{\text{ic}}^2 \approx \frac{2\pi}{l_{\text{opt}}} . \quad (4.11)$$

Da nur wenige Teilchen vom inelastischen Kollaps betroffen sind, sind (von der Kollisionsfrequenz abgesehen) die Auswirkungen auf makroskopische Größen gering. Für die numerische Simulation ist er dennoch extrem problematisch, weil die Rechenzeit ja proportional zur Anzahl der verarbeiteten Kollisionen ist.

TC-Modell

Eine Lösung für das Problem des inelastischen Kollapses stellt das TC-Modell dar [53]. Diese Erweiterung des einfachen Modells der inelastischen harten Kugeln (siehe Kap. 4.1.1) führt eine effektive Kontaktdauer t_c ein. Ist nun die Zeitspanne zwischen aufeinander folgenden Kollisionen eines Teilchens kleiner als t_c , wird die zweite Kollision als elastisch betrachtet, das heißt für diese ist $\epsilon = 1$. Genauer gesagt: eine Kollision ist genau dann elastisch, wenn einer der beiden Kollisionspartner zu einem Zeitpunkt, der weniger als t_c zurückliegt, bereits mit einem anderen Teilchen kollidiert ist.

Der physikalische Hintergrund dieses Modells liegt darin, dass man die unphysikalische, infinitesimal kleine Kollisionsdauer des Harte-Kugel-Modells aus energetischer Sicht durch eine Kollisionsdauer t_c ersetzt. Finden nun mehrere Kollisionen innerhalb von t_c statt, entspricht dies gewissermaßen einer Mehrteilchenkollision, da ja die vorhergehende Kollision die aktuelle noch beeinflusst. Untersuchungen von Mehrteilchenkollisionen bei weichen Kugeln [54, 55] zeigen

²Der Name optische Tiefe hat seinen Ursprung darin, dass diese Größe der Länge (in Teilchendurchmessern) entspricht, die ein Lichtstrahl, der den Simulationsraum durchquert, *innerhalb* von Teilchen verläuft.

in der Tat, dass dabei weniger Energie dissipiert wird als bei einer entsprechenden Reihe von Zweiteilchenkollisionen. Dementsprechend wird auch beim TC-Modell die Dissipation bei schnell aufeinander folgenden Kollisionen herabgesetzt.

Man kann sogar so weit gehen, dass man die kinetische Energie, die aufgrund der t_c -Regel nicht dissipiert werden kann, als ein Äquivalent zur elastischen Energie bei einem Modell mit weichen Kugeln betrachtet. Ein Vergleich mit einem linear elastischen Modell [56] mit weichen Kugeln der Steifigkeit k zeigt, dass die Kräfte, Spannungen und pseudo-elastischen Energien, die beim TC-Modell auftreten, denjenigen von weichen Kugeln entsprechen. Und auch die Zeit t_c entspricht dabei der Kontaktdauer $t_c^{el} = \pi \sqrt{m/k}$ bei der Kollision weicher Kugeln. Man erhält mit dem TC-Modell also auch eine Art „statischen“ Grenzfall für das Harte-Kugel-Modell, wenngleich dieser jedoch durch schnell aufeinander folgende Kollisionen realisiert wird – und daher mit erheblichem Rechenaufwand verbunden ist [53].

Wählt man $t_c \ll t_E$ (wenn t_E die typische kollisionsfreie Zeit ist), was obiger Analogie folgend Kugeln mit sehr hoher Steifigkeit entspricht, so wird die t_c -Regel nur bei sehr wenigen Kollisionen angewandt, nämlich bei einem Anteil

$$c_e = 1 - \exp\left(-2\frac{t_c}{t_E}\right) \approx 2\frac{t_c}{t_E}. \quad (4.12)$$

Daher sind die Auswirkungen auf makroskopische Größen im Vergleich zum einfachen Modell inelastischer harter Kugeln vernachlässigbar [57] – aber der inelastische Kollaps wird dennoch verhindert, weil die daran beteiligten Teilchen elastisch werden.

Neben dem TC-Modell gibt es noch eine ganze Reihe anderer Modelle, die den inelastischen Kollaps ebenfalls unterbinden. Den meisten hiervon fehlt es allerdings an einer soliden physikalische Grundlage [53], weswegen wir uns für das TC-Modell mit $t_c \ll t_E$ entschieden haben.

4.2 Kinetische Gastheorie

Die kinetische Gastheorie leitet die makroskopischen Eigenschaften von Gasen mit Hilfe der klassischen Mechanik und der statistischen Physik aus den mikro-

skopischen Vorgängen her. *Ideale Gase* wurden von Maxwell [58, 59] und Boltzmann [60–62] beschrieben. Enskog und Chapman erweiterten die Gleichungen um den Impulstransfer und konnten so die Gültigkeit auf höhere Dichten ausdehnen [63, 64].

Wir wählen hier eine zur Chapman-Enskog-Erweiterung äquivalente Darstellung – den Liouville-Operator-Formalismus [29, 65–68]. Wir skizzieren lediglich die Herleitung der Gleichungen; für Details und die ausführliche Berechnung der Integrale sei auf die entsprechenden Literaturangaben und den Anhang verwiesen.

4.2.1 Der Pseudo-Liouville-Operator

Der Liouville-Operator \mathcal{L}^+ ist durch die Poisson-Klammer der Hamiltonfunktion $\mathcal{H} = \sum_j \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + \sum_{j < k} \mathcal{V}(\mathbf{r}_{jk})$ definiert:

$$\mathcal{L}^+ := \{i\mathcal{H}, \cdot\} \quad (4.13)$$

$$= -i \sum_j \mathbf{v}_j \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_j} - i \sum_{j < k} \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mathbf{r}_{jk}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_k} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right) \quad (4.14)$$

$$= \mathcal{L}_0^+ + \mathcal{L}_{\text{int}}^+ \quad (4.15)$$

Da ja $\frac{d}{dt}A = \{\mathcal{H}, A\}$ gilt, hat er die Funktion eines Zeitentwicklungsoperators und formal lässt sich auch

$$A(t) = \exp(i\mathcal{L}^+t)A(0) \quad (4.16)$$

schreiben.

Der erste Teil \mathcal{L}_0^+ des Liouville-Operators beschreibt die ungestörte Bewegung eines Teilchens

$$\mathcal{L}_0^+ := -i \sum_j \mathbf{v}_j \cdot \nabla_j, \quad (4.17)$$

der zweite Teil $\mathcal{L}_{\text{int}}^+$ beschreibt die Teilchen-Wechselwirkung.

Das Harte-Kugel-Gas

Da jedoch beim Harte-Kugel-Gas kein differenzierbares Wechselwirkungspotential \mathcal{V} vorliegt, nimmt man für den Operator $\mathcal{L}_{\text{int}}^+$:

$$\mathcal{L}_{\text{int}}^+ := -i \sum_{j < k} \mathcal{C}_{jk}^+ := -i \sum_{j < k} |\mathbf{v}_{jk} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{jk}| \Theta(-\mathbf{v}_{jk} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{jk}) \delta(r_{jk} - 2a) (b_{jk}^+ - 1) \quad (4.18)$$

mit den Geschwindigkeiten $\mathbf{v}_{jk} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k$, den Entfernungen $r_{jk} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|$ und den Richtungen $\hat{\mathbf{r}}_{jk} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)/r_{jk}$. Der Kollisions-Operator b_{jk}^+ wirkt dabei auf die Teilchen j und k und ergibt die entsprechenden Änderungen der betroffenen Größen bei der Kollision:

$$b_{jk}^+ A(\mathbf{v}_j, \mathbf{v}_k) = A(\mathbf{v}'_j, \mathbf{v}'_k) \quad (4.19)$$

Die heavisidesche Sprungfunktion sorgt dafür, dass nur sich aufeinander zu bewegende Teilchen betroffen sind; die Deltafunktion wählt nur diejenigen aus, die sich gerade berühren. Der Term $\mathbf{v}_{jk} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{jk}$ schließlich ist die Relativgeschwindigkeit der Teilchen; dies spiegelt die Tatsache wider, dass schnelle Teilchen häufiger kollidieren als langsame.

Da der Liouville-Operator mit diesem modifizierten $\mathcal{L}_{\text{int}}^+$ nicht mehr selbstadjungiert ist, spricht man auch von einem Pseudo-Liouville-Operator [65–68]. Zwischen den Stößen bewegen sich die Teilchen ungestört und werden durch \mathcal{L}_0^+ aus Gleichung (4.17) beschrieben. Insgesamt erhält man also

$$i\mathcal{L}^+ = \sum_j \mathbf{v}_j \cdot \nabla_j + \sum_{j < k} \mathcal{C}_{jk}^+ . \quad (4.20)$$

Mittelwerte und Zeitableitung

Für den Ensemble-Mittelwert einer Observablen A gilt:

$$\langle A \rangle(t) = \int d\Gamma \varrho(0) A(t) = \int d\Gamma \varrho(t) A(0) \quad (4.21)$$

Dabei ist $d\Gamma$ ein Phasenraumelement und ϱ die Phasenraumdichte mit der Normierung $\int d\Gamma \varrho = 1$.

Die Zeitableitung lässt sich demnach auch folgendermaßen schreiben:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \int d\Gamma \varrho(0) \frac{d}{dt} A(t) \quad (4.22)$$

$$= \int d\Gamma \varrho(0) \frac{d}{dt} \exp(i\mathcal{L}^+ t) A(0) \quad (4.23)$$

$$= \int d\Gamma \varrho(0) i\mathcal{L}^+ A(t) \quad (4.24)$$

$$= \langle i\mathcal{L}^+ A \rangle(t) \quad (4.25)$$

4.2.2 Homogener Zustand

Im Allgemeinen lässt sich die Phasenraumdichte ϱ des Harte-Kugel-Gases nur näherungsweise angeben. Unter der Annahme von Homogenität, Isotropie, molekularem Chaos und maxwellscher Geschwindigkeitsverteilung gilt jedoch für ein Harte-Kugel-Gas mit N Teilchen der Masse m und den Geschwindigkeiten v_j im \mathcal{D} -dimensionalen Volumen V bei einer granularen Temperatur $T = 2 \langle E \rangle / \mathcal{D}$:

$$\varrho(\Gamma, t) = \frac{W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\int \prod_j d\mathbf{r}_j W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} \left(\frac{m}{2\pi T(t)} \right)^{\mathcal{D}N/2} \exp \left(- \sum_j \frac{m\mathbf{v}_j^2}{2T(t)} \right) \quad (4.26)$$

Dabei ist

$$W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \exp \left(- \frac{1}{T} \sum_{j < k} \mathcal{V}_{\text{HC}}(r_{jk}) \right) \quad (4.27)$$

$$= \prod_{j < k} \Theta(r_{jk} - 2a) \quad (4.28)$$

$$= \begin{cases} 1 & \text{bei Konfigurationen ohne Überlappung} \\ 0 & \text{bei Konfigurationen mit Überlappung.} \end{cases} \quad (4.29)$$

Mit diesen Annahmen lassen sich nun zahlreiche Observablen analytisch berechnen:

Kollisionsfrequenz

So gilt beispielsweise für die Kollisionsfrequenz f_E pro Teilchen, wenn \mathfrak{C} die Gesamtzahl der Kollisionen ist [69]:

$$f_E = \frac{2}{N} \frac{d\mathfrak{C}}{dt} \quad (4.30)$$

$$= \frac{2}{N} \langle i\mathcal{L}^+ \mathfrak{C} \rangle \quad (4.31)$$

$$= \frac{2}{N} \langle i\mathcal{L}_{\text{int}}^+ \mathfrak{C} \rangle \quad (4.32)$$

$$= \dots \text{ (siehe Anhang A.1)}$$

$$= \frac{\mathcal{D} 2^{\mathcal{D}-1}}{\sqrt{\pi a}} \nu g_{2a}(\nu) \sqrt{\frac{T}{m}} \quad (4.33)$$

$$= \begin{cases} \frac{4}{\sqrt{\pi a}} \nu g_{2a}(\nu) \sqrt{\frac{T}{m}} & (2D) \\ \frac{12}{\sqrt{\pi a}} \nu g_{2a}(\nu) \sqrt{\frac{T}{m}} & (3D) \end{cases} \quad (4.34)$$

Dabei ist g_{2a} die radiale Paarverteilungsfunktion beim Abstand $2a$:

$$g_{2a} := g(2a) := \frac{V}{\partial V_{2a} N^2} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(r_{ij} - 2a) \right\rangle \quad (4.35)$$

mit

$$\partial V_{2a} := \frac{\pi^{\mathcal{D}/2} \mathcal{D}}{(\mathcal{D}/2)!} (2a)^{\mathcal{D}-1} = \begin{cases} 2\pi 2a & (2D) \\ 4\pi (2a)^2 & (3D) \end{cases} \quad (4.36)$$

Freie Weglänge

Die mittlere Teilchengeschwindigkeit beträgt

$$\bar{v} := \langle v \rangle = \sqrt{\frac{2^{\mathcal{D}}}{\pi}} \sqrt{\frac{T}{m}}. \quad (4.37)$$

Daraus lässt sich nun auch die mittlere freie Weglänge l_E berechnen:

$$l_E := \frac{\bar{v}}{f_E} = \frac{a}{2^{(\mathcal{D}-2)/2} \mathcal{D} \nu g_{2a}(\nu)} \quad (4.38)$$

Für unendlich verdünnte Systeme $\nu \rightarrow 0$ und $\mathcal{D} = 3$ erhält man die mittlere freie Weglänge eines idealen Gases in 3D:

$$l_E = \frac{a}{3\sqrt{2}\nu} \quad (4.39)$$

Spannungstensor

Ebenso lässt sich der Spannungstensor $\underline{\underline{\sigma}}$ berechnen [69–71]:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\frac{d}{dt} \left\langle \frac{1}{V} \sum_j \mathbf{p}_j \otimes \mathbf{r}_j \right\rangle \quad (4.40)$$

$$= -\frac{1}{V} \left\langle (i\mathcal{L}_0^+ + i\mathcal{L}_{\text{int}}^+) \sum_j \mathbf{p}_j \otimes \mathbf{r}_j \right\rangle \quad (4.41)$$

$$= \dots \text{ (siehe Anhang A.2)}$$

$$= -\frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} (1 + (1 + \epsilon)2^{\mathcal{D}-2}\nu g_{2a}(\nu)) \quad (4.42)$$

$$= -\frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} - \frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} (1 + \epsilon) \begin{cases} \nu g_{2a}(\nu) & (2\text{D}) \\ 2\nu g_{2a}(\nu) & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.43)$$

Wie man aufgrund der Isotropie erwartet, ist der Spannungstensor $\underline{\underline{\sigma}} = -P\underline{\underline{1}}$ also diagonal und richtungsunabhängig. Er besteht aus zwei Anteilen, dem kinetischen Anteil NT/V und dem Kollisionsanteil $(1 + \epsilon)2^{\mathcal{D}-2}\nu g_{2a}(\nu)NT/V$.

Zustandsgleichung

Mit dem Druck $P = -1/\mathcal{D} \text{ spur}(\underline{\underline{\sigma}})$ erhält man die dimensionslose Zustandsgleichung des inelastischen Harte-Kugel-Gases:

$$\frac{PV}{NT} = 1 + (1 + \epsilon) \begin{cases} \nu g_{2a}(\nu) & (2\text{D}) \\ 2\nu g_{2a}(\nu) & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.44)$$

Im elastischen Fall $\epsilon = 1$ gilt:

$$\frac{PV}{NT} - 1 = \begin{cases} 2\nu g_{2a}(\nu) & (2\text{D}) \\ 4\nu g_{2a}(\nu) & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.45)$$

Für unendlich verdünnte Systeme $\nu \rightarrow 0$ ergibt sich die ideale Gasgleichung

$$PV = NT \quad (4.46)$$

Paarverteilungsfunktion

Mit der Virialentwicklung $PV/NT - 1 = \sum_i c_i \nu^i$ kann man im elastischen Fall $\epsilon = 1$ nun außerdem Näherungslösungen für die Virialkoeffizienten c_i berechnen und damit die Paarverteilungsfunktion g_{2a} bestimmen. Beispielsweise erhält man in 3D [72, 73]:

$$\frac{PV}{NT} = 1 + 4\nu + 10\nu^2 + 18.36\nu^3 + 28.2\nu^4 + 39.5\nu^5 + \dots \quad (4.47)$$

$$\approx 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (n^2 + 3n)\nu^n \quad (4.48)$$

$$= 1 + 4\nu \frac{1 - \nu/2}{(1 - \nu)^3} \quad (4.49)$$

Analog dazu kann man auch in 2D vorgehen [74, 75] und erhält

$$\frac{PV}{NT} \approx 1 + 2\nu \left(\frac{1 - 7\nu/16}{(1 - \nu)^2} - \frac{1}{64} \frac{\nu^3}{(1 - \nu)^4} \right) \quad (4.50)$$

$$\approx 1 + 2\nu \frac{1 - 7\nu/16}{(1 - \nu)^2} \quad (4.51)$$

Insgesamt bekommt man damit:

$$g_{2a}(\nu) = \begin{cases} \frac{1-7\nu/16}{(1-\nu)^2} & (2D) \\ \frac{1-\nu/2}{(1-\nu)^3} & (3D) \end{cases} \quad (4.52)$$

Für $\nu \rightarrow 0$ strebt $g_{2a}(\nu) \rightarrow 1$. Bei sehr hohen Dichten setzt irgendwann Kristallisation ein, wobei die Virialentwicklung zusammenbricht und die Isotropie von $g(\mathbf{r})$ verloren geht.

Damit erhält man nun für die Zustandsgleichung des Harte-Kugel-Gases im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 1$:

$$\frac{PV}{NT} - 1 = \begin{cases} 2\nu \frac{1-7\nu/16}{(1-\nu)^2} & (2D) \\ 4\nu \frac{1-\nu/2}{(1-\nu)^3} & (3D) \end{cases} \quad (4.53)$$

Abkühlung

Auch die zeitliche Entwicklung der Größen lässt sich auf diese Weise berechnen. Da ja bei jeder Kollision Energie dissipiert wird, aber keine Energie zugeführt wird, kühlt das System ab. Für die granulare Temperatur $T := 2\langle E \rangle / \mathcal{D}$ gilt [29]:

$$\frac{d}{dt}T(t) = \langle i\mathcal{L}_{\text{int}}^+ T(t) \rangle \quad (4.54)$$

$$= \dots \text{ (siehe Anhang A.3)}$$

$$= -\frac{\lambda f_E(0)}{\mathcal{D}\sqrt{T(0)}} T^{3/2}, \quad (4.55)$$

Damit erhält man:

$$T(t) = \frac{T(0)}{\left(1 + \frac{\lambda}{2\mathcal{D}} \frac{t}{t_E}\right)^2} \quad (4.56)$$

wobei $t_E := f_E^{-1}(0)$ die anfängliche Enskog-Kollisionszeit ist.

Führt man eine skalierte, dimensionslose Zeit τ gemäß

$$\tau := \frac{t}{t_{\text{hom}}} := \frac{\lambda}{2\mathcal{D}} \frac{t}{t_E} \quad (4.57)$$

ein, so erhält die Gleichung die einfache Gestalt:

$$T(\tau) = \frac{T(0)}{(1 + \tau)^2} \quad (4.58)$$

Ebenso gilt auch für die mittlere kinetische Energie E

$$E(\tau) = \frac{E(0)}{(1 + \tau)^2} \quad (4.59)$$

und den Druck

$$P(\tau) = \frac{P(0)}{(1 + \tau)^2}. \quad (4.60)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (4.34), (4.37) und (4.58) erhält man außerdem auch die Abnahme der Kollisionsfrequenz

$$f_E(\tau) = \frac{f_E(0)}{1 + \tau} \quad (4.61)$$

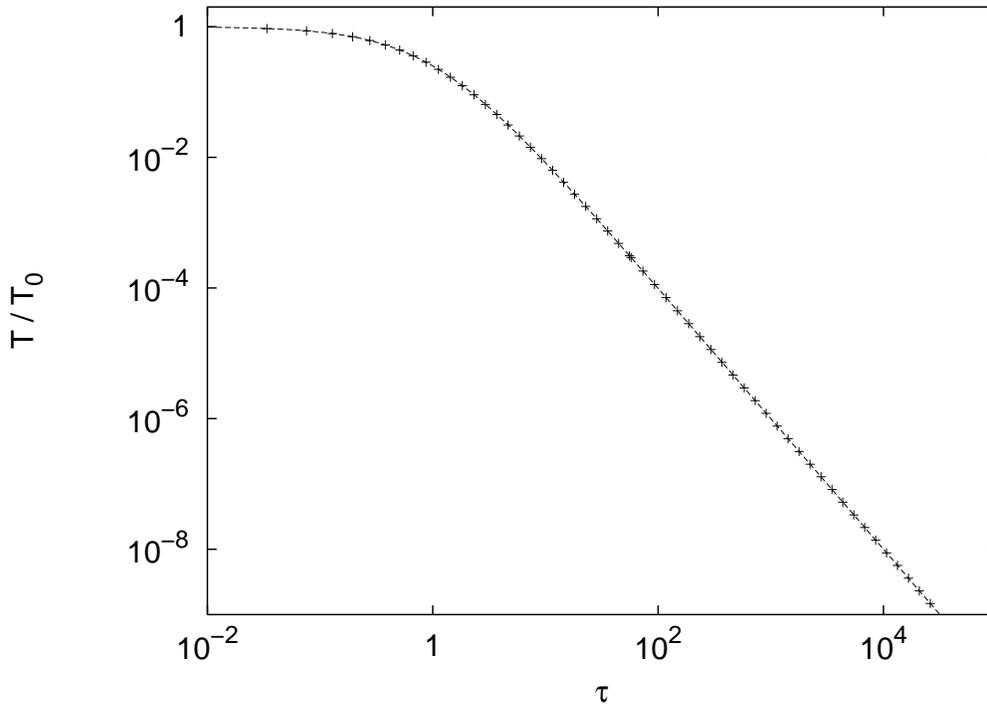


Abbildung 4.1: Abkühlung eines dreidimensionalen granularen Gases (Dichte $\nu = 0.25$) im homogenen Zustand mit $N = 512000$ Teilchen und einem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.998$. Die Punkte geben die Simulationsergebnisse wieder; die Kurve ist Gleichung (4.58).

und der mittleren Geschwindigkeit

$$\bar{v}(\tau) = \frac{\bar{v}(0)}{1 + \tau}. \quad (4.62)$$

Die mittlere Geschwindigkeit sowie die Kollisionsfrequenz nehmen also für $\tau \gg 1$ mit τ^{-1} ab, die Temperatur und der Druck mit τ^{-2} . Die mittlere freie Weglänge bleibt konstant.

Die Zeitskalierung ist dabei proportional zur Dissipation λ . Starke Dissipation führt zu schneller Abkühlung, geringe Dissipation zu langsamer Abkühlung. Die gute Übereinstimmung dieser theoretischen Voraussagen mit den Simulationsergebnissen wird durch Abb. 4.1 belegt.

All diese Überlegungen verlieren jedoch ihre Gültigkeit, wenn die Annahmen für die Herleitung nicht mehr erfüllt sind und beispielsweise Inhomogenitäten ins Spiel kommen – siehe hierzu auch Kapitel 4.4.

4.3 Zustandsgleichung des Harte-Kugel-Gases

In Abb. 4.2 ist die Zustandsgleichung des elastischen Harte-Kugel-Gases zu sehen. Dabei ist der reduzierte Druck

$$\mathfrak{P} := \frac{PV}{NT} - 1 \quad (4.63)$$

über dem Volumenanteil ν aufgetragen. Deutlich erkennt man, dass die mit steigendem Volumenanteil monotone Druckzunahme von einem Druckabfall bei hohen Dichten unterbrochen wird. Dieser rührt von einem Phasenübergang von fluider Phase zu fester Phase her. (Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ und sehr langsamer Zustandsänderung erwartet man keinen Druckabfall, sondern ein Plateau.) Bei $\nu < \nu_f$ liegt das System in gasförmiger bzw. flüssiger Phase³ vor. Dann setzt bei ν_f in einzelnen Bereichen Kristallisation ein und fluide und feste Phase koexistieren miteinander, bis schließlich bei $\nu > \nu_s$ das ganze System eingefroren ist [76–79].

Die Zahlenwerte⁴ für ν_f und ν_s betragen dabei [80]

$$\nu_f = \begin{cases} 0.69 & (2D) \\ 0.49 & (3D) . \end{cases} \quad (4.64)$$

³Mangels Wechselwirkung zwischen den Teilchen gibt es keinen klaren Übergang von gasförmig nach flüssig. Als flüssigen Zustand bezeichnen wir diejenigen Dichten unterhalb der Kristallisationsdichte, bei denen die freie Weglänge klein gegenüber der Teilchengröße ist; ansonsten sprechen wir vom gasförmigen Zustand.

⁴Für 3D finden sich jedoch auch davon abweichende Zahlenwerte in der Literatur. Unsere Simulation aus Abb. 4.2 liefert mittels einer Maxwell-Konstruktion die Werte $\nu_f = 0.55$ und $\nu_s = 0.58$. Die Abweichungen können aber auch dadurch zustande kommen, dass unser System zu klein ist oder das Teilchenwachstum immer noch zu schnell erfolgt, vgl. auch Abb. 4.3.

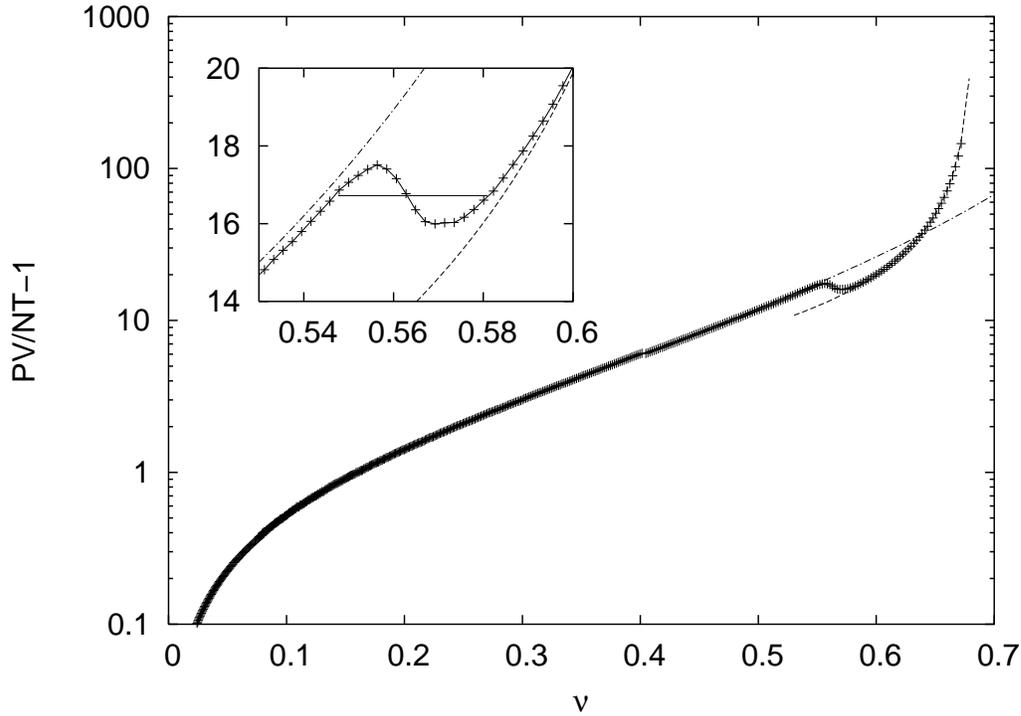


Abbildung 4.2: Zustandsgleichung eines dreidimensionalen Harte-Kugel-Gases mit $N = 8000$ Teilchen.

Die (sehr dicht liegenden) Punkte sind Simulationsergebnisse; die Kurven sind durch die Gleichungen (4.66) und (4.67) gegeben. Deutlich zu erkennen ist der Druckabfall beim Phasenübergang sowie die Druckdivergenz in der Nähe der maximalen Dichte.

Das kleine Bild zeigt eine Maxwell-Konstruktion (gleiche Flächen zwischen Datenkurve und Ausgleichsgerade) beim Phasenübergang zwischen $\nu = 0.55$ und $\nu = 0.58$.

Gewonnen wurden die Daten aus einer Simulation mit sehr langsam wachsenden Kugeln ($u_a/\bar{v} < 10^{-5}$).

Die Fitparameter in Gleichung (4.67) sind hierbei $\nu_{max} = 0.683$ und $c'_0 = 1.65$.

und

$$\nu_s = \begin{cases} 0.72 & (2\text{D}) \\ 0.55 & (3\text{D}) . \end{cases} \quad (4.65)$$

Unterhalb von ν_f wird der reduzierte Druck \mathfrak{P} sehr gut durch die Zustandsgleichung (4.53) beschrieben:

$$\mathfrak{P} = \begin{cases} 2\nu \frac{1-7\nu/16}{(1-\nu)^2} & (2\text{D}) \\ 4\nu \frac{1-\nu/2}{(1-\nu)^3} & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.66)$$

Für sehr hohe Dichten $\nu > \nu_s$ kann man Näherungslösungen gewinnen, indem man eine regelmäßige Teilchenanordnung und das den Teilchen dabei zur Verfügung stehende freie Volumen betrachtet [81–84]. Man erhält in erster Näherung beispielsweise

$$\mathfrak{P} = \frac{c'_0}{\nu_{\max} - \nu} - 1 \quad (4.67)$$

wobei der Parameter c'_0 empirisch zu bestimmen ist.

Die dichteste Packung, die sich mit harten Kugeln überhaupt erzielen lässt, ist ein regelmäßiges Dreiecks- bzw. FCC-Gitter⁵ mit dem Volumenanteil

$$\nu_{\max} = \begin{cases} 0.91 & (2\text{D}) \\ 0.74 & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.68)$$

Für ein System ungeordneter Kugeln, erhält man dagegen lediglich die dichteste

⁵Dass es sich beim FCC- bzw. HCP-Gitter um die dichteste Kugelpackung handelt, ist unter Physikern zwar schon seit 400 Jahren bekannt, aber mathematisch nach wie vor nicht einwandfrei bewiesen. Thomas Hales legte zwar 1998 einen entsprechenden Beweis vor. Nach fünfjährigem Studium sind die Gutachter nun zu dem Schluss gekommen, dass dieser Beweis höchstwahrscheinlich korrekt ist, sie sich aber nicht in der Lage sehen, die Richtigkeit mit absoluter Gewissheit festzustellen. Damit gilt das Problem nach wie vor als offen [85].

Zufallspackung⁶

$$\nu_{\text{rcp}} = \begin{cases} 0.82 & \text{(2D)} \\ 0.64 & \text{(3D)} \end{cases} \quad (4.69)$$

Im Experiment erhält man in der festen Phase meist kleine Kristalle mit zahlreichen Defekten und Korngrenzen. Die maximale Dichte nimmt daher Werte an, die zwischen diesen beiden Extremen ν_{max} und ν_{rcp} liegen. Je nachdem wie das System präpariert wurde, sollte man daher die maximale Dichte ν_{max} in Gleichung (4.67) eventuell auch als freien Fitparameter betrachten.

4.3.1 Ratenabhängigkeit des Drucks

In Abb. 4.3 ist die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Wachstumsrate u_a aufgetragen. Die Bezugsgröße $v_{0.4}$ ist dabei die mittlere Geschwindigkeit bei der Dichte $\nu = 0.4$. Weil die Energie bei den Stößen nicht erhalten bleibt – vgl. hierzu Gleichung (2.17) –, gilt $v_{0.6} > v_{0.4}$.

Man erkennt, dass bei zu schnellem Wachstum der tatsächliche Druck höher liegt als der theoretische Wert, da das System nicht genügend Zeit hat, den Zustand mit der geringsten freien Energie zu erreichen. Entsprechendes gilt bei schrumpfenden Teilchen mit umgekehrtem Vorzeichen.

4.4 Clusterbildungs-Instabilität

In Kapitel 4.2 haben wir einige Aussagen über den homogenen Zustand von granularen Gasen gewonnen. Nun zeigt sich aber, dass der homogene Zustand in der Regel instabil ist und sich stattdessen dichte Cluster von Teilchen bilden (siehe Abb. 4.4).

⁶Der Begriff dichteste Zufallspackung ist mathematisch nicht sauber definiert, aber trotzdem gebräuchlich. Die tatsächlichen Werte, die man für ν_{rcp} erhält, hängen damit auch vom genauen Verfahren ab, mit dem sie gewonnen wurden. Den Versuch einer saubereren Definition für ν_{rcp} findet man in [86].

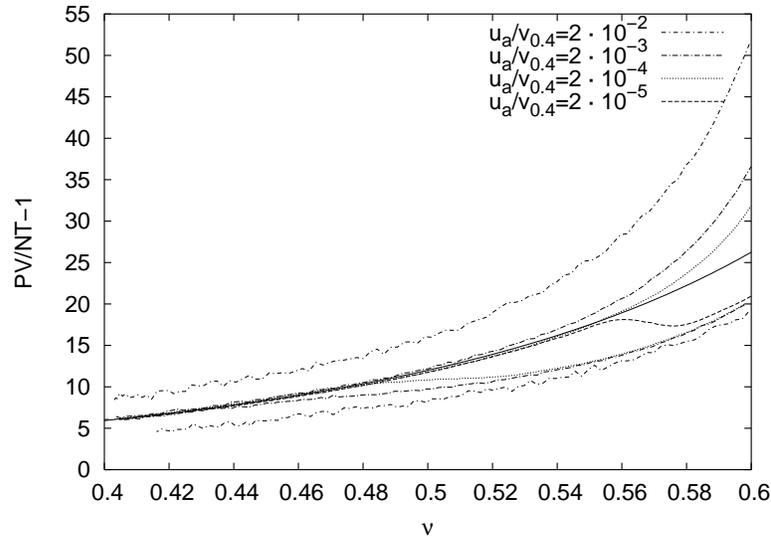


Abbildung 4.3: Reduzierter Druck in Abhängigkeit von der Wachstums- bzw. Schrumpfrate $u_a/v_{0.4}$. Eingezeichnet sind für jede Rate zwei Zweige: zum einen für wachsende Teilchen von $\nu = 0.4$ bis $\nu = 0.6$, zum anderen für schrumpfende Teilchen wieder zurück bis $\nu = 0.4$. Wachsende Teilchen überschreiten den theoretischen Wert (durchgezogene Linie), schrumpfende Teilchen unterschreiten ihn.

Dies lässt sich folgendermaßen verstehen: Wenn sich in einem Gebiet durch zufällige Dichte-Fluktuationen mehr Teilchen aufhalten als in einem anderen, steigt infolgedessen dort auch die Kollisionsfrequenz an. Wegen der Inelastizität der Kollisionen wird nun in diesem Gebiet mehr Energie dissipiert und die granulare Temperatur sinkt lokal ab. Damit nimmt dort auch der Druck ab. Der sich daraus ergebende Druckgradient zwischen verschiedenen Gebieten sorgt nun dafür, dass noch mehr Teilchen in das Gebiet mit höherer Dichte strömen, was zu weiterer Abkühlung und weiterem Druckabfall führt, bis sich schließlich die Teilchencluster bilden.

Dies alles setzt lediglich voraus, dass die Clusterbildung schneller abläuft als die hydrodynamischen Prozesse, die die Teilchenanhäufung zerstreuen. Eine lineare Stabilitätsanalyse der hydrodynamischen Bewegungsgleichungen zeigt, dass die Fluktuationen umso langsamer zerfallen, je größer ihre Längenskala ist [27, 87].

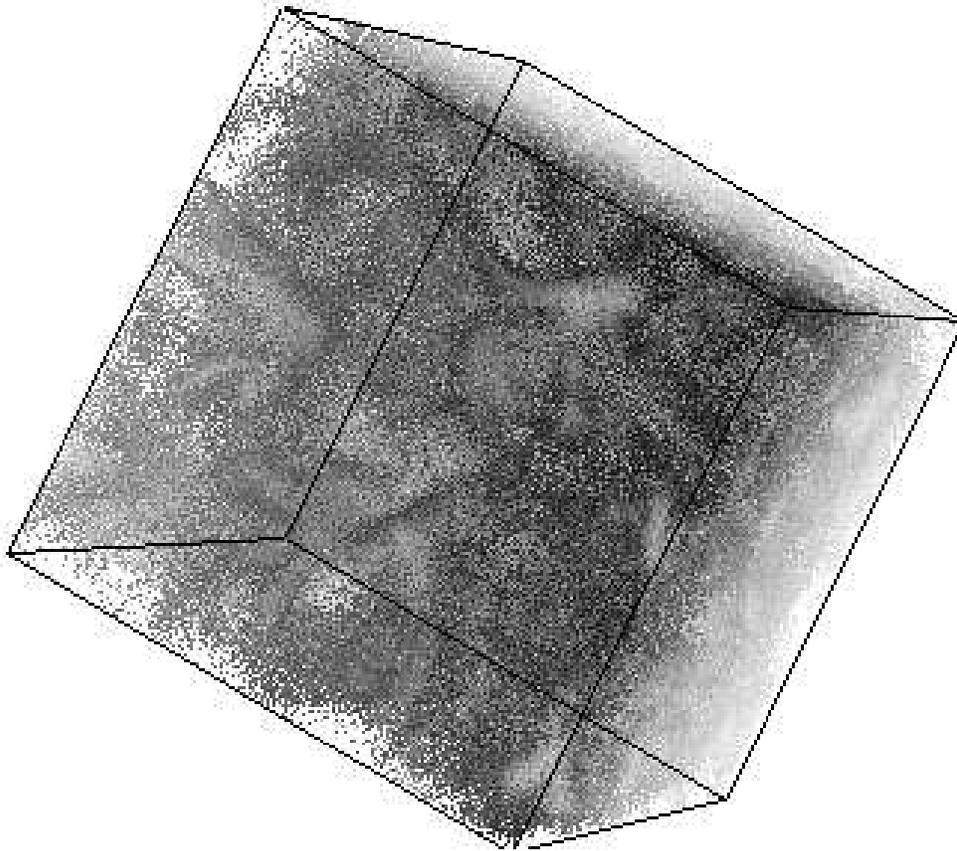


Abbildung 4.4: Momentaufnahme eines dreidimensionalen System mit ca. $5 \cdot 10^5$ Teilchen, einem Volumenanteil von $\nu = 0.25$ und einem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.3$ nach längerer Simulationsdauer. Die Helligkeit der Teilchen kennzeichnet die Anzahl der Teilchenkollisionen. Dunkle Teilchen haben bis zum Zeitpunkt der Momentaufnahme wenige Kollisionen erlitten, helle Teilchen viele. Man erkennt deutlich die erhöhte Kollisionsfrequenz in den Gebieten mit vielen Teilchen.

Das bedeutet, der homogene Zustand ist gegenüber Störungsmoden oberhalb einer gewissen Wellenlänge instabil. Wenn das System groß genug ist, um eine solche Mode zuzulassen, kommt es also zur Clusterbildung.⁷

Das Voranschreiten des Clusterwachstums selbst lässt sich auf diese Weise nicht untersuchen, da die linearisierten Gleichungen mit zunehmenden Abweichungen vom homogenen Zustand ihre Gültigkeit verlieren. Aber die kritischen Parameter, bei denen der homogene Zustand instabil wird, lassen sich abschätzen. Für eine ausführliche Stabilitätsanalyse sei auf Anhang B verwiesen.

Es zeigt sich, dass Clusterbildung immer genau dann auftritt, wenn die Systemgröße L , die Dichte ν und die Dissipation λ ausreichend groß sind [87, 90]. Wir können also eine kritische Dissipation λ_{cl} wieder mit Hilfe der optischen Tiefe l_{opt} angeben und erhalten:

$$\lambda_{\text{cl}} = 1 - \epsilon_{\text{cl}}^2 \quad (4.70)$$

$$\approx \dots \text{ (siehe Anhang B)}$$

$$= \frac{(\mathcal{D} + 2)^2}{\mathcal{D}(\mathcal{D} - 1)2^{2\mathcal{D}-1}} \frac{\pi^3}{l_{\text{opt}}^2} \quad (4.71)$$

$$= \begin{cases} \frac{\pi^3}{l_{\text{opt}}^2} & (2\text{D}) \\ \frac{25\pi^3}{192l_{\text{opt}}^2} & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.72)$$

Clusterbildung tritt also nur auf, wenn $\lambda > \lambda_{\text{cl}}$ ist. Oder anders ausgedrückt: Für geringe optische Tiefen ist auch bei starker Dissipation keine Clusterbildung mehr möglich.

Darüber hinaus kann jedoch auch noch eine Schermode instabil werden. Diese Instabilität tritt schon bei

$$\lambda_{\text{sh}} \approx \frac{2\mu_0}{\eta_0} \left(\frac{2\pi}{\nu_h L} \right)^2, \quad (4.73)$$

⁷Es ist denkbar, dass derartige Mechanismen beispielsweise auch bei der Planeten- oder Sternentstehung aus interstellaren Staubwolken und bei der Bildung planetarer Ringe eine Rolle spielen [27, 88, 89].

also

$$\lambda_{\text{sh}} \approx \frac{\mathcal{D} + 2}{\mathcal{D}^2} \frac{\pi^3}{2^{2\mathcal{D}-2} l_{\text{opt}}^2} \quad (4.74)$$

$$= \begin{cases} \frac{\pi^3}{4l_{\text{opt}}^2} & (2\text{D}) \\ \frac{5\pi^3}{144l_{\text{opt}}^2} & (3\text{D}) \end{cases} \quad (4.75)$$

auf. Sie führt aber lediglich zu einer Scherströmung und nicht zu Dichte- und Temperaturschwankungen.

Insgesamt erhält man also für sehr schwache Dissipation $\lambda < \lambda_{\text{sh}}$ einen stabilen homogenen Zustand. Im schmalen Bereich $\lambda_{\text{sh}} < \lambda < \lambda_{\text{cl}}$ bildet sich eine Scherströmung, aber Dichte und Temperatur bleiben homogen.⁸ Für $\lambda > \lambda_{\text{cl}}$ schließlich kommt es zum Clusterwachstum.

Im numerischen Experiment zeigt sich, dass die Übergänge zwischen homogenem Regime und Cluster-Regime fließend sind. Jedoch liefert Gleichung (4.72) zumindest die richtige Größenordnung. So ergab beispielsweise eine Reihe von 3D-Simulationen mit $L/2a = 10^2$, $\nu = 0.25$ und demzufolge $l_{\text{opt}} = 25$ und $\lambda_{\text{cl}} \approx 6 \cdot 10^{-3}$ für $\lambda \approx 4 \cdot 10^{-3} < \lambda_{\text{cl}}$ keine Hinweise auf Clusterbildung, für $\lambda \approx 4 \cdot 10^{-2} > \lambda_{\text{cl}}$ dagegen schon. Vergleiche hierzu auch die zahlreichen Schaubilder in Kapitel 5.

4.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir einleitend zunächst einen Überblick über die komplexe Phänomenologie granularer Medien gegeben. In Abhängigkeit von der Dichte ähnelt deren Verhalten den thermodynamischen Aggregatzuständen gasförmig, flüssig und fest, von denen uns in dieser Arbeit in erster Linie der gasförmige interessieren soll, also derjenige Zustand, dessen Dynamik durch Teilchenkollisionen bestimmt wird.

⁸Da der Bereich der Scherströmung bei hoher optischer Tiefe nur einen sehr schmalen Bereich von Restitutionskoeffizienten umfasst und die meisten Größen dabei ohnehin homogen bleiben, behandeln wir ihn im Folgenden einfach als Teil des homogenen Regimes. Für eine weiter gehende Untersuchung siehe beispielsweise [27, 47].

Als granulares Gas bezeichnen wir solch ein System, wenn die Dichte deutlich unterhalb des Phasenübergangs zum festen Zustand liegt, aber sich andererseits auch signifikant vom idealen Gas unterscheidet, also nicht zu gering wird. Wesentlich ist außerdem der dissipative Charakter der Dynamik.

Wir haben festgestellt, dass eine Reduktion des Modells auf die wesentlichen Kernaspekte sinnvoll ist, um allgemeine Aussagen zu gewinnen. Daher haben wir als Modellsystem ein einfaches, monodisperses Harte-Kugel-Gas gewählt. Die wesentlichen Systemparameter sind dabei die Dichte ν und der Restitutionskoeffizient ϵ . Um ein Artefakt dieser Idealisierung – den inelastischen Kollaps – zu umgehen, müssen wir eine geringfügige Modifikation der Dynamik vornehmen, die für effektive Mehrteilchenkollisionen die Dissipation verringert. Dieses so genannte TC-Modell verändert dabei das makroskopische Verhalten nur unwesentlich.

Analog zum Liouville-Operator der klassischen kinetischen Gastheorie können wir einen (Pseudo-)Liouville-Operator für das Harte-Kugel-Gas einführen und mit diesem zu einer umfassenden Beschreibung des homogenen Zustands granularer Gase gelangen. Die wichtigsten Ergebnisse sind die Zustandsgleichung $\mathfrak{P} \sim (1 + \epsilon)\nu g_{2a}(\nu)$ und die Abkühlung gemäß $T(\tau) \sim P(\tau) \sim (1 + \tau)^{-2}$.

Der homogene Zustand ist bei einem granularen Gas jedoch nur für $\epsilon \approx 1$ stabil. Ansonsten setzt Clusterbildung ein, komplexe Strukturen bilden sich und die Dynamik weicht von der des homogenen Zustands ab. Diesem Verhalten soll im nächsten Kapitel ausführlich nachgegangen werden.

5 Clusterwachstum

Wie wir im letzten Kapitel gesehen haben, lässt sich zwar die Bildung von Teilchenclustern in einem granularen Gas mit theoretischen Konzepten verstehen. Zur Beschreibung des Clusterwachstums sind diese allerdings nicht ausreichend. Um weiter gehende Ergebnisse zu gewinnen, sind daher Experimente nötig und da es sich bei unserem System ja um ein stark idealisiertes Modell handelt, sind numerische Experimente die erste Wahl [5].

Bisherige Untersuchungen [91–97] wurden meist in zwei Dimensionen durchgeführt. Tatsächlich zeigen dreidimensionale granulare Gase gegenüber zweidimensionalen jedoch charakteristische Unterschiede, die im Folgenden besonders herausgestellt werden sollen.

Einen ersten Eindruck vom Ablauf des Clusterwachstum vermitteln am besten einige Bilder, siehe dazu Abb. 5.1.

Man erkennt, wie sich aus einem zunächst homogenen System aufgrund des in Kapitel 4.4 geschilderten Mechanismus aus zufälligen Fluktuationen Cluster entwickeln, die immer weiter wachsen, bis sie schließlich Systemgröße erreicht haben. Diese Strukturen und deren Entwicklung sollen in diesem Kapitel detailliert untersucht werden.

Der Cluster-Entstehung liegt ein Zusammenwirken von Temperatur- und Dichtefluktuationen zu Grunde. Daher beschäftigen wir uns zunächst in Kap. 5.1 mit der Temperatur und dann in Kap. 5.2 mit der Dichte und damit zusammenhängenden Größen. Anschließend geben wir in Kap. 5.3 noch einen Einblick in die Dynamik der Clusterpopulationen und fassen die Ergebnisse in Kap. 5.4 zusammen.

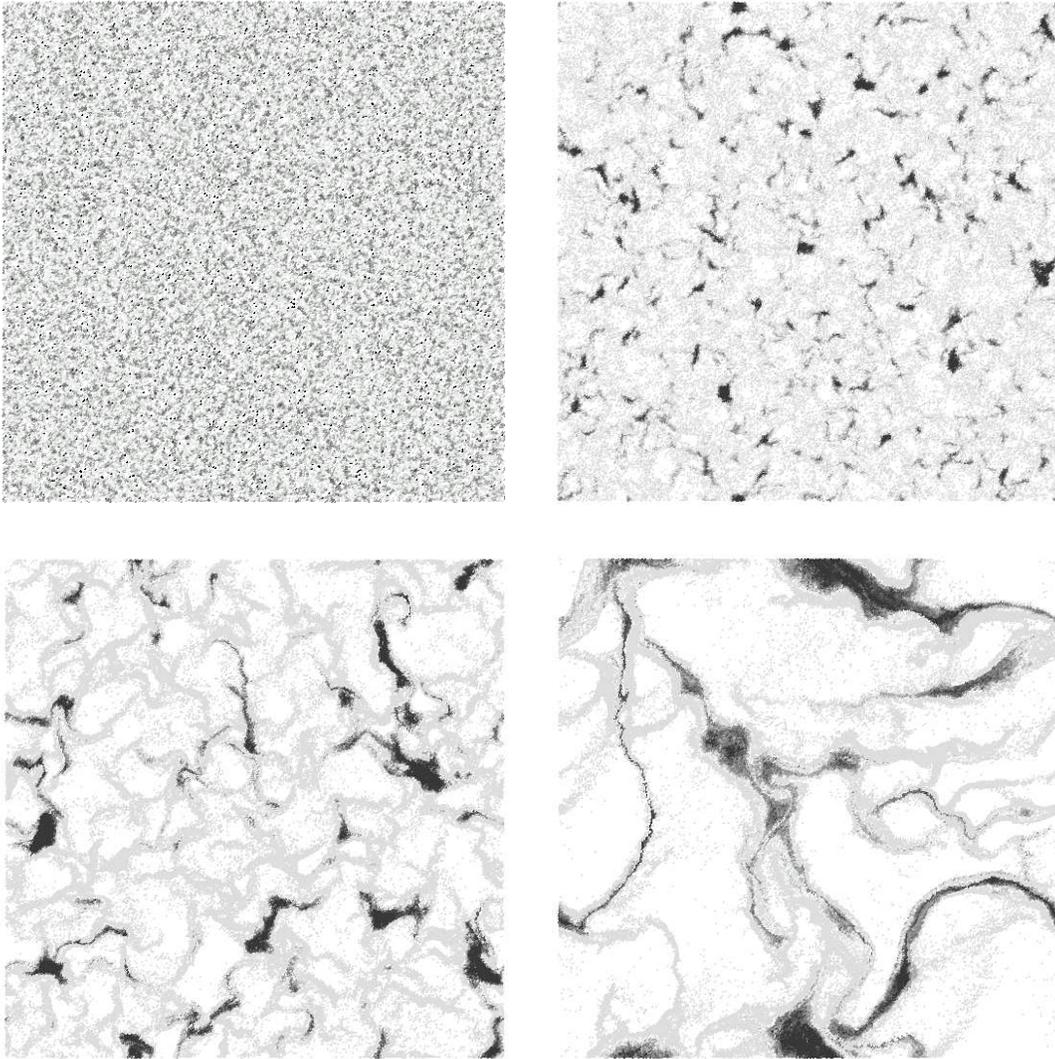


Abbildung 5.1: Schnappschüsse vom Clusterwachstum in einem zweidimensionalen granularen Gas ($\epsilon = 0.5$) mit $N = 10^5$ Teilchen zu den Zeiten $\tau = 1$ (links oben), $\tau = 40$ (rechts oben), $\tau = 400$ (links unten) und $\tau = 10000$ (rechts unten).

Helle Bildpunkte entsprechen Teilchen, die seit Beginn der Simulation wenige Kollisionen erlitten haben, dunkle Punkte entsprechen Teilchen mit vielen Kollisionen und weiße Bereiche entsprechen Gebieten ohne Teilchen.

5.1 Abkühlung

Eine theoretische Beschreibung des homogenen Zustands von granularen Gasen (siehe Kap. 4.2.2) sagt eine Abkühlung voraus, die der universellen Kurve $T(\tau) \sim (1 + \tau)^{-2}$ folgt. Die Simulationsparameter haben dabei lediglich Einfluss auf die Zeitskala τ . Nun ist ja der homogene Zustand nur für $\epsilon > \epsilon_{\text{cl}}$ stabil. Aber auch für kleinere Restitutionskoeffizienten ϵ erwarten wir ein ähnliches Verhalten, solange die Inhomogenitäten noch klein sind.

Für den weiteren Verlauf müssen wir auf Computersimulationen und deren Interpretation zurückgreifen. Zunächst einmal sollen die verschiedenen Simulationsergebnisse in den Kapiteln 5.1.1 bis 5.1.4 zusammengefasst und anschließend in Kapitel 5.1.5 diskutiert werden.

5.1.1 Kinetische Energie

Die Abnahme der Temperatur bzw. der mittleren kinetischen Energie E für verschiedene Restitutionskoeffizienten ϵ ist in Abb. 5.2 aufgetragen. Man erkennt deutlich, dass alle Kurven zunächst dem vorhergesagten homogenen Verlauf folgen. Für kleine Restitutionskoeffizienten ϵ (und damit hohe Dissipation λ) sind die Abweichungen vom theoretischen Wert schon bei $\tau \gtrsim 1$ sichtbar. Kurven mit kleinerem ϵ folgen dem homogenen Verlauf länger und für $\epsilon > \epsilon_{\text{cl}}$ schließlich für immer.

Den weiteren Verlauf der Datenkurven erkennt man am besten, wenn man von der Auftragung über die skalierte Zeit τ wieder zur realen Zeit t zurückgeht, siehe Abb. 5.3. Hier sind jetzt nur diejenigen Kurven berücksichtigt, die unterhalb von ϵ_{cl} liegen.

Wenn das Clusterwachstum einsetzt, weichen die Kurven vom homogenen Verlauf

$$E_{\text{hom}}(t) = \frac{E(0)}{(1 + t/t_{\text{hom}})^2} \quad (5.1)$$

ab.

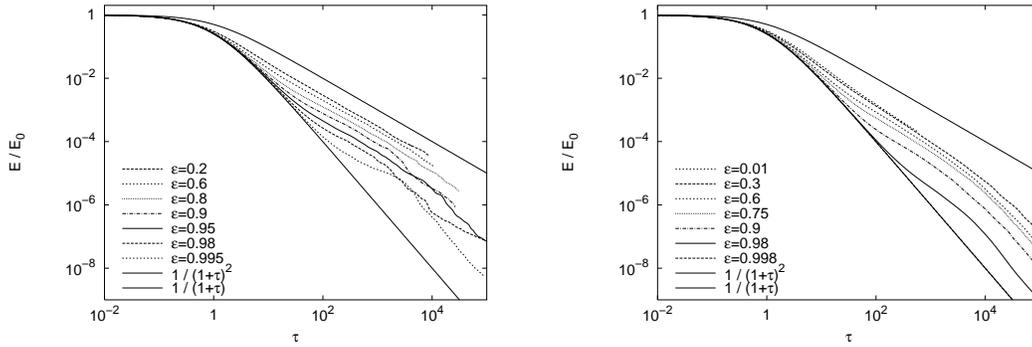


Abbildung 5.2: Abfall der kinetischen Energie E mit der skalierten Zeit τ in einem granularen Gas der Dichte $\nu = 0.25$ bei verschiedenen Restitutionskoeffizienten ϵ im Vergleich zu den theoretischen Vorhersagen $(1 + \tau)^{-1}$ und $(1 + \tau)^{-2}$.

Die Kurve mit $\epsilon = 0.998$ liegt jenseits von ϵ_{cl} und fällt mit $(1 + \tau)^{-2}$ zusammen.

(links) 2D-System mit 10^5 Teilchen.

(rechts) 3D-System mit $5 \cdot 10^5$ Teilchen.

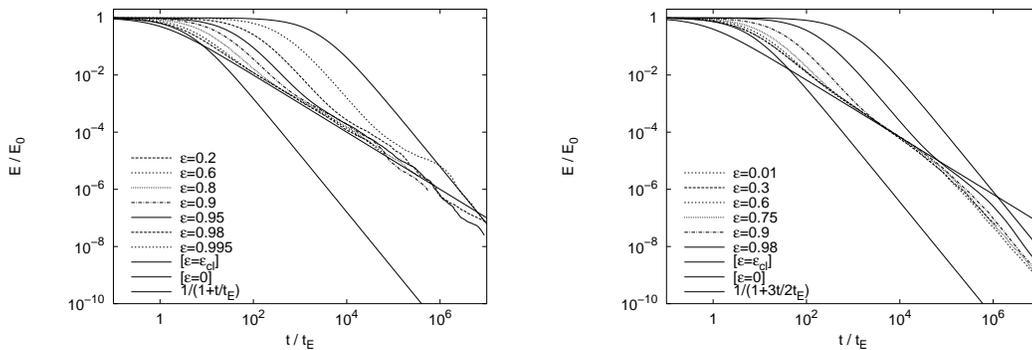


Abbildung 5.3: Abfall der kinetischen Energie E mit der unskalierten Zeit t .

Die durchgezogenen Kurven sind Gleichung (5.2) und (5.3) sowie der theoretische Wert für $\epsilon = 0$.

(links) 2D-System mit 10^5 Teilchen.

(rechts) 3D-System mit $5 \cdot 10^5$ Teilchen.

Alle Kurven nähern sich stattdessen einem asymptotischen Verlauf

$$E_{\text{grw}}(t) = \frac{E(0)}{(1 + t/t_{\text{grw}})^\alpha}, \quad (5.2)$$

wobei $t_{\text{grw}} \approx \frac{2}{\mathcal{D}}t_E$ und $\alpha \approx 1$ ist.¹

Wenn das Wachstum der Inhomogenitäten abgeschlossen ist, die Cluster also Systemgröße erreicht haben, folgt der Energieabfall wieder einer Potenz t^{-2} , ähnlich wie im homogenen Zustand.² Denn die Temperaturverläufe sollten ja von der Dissipationsstärke monoton abhängig sein, das heißt die Datenkurven schneiden sich nicht.

Da alle Kurven für $\lambda \geq \lambda_{\text{cl}}$ sich demselben Endverlauf annähern, Kurven mit $\lambda \leq \lambda_{\text{cl}}$ aber $E(t) \sim (1 + \lambda t/2\mathcal{D}t_E)$ folgen, können wir mit Hilfe des Grenzfalls λ_{cl} den asymptotischen Verlauf bestimmen:

$$E_{\text{sat}}(t) = \frac{E(0)}{(1 + t/t_{\text{sat}})^2} \quad (5.3)$$

mit $t_{\text{sat}} = 2\mathcal{D}t_E/\lambda_{\text{cl}}$.

Der Übergang vom homogenem Regime zum Clusterwachstums-Regime findet demnach bei $t \gtrsim t_{\text{hc}}$

$$t_{\text{hc}} \approx \frac{t_{\text{hom}}^2}{t_{\text{grw}}} = \frac{2\mathcal{D}^3}{\lambda^2} t_E \geq 2\mathcal{D}^3 t_E \quad (5.4)$$

statt, der Übergang zum Sättigungsregime bei $t \lesssim t_{\text{cs}}$

$$t_{\text{cs}} \approx \frac{t_{\text{sat}}^2}{t_{\text{grw}}} = \frac{2\mathcal{D}^3}{\lambda_{\text{cl}}^2} t_E \sim l_{\text{opt}}^4 t_E. \quad (5.5)$$

Dies sind auch die Schnittpunkte der durchgezogenen Linien in Abb. 5.3. Man erkennt, dass diese Werte nur die ungefähre Größenordnung wiedergeben, der

¹In 2D ist die Übereinstimmung mit $\alpha = 1$ sehr gut, vergleiche auch [94]. In 3D ergibt ein Fit $\alpha = 1.1 \pm 0.1$. Dies ist ebenfalls konsistent mit $\alpha = 1$, aber nicht mit dem Wert $\alpha = \mathcal{D}/2$ aus [98, 99].

²Bei den abgebildeten 2D-Daten sind die Simulationsdauern teilweise allerdings zu kurz bzw. die Teilchenzahlen zu groß, um dieses Verhalten beobachten zu können. Bei weiteren Simulationen mit weniger Teilchen ist der t^{-2} -Abfall jedoch ebenfalls deutlich zu sehen.

tatsächliche Übergang ist fließender Natur. Eine wirklich systematische Untersuchung der Übergangszeiten konnten wir daher auch nicht durchführen.

Mit Hilfe der skalierten Zeit τ ausgedrückt lauten die ungefähren Übergangszeiten:

$$\tau_{\text{hc}} = \frac{\mathcal{D}^2}{\lambda} \quad (5.6)$$

$$\tau_{\text{cs}} = \frac{\mathcal{D}^2 \lambda}{\lambda_{\text{cl}}^2} \quad (5.7)$$

5.1.2 Kollisionsfrequenz

Ebenso wie bei der kinetischen Energie kann man auch beim Verlauf der Kollisionsfrequenz deutlich drei Bereiche voneinander unterscheiden: siehe Abb. 5.4. Zunächst folgen die Kurven der Vorhersage für homogene Systeme

$$f_E(\tau) = \frac{f_E(0)}{1 + \tau}. \quad (5.8)$$

Dann – beim Einsatz des Clusterwachstums nimmt die Kollisionsfrequenz langsamer ab oder bei starker Dissipation zeitweise sogar zu. Dieser Übergang ist sogar noch deutlicher und schon etwas früher sichtbar als bei der kinetischen Energie. Außerdem beginnt die Kollisionsfrequenz auch noch stark zu fluktuieren.

Schließlich beim Übergang zum Sättigungsregime folgt die Vorhersage wieder ungefähr dem τ^{-1} -Verlauf, wenngleich nach wie vor starke Fluktuationen zu erkennen sind.

Auch hier ist es wieder instruktiv, ebenfalls die unskalierte Zeit t zu betrachten (siehe Abb. 5.5). Sobald die Kurven vom homogenen Fall abweichen, der ja für starke Dissipation einen schnelleren Abfall vorhersagt, kehrt sich dieses Verhältnis um und starke Dissipation führt gar zu einem Anstieg der Kollisionsfrequenz. Daher kreuzen sich die Datenkurven und zeigen im Clusterwachstums-Regime einen unübersichtlichen Verlauf. Auf längerer Zeitskala nähern sie sich dann wieder dem asymptotischen Wert für $\epsilon = \epsilon_{\text{cl}}$ an.

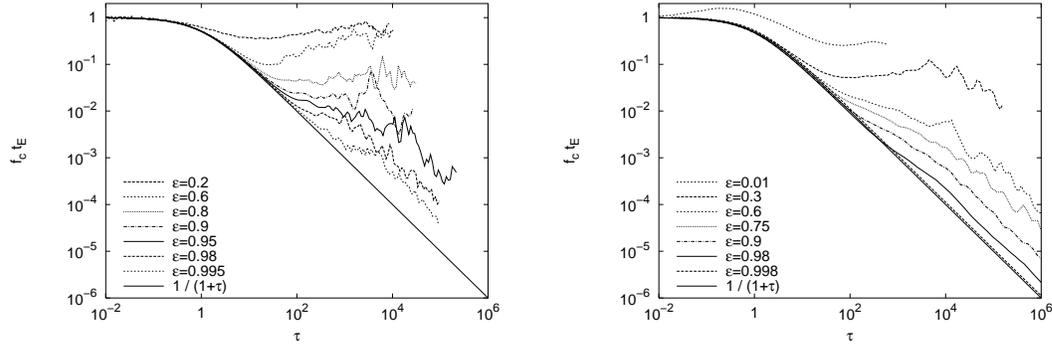


Abbildung 5.4: Abfall der Kollisionsfrequenz f_E mit der skalierten Zeit τ in einem granularen Gas der Dichte $\nu = 0.25$ bei verschiedenen Restitutionskoeffizienten ϵ im Vergleich zu theoretischen Vorhersagen.

Die Kurve mit $\epsilon = 0.998$ liegt jenseits von ϵ_{cl} und folgt $(1 + \tau)^{-1}$.
 (links) 2D-System mit 10^5 Teilchen.
 (rechts) 3D-System mit $5 \cdot 10^5$ Teilchen.

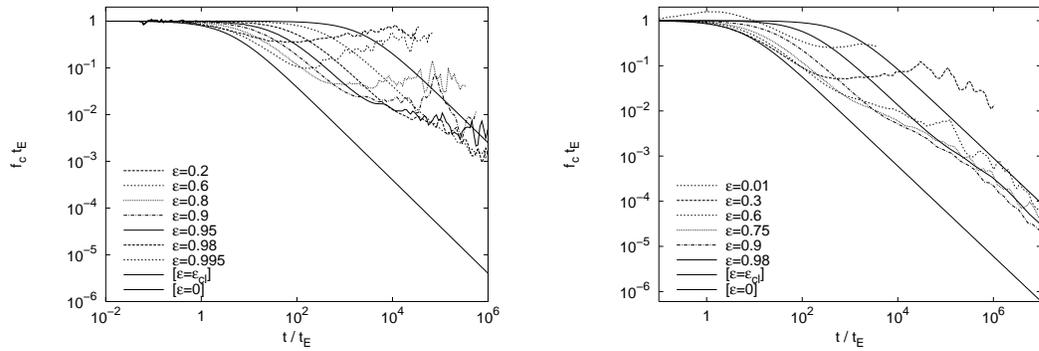


Abbildung 5.5: Abfall der Kollisionsfrequenz f_E mit der unskalierten Zeit t .

Die durchgezogenen Linien sind die theoretischen Werte für $\epsilon = 0$ und $\epsilon = \epsilon_{cl}$.

(links) 2D-System mit 10^5 Teilchen.
 (rechts) 3D-System mit $5 \cdot 10^5$ Teilchen.

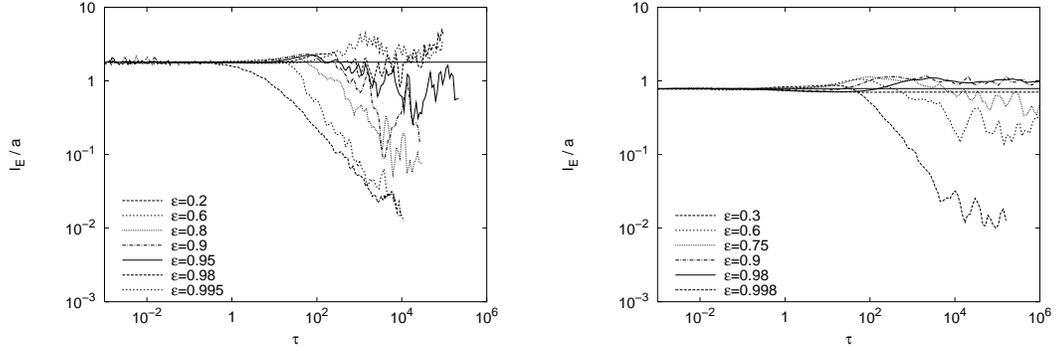


Abbildung 5.6: Mittlere freie Weglänge l_E über skalierte Zeit τ in einem granularen Gas bei verschiedenen Restitutionskoeffizienten ϵ . Bei der vorliegenden Dichte $\nu = 0.25$ liegt die mittlere freie Weglänge anfangs in der Größenordnung der Teilchenradien a .

Die durchgezogene Linie ist der theoretische Wert für den homogenen Fall.

(links) 2D-System mit 10^5 Teilchen.

(rechts) 3D-System mit $5 \cdot 10^5$ Teilchen.

5.1.3 Freie Weglänge

Aus den Daten für die kinetische Energie und die Kollisionsfrequenz lässt sich unter der Annahme maxwellischer Geschwindigkeitsverteilung nun auch noch die mittlere freie Weglänge berechnen:

$$l_E(\tau) = \sqrt{\frac{2^D}{\pi} \frac{\sqrt{2E(\tau)/m}}{f_E(\tau)}} \quad (5.9)$$

Für das homogene Regime erwarten wir einen konstanten Verlauf. Wie Abb. 5.6 zeigt, ist dies für alle Kurven zumindest bis zum Zeitpunkt $\tau \approx 1$ auch gut erfüllt, dann wächst für die meisten Kurven die freie Weglänge leicht an, um anschließend stark abzusinken und schließlich wieder in einen mehr oder weniger konstanten Verlauf zu münden. Bei Werten $\epsilon > \epsilon_{cl}$ bleibt die freie Weglänge erwartungsgemäß konstant.

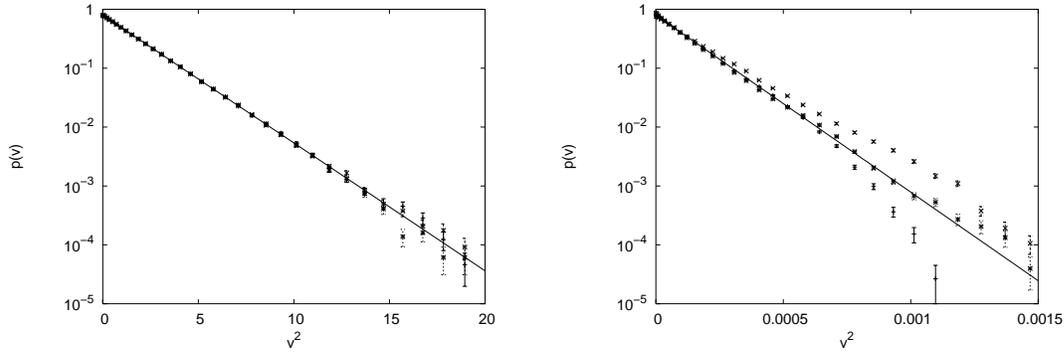


Abbildung 5.7: Geschwindigkeitsverteilung $p(v)$ in semi-logarithmischer Auftragung über v^2 . Die Punkte sind Messwerte für die Geschwindigkeitskomponenten in unterschiedlichen Raumrichtungen. Die Gerade ist die gaußsche Normalverteilung.

(links) Verteilung bei Simulationsbeginn.

(rechts) Verteilung bei Simulationsende für $\epsilon = 0.3$.

5.1.4 Geschwindigkeitsprofil

In Abb. 5.7 ist die Geschwindigkeitsverteilung für ein granulares Gas aufgetragen. Bei Simulationsbeginn ist diese isotrop und gaußverteilt. Nachdem sich Cluster gebildet haben, ist auch die Geschwindigkeit inhomogen und anisotrop und weicht deutlich von der Normalverteilung ab.

Solange sich nur kleine Cluster gebildet haben, ist die Abweichung von der Normalverteilung in der Regel vernachlässigbar, sodass die Berechnungen für die freie Weglänge im letzten Kapitel trotzdem annähernd gültig bleiben.

Die Abweichung von der Isotropie bei stärkerer Clusterbildung ist auch in Abb. 5.8 zu erkennen. Dort sieht man, dass die Teilchengeschwindigkeiten in den Clustern praktisch parallel zueinander sind, während die relativen Teilchengeschwindigkeiten sehr klein sind.

Die Ursache hierfür ist, dass die lokalen Teilchenfluktuationen ja aufgrund der Kollisionen in den Clustern schnell dissipiert werden. Daher nehmen die Fluktuationen schneller ab, als die Geschwindigkeiten selbst. Die relative Abnahme der lokalen Fluktuationen folgt dabei $\Delta v/v \sim t^{-1/4}$ [94].

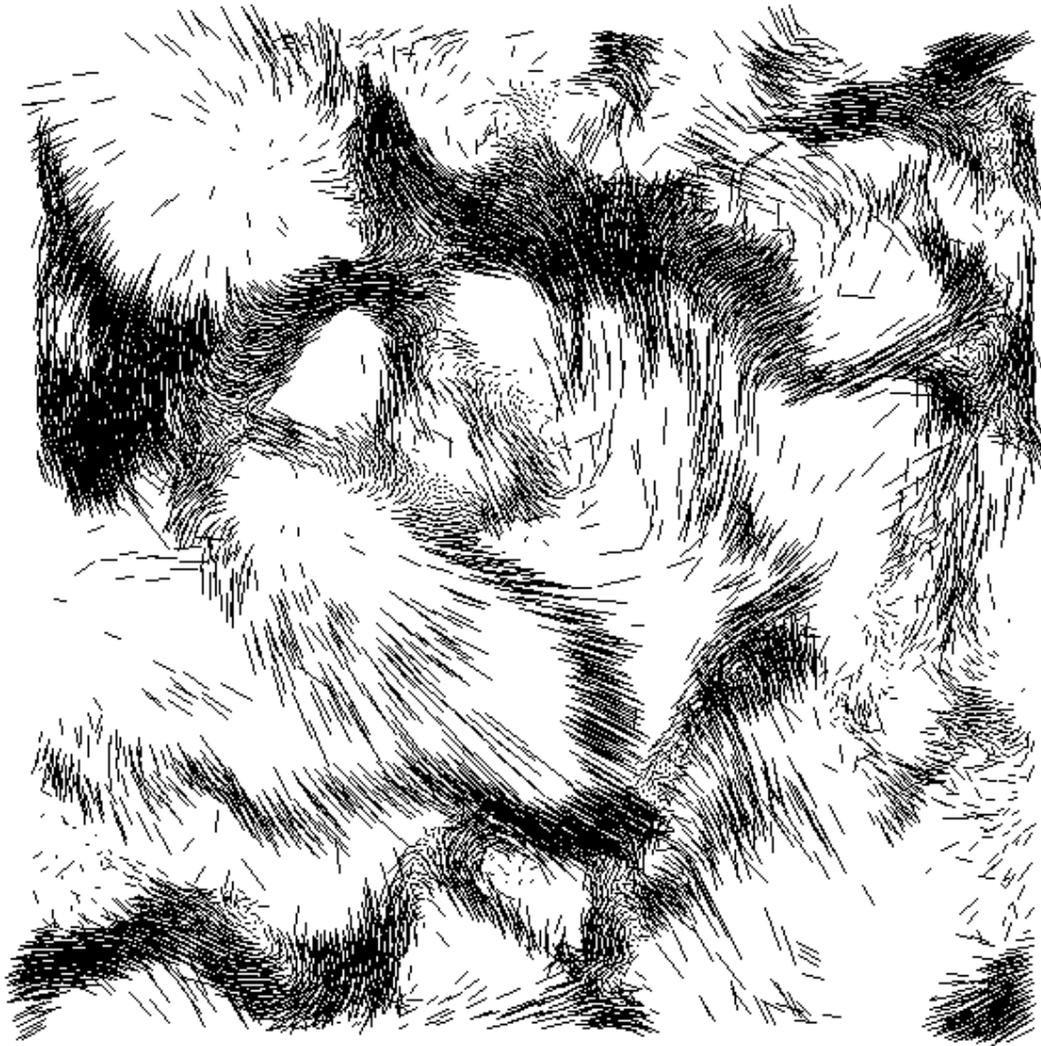


Abbildung 5.8: Momentaufnahme der Geschwindigkeitsvektoren der $N = 10^4$ Teilchen in einem zweidimensionalen System mit einer Dichte $\nu = 0.25$ und einem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.5$.

5.1.5 Diskussion

Beim Abkühlen eines granularen Gases kann man deutlich drei Phasen unterscheiden. Zunächst befindet sich das Gas im homogenen Zustand. Die Abnahme der Temperatur und Kollisionsfrequenz folgt den Vorhersagen der kinetischen Theorie und alle Datenreihen lassen sich mittels Zeitskalierung auf eine einzige Kurve abbilden: $T(\tau)/T(0) = (1 + \tau)^{-2}$. Wenn die Dissipation sehr klein ist ($\lambda < \lambda_{cl}$), verbleibt das System in diesem Zustand.

Ansonsten bildet das System Inhomogenitäten aus, die nach einer Zeitdauer $t_{hc} \sim \lambda^{-2}$ bzw. $\tau_{hc} \sim \lambda^{-1}$ so weit angewachsen sind, dass sie signifikante Abweichungen vom homogenen Verlauf ergeben. Augenfällig wird diese Abweichung zunächst bei der Kollisionsfrequenz, die bei starker Dissipation zeitweise sogar ansteigen kann und stetig wachsende Fluktuationen zeigt. Sichtbar sind die Inhomogenitäten auch in der mittleren freien Weglänge und der Geschwindigkeitsverteilung. Und auch die Temperatur sinkt langsamer ab, nämlich nur noch mit τ^{-1} . Dabei streben alle Kurven unabhängig von der Stärke der Dissipation ($\lambda < \lambda_{cl}$ vorausgesetzt) demselben Temperaturverlauf zu.

Schließlich nach einer Zeitdauer $t_{cs} \sim l_{opt}^4$, die also stark von der Teilchenzahl und der Dichte abhängt, sind die Inhomogenitäten auf Systemgröße angewachsen. Nach wie vor sind starke Fluktuationen in der Kollisionsfrequenz und der mittleren freien Weglänge sowie Anisotropie in der Geschwindigkeitsverteilung zu beobachten. Aber im Großen und Ganzen ähnelt der Verlauf der Abkühlung dem homogenen Verlauf von λ_{cl} . Mit der Kollisionsfrequenz verhält es sich ähnlich, wenngleich hier die Annäherung an den asymptotischen Verlauf weniger deutlich ausgeprägt ist und mehr Zeit erfordert.

Der Grund für die starken Fluktuationen mit deutlichen Spitzen in der Kollisionsfrequenz und davon abgeleiteten Größen ist die Kollision von Teilchenclustern mit anderen Teilchenclustern, bei denen ja zahlreiche einzelne Stöße stattfinden. Damit steigt dann kurzfristig die Kollisionsfrequenz stark an.

Wenn das System von Clustern dominiert wird, wird außerdem auch der Restitutionskoeffizient für Teilchen-Teilchen-Kollisionen immer unwichtiger. Denn bei einer Kollision mit einem (ruhenden) Cluster wird praktisch die gesamte kinetische Energie des einfallenden Objekts über zahlreiche Einzelkollisionen

dissipiert. Daher zeigt das System in diesem Stadium keine Abhängigkeit mehr von der Stärke der Dissipation.

Dass die Temperatur während des Clusterwachstums langsamer absinkt als in einem homogenen System, hängt damit zusammen, dass sich während des Clusterwachstums die freie Weglänge und die Relativgeschwindigkeiten der Teilchen für freie und Cluster-Teilchen sehr unterschiedlich entwickeln. Für die freien Teilchen wächst die freie Weglänge aufgrund der sinkenden Dichte an, für die Cluster-Teilchen sinkt sie ab. Da die Temperatur der freien Teilchen höher ist als diejenige der Cluster-Teilchen, ergibt dies im Durchschnitt eine geringere Temperaturabnahme als sie ein homogenes System zeigen würde.

5.2 Teilchencluster

In diesem Kapitel wollen wir uns nun mit den Dichtefluktuationen und den damit zusammenhängenden Größen beschäftigen. Dazu werden wir auch Maße für die Clusterbildung einführen, um den Prozess besser beschreiben und verstehen zu können.

5.2.1 Dichteprofil

Ein Beispiel für die räumliche Dichteverteilung in einem dreidimensionalen granularen Gas, nachdem sich große Cluster gebildet haben, sieht man in Abb. 5.9. Auf den ersten Blick sehen die Strukturen, die sich dabei in zwei und drei Dimensionen bilden, ähnlich aus, vergleiche beispielsweise Abb. 4.4 und Abb. 5.1.

Bei genauerer Untersuchung des Dichteprofiles (siehe Abb. 5.10) erkennt man jedoch charakteristische Unterschiede zwischen 2D und 3D. Beispielhaft sind hier Dichteprofile bei hoher Dissipation aufgetragen, wo ja die Inhomogenitäten besonders stark ausgeprägt sind.

In zwei Dimensionen erhält man eine Dichteverteilung mit zwei Maxima. Ein sehr ausgeprägtes bei $\nu = 0$ und ein schwächeres bei $\nu \approx \nu_{\text{rcp}}$. Ein deutlicher Anteil der Verteilung liegt dabei im Bereich $\nu_s \dots \nu_{\text{max}}$. Mit anderen Worten – die Strukturen die beim Clusterwachstum entstehen sind sehr klar. Es gibt größere Bereiche, in denen sich praktisch keine Teilchen mehr befinden und

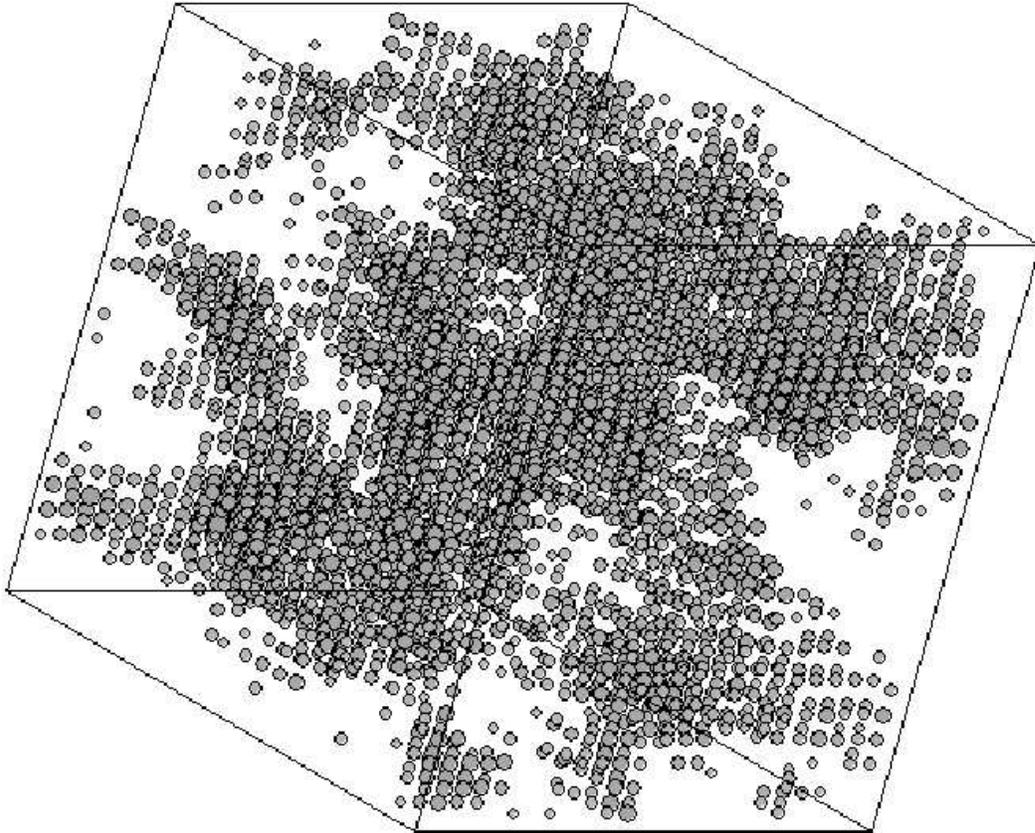


Abbildung 5.9: Momentaufnahme der Dichteveriationen in einem dreidimensionalen System mit ca. $5 \cdot 10^5$ Teilchen, einem Volumenanteil von $\nu = 0.25$ und einem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.3$ nach längerer Simulationsdauer.

Jede Kugel repräsentiert einen lokalen Bereich mit durchschnittlich 40 Teilchen. Die Größe der Kugeln ist proportional zur Dichte; sehr kleine Kugeln (die sehr geringer Dichte entsprechen) wurden ganz weggelassen.

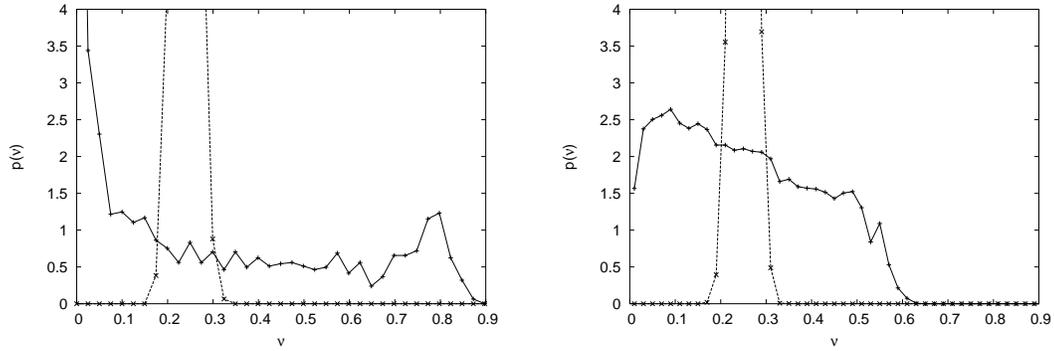


Abbildung 5.10: Dichteverteilung in einem granularen Gas mit der durchschnittlichen Dichte $\nu = 0.25$ nach erfolgter Clusterbildung (durchgezogene Kurve). Zum Vergleich ist auch die Dichteverteilung bei Simulationsbeginn (gestrichelte Kurve) mit eingezeichnet.

(links) zweidimensionales System mit $\lambda = 0.96$ ($\epsilon = 0.2$)

(rechts) dreidimensionales System mit $\lambda = 0.91$ ($\epsilon = 0.3$)

Bereiche, in denen die Teilchen so dicht gepackt sind, dass sie sich im festen Zustand befinden (siehe auch Abb. 5.11).

Dagegen weist die Dichteverteilung in drei Dimensionen keine klaren Strukturen auf. Die Dichteverteilung schwankt praktisch über den gesamten Verlauf $0 \dots \nu_f$ nicht mehr als um einen Faktor 2. Für höhere Dichten sinkt sie dann sehr schnell auf Null ab, sodass sich nur ein verschwindender Anteil der Verteilung oberhalb von ν_s befindet. Dies bedeutet, dass die entstehenden Teilchencluster hier viel verwuschener sind und sich dabei auch praktisch keine nennenswerten Bereiche im festen Zustand befinden.

Ein entsprechendes Verhalten beobachtet man auch bei anderen Restitutionskoeffizienten ϵ , anderen mittleren Dichten ν und anderen Teilchenzahlen N .

Betrachtet man den zeitlichen Verlauf der Dichteverteilung (siehe Abb. 5.12) so erkennt man wieder deutlich die drei Bereiche der zeitlichen Entwicklung: Zunächst der homogene Zustand, in dem nur geringe Variationen der Dichte um den Mittelwert zu erkennen sind. Dann der Bereich des Clusterwachstums, in dem die Variationen stark anwachsen, bis sie das gesamte Dichte-Spektrum $0 \dots \nu_{\max}$ in 2D bzw. $0 \dots \nu_s$ in 3D abdecken. Schließlich das Sättigungsregime,

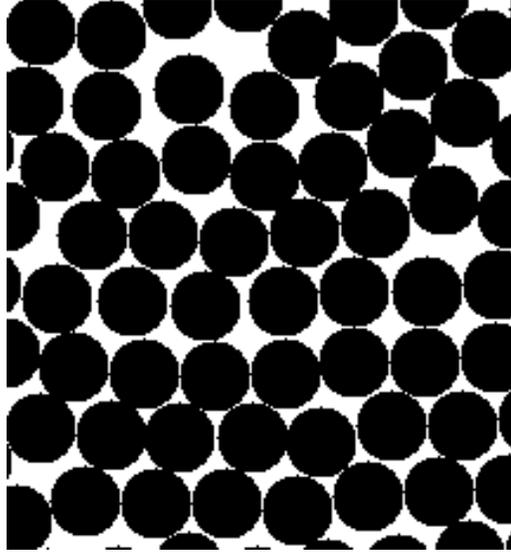


Abbildung 5.11: Momentaufnahme einer typischen Teilchenkonfiguration in einem zweidimensionalen Cluster in einem System mit einem Restitutionskoeffizienten von $\epsilon = 0.5$. Die Packungsdichte liegt gebietsweise nahe der dichtesten Kugelpackung.

in dem es zwar relativ starke Fluktuationen gibt, sich davon abgesehen aber keine größeren Änderungen mehr an dieser Dichteverteilung ergeben.

5.2.2 Paarverteilungsfunktion

Die radiale Paarverteilungsfunktion

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \frac{(\mathcal{D}/2)!}{\pi^{\mathcal{D}/2} \mathcal{D} r^{\mathcal{D}-1}} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(r_{ij} - 2a) \right\rangle \quad (5.10)$$

für zwei- und dreidimensionale granulare Gase ist in Abb. 5.13 zu sehen. Da sich die Teilchen nicht näher als $2a$ kommen können, ist natürlich $g(r < 2a) = 0$. Beim Abstand $2a$ ist $g(2a)$ für den homogenen Fall (in der Abbildung bei $t = 0$) durch Gleichung (4.52) gegeben. Diese liefert für die gegebenen Simulationsparameter $g(2a) = 1.6$ in 2D und $g(2a) = 2.1$ in 3D. Für $r \rightarrow \infty$ erwartet man $g(r) \rightarrow 1$ aufgrund der Normierung.

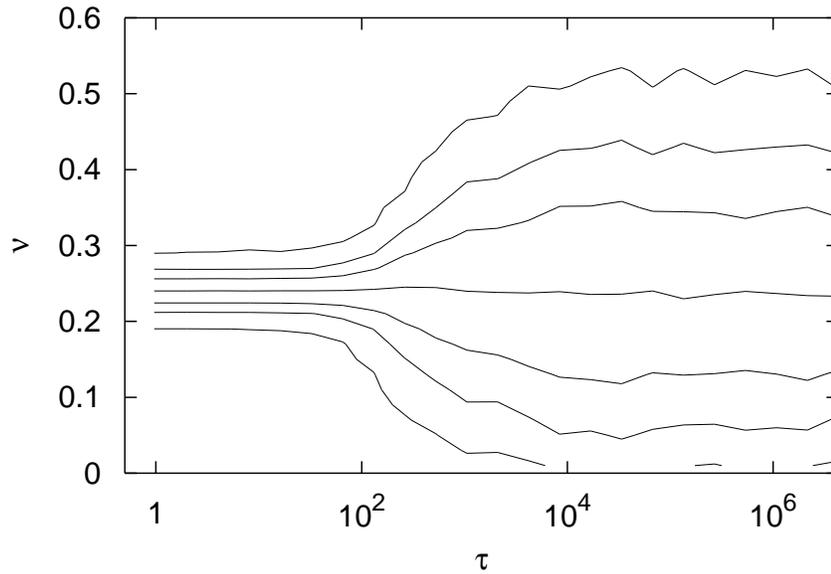


Abbildung 5.12: Quantile der Dichteverteilung eines dreidimensionalen Systems mit der durchschnittlichen Dichte $\nu = 0.25$ bei einem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.9$ im zeitlichen Verlauf. Die Linien geben die Werte an, unterhalb deren 1%, 10%, 25%, 50%, 75%, 90% und 99% der Dichteverteilung liegen.

Wie man der Abbildung entnehmen kann, entsprechen die Simulationsergebnisse für den homogenen Zustand dieser Vorhersage. Für $g(2a)$ erhält man die berechneten Werte und für $r > 5a$ ist praktisch keine Korrelation mehr zu erkennen. Durch die dissipativen Kollisionen nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen $2a$ und $3a$ mit zunehmender Simulationsdauer stark zu. Für $r > 5a$ erhält man aber weiterhin $g(r) \approx 1$, solange die Clusterbildung noch nicht eingesetzt hat. Dann jedoch beobachtet man ein starkes Anwachsen von $g(r)$, das seine Ursache in den Zusammenballungen der Teilchen zu Clustern hat. In diesem Stadium erkennt man außerdem deutliche Unterschiede zwischen 2D und 3D. In zwei Dimensionen kann man sehr klar die Peaks des Kristallgitters erkennen, während in drei Dimensionen praktisch keine lokale Ordnung für $r > 5a$ zu erkennen ist.

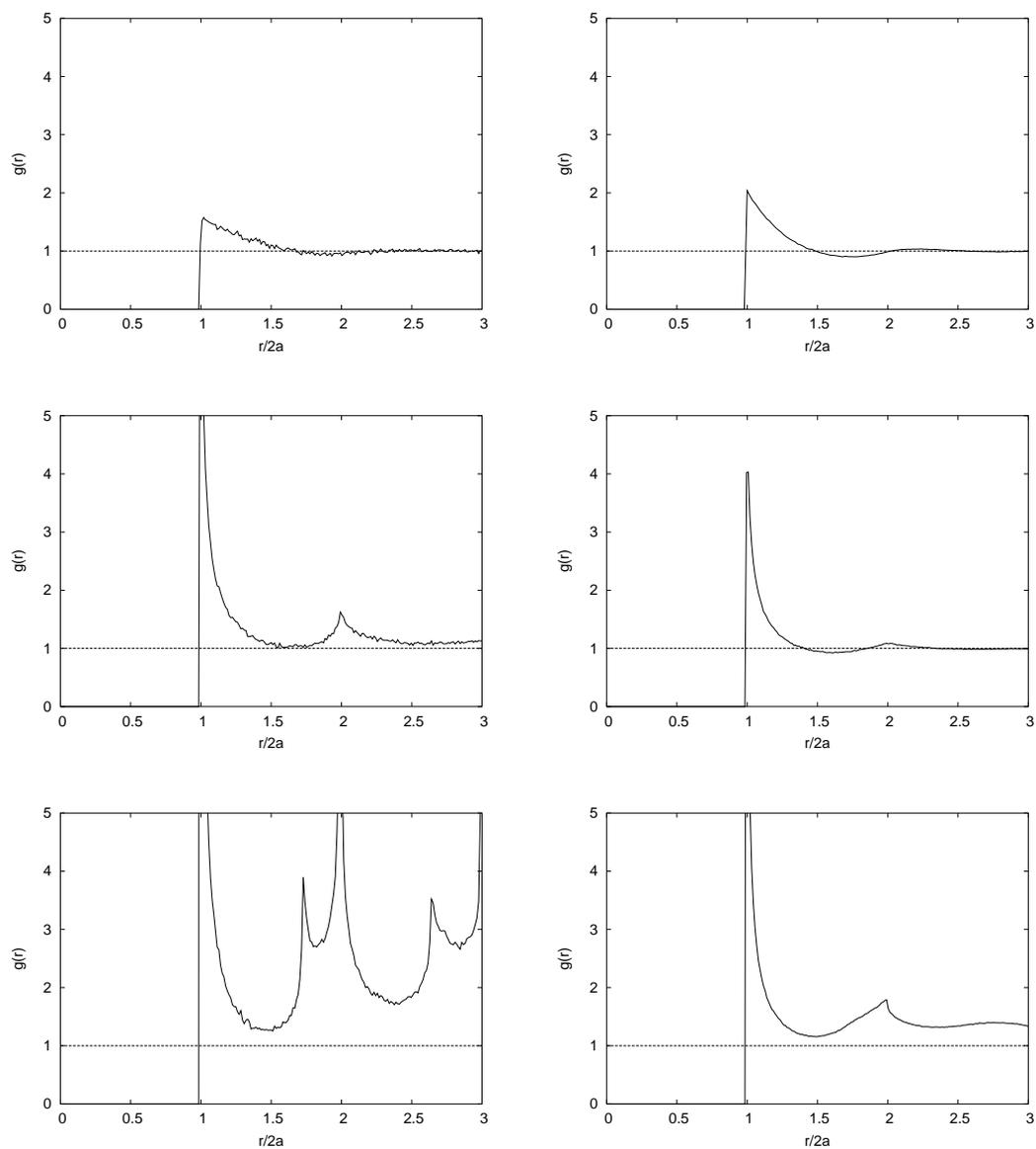


Abbildung 5.13: Paarverteilungsfunktion eines granularen Gases der Dichte $\nu = 0.25$ bei $t = 0$ (oben), $t \approx t_{hc}$ (Mitte) und $t \gg t_{hc}$ (unten).
 (links) zweidimensionales System mit $\lambda = 0.96$ ($\epsilon = 0.2$)
 (rechts) dreidimensionales System mit $\lambda = 0.91$ ($\epsilon = 0.3$)

5.2.3 Clustergrößen

Wie wir in den vorhergehenden Kapiteln gesehen haben, ballen sich die Teilchen im Verlauf der Zeit zu Clustern zusammen. Diese Strukturen sind in zwei Dimensionen klarer ausgeprägt als in drei Dimensionen, nichtsdestotrotz auch in 3D deutlich zu erkennen. Jedoch haben wir uns bei der Zuordnung der Teilchen zu Clustern bisher auf den bloßen Augenschein verlassen und keine klare Definition dafür aufgestellt.

Definitionen

Da sich die Teilchen nur verschwindend kurze Zeit berühren und sich ansonsten allenfalls nahe beieinander aufhalten, fassen wir unsere Definition dementsprechend ab:

Ein Teilchen gehört genau dann zu einem Cluster, wenn sein Abstand zu mindestens einem Teilchen dieses Clusters kleiner als δ ist.

δ sollte dabei etwa in der Größenordnung des typischen Teilchenabstands in einem Cluster liegen. Der genaue numerische Wert ist aber zunächst einmal beliebig und ergibt bei sinnvoller Wahl für die folgenden Ergebnisse auch keine qualitativen Unterschiede. Eine Betrachtung der mittleren Teilchenabstände, mittleren freien Weglängen, Dichteverteilungen und Paarkorrelationsfunktionen (siehe dazu auch Kap. 5.2.1 und Kap. 5.2.2) legt nahe, δ in der Größenordnung von 10% des Teilchendurchmessers zu wählen. Denn damit werden Gebiete mit einer lokalen Dichte $\nu/\nu_{\max} \gtrsim 1.1^D$ zuverlässig als Teil eines Clusters erkannt. Bei einem kleineren δ werden Cluster teilweise nicht als solche identifiziert, ein größeres δ ist allenfalls bei geringerer Dichte sinnvoll, ansonsten werden die nicht clusterbildenden Teilchen nicht als solche erkannt. Im Folgenden gilt daher immer

$$\delta/2a := 0.1 . \tag{5.11}$$

Mit dieser Definition erhalten wir nun eine Verteilung von Teilchenclustern der Größe $s = 1$ bis $s = N_x$, wobei wir die Cluster der Größe $s = 1$ auch als freie

Teilchen bezeichnen. Um diese Verteilung zu untersuchen, definieren wir die k -ten Momente der Clustergrößenverteilung

$$M_k := \frac{1}{n_{\text{tot}}} \sum_s s^k n_s, \quad (5.12)$$

wobei n_s die Anzahl der Cluster der Größe s und $n_{\text{tot}} = \sum_s n_s$ die Gesamtzahl der Cluster ist. Damit ist beispielsweise das 0. Moment $M_0 = 1$ und das 1. Moment $M_1 = \sum_s s n_s / \sum_s n_s$ die mittlere Clustergröße.

Häufig entwickelt sich während des Clusterwachstums ein sehr großer Cluster und viele kleinere. Dann werden die höheren Momente von dem einen Cluster der Größe $s = N_x$ dominiert. Daher definieren wir zum einen den Anteil q_x dieses Clusters am gesamten System

$$q_x := \frac{N_x}{N} = n_{\text{tot}} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{M_k}{N^k} \quad (5.13)$$

und zum anderen die reduzierten Momente M'_k , bei denen der größte Cluster nicht mit eingerechnet ist:

$$M'_k := \frac{1}{n_{\text{tot}}} \sum_s^{N_x-1} s^k n_s = M_k - \frac{N_x^k}{n_{\text{tot}}} \quad (5.14)$$

Verlauf

In Abb. 5.14 erkennt man wiederum sehr deutlich die drei Bereiche der Clusterentwicklung. Betrachten wir zunächst das homogene Regime. Alle Momente beginnen bei einem kleinem Ausgangswert, der allein von der Dichte (und natürlich dem Zahlenwert für δ) abhängig ist. Einige wenige Teilchen bilden dabei zufällige und temporäre kleine Cluster, daher liegen die Werte für die Momente bei $M_k \gtrsim 1$. Wenn die allerersten Kollisionen stattfinden, also im Bereich $\tau \ll 1$, verändern sich diese Konfigurationen aufgrund der dissipativen Stöße bereits. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in unmittelbarer Nähe der Teilchen wächst an³ und somit auch die Cluster-Momente. Besonders deutlich ist dieser Effekt natürlich bei starker Dissipation.⁴ Bis zum Übergang zum

³Dies ist beispielsweise auch an Betrachtungen der Paarverteilungsfunktion $g(r)$ zu erkennen. (Hier nicht abgebildet.)

⁴In den abgebildeten Schaubildern ist dieser Effekt in 2D kaum zu erkennen, gleichwohl auch dort vorhanden.

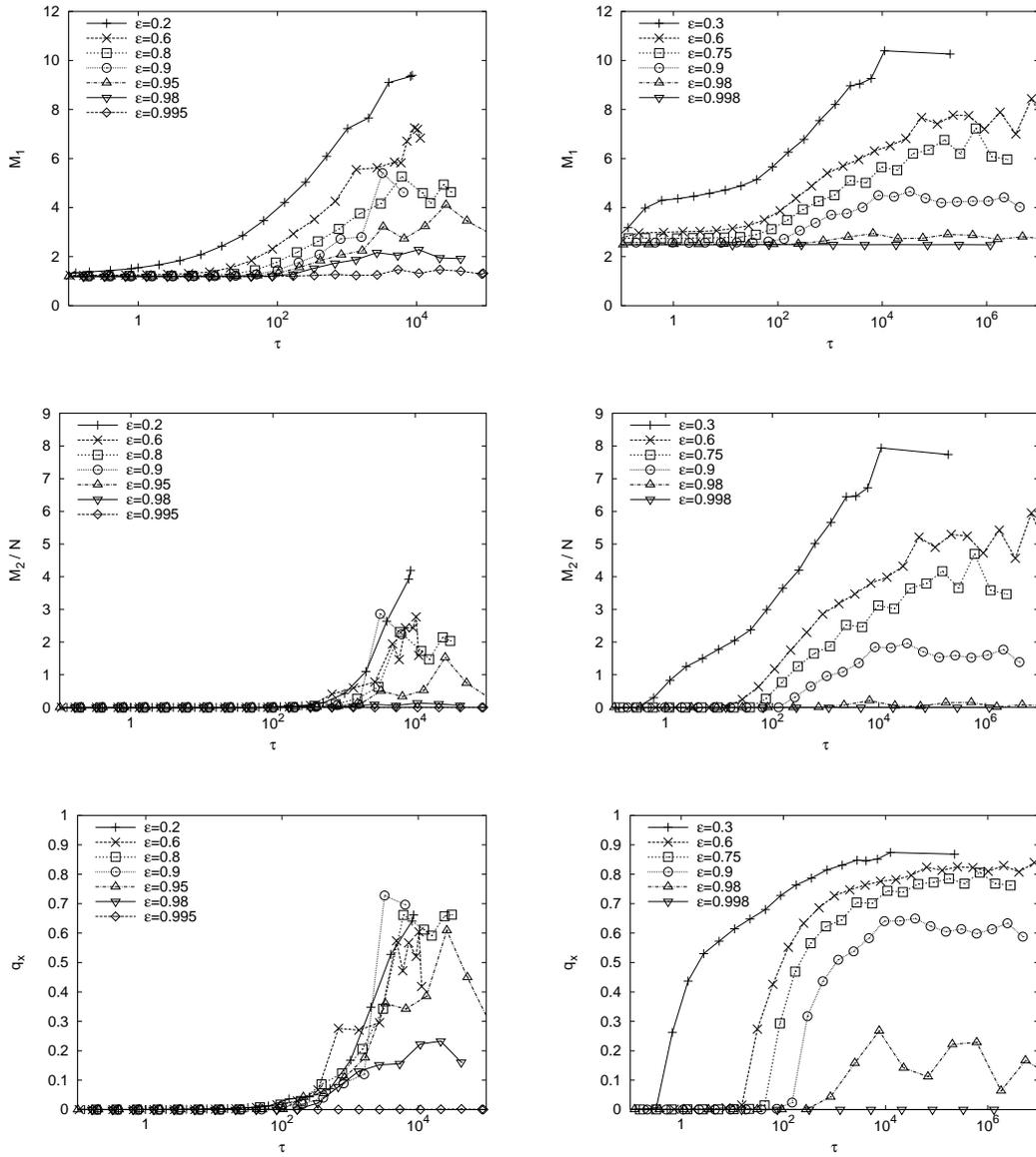


Abbildung 5.14: 1. Moment (oben), 2. Moment (Mitte) und Maximum (unten) der Clustergrößenverteilung (links) für ein zweidimensionales System mit $N = 10^5$ Teilchen (rechts) für ein dreidimensionales System mit $N = 5 \cdot 10^5$ Teilchen

Wachstumsregime bleiben dann die Cluster-Momente aber erst einmal näherungsweise konstant.

Als Übergangszeit vom homogenen zum Wachstumsregime erwarten wir bei den gegebenen Parametern gemäß Gleichung (5.6): $\tau_{hc} \approx 10^1 \dots 10^2$ in 3D und etwa halb so große Werte in 2D. Tatsächlich erkennen wir in den Schaubildern auch einen starken Anstieg des 1. Moments der Clustergrößenverteilung bei diesen Werten. In drei Dimensionen wird dieser auch von einem starken Anstieg der höheren Momente begleitet, während diese in zwei Dimensionen bei kleinen Werten verbleiben und erst mit starker Verzögerung sanft anwachsen (dann jedoch alle ungefähr zum selben skalierten Zeitpunkt τ). Dies bedeutet, dass sich in drei Dimensionen schon zu Beginn des Clusterwachstums auch größere Cluster bilden, in zwei Dimensionen dagegen zunächst lediglich zahlreiche kleinere. Das Wachstumsregime ist aber in beiden Fällen durch ein stetiges Anwachsen der mittleren Clustergröße gekennzeichnet.

Schließlich erwarten wir zum Zeitpunkt $\tau_{cs} \approx 10^5$ in 3D den Übergang zum Sättigungsregime. Tatsächlich ist ab ungefähr dieser Größenordnung auch kein bzw. nur noch ein sehr schwaches Anwachsen der Cluster-Momente zu beobachten. Ebenso hat auch der größte Cluster seine maximale Ausdehnung erreicht und beinhaltet abhängig von der Stärke der Dissipation bis zu 90% aller Teilchen. Bei geringerer Dissipation ist auch der größte Cluster deutlich kleiner und zeigt stärkere relative Fluktuationen. Bei $\lambda < \lambda_{cl}$ ist schließlich gar keine Clusterbildung mehr zu beobachten.

In 2D liegt das Sättigungsregime jenseits der maximalen Simulationsdauer, aber ein Abflachen des Anstiegs der Cluster-Momente ist bereits zu erkennen.

Zusammengefasst kann man also feststellen, dass sich das Anwachsen der Clustergröße in dieselben drei Bereiche einteilen lässt wie der Verlauf der Abkühlung und zahlreicher anderer Größen: zunächst homogene Verteilung praktisch ohne Cluster, dann starkes Anwachsen und schließlich Sättigung bei maximaler Clustergröße. Diese ist dabei abhängig von der Stärke der Dissipation.

Es fällt jedoch auf, dass das Anwachsen der Cluster in zwei und drei Dimensionen unterschiedlich abläuft. In zwei Dimensionen bilden sich zunächst zahlreiche kleinere Cluster, die dann zu einem späteren Zeitpunkt zu einem großen Cluster verschmelzen. Der zweite Prozess ist unabhängig von der Stärke der Dissipation; daher fällt der Zeitpunkt hierfür praktisch für alle Restitutionskoeffizien-

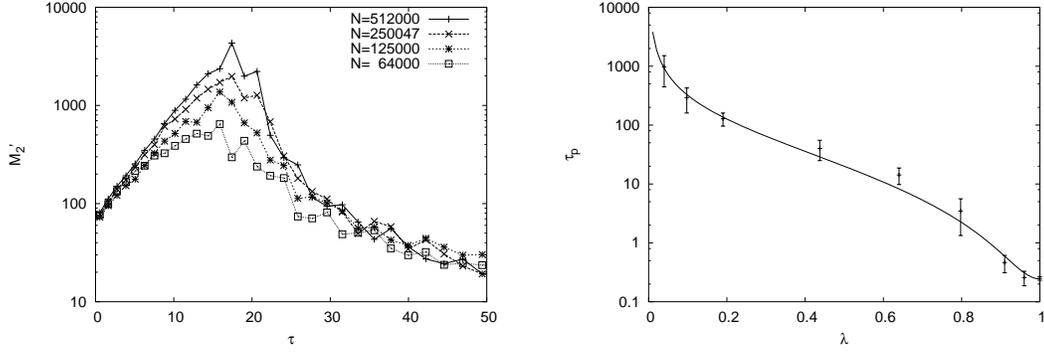


Abbildung 5.15: (links) Reduziertes 2. Moment M'_2 der Clustergrößenverteilung über die Zeit τ bei $\lambda = 0.44$.
(rechts) Zeitpunkt τ_p des Peaks von M'_2 über die Dissipation λ . Die durchgezogene Linie gibt die Fitfunktion (5.15) wieder.

ten zusammen. In drei Dimensionen dagegen, bildet sich mit dem Einsatz des Clusterwachstums schon ein großer Cluster heraus, der immer weiter anwächst. Ferner ist der Beginn des Wachstums des großen Clusters auch viel abrupter als in zwei Dimensionen.

Zeitskalierung

In zwei Dimensionen verläuft das Anwachsen des großen Clusters sanft und für alle Restitutionskoeffizienten ungefähr zur selben (skalierten) Zeit $\tau_x \sim l_{\text{opt}}^2$. In drei Dimensionen dagegen vollzieht sich dieser Übergang zum Wachstum viel abrupter und ist stark abhängig vom Restitutionskoeffizienten. Um diesen Zeitpunkt genauer fassen zu können, betrachten wir das zweite reduzierte Moment, siehe Abb. 5.15 (links). Dieses weist einen deutlichen Peak beim Einsetzen des Wachstums des großen Clusters auf. Den Zeitpunkt, bei dem dieser Peak zu sehen ist, nennen wir τ_p .

Wenn wir τ_p in Abhängigkeit von λ untersuchen (vgl. Abb. 5.15 (rechts)), so finden wir eine gute Übereinstimmung mit

$$\tau_p = \tau_0 + c'_\tau (1 - \lambda)^2 \tau_{\text{hc}} = \tau_0 + c_\tau \frac{(1 - \lambda)^2}{\lambda} \quad (5.15)$$

Dabei sind $\tau_0 = 0.24 \pm 0.02$ und $c_\tau = 40 \pm 5$ Fitparameter. Diese empirischen Ergebnisse lassen sich wie folgt interpretieren: Nach einer Zeit τ_{hc} beginnt das

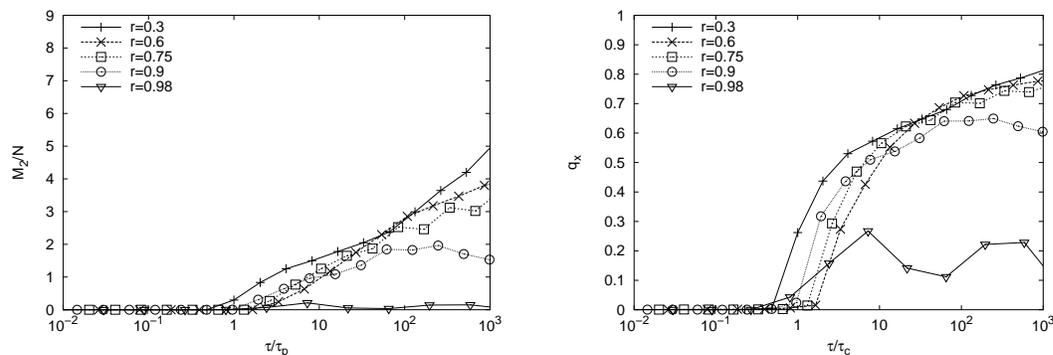


Abbildung 5.16: Zeitlich reskalierte Momente der Clustergrößenverteilung (siehe Abb. 5.14) in 3D:
 (links) 2. Moment, (rechts) maximaler Cluster

Wachstumsregime. Die Zeitdauer, nach der auch der große Cluster zu wachsen beginnt, ist stark abhängig von der Dissipation λ . Die zusätzliche Korrektur τ_0 , die in der Größenordnung der anfänglichen kollisionsfreien Zeit liegt, verhindert, dass τ_p bei extrem starker Dissipation kleiner werden kann als τ_0 , da ja zum Clusterwachstum einige Kollisionen erforderlich sind.

Dass diese empirische Formel den Einsatz des Wachstums des großen Clusters einigermaßen zutreffend beschreibt, zeigt Abb. 5.16, in der M_2 und q_x reskaliert aufgetragen sind und nun ungefähr zur selben Zeit $\tau/\tau_p \approx 1$ zu wachsen beginnen. Ohne diese Reskalierung liegen die Zeitpunkte für verschiedene Restitutionskoeffizienten dagegen ja um mehrere Größenordnungen auseinander.

Abhängigkeit von der Teilchenzahl

Werfen wir nun noch einen kurzen Blick auf die Abhängigkeit der Clustergrößen von der Teilchenzahl N , siehe Abb. 5.17.

Der Einfluss auf den zeitlichen Verlauf ist erwartungsgemäß gering. Unsere bisherigen Überlegungen lassen ja lediglich für die Zeit τ_{cs} einen Einfluss der Systemgröße erwarten; der Übergang zum Sättigungsregime ist allerdings anhand der vorliegenden Kurven schwer abzuschätzen.

Der Einfluss von der Teilchenzahl auf die Clustergrößen ist ebenfalls nur schwach ausgeprägt: Eine Variation der Teilchenzahl um den Faktor 64 ergibt

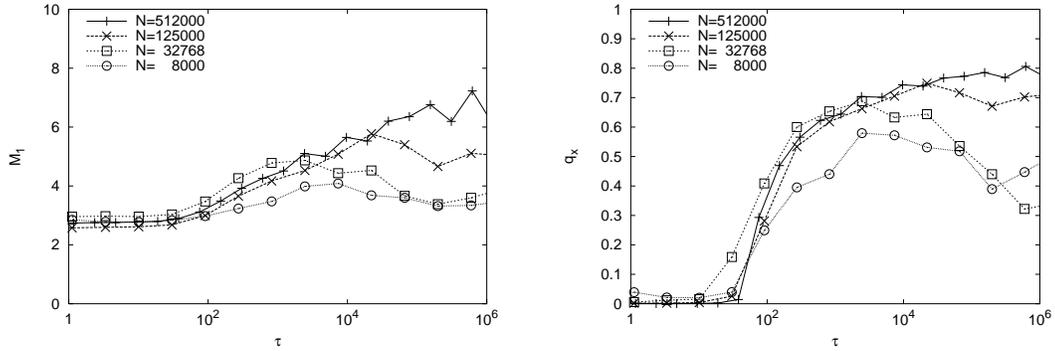


Abbildung 5.17: 1. Moment M_1 der Clustergrößenverteilung (links) und maximale Clustergröße q_x (rechts) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N in einem dreidimensionalen System mit dem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.75$ und einer Dichte $\nu = 0.25$.

lediglich eine Änderung des Anteils q_x um den Faktor 2. Außerdem nehmen natürlich die Fluktuationen mit sinkenden Teilchenzahlen zu.

Abhängigkeit von der Dichte

Ebenso wollen wir zu guter Letzt auch noch die Abhängigkeit der Clustergrößen von der Dichte betrachten, siehe Abb. 5.18. Hier erhält man nun einen sehr ausgeprägten Einfluss auf die Clustergrößen und deren zeitliche Entwicklung. Dabei sollte man jedoch berücksichtigen, dass all diese Daten mit der Clusterdefinitionslänge $\delta/2a = 0.1$ gewonnen wurden. Für $\nu = 0.25$ ist das eine gute Wahl, bei geringeren Dichten werden aber Teilchen-Cluster mit diesem δ unter Umständen gar nicht mehr als solche identifiziert. Besser wäre es, bei kleinen Dichten die Länge δ beispielsweise entsprechend $\delta \sim \nu^{1/D}$ zu wählen, da ja die mittleren Teilchenabstände mit $\nu^{1/D}$ skalieren. Da wir im Folgenden aber wieder zu $\nu = 0.25$ zurückkehren, verzichten wir darauf.

Das erste Moment der Clustergrößenverteilung lässt sich übrigens für die zufällige Anfangsverteilung zum Zeitpunkt $\tau = 0$ grob abschätzen, wenn man lediglich 1- und 2-Teilchen-Cluster berücksichtigt und $n_1 \gg n_2$, $\delta \ll 2a$ und $\nu \ll 1$ vor-

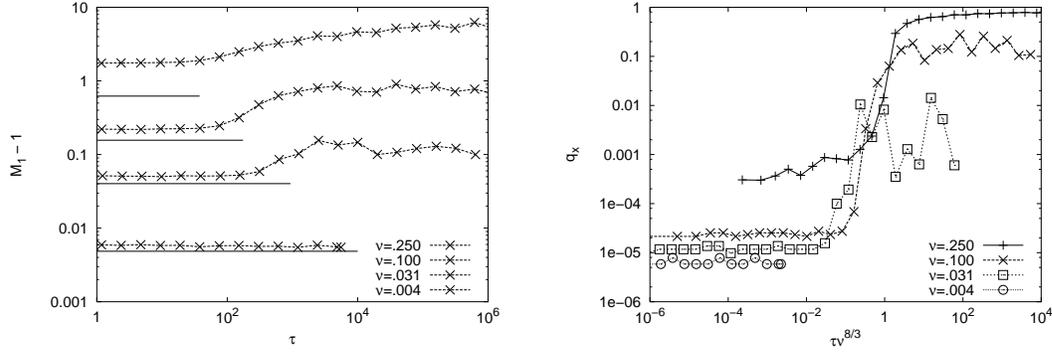


Abbildung 5.18: Einfluss der Dichte ν auf die Clustergrößen in einem dreidimensionalen System mit dem Restitutionskoeffizienten $\epsilon = 0.75$ und einer Teilchenzahl $N = 512000$.

Man beachte den logarithmischen Maßstab.

(links) 1. Moment $M_1 - 1$ der Clustergrößenverteilung über die Zeit τ . Die durchgezogenen Linien sind dabei die mit Hilfe von Gleichung (5.19) abgeschätzten Werte.

(rechts) Maximale Clustergröße q_x über die mit $\nu^{8/3}$ skalierte Zeit.

aussetzt:

$$M_1(0) \approx \frac{n_1 + 2n_2}{n_1 + n_2} \quad (5.16)$$

$$= 1 + \frac{n_2}{n_1 + n_2} \quad (5.17)$$

$$\approx 1 + \int_{2a}^{2a+\delta} d\mathbf{r} g(r) \frac{\nu}{V_{\text{part}}} \quad (5.18)$$

$$\approx 1 + \begin{cases} 4\nu g_{2a}(\nu) \frac{\delta}{2a} & (2\text{D}) \\ 12\nu g_{2a}(\nu) \frac{\delta}{2a} & (3\text{D}) \end{cases} \quad (5.19)$$

Das genügt allerdings schon, um die richtige Größenordnung für M_1 zu erhalten, vgl. Abb. 5.18 (links).

Die Zeitskalierung in Abb. 5.18 (rechts) passt mit $\tau_{\text{cs}} \sim \lambda_{\text{cl}}^{-2} \sim l_{\text{opt}}^4 \sim \nu^{8/3}$ zusammen, wobei allerdings zu beachten ist, dass das starke Wachstum des großen Clusters schon deutlich vor τ_{cs} stattfindet.

Der Einfluss der Dichte auf die Clustergrößen ist alles in allem relativ kompliziert, da sowohl die optische Tiefe als auch die Paarkorrelationsfunktion von der Dichte beeinflusst werden. Gleichwohl beobachtet man grundsätzlich auch bei geringeren Dichten ein qualitativ ähnliches Verhalten, wie es in den vorhergehenden Kapiteln beschrieben wurde.

Voraussetzung dafür ist natürlich, dass die optische Tiefe ausreichend groß bleibt, um Clusterbildung zuzulassen, vgl. dazu Gleichung (4.9). Bei höheren Dichten gerät man bald in den Bereich des Phasenübergangs; dann werden z. B. auch Reibungskräfte zwischen den Teilchen wichtig und unser Modell ist in der vorliegenden Form nicht mehr zur Beschreibung geeignet.

5.2.4 Diskussion

Bei der Untersuchung der Dichte-Inhomogenitäten, die sich aufgrund der Dissipation ausbilden, sind wir auf Unterschiede zwischen zwei- und dreidimensionalen Systemen gestoßen.

In zwei Dimensionen erhalten wir dabei deutlich klarere Strukturen. Die Cluster weisen dort eine sehr hohe Dichte auf, die jenseits des fluiden Zustands liegt. Sowohl der bloße Augenschein als auch die Untersuchung der Paarkorrelation lässt eine langreichweitige Ordnung erkennen. Zwischen den Clustern befinden sich dagegen Bereiche, in denen die Dichte niedrig ist und in denen sich nur noch sehr wenige freie Teilchen aufhalten.

In drei Dimensionen sind die Strukturen dagegen verwaschener, die Dichteverteilung zeigt keine klaren Maxima, die höchste beobachtete Dichte geht auch fast nirgends über den fluiden Zustand hinaus und die Paarkorrelation lässt keine langreichweitige Ordnung erkennen. Außerdem sind auch die Regionen zwischen den Clustern nicht so deutlich ausgedünnt wie in zwei Dimensionen.

Der Verlauf der Clusterbildung weist ebenfalls Unterschiede zwischen zwei und drei Dimensionen auf. Zwar sind in beiden Fällen die drei Bereiche homogenes, Wachstums- und Sättigungsregime zu erkennen und stimmen mit den Erkenntnissen aus den vorhergehenden Kapiteln überein. In beiden Fällen bildet sich dabei auch ein großer Cluster heraus, der bei ausreichender Dissipation bis auf Systemgröße anwächst. Aber die Dynamik dieses Wachstums ist unterschiedlich. In zwei Dimensionen wächst dieser Cluster erst, nachdem sich bereits

zahlreiche kleinere Cluster gebildet haben, langsam heran. Die Dissipationsrate hat dabei auf den Zeitpunkt des Wachstums nur einen geringen Einfluss. In drei Dimensionen setzt dieses Wachstum dagegen viel früher und recht abrupt ein. Der Zeitpunkt dieses Wachstumsbeginns ist dabei stark (und auf relativ komplizierte Weise) abhängig von der Stärke der Dissipation.

Das schnelle Wachstum des großen Clusters in drei Dimensionen und dessen ungeordnete Struktur hängen sicherlich miteinander zusammen. Denn wie wir in Kap. 4.3 gesehen haben, wird die Kristallisation bei zu schnellem Anstieg der Dichte verhindert. In zwei Dimensionen läuft das Wachstum dagegen langsamer ab und den Teilchen bleibt genügend Zeit, sich in einer sehr dichten Packung anzuordnen.

5.3 Clusterpopulationen

In diesem Kapitel wollen wir einen genaueren Blick auf die Clustergrößenverteilung werfen. Dazu untersuchen wir zunächst in Kapitel 5.3.1 die zufällige Anfangsverteilung mit den Mitteln der Perkolationstheorie. Dann stellen wir in Kapitel 5.3.2 die Gleichungen auf, die der zeitlichen Entwicklung dieser Clusterpopulationen zu Grunde liegen und vergleichen die dabei erzielten Resultate mit den Simulationsergebnissen. Daraus ziehen wir dann in Kapitel 5.3.3 einige Folgerungen für die Momente der Verteilungen. Zu guter Letzt diskutieren wir diese Ergebnisse noch einmal kurz in Kapitel 5.3.4.

5.3.1 Perkolationstheorie

Die Perkolationstheorie macht universelle Aussagen über Cluster in Systemen mit zufällig angeordneten Teilchen [100]. Für unser System ist diese zufällige Teilchenanordnung zumindest zu Beginn der Simulation gegeben und es ist naheliegend, diese universellen Aussagen daher auch auf granulare Gase anzuwenden [101].

Die Perkolationstheorie liefert für die Verteilung der Clustergrößen n_s unterhalb des Perkulationspunktes – wenn sich also noch kein großer Cluster gebildet hat:

$$n_s \sim s^{-\Theta} \exp(-w_p s) \quad \text{für } s \gg 1 \quad (5.20)$$

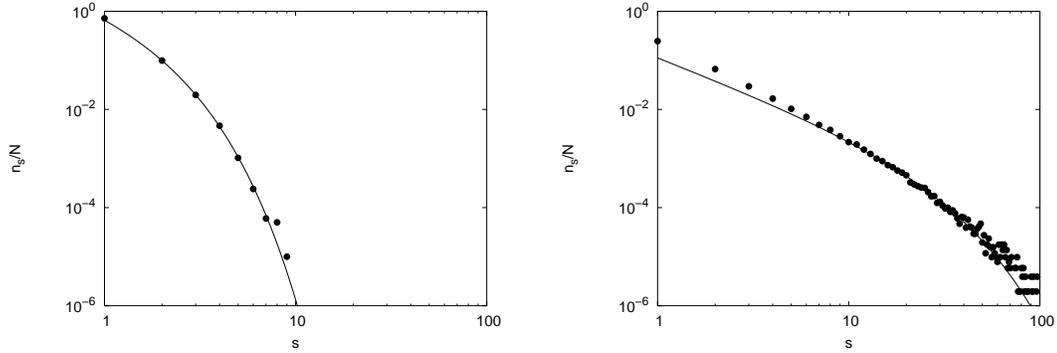


Abbildung 5.19: Clustergrößenverteilung bei Simulationsbeginn:

(links) zweidimensionales System mit $N = 10^5$ und $\nu = 0.25$

(rechts) dreidimensionales System mit $N = 5 \cdot 10^5$ und $\nu = 0.25$

Die durchgezogene Linie ist Gleichung (5.20).

Dabei ist $w_p \geq 0$ ein Parameter, der stark von der Dichte abhängt, und Θ eine universelle Konstante:

$$\Theta = \begin{cases} 1 & (2D) \\ 3/2 & (3D) \end{cases} \quad (5.21)$$

Wie Abb. 5.19 zeigt, kann die Verteilung der Clustergrößen durch Gleichung (5.20) recht gut beschrieben werden. In zwei Dimensionen stimmt die Gleichung sogar noch für sehr kleine Clustergrößen s , in drei Dimensionen erst – wie es die Perkolationsstheorie fordert – bei größeren s . Dass w_p in unserem zweidimensionalen Beispiel größer ist als in drei Dimensionen, hängt damit zusammen, dass die Wahrscheinlichkeit für die Bildung von Clustern bei gleicher Dichte in drei Dimensionen höher ist, vgl. Gleichung (5.19).

Nun können wir überprüfen, ob die Perkolationsstheorie auch die korrekte Verteilung der Clustergrößen am Perkolationspunkt – wenn sich also gerade ein großer Cluster bildet – liefert. Es gilt:

$$n_s \sim s^{-\theta} \quad \text{für } s \gg 1 \quad (5.22)$$

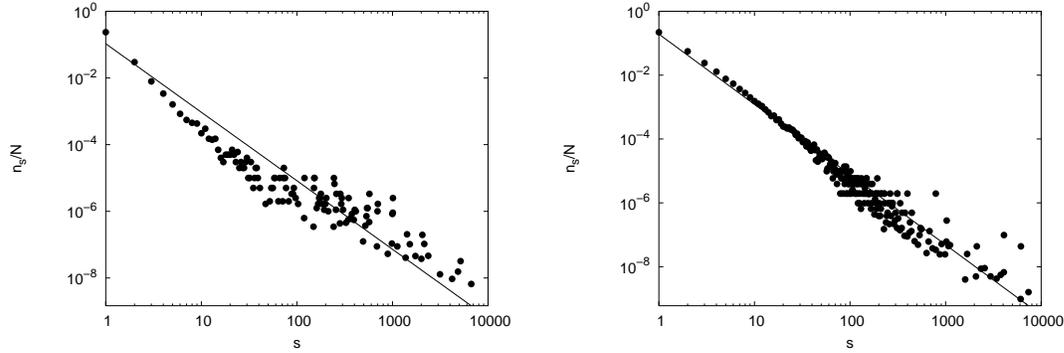


Abbildung 5.20: Clustergrößenverteilung am Perkolationspunkt:

(links) zweidimensionales System mit $N = 10^5$, $\epsilon = 0.6$ und $\nu = 0.25$

(rechts) dreidimensionales System mit $N = 5 \cdot 10^5$, $\epsilon = 0.75$ und $\nu = 0.25$

Die durchgezogene Linie ist Gleichung (5.22).

mit der universellen Konstante

$$\vartheta = \begin{cases} 187/91 & (2D) \\ 2.2 & (3D) \end{cases} \quad (5.23)$$

Ein Vergleich mit Abb. 5.20 zeigt, dass Gleichung (5.22) die Verteilung in drei Dimensionen recht gut beschreibt; in zwei Dimensionen ist die Übereinstimmung aber nicht besonders gut.

Dies ist nun aber nicht weiter verwunderlich, da wir ja bereits festgestellt haben, dass das Anwachsen des großen Clusters in zwei Dimensionen erst zu einem sehr späten Zustand stattfindet. Die anfänglich zufällige Verteilung ist zu diesem Zeitpunkt natürlich nicht mehr gegeben und die Perkolationsstheorie ist zur Beschreibung ungeeignet. In drei Dimensionen dagegen ist die Strukturbildung am Perkolationspunkt noch nicht so weit fortgeschritten und kann offenbar noch mit Hilfe der Perkolationsstheorie beschrieben werden.

Die Vorhersagen der Perkolationsstheorie jenseits des Perkolationspunkts

$$n_s \sim s^{-\Theta'} \exp(-w'_p s^{1-1/D}) \quad \text{für } s \gg 1 \quad (5.24)$$

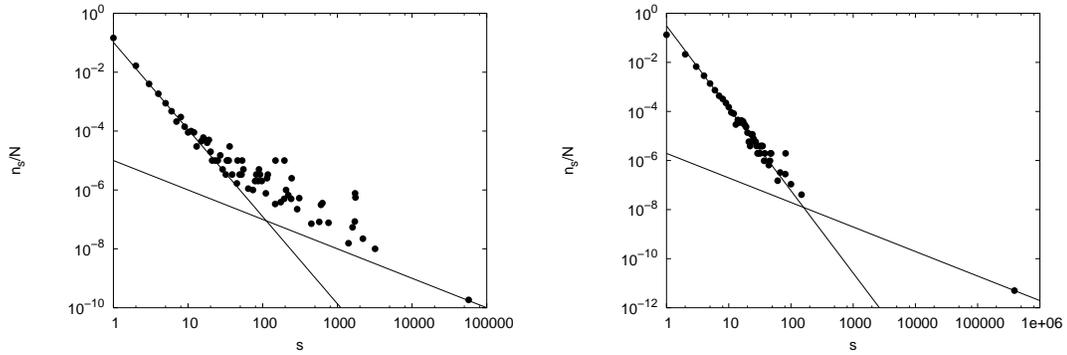


Abbildung 5.21: Clustergrößenverteilung am Simulationsende:

(links) zweidimensionales System mit $N = 10^5$, $\epsilon = 0.6$ und $\nu = 0.25$

(rechts) dreidimensionales System mit $N = 5 \cdot 10^5$, $\epsilon = 0.75$ und $\nu = 0.25$

In drei Dimensionen ist die Bildung des großen Clusters bereits abgeschlossen, in zwei Dimensionen noch nicht (vgl. Abb. 5.14). Die durchgezogenen Linien sind $n_s \sim s^{-\vartheta'}$ mit $\vartheta' \approx 3$ sowie $n_s = 1/s$.

mit dem Fitparameter w'_p und der universellen Konstante

$$\Theta' = \begin{cases} 5/4 & (2D) \\ -1/9 & (3D) \end{cases} \quad (5.25)$$

schließlich stimmen weder in zwei noch in drei Dimensionen mit den Ergebnissen bei Simulationsende überein, vgl. Abb. 5.21. Die Strukturbildung ist zu diesem Zeitpunkt allerdings auch sehr weit fortgeschritten und es liegt keine zufällige Verteilung der Teilchen mehr vor.

Stattdessen lässt sich die Clusterverteilung für $s \ll N_x$ nach wie vor durch ein Potenzgesetz

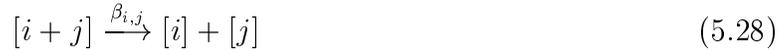
$$n_s \sim s^{-\vartheta'} \quad (5.26)$$

beschreiben, wobei jedoch $\vartheta' \approx 3 > \vartheta$ ist. Für den großen Cluster gilt natürlich $n_s = 1$, was sich aber aufgrund der benutzten Mittelung im Schaubild als $n_s =$

$1/s$ niederschlägt.⁵ Im 2D-Schaubild ist die Bildung des Perkulationsclusters noch nicht abgeschlossen (vgl. Abb. 5.14) und es gibt es noch einige weitere größere Cluster, die $n_s \gtrsim 1/s$ folgen.⁶

5.3.2 Populationsdynamik

Gehen wir nun zu einer Betrachtung der Dynamik der Clusterpopulationen über. Wenn $[s]$ einen Cluster der Größe s bezeichne, wird das Verschmelzen zweier Cluster bzw. das Auseinanderbrechen eines Clusters in zwei Teile durch folgende Reaktionsgleichungen beschrieben [102]:



Dabei sind α und β die entsprechenden Reaktionsraten. Für diese können wir folgenden Ansatz machen:

$$\alpha_{i,j} = \alpha_0 (i + j)^{1-1/D} v_{ij} \lambda^{1/2} \quad (5.29)$$

$$\beta_{i,j} = \beta_0 (i + j)^{1-1/D} v_{ij} \left(\frac{i + j}{ij} \right)^\xi \quad (5.30)$$

Die Verschmelzungsrate ist dabei proportional zum Wechselwirkungsquerschnitt und zur Cluster-Relativgeschwindigkeit, da diese Größen in die Kollisionsrate miteingehen. Ferner haben wir über $\lambda^{1/2}$ noch eine Proportionalität zur Abnahme der Teilchengeschwindigkeiten bei der Kollision angenommen, da nicht jede Kollision zu einer Verschmelzung der Cluster führt.

⁵Das Auswertungsprogramm benutzt ein einfaches Glättungsverfahren für die „Löcher“ in der diskreten Clustergrößenverteilung. Dabei wird über Bereiche mit $n_s = 0$ bis hin zum nächstgrößeren s mit $n_s \neq 0$ arithmetisch gemittelt. Im Fall des großen Clusters der Größe s ist $n_s = 1$ und der Mittelungsbereich über das breite „Loch“ hinweg bis zum nächstkleineren Cluster der Größe r umfasst $s - r$. Somit liefert die Auswertung den Wert $n_s = \frac{1}{s-r} \approx \frac{1}{s}$.

⁶Bei weiteren 2D-Simulationen mit weniger Teilchen (hier nicht abgebildet) treten im Gegensatz zu 3D in der Endverteilung trotzdem noch einige mittelgroße Cluster auf – allerdings deutlich weniger als in Abb. 5.21 (links).

Bei der Fragmentierungsrate haben wir eine Proportionalität zur Cluster-Oberfläche und zu den Geschwindigkeiten der Bruchstücke angesetzt. Darüber hinaus haben wir noch einen Term angenommen, der dafür sorgt, dass die Größenverteilung der Bruchstücke einem Potenzgesetz folgt – was man bei der Fragmentierung im Allgemeinen tatsächlich meist beobachtet [103]. Für den Parameter $\xi > 1$ wollen wir dabei vorerst keine weiteren Annahmen machen.

Damit kann man nun die Mastergleichung für die Wahrscheinlichkeiten $p_s = n_s/n_{\text{tot}}$ der Clustergrößen aufstellen:

$$\frac{d}{dt}p_j = \sum_{i=1}^{j-1} \alpha_{i,j-i} p_i p_{j-i} - \sum_{i=1}^{N-j} \alpha_{i,j} p_i p_j + \sum_{i=1}^{N-j} \beta_{i,j} p_{i+j} - \sum_{i=1}^{j-1} \beta_{i,j-i} p_j \quad (5.31)$$

In aller Allgemeinheit lässt diese sich natürlich nicht analytisch lösen. Wenn die Verteilung sich allerdings einem Gleichgewichtszustand angenähert hat und wir der Einfachheit halber sogar detailliertes Gleichgewicht⁷ der einzelnen Beiträge annehmen, so erhalten wir

$$\frac{\beta_{i,j}}{\alpha_{i,j}} = \frac{p_i p_j}{p_{i+j}}. \quad (5.32)$$

Die Raten (5.29) und (5.30) eingesetzt:

$$\frac{p_i p_j}{p_{i+j}} = \frac{\beta_0}{\alpha_0} \left(\frac{i+j}{ij} \right)^\xi \lambda^{-1/2} \quad (5.33)$$

Dies wird gelöst von

$$p_s = c s^{-\xi} \exp(-ws) \quad (5.34)$$

und umfasst damit auch die beobachteten Verteilungen aus Abb. 5.19 bis Abb. 5.21, solange wir den großen Cluster gesondert betrachten. Dabei ist

$$c = \frac{\beta_0}{\alpha_0} \lambda^{-1/2}. \quad (5.35)$$

⁷Das heißt, dass wir annehmen, dass sich beim 2. und 3. Term bzw. beim 1. und 4. Term der rechten Seite von Gleichung (5.31) die Beiträge mit denselben Indizes paarweise aufheben.

Andererseits gilt aus Gründen der Normierung

$$\sum_s p_s = 1 \quad (5.36)$$

bzw. ohne den großen Cluster

$$\sum_{s=1}^{N_x-1} p_s = 1 - q_x . \quad (5.37)$$

Wenn wir nun Gleichung (5.34) und (5.35) einsetzen, erhalten wir für die freien Parameter w und q_x die Gleichung:

$$(1 - q_x) = \frac{\beta_0}{\alpha_0} \lambda^{-1/2} \sum_{s=1}^{N_x-1} s^{-\xi} \exp(-ws) \quad (5.38)$$

Bei sehr geringer Dissipation verschwindet der große Cluster und die Lösung nimmt folgende Form an:

$$q_x = 0 \quad \text{und} \quad w = w_0 + \ln c = w_0 + \ln \frac{\beta_0}{\alpha_0 \sqrt{\lambda}} \quad (5.39)$$

mit $0 < w_0 \leq \sum_s s^{-\xi}$. Bei sehr schwacher Dissipation ist $c \gg 1$, dann gilt in erster Näherung:

$$w_0 \approx \frac{1}{2\xi c} \quad (5.40)$$

Da $\sum_s s^{-\xi}$ und damit auch w_0 für $\xi > 1$ nach oben beschränkt ist und $\ln c$ mit wachsender Dissipation λ irgendwann negativ wird, erreicht w irgendwann 0. Dann kann Gleichung (5.38) nur noch für $q_x \neq 0$ gelöst werden, wenn sich also ein großer Cluster bildet. Damit gilt:

$$w = 0 \quad \text{und} \quad 1 - q_x = \frac{\beta_0}{\alpha_0} \lambda^{-1/2} \sum_{s=1}^{N_x-1} s^{-\xi} \sim \lambda^{-1/2} \quad (5.41)$$

Wir erhalten also ab einer kritischen Dissipation $\lambda_{cl} \approx (\beta_0/\alpha_0)^2 (\sum_s s^{-\xi})^2 > \beta_0^2/\alpha_0^2$ einen Perkolationscluster, dessen maximale Größe gemäß Gleichung

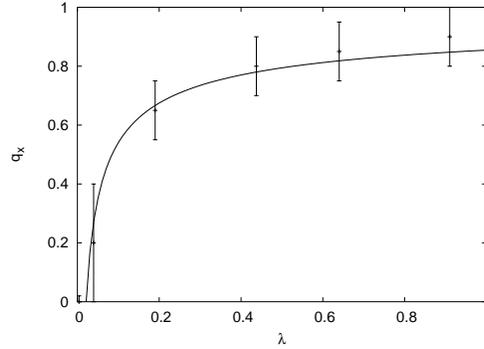


Abbildung 5.22: Maximale Clustergröße q_x in Abhängigkeit von der Dissipation λ bei einem dreidimensionalen System mit $N = 5 \cdot 10^5$ Teilchen und einer Dichte $\nu = 0.25$.

Die Balken geben die tatsächlichen Messwerte aus Abb. 5.14 an; die Kurve entspricht Gleichung (5.41).

(5.41) von der Stärke der Dissipation λ abhängt. Die kleineren Cluster gehorchen dem Potenzgesetz

$$\frac{n_s}{n_{\text{tot}}} = c s^{-\xi}. \quad (5.42)$$

Diese Verteilung ist konsistent mit der beobachteten Verteilung (5.26). Die Größe des Perkolationsclusters haben wir in Abb. 5.22 aufgetragen; die Messwerte sind mit relativ großen Unsicherheiten belastet, sind aber ebenfalls konsistent mit Gleichung (5.41).

Für sehr schwache Dissipation erhalten wir einen exponentiellen Abfall der Clustergrößen

$$\frac{n_s}{n_{\text{tot}}} = c s^{-\xi} \exp(-ws) = c^{1-s} s^{-\xi} \exp(-w_0 s) \quad (5.43)$$

und keinen Perkolationscluster, siehe Abb. 5.23. Für den Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$ schließlich, liefert (5.43) $n_s \rightarrow 0$ für $s > 1$. Dieses Ergebnis ist offensichtlich falsch. Die Ursache hierfür ist, dass wir in unseren Ratengleichungen diejenigen Cluster, die dadurch zu Stande kommen, dass sich Teilchen zufällig nahe beieinander aufhalten, gar nicht berücksichtigt haben. Für sehr geringe Dissipation muss daher Gleichung (5.43) durch (5.20) ersetzt werden. Da sich die Gleichungen formal ähneln, ergibt sich in Fällen wie beispielsweise Abb. 5.23 nur ein geringfügiger Unterschied.

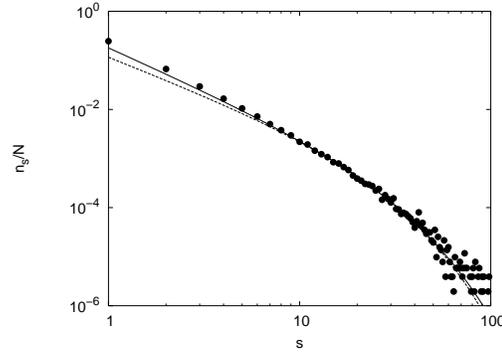


Abbildung 5.23: Clustergrößenverteilung bei sehr geringer Dissipation $\lambda < \lambda_{cl}$ bei Simulationsende für ein dreidimensionales System mit $N = 5 \cdot 10^5$ Teilchen und einer Dichte $\nu = 0.25$. Die durchgezogene Linie ist Gleichung (5.43) mit $\xi \approx 1.7$ und $w \approx 5 \cdot 10^{-2}$; die gestrichelte Linie ist Gleichung (5.20).

Numerische Lösung der Mastergleichung

Anstatt die Mastergleichung (5.31) analytisch zu untersuchen, kann man diese auch numerisch lösen. Eine entsprechende Zeitreihe sieht man in Abb. 5.24.

Bei schwacher Dissipation erhält man sehr schnell eine Verteilung, die Gleichung (5.43) entspricht, also einem Potenzgesetz, dem ein exponentieller Abfall überlagert ist.

Bei starker Dissipation entwickelt sich zunächst eine ähnliche Verteilung. Der exponentielle Abfall verschwindet jedoch mit der Zeit. Schließlich nimmt die Wahrscheinlichkeit für sehr große Cluster stark zu, während die Wahrscheinlichkeit für mittelgroße Cluster wieder absinkt; die Verteilung der kleinen Cluster folgt nach wie vor in akzeptabler Näherung einem Potenzgesetz.

Diese Ergebnisse stimmen qualitativ mit den Beobachtungen und den analytischen Resultaten gut überein, auch wenn wir hier den großen Cluster nicht gesondert betrachtet haben.

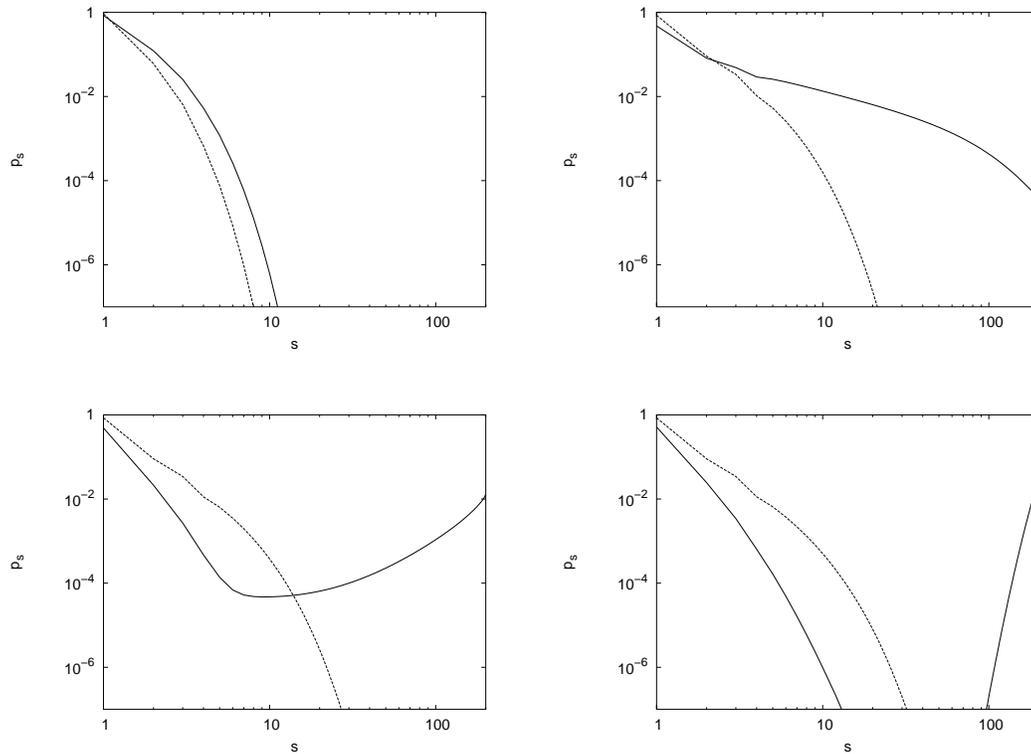


Abbildung 5.24: Die numerische Lösung der Mastergleichung (5.31) liefert die Wahrscheinlichkeiten p_s für die Clustergrößen s mit von links oben nach rechts unten fortschreitender Zeit. Die Anfangsverteilung ist dabei durch $p_1 = 1$ und $p_i = 0$ für $i > 1$ gegeben; der Fragmentierungsparameter ist $\xi = 2$.

Die durchgezogene Linie gilt für starke Dissipation ($\lambda = 4\beta_0^2/\alpha_0^2$), die gestrichelte Linie für schwache Dissipation ($\lambda = 0.25\beta_0^2/\alpha_0^2$).

5.3.3 Folgerungen

Mit Hilfe der bestimmten Clustergrößenverteilungen und Gleichung (5.12) lassen sich nun auch theoretische Werte für die Momente der Clustergrößen berechnen.

Für die Anfangsverteilung gemäß Gleichung (5.20) erhält man

$$M_1(\tau = 0) \approx 1 + \frac{1}{2} \begin{cases} \exp(-w) & (2\text{D}) \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-w) & (3\text{D}) \end{cases} \quad (5.44)$$

$$M_2(\tau = 0) \approx 1 + \frac{3}{2} \begin{cases} \exp(-w) & (2\text{D}) \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-w) & (3\text{D}) \end{cases} \quad (5.45)$$

für den Grenzfall $w \gg 1$ (also bei geringen Dichten) und $N \rightarrow \infty$. Im Fall $w \ll 1$ dagegen erhält man

$$M_k(0) \sim w^{\Theta-k-1} \sim \begin{cases} w^{-k} & (2\text{D}) \\ w^{1/2-k} & (3\text{D}) \end{cases} \quad (5.46)$$

für $k \geq 1$ und $N \rightarrow \infty$.

Zusammen mit Gleichung (5.19) kann man daher bei sehr kleinen Dichten $\nu \ll 1$ den Parameter w und damit die vollständige Größenverteilung berechnen:

$$w \approx - \begin{cases} \ln(8\nu \frac{\delta}{2a}) & (2\text{D}) \\ \ln(24\sqrt{2}\nu \frac{\delta}{2a}) & (3\text{D}) \end{cases} \quad (5.47)$$

Die gute Übereinstimmung mit dem numerischen Experiment zeigt Abb. 5.25. Am Perkulationspunkt, wenn sich der große Cluster entwickelt und die Größenverteilung (zumindest in 3D) durch Gleichung (5.22) beschrieben wird, erhält man:

$$M_1(\tau \approx \tau_p) \lesssim \begin{cases} 11.7 & (2\text{D}) \\ 3.7 & (3\text{D}) \end{cases} \quad (5.48)$$

$$M_2(\tau \approx \tau_p) \sim N^{3-\vartheta} \quad (5.49)$$

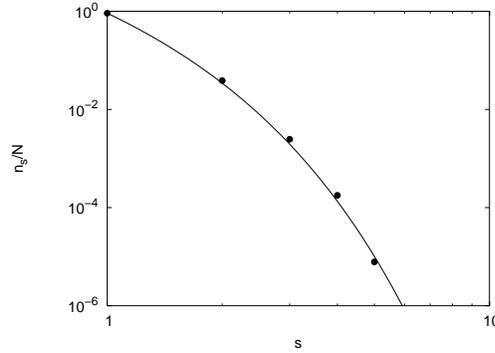


Abbildung 5.25: Clustergrößenverteilung bei geringer Dichte $\nu = 0.031$ bei Simulationsbeginn für ein dreidimensionales System mit $N = 5 \cdot 10^5$ Teilchen.

Die durchgezogene Linie ist die mit den Gleichungen (5.20) und (5.47) berechnete Kurve.

Am ersten Moment der Größenverteilung sieht man, dass der Perkulationspunkt in zwei Dimensionen wegen $\vartheta_{2D} < \vartheta_{3D}$ erst bei einer deutlich höheren mittleren Clustergröße auftritt. Deshalb beginnt sich der große Cluster in zwei Dimensionen erst zu entwickeln, wenn das allgemeine Clusterwachstum schon viel weiter fortgeschritten ist. Allerdings ist zu diesem Zeitpunkt dann auch die Zufallsverteilung verloren gegangen und die Vorhersagen der Perkulationstheorie inklusive der Verteilung (5.22) sind dann gar nicht mehr gültig.

Zu noch späteren Zeitpunkten, wenn sich schließlich ein großer Perkulationscluster entwickelt hat, werden die Momente im Wesentlichen durch den großen Cluster dominiert:

$$M_1(\tau \rightarrow \infty) \sim \frac{1}{1 - q_x} \quad (5.50)$$

$$M_2(\tau \rightarrow \infty) \sim \frac{q_x^2 N}{1 - q_x} . \quad (5.51)$$

Zusammen mit Gleichung (5.41) erhält man also für starke Dissipation

$$M_1(\tau \rightarrow \infty) \sim \lambda^{1/2} , \quad (5.52)$$

was in etwa das beobachtete Verhalten widerspiegelt, vgl. hierzu Abb. 5.26.

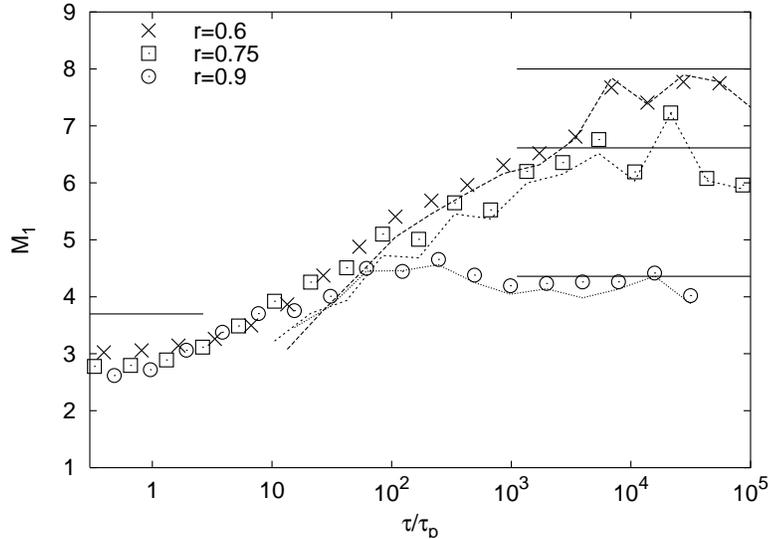


Abbildung 5.26: Vergleich der berechneten Werte für das 1. Moment der Clustergrößenverteilung mit den Simulationsergebnissen: Die durchgezogenen Linien sind Gleichung (5.48) und (5.52), die gestrichelten Linien sind Gleichung (5.50) und die Punkte sind die Simulationsergebnisse für verschiedene Restitutionskoeffizienten in einem dreidimensionalen System.

Die in diesem Kapitel abgeleiteten Werte für die Momente der Clustergrößenverteilung sind allerdings mit Vorsicht zu genießen, da ja die Verteilungen (5.20) und (5.22) eigentlich nicht für die ganz kleinen Cluster gelten, diese jedoch maßgeblich zu den Momenten beitragen.

5.3.4 Diskussion

Wir haben die Clustergrößenverteilung mit zwei verschiedenen Herangehensweisen untersucht. Zum einen haben wir die Perkolations-theorie benutzt, die universelle Aussagen über ungeordnete Systeme macht und daher insbesondere zur Beschreibung des Anfangszustands eines granularen Gases geeignet ist.

Zum anderen haben wir die Ratengleichungen für Clusterwachstum und -schrumpfung mit Hilfe einfacher Ansätze aufgestellt. Unter vereinfachenden

Annahmen können diese für den Fall eines quasistationären Populationsgleichgewichts analytisch gelöst werden. Damit ist diese Theorie insbesondere für die Endverteilung der Clustergrößen geeignet.

Einen Einblick in die Populationsdynamik kann man außerdem auch noch mit Hilfe einer numerischen Lösung der Mastergleichung gewinnen. Diese bestätigt qualitativ die beobachtete Clusterentwicklung.

Der ungeordnete Anfangszustand granularer Gase kann sehr gut mit Hilfe der Perkolations-theorie beschrieben werden. Wir erhalten für diesen Fall in der Clustergrößenverteilung ein Potenzgesetz mit universellem Exponenten, dem ein exponentieller Abfall überlagert ist. Die Stärke des exponentiellen Abfalls ist dabei von der Dichte abhängig. Bei geringer Dissipation verbleibt das System im homogenen Zustand und kann auch zu späteren Zeiten noch durch dieses oder ein ähnliches Gesetz mit modifiziertem Exponenten beschrieben werden.

Ausreichende Dissipation vorausgesetzt, kommt es jedoch früher oder später zur Bildung eines großen Clusters. Wenn dessen Wachstum einsetzt, ergeben sich – zumindest in drei Dimensionen – rein potenzverteilte Clustergrößen, wobei der Exponent mit den Vorhersagen der Perkolations-theorie übereinstimmt. In zwei Dimensionen vollzieht sich dieses Wachstum, wie wir in den vorhergehenden Kapiteln ja schon gesehen haben, erst zu einem recht späten Zeitpunkt, wenn die Strukturbildung schon recht weit fortgeschritten ist und die mittlere Clustergröße bereits deutlich angewachsen ist. In diesem Fall ist die Perkolations-theorie zur Beschreibung nicht mehr geeignet.

Die Endverteilung, die sich schließlich herausbildet, wird von unserer Populationsdynamik recht gut beschrieben. Es ergibt sich dabei nach wie vor ein Potenzgesetz in der Clustergrößenverteilung. Darüber hinaus erhält man einen großen Cluster, dessen Größe von der Dissipation abhängt und sich ebenfalls recht gut mit Hilfe dieser Populationsdynamik beschreiben lässt.

Die Unterschiede des Verhaltens in zwei und drei Dimensionen hängen mit den unterschiedlichen Exponenten in den Clustergrößenverteilungen zusammen. In der Anfangsverteilung ist bei gegebener Dichte der exponentielle Abfall viel stärker, vgl. hierzu Gleichung (5.47). Das heißt, in zwei Dimensionen sind zunächst nur sehr kleine Cluster vorhanden. Bis sich schließlich ein Perkolationscluster entwickeln kann, muss dagegen die mittlere Clustergröße in zwei Dimensionen viel weiter anwachsen als in drei Dimensionen, vgl. hierzu Gleichung

(5.48). Damit ist es nicht weiter überraschend, dass sich ein Perkolationscluster in zwei Dimensionen erst zu einem deutlich späteren Zeitpunkt entwickelt.

5.4 Zusammenfassung

Die Clusterbildung in einem granularen Gas wird von der Entwicklung der Temperatur und der Dichte bestimmt. Daher haben wir in diesem Kapitel zum einen den zeitlichen Verlauf der Temperatur, der Kollisionsfrequenz, der mittleren freien Weglänge und der Geschwindigkeitsverteilung untersucht. Zum anderen haben wir die Entwicklung der Dichteverteilung, der Paarverteilungsfunktion und der Clustergrößenverteilung studiert. Diese haben wir mit den Vorhersagen der kinetischen Gastheorie und einer Stabilitätsanalyse der hydrodynamischen Bewegungsgleichungen verglichen. Darüber hinaus haben wir die Perkolationstheorie auf den ungeordneten Anfangszustand angewandt und ein einfaches Modell für die Evolution der Clusterpopulationen entwickelt, für das wir sowohl numerische als auch analytische Ergebnisse erhalten. Die Untersuchungsergebnisse lassen sich am einfachsten zusammenfassen, indem man den Verlauf der Clusterbildung in drei Phasen einteilt:

Zunächst befindet sich das System im homogenen Zustand. Bei starker Dissipation bilden sich schon bei den allerersten Kollisionen einige kleine Cluster, die jedoch mit zunehmender Größe exponentiell seltener werden. Auf größerer Längenskala bleibt die Dichte zunächst jedoch homogen. Die Abkühlung folgt den Vorhersagen der kinetischen Theorie und ist durch $T(\tau) = T(0)/(1 + \tau)^2$ gegeben. Die Stärke der Dissipation beeinflusst dabei lediglich die Zeitskala τ . Bei sehr schwacher Dissipation $\lambda < \lambda_{cl}$ bleibt das System in diesem Zustand.

Ansonsten erfolgt ungefähr zu einem Zeitpunkt $t_{hc} \sim \lambda^{-2}$ der Übergang zum Clusterwachstum. Die Verteilung der Clustergrößen nähert sich einem Potenzgesetz an, die mittlere Clustergröße wächst kontinuierlich und die Dichteverteilung wird immer breiter. Die Abkühlung verlangsamt sich auf $T(t) \sim t^{-1}$, wobei sich nahezu unabhängig von der Dissipationsstärke alle Kurven demselben asymptotischen zeitlichen Verlauf annähern. Die Kollisionsfrequenz beginnt dabei immer mehr zu schwanken und nimmt ebenfalls langsamer ab als im homogenen Regime oder nimmt sogar zu. Während dieser Phase beginnt sich auch

ein großer Cluster herauszubilden. In drei Dimensionen geschieht dies zu einem Zeitpunkt der stark von der Dissipation abhängig ist: für starke Dissipation schon sehr früh, für geringe Dissipation erst spät. In zwei Dimensionen dagegen wächst der große Cluster unabhängig von der Stärke der Dissipation erst sehr spät heran. Die Unterschiede können dabei mit den verschiedenen Exponenten der Clustergrößenverteilungen, die die Perkolationsstheorie für 2D und 3D liefert, erklärt werden. Diese Phase hält an, bis der große Cluster Systemgröße erreicht hat.

Dies geschieht ungefähr zum Zeitpunkt $t_{cs} \sim l_{opt}^4$. Die Clustergrößen haben sich einer Gleichgewichtsverteilung angenähert, bei der es einen sehr großen Cluster und zahlreiche kleinere Cluster gibt, deren Verteilung einem Potenzgesetz folgt. Die Dichteverteilung reicht von sehr ausgedünnten Gebieten bis zu Gebieten mit sehr hoher Dichte. In 3D erreicht die höchste Dichte ungefähr ν_s , in 2D geht sie darüber hinaus bis zur maximalen Kristalldichte. Daher ist in 2D auch eine langreichweitige Ordnung der Teilchen zu erkennen, in 3D nicht. Überhaupt sind die Strukturen, die sich hierbei bilden in zwei Dimensionen viel klarer ausgeprägt als in drei. Der Temperaturverlauf $T(t) \sim t^{-2}$ folgt nun wieder der kinetischen Theorie; der Verlauf der Kollisionsfrequenz nähert sich ebenfalls langsam wieder $f_E(t) \sim t^{-1}$ an – wenn auch mit starken Fluktuationen. Die Dissipationsstärke hat asymptotisch betrachtet nur noch einen Einfluss auf die Größe des Perkolationsclusters; die Abkühlrate und die meisten übrigen Größen sind davon unabhängig.

6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir uns mit granularen Medien geringer Dichte, den so genannten granularen Gasen, beschäftigt. Diese dissipativen Systeme zeigen ein interessantes Verhalten mit komplexer Strukturbildung. In einem anfänglich homogenen System bilden sich mit der Zeit Dichte- und Temperaturinhomogenitäten, die immer weiter anwachsen, bis sie schließlich Systemgröße erreicht haben.

Im ersten Teil dieser Arbeit haben wir mit der Ereignisdynamik einen Algorithmus vorgestellt, mit dem sich granulare Gase effizient simulieren lassen, der aber grundsätzlich für eine breite Palette von physikalischen und nicht-physikalischen Problemen geeignet ist. Die Ereignisdynamik arbeitet die Kausalkette, die von den Teilchenwechselwirkungen – den Ereignissen – gebildet wird, schrittweise ab. Pro Rechenschritt wird dabei jeweils ein Ereignis ausgeführt und für die beteiligten Teilchen werden neue Ereignisse berechnet. Für Probleme, bei denen die typische Wechselwirkungsdauer zwischen Teilchen sehr viel kleiner als die typische Zeit zwischen den Wechselwirkungen ist, ist diese Methode wesentlich effizienter als gewöhnliche Molekulardynamik.

Die Ereignisdynamik ist ihrer Natur nach ein serieller Algorithmus. Die Probleme, die die Parallelisierung dieses Verfahrens verursacht, haben wir jedoch gelöst. Da sich Kausalitätsfehler bei der parallelisierten Ereignisdynamik nicht grundsätzlich vermeiden lassen, greifen wir auf eine optimistische Strategie zurück, die zunächst von einer korrekten Berechnung ausgeht und im Falle eines Kausalitätsfehlers den fehlerhaften Rechenabschnitt wiederholt.

Die Rechenzeit skaliert dabei mit der Anzahl \mathcal{P} der Prozesse gemäß $\mathcal{P}^{-1/2}$, der Speicherbedarf mit bis zu \mathcal{P}^{-1} . Die notwendige Kommunikation zwischen

den Prozessen wurde durch Überlapp der Randbereiche der Prozessgebiete minimiert. Um auch inhomogene Systeme effizient simulieren zu können, wurde der Algorithmus ferner mit einer dynamischen Lastverteilung versehen, die die Gebietszerlegung bei Bedarf anpasst.

Im zweiten Teil der Arbeit haben wir uns dann mit granularen Gasen beschäftigt. Ein einfaches Modell, das aber alle wesentlichen Eigenschaften eines granularen Gases zeigt, stellt das inelastische Harte-Kugel-Gas dar. Um den inelastischen Kollaps, ein Artefakt dieser Idealisierung, zu vermeiden, muss dessen Dynamik allerdings mit Hilfe des so genannten TC-Modells geringfügig modifiziert werden. Mit diesem wird der verminderten Dissipation von Mehrteilchenkollisionen Rechnung getragen.

Theoretische Untersuchungen des Harte-Kugel-Modells, die an die klassische kinetische Gastheorie angelehnt sind, können den homogenen Zustand eines granularen Gases ausgezeichnet beschreiben. Für den zeitlichen Temperaturverlauf erhält man beispielsweise $T(\tau) \sim (1 + \tau)^{-2}$.

Auch der Mechanismus, der der Bildung von Inhomogenitäten zu Grunde liegt, lässt sich mittels Stabilitätsanalyse der hydrodynamischen Bewegungsgleichungen verstehen. Diese liefert eine kritische Dissipationsstärke $\lambda_{\text{cl}} \sim l_{\text{opt}}^{-2}$ in Abhängigkeit von der Dichte ν und Systemgröße N , die sich in der optischen Tiefe $l_{\text{opt}} \sim \nu^{1-1/D} N^{1/D}$ zusammenfassen lassen. Der homogene Zustand ist nur für geringere Dissipation als λ_{cl} stabil. Um auch den inhomogenen Zustand, der sich ansonsten entwickelt, besser verstehen zu können, sind Computersimulationen nötig.

Diese ergeben einen dreistufigen Verlauf der Clusterbildung. Zunächst befindet sich das System im homogenen Zustand und lässt sich mit Hilfe der kinetischen Theorie beschreiben. Die Geschwindigkeit der zeitlichen Entwicklung ist dabei von der Dissipationsstärke λ abhängig.

Dann beginnt das Clusterwachstum. Die Abkühlung verlangsamt sich und die Stärke der Dissipation λ verliert an Einfluss: alle Kurven nähern sich derselben zeitlichen Entwicklung an. Dabei entwickelt sich auch ein großer Perkolationscluster, der einen makroskopischen Anteil der Teilchen enthält. Dessen zeitliche Entwicklung verläuft in zwei und drei Dimensionen jedoch unterschiedlich: In zwei Dimensionen vollzieht sie sich erst spät, in drei Dimensionen früh und relativ abrupt.

Schließlich erreicht der große Cluster Systemgröße; sein Massenanteil ist von der Dissipation λ abhängig. Die Verteilung der kleineren Cluster hat sich ebenfalls einem Gleichgewichtszustand angenähert und folgt einem Potenzgesetz. Das System ist jetzt stark inhomogen, aber der Verlauf der Abkühlung und der damit zusammenhängenden Größen verläuft im Wesentlichen wieder ähnlich wie im homogenen Zustand, jedoch mit stärkeren Fluktuationen und weitgehend unabhängig von der Stärke der Dissipation.

Die Verteilung der Clustergrößen lässt sich anfangs – wenn noch ein ungeordnetes System vorliegt – mit Hilfe der Perkolationsstheorie beschreiben. Diese sagt den beobachteten exponentiellen Abfall der Clustergrößen voraus. Mit dem Fortschreiten der Strukturbildung im granularen Gas verlieren die Aussagen der Perkolationsstheorie aber nach und nach an Gültigkeit. Weil sich ein großer Cluster in drei Dimensionen schon zu einem sehr frühen Zeitpunkt entwickelt, stimmt die für diesen Zeitpunkt vorhergesagte Potenzverteilung jedoch immer noch mit der beobachteten Clustergrößenverteilung in 3D überein. Darüber hinaus liefern die unterschiedlichen Exponenten, die die Perkolationsstheorie für 2D und 3D liefert, einen Erklärungsansatz für die beobachteten Unterschiede in zwei und drei Dimensionen.

Zur Untersuchung der späteren zeitliche Entwicklung der Clustergrößen haben wir ein einfaches Modell der Evolution der Clusterpopulationen entwickelt. Eine numerische Auswertung dieser Populationsdynamik ist mit den Simulationsergebnissen konsistent. Weiterhin liefert dieses Modell aber auch noch einige analytische Resultate für die Clustergrößenverteilungen und deren Momente sowie den maximalen Massenanteil des Perkolationsclusters. Diese stimmen trotz des einfachen Ansatzes und der benutzten Näherungen ebenfalls ausgezeichnet mit den Ergebnissen der Computersimulationen überein.

Weiter gehende Fragestellungen

Zum Schluss wollen wir noch einen kleinen Ausblick auf weiter gehende Fragestellungen geben: Diese Arbeit hat sich größtenteils mit granularen Gasen beschäftigt, bei denen die mittlere freie Weglänge der Teilchen in derselben Größenordnung wie die Teilchengröße liegt. Daher erscheint es uns am vielversprechendsten, für weitere Studien zu geringeren Dichten überzugehen und die entsprechenden Ergebnisse mit den in dieser Arbeit gewonnenen zu ver-

gleichen. Insbesondere wäre es interessant, systematisch zu untersuchen, ob die beobachteten Unterschiede zwischen zwei- und dreidimensionalen granularen Gasen auch bei sehr verdünnten Systemen erhalten bleiben.

Bei der Untersuchung von dünnen granularen Gasen ist es jedoch notwendig, sehr große Systeme zu simulieren, da ansonsten die optische Tiefe nicht ausreicht, um Clusterbildung zuzulassen. Die stetig wachsende Rechenleistung von Computern kombiniert mit den algorithmischen Werkzeugen, die wir im ersten Teil dieser Arbeit vorgestellt haben, machen solche großen Simulationen jedoch möglich.

Danksagungen

Meinem Doktorvater PD Dr. Stefan Luding danke ich für die ausgezeichnete Betreuung, die viel Freiraum für selbständiges wissenschaftliches Arbeiten ließ und immer durch ein gutes persönliches Verhältnis gekennzeichnet war.

Prof. Dr. Hans-Rainer Trebin danke ich für sein Interesse und die freundliche Übernahme des Mitberichts.

Ferner sei all meinen Kollegen am ICA1 für die angenehme Arbeitsatmosphäre gedankt und insbesondere Sean für hilfreiche Hinweise und Englischkorrekturen. Die Systemadministratoren haben ihren Job ordentlich gemacht. Und Marlies habe ich nicht nur für Reisekostenanträge gebraucht.

Die Kaffeerunde war immer für abseitige Diskussionen, bizarre Wetten und kurzweilige Mittagspausen gut.

Bei meinen Freunden bedanke ich mich für moralische Unterstützung, Rückhalt und Ablenkung. Außerdem entschuldige ich mich dafür, dass ich ihnen in den vergangenen Monaten so wenig Zeit gewidmet habe.

Ebenso bin ich meiner Familie für ihre Unterstützung dankbar.

Tanja, die immer für mich da war, danke ich für Sonnenschein.

Teil III

Anhänge

A Berechnungen zur kinetischen Theorie in \mathcal{D} Dimensionen

In diesem Kapitel sollen die Kollisionsfrequenz, der Spannungstensor und die Abnahme der granularen Temperatur allgemein für \mathcal{D} -dimensionale homogene Systeme hergeleitet werden (siehe dazu Kap. 4.2.2).

Einige Bezeichnungen vorneweg:

$\int d\mathbf{r}$ ist das \mathcal{D} -dimensionale Volumenintegral über das gesamte Volumen V . Es ist:

$$\int d\mathbf{r} = V \quad (\text{A.1})$$

$\int d\mathbf{v}$ ist das \mathcal{D} -dimensionale Volumenintegral über alle Geschwindigkeiten. Es ist:

$$\int d\mathbf{v} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2T}\right) = \left(\frac{2\pi T}{m}\right)^{\mathcal{D}/2} \quad (\text{A.2})$$

$\int d\hat{\mathbf{r}}$ und $\int d\hat{\mathbf{v}}$ bezeichnen das $(\mathcal{D} - 1)$ -dimensionale Oberflächenintegral über die \mathcal{D} -dimensionale Kugel, die vom Einheitsvektor $\hat{\mathbf{r}}$ bzw. $\hat{\mathbf{v}}$ aufgespannt wird. Es ist:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} = \frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \mathcal{D} \quad (\text{A.3})$$

$\int_{\hat{\rho} \perp \hat{\mathbf{r}}} d\hat{\rho}$ bezeichnet das $(\mathcal{D} - 2)$ -dimensionale Oberflächenintegral über die $(\mathcal{D} - 1)$ -dimensionale Kugel, die vom Einheitsvektor $\hat{\rho}$ senkrecht zu $\hat{\mathbf{r}}$ aufgespannt wird. Es ist:

$$\int_{\hat{\rho} \perp \hat{\mathbf{r}}} d\hat{\rho} = \frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{((\mathcal{D}-1)/2)!} (\mathcal{D} - 1) \quad (\text{A.4})$$

Ferner werden einige der bereits in Kap. 4.2 eingeführten Größen benötigt, nämlich der Liouville-Operator

$$i\mathcal{L}^+ = i\mathcal{L}_0^+ + i\mathcal{L}_{\text{int}}^+ \quad (\text{A.5})$$

$$= \sum_j \mathbf{v}_j \cdot \nabla_j + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \mathcal{C}_{jk}^+ \quad (\text{A.6})$$

$$= \sum_j \mathbf{v}_j \cdot \nabla_j + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} |\mathbf{v}_{jk} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{jk}| \Theta(-\mathbf{v}_{jk} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{jk}) \delta(r_{jk} - 2a) (b_{jk}^+ - 1), \quad (\text{A.7})$$

die Phasenraumdichte des Harte-Kugel-Gases im homogenen Zustand

$$\varrho = \frac{W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\int \prod_j d\mathbf{r}_j W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} \left(\frac{m}{2\pi T(t)} \right)^{\mathcal{D}N/2} \exp \left(- \sum_j \frac{m\mathbf{v}_j^2}{2T(t)} \right), \quad (\text{A.8})$$

die Paarverteilungsfunktion

$$g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{V^2}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{A.9})$$

$$= \frac{V^2}{N^2} \sum_{i \neq j} \int d\Gamma \varrho \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_2) \quad (\text{A.10})$$

$$= \frac{V^2}{N^2} \sum_{i \neq j} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \frac{W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\int \prod_k d\mathbf{r}_k W} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_2) \quad (\text{A.11})$$

und der Volumenanteil

$$\nu = \frac{Na^{\mathcal{D}}}{V} \frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!}. \quad (\text{A.12})$$

A.1 Kollisionsfrequenz

Die Kollisionsfrequenz ist:

$$f_E = \frac{2}{N} \langle i \mathcal{L}_{\text{int}}^+ \mathfrak{C} \rangle \quad (\text{A.13})$$

$$= \frac{2}{N} \int d\Gamma \varrho \frac{1}{2} \sum_{j \neq k}^N \mathcal{C}_{jk}^+ \mathfrak{C} \quad (\text{A.14})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j \neq k}^N \int \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i d\mathbf{v}_i \varrho \mathcal{C}_{jk}^+ \mathfrak{C} \quad (\text{A.15})$$

Mit $\int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_k) = 1$:

$$f_E = \frac{1}{N} \sum_{j \neq k}^N \int \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i d\mathbf{v}_i d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_k) \varrho \mathcal{C}_{jk}^+ \mathfrak{C} \quad (\text{A.16})$$

ϱ eingesetzt (Gl. A.8):

$$f_E = \frac{1}{N} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}N/2} \sum_{j \neq k}^N \int \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i d\mathbf{v}_i d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_k) \\ \times \frac{W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{(\int \prod_i d\mathbf{r}_i W)} \exp \left(- \sum_{l=1}^N \frac{m\mathbf{v}_l^2}{2T} \right) \mathcal{C}_{jk}^+ \mathfrak{C} \quad (\text{A.17})$$

Mit der Definition von $g(\mathbf{r})$ (Gl. A.11) und Integration über $d\mathbf{v}_3 \dots d\mathbf{v}_N$:

$$f_E = \frac{N}{V^2} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 g(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \exp \left(- \frac{m(\mathbf{v}_1^2 + \mathbf{v}_2^2)}{2T} \right) \\ \times \mathcal{C}_{12}^+ \mathfrak{C} \quad (\text{A.18})$$

\mathcal{C}_{12}^+ eingesetzt (Gl. A.7):

$$f_E = \frac{N}{V^2} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 g(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \exp \left(- \frac{m(\mathbf{v}_1^2 + \mathbf{v}_2^2)}{2T} \right) \\ \times |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}| \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \delta(r_{12} - 2a) (b_{12}^+ - 1) \mathfrak{C} \quad (\text{A.19})$$

Mit $(b_{12}^+ - 1)\mathfrak{C} = 1$ und den Substitutionen $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2$, $\mathbf{r} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$, $\sqrt{2}\mathbf{V} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$, $\sqrt{2}\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$:

$$f_E = \frac{N}{V^2} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}} \int d\mathbf{V} d\mathbf{v} d\mathbf{R} d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v}^2 + \mathbf{V}^2)}{2T}\right) \times \left| \sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}} \right| \Theta\left(-\sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}\right) \delta(r - 2a) \quad (\text{A.20})$$

Mit $d\mathbf{r} = r^{\mathcal{D}-1} dr d\hat{\mathbf{r}}$ und Integration über $d\mathbf{R}$ und $d\mathbf{V}$:

$$f_E = \frac{N}{V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} \int dr r^{\mathcal{D}-1} g(r) \delta(r - 2a) \int d\hat{\mathbf{r}} \times \int d\mathbf{v} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2T}\right) \left| \sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}} \right| \Theta\left(-\sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}\right) \quad (\text{A.21})$$

Mit $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{v}}$ und $d\mathbf{v} = v^{\mathcal{D}-1} dv d\hat{\mathbf{v}}$ und Integration über dr :

$$f_E = \frac{N}{V} g(2a) \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} (2a)^{\mathcal{D}-1} \sqrt{2} \times \int dv v^{\mathcal{D}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2T}\right) \int d\hat{\mathbf{r}} d\hat{\mathbf{v}} |\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{r}}| \Theta(-\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{A.22})$$

Mit $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}} \cos \vartheta + \hat{\varrho} \sin \vartheta$ und $d\hat{\mathbf{v}} = (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} d\vartheta d\hat{\varrho}$ und Integration über dv :

$$f_E = \frac{N}{V} g(2a) \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} (2a)^{\mathcal{D}-1} \sqrt{2} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{2T}{m} \right)^{(\mathcal{D}+1)/2} \left(\frac{\mathcal{D}-1}{2} \right)! \right) \times \int_0^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} |\cos \vartheta| \Theta(-\cos \vartheta) \int d\hat{\mathbf{r}} \int_{\hat{\varrho} \perp \hat{\mathbf{r}}} d\hat{\varrho} \quad (\text{A.23})$$

Integration über $d\hat{\mathbf{r}}$ und $d\hat{\varrho}$:

$$f_E = \frac{N}{V} g(2a) \sqrt{\frac{T}{m}} \pi^{-\mathcal{D}/2} (2a)^{\mathcal{D}-1} \left(\frac{\mathcal{D}-1}{2} \right)! \left(\frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \mathcal{D} \right) \times \left(\frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{(\frac{\mathcal{D}-1}{2})!} (\mathcal{D}-1) \right) \int_{\pi/2}^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} (-\cos \vartheta) \quad (\text{A.24})$$

Kürzen und Integration über $d\vartheta$:

$$f_E = \frac{N}{V} g(2a) \sqrt{\frac{T}{m}} (2a)^{\mathcal{D}-1} \frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \mathcal{D}(\mathcal{D}-1) \left(\frac{1}{\mathcal{D}-1} \right) \quad (\text{A.25})$$

Mit der Definition von ν (Gl. A.12):

$$f_E = g(2a) \sqrt{\frac{T}{m}} \nu \frac{1}{\sqrt{\pi a}} 2^{\mathcal{D}-1} \mathcal{D} \quad (\text{A.26})$$

A.2 Spannungstensor

Der Spannungstensor ist:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\frac{1}{V} \left\langle \left(i\mathcal{L}_0^+ + i\mathcal{L}_{\text{int}}^+ \right) \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j \otimes \mathbf{r}_j \right\rangle \quad (\text{A.27})$$

$$= -\frac{1}{V} \sum_{j=1}^N \int d\Gamma \varrho \left(\mathbf{v}_j \cdot \nabla_j + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l}^N \mathcal{C}_{kl}^+ \right) m \mathbf{v}_j \otimes \mathbf{r}_j \quad (\text{A.28})$$

$$= -\frac{m}{V} \sum_{j=1}^N \int d\Gamma \varrho \mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j + \frac{m}{2V} \sum_{j=1}^N \sum_{k \neq l}^N \int d\Gamma \varrho \mathcal{C}_{kl}^+ \mathbf{v}_j \otimes \mathbf{r}_j \quad (\text{A.29})$$

1. Term über $d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$ integriert; im 2. Term Integrationen und Substitutionen wie in Gln. (A.16) bis (A.20):

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} &= -\frac{m}{V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}N/2} \sum_{j=1}^N \int \prod_{k=1}^N d\mathbf{v}_k \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}_k^2}{2T} \right) \mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j \\ &\quad - \frac{N^2 m}{V^3} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}} \int d\mathbf{V} d\mathbf{v} d\mathbf{R} d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \exp \left(-\frac{m(\mathbf{v}^2 + \mathbf{V}^2)}{2T} \right) \\ &\quad \times \left| \sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}} \right| \Theta \left(-\sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}} \right) \delta(r - 2a)(b^+ - 1) \sqrt{2}\mathbf{v} \otimes \mathbf{r} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

1. Term über $\mathcal{D}N - 1$ Geschwindigkeitskomponenten integriert; 2. Term über $d\mathbf{R}$ und $d\mathbf{V}$ integriert, $(b^+ - 1)v = -\frac{1+\epsilon}{2}v$ eingesetzt:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} &= -\frac{Nm}{V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \int dv \exp \left(-\frac{mv^2}{2T} \right) v^2 \underline{\underline{1}} \\ &\quad + \frac{N^2 m}{V^2} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} \int d\mathbf{v} d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2T} \right) \\ &\quad \times |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}| \Theta(-\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \delta(r - 2a)(1 + \epsilon) \mathbf{v} \otimes \mathbf{r} \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

1. Term über dv integriert; in 2. Term $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$, $\mathbf{v} = v(\hat{\mathbf{r}} \cos \vartheta + \hat{\boldsymbol{\rho}} \sin \vartheta)$, $d\mathbf{r} = r^{\mathcal{D}-1} dr d\hat{\mathbf{r}}$ und $d\mathbf{v} = v^{\mathcal{D}-1} dv d\hat{\boldsymbol{\rho}} (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} d\vartheta$ eingesetzt und $\mathbf{r} \otimes \mathbf{v}$ aus Symmetriegründen durch $\mathbf{r} \cdot \mathbf{v} \frac{1}{\mathcal{D}} \underline{\underline{1}}$ ersetzt:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} &= -\frac{Nm}{V} \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{1/2} \left(\frac{2T}{m}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \underline{\underline{1}} \\ &+ \frac{N^2 m}{V^2} \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{\mathcal{D}/2} (1+\epsilon) \frac{1}{\mathcal{D}} \int dr r^{\mathcal{D}-1} g(r) \delta(r-2a) r \\ &\times \int dv v^{\mathcal{D}-1} \exp\left(-\frac{mv^2}{2T}\right) v^2 \int d\hat{\mathbf{r}} \int_{\hat{\boldsymbol{\rho}} \perp \hat{\mathbf{r}}} d\hat{\boldsymbol{\rho}} \\ &\times \int_0^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} |\cos \vartheta| (\cos \vartheta) \Theta(-\cos \vartheta) \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

1. Term gekürzt; 2. Term über dr , dv , $d\hat{\mathbf{r}}$ und $d\hat{\boldsymbol{\rho}}$ integriert:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} &= -\frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} \\ &- \frac{N^2 m}{V^2} \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{\mathcal{D}/2} \underline{\underline{1}} (1+\epsilon) \frac{1}{\mathcal{D}} (2a)^\mathcal{D} g(2a) \left(\left(\frac{2T}{m}\right)^{(\mathcal{D}+2)/2} \frac{(\mathcal{D}/2)!}{2} \right) \\ &\times \left(\frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \mathcal{D} \right) \left(\frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{(\frac{\mathcal{D}-1}{2})!} (\mathcal{D}-1) \right) \int_{\pi/2}^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} \cos^2 \vartheta \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Kürzen und Integration über $d\vartheta$:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} &= -\frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} \\ &- \frac{N^2 T}{V^2} \underline{\underline{1}} (1+\epsilon) (2a)^\mathcal{D} g(2a) \frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{(\frac{\mathcal{D}-1}{2})!} (\mathcal{D}-1) \left(\frac{\sqrt{\pi} (\frac{\mathcal{D}-3}{2})!}{4(\mathcal{D}/2)!} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

$$= -\frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} \left(1 + \frac{N}{4V} (1+\epsilon) (2a)^\mathcal{D} g(2a) \frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \right) \quad (\text{A.35})$$

Mit der Definition von ν (Gl. A.12):

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\frac{NT}{V} \underline{\underline{1}} [1 + (1+\epsilon) 2^{\mathcal{D}-2} \nu g(2a)] \quad (\text{A.36})$$

A.3 Granulare Temperatur

Die Abnahme der Temperatur ist:

$$\frac{d}{dt}T = \langle i\mathcal{L}_{\text{int}}^+ T \rangle \quad (\text{A.37})$$

$$= \frac{2}{\mathcal{D}} \langle i\mathcal{L}_{\text{int}}^+ E \rangle \quad (\text{A.38})$$

$$= \frac{1}{\mathcal{D}} \sum_{j \neq k} \int d\Gamma \varrho \mathcal{C}_{jk} E \quad (\text{A.39})$$

Analog zu (Gl. A.16) bis (Gl. A.20) vorgehen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}T &= \frac{N^2}{\mathcal{D}V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} \int d\mathbf{v} d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{m\mathbf{v}^2}{2T} \right) |\sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}| \\ &\quad \times \delta(r - 2a) \Theta(-\sqrt{2}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}) (b^+ - 1) \frac{1}{N} m \mathbf{v}^2 \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Mit $(b^+ - 1)\mathbf{v}^2 = -\frac{\lambda}{2}(\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2$, $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$ und $\mathbf{v} = v(\hat{\mathbf{r}} \cos \vartheta + \hat{\varrho} \sin \vartheta)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}T &= -\frac{\lambda N m}{\sqrt{2}\mathcal{D}V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} \int dv v^{\mathcal{D}+2} \exp\left(\frac{mv^2}{2T} \right) \\ &\quad \times \int dr r^{\mathcal{D}-1} g(r) \delta(r - 2a) \int d\hat{\mathbf{r}} \int_{\hat{\varrho} \perp \hat{\mathbf{r}}} d\hat{\varrho} \\ &\quad \times \int_0^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} |\cos \vartheta| \Theta(-\cos \vartheta) \cos^2 \vartheta \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Integration über dr , dv , $d\hat{\mathbf{r}}$ und $d\hat{\varrho}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}T &= -\frac{\lambda N m}{\sqrt{2}\mathcal{D}V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\mathcal{D}/2} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{2T}{m} \right)^{(\mathcal{D}+3)/2} \left(\frac{\mathcal{D}+1}{2} \right)! \right) \\ &\quad \times (2a)^{\mathcal{D}-1} g(2a) \left(\frac{\pi^{\mathcal{D}/2}}{(\mathcal{D}/2)!} \mathcal{D} \right) \left(\frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{(\frac{\mathcal{D}-1}{2})!} (\mathcal{D}-1) \right) \\ &\quad \times \int_{\pi/2}^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^{\mathcal{D}-2} (-\cos^3 \vartheta) \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Kürzen und Integration über $d\vartheta$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}T &= -\frac{\lambda Nm}{2V} \left(\frac{T}{m}\right)^{3/2} (2a)^{\mathcal{D}-1} g(2a) \frac{\pi^{(\mathcal{D}-1)/2}}{(\mathcal{D}/2)!} (\mathcal{D}+1)(\mathcal{D}-1) \\ &\quad \times \frac{2}{(\mathcal{D}+1)(\mathcal{D}-1)} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Mit der Definition von ν (Gl. A.12):

$$\frac{d}{dt}T = -\frac{\lambda}{\sqrt{\pi m a}} T^{3/2} 2^{\mathcal{D}-1} g(2a) \nu \quad (\text{A.44})$$

$f_E(0)$ eingesetzt (Gl. A.26):

$$\frac{d}{dt}T = -\frac{\lambda f_E(0)}{\mathcal{D} \sqrt{T(0)}} T^{3/2} \quad (\text{A.45})$$

B Stabilitätsanalyse des homogenen Zustands

Betrachten wir die hydrodynamischen Gleichungen für ein granulares Fluid in \mathcal{D} Dimensionen. Es gilt [87]

$$\text{Massenerhaltung:} \quad \frac{D}{Dt} \nu = -\nu \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (\text{B.1})$$

$$\text{Impulserhaltung:} \quad \nu \frac{D}{Dt} \mathbf{v} = \frac{V_{\text{part}}}{m} \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (\text{B.2})$$

$$\text{Energieerhaltung:} \quad \frac{\mathcal{D}}{2} \nu \frac{D}{Dt} T = -\nabla \cdot \mathbf{Q} + V_{\text{part}} \text{spur}(\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{W}}) - \eta \quad (\text{B.3})$$

Dabei ist $\frac{D}{Dt}$ die materielle Zeit-Ableitung

$$\frac{D}{Dt} = \frac{d}{dt} + \mathbf{v} \cdot \nabla, \quad (\text{B.4})$$

$\underline{\underline{W}}$ der symmetrische Geschwindigkeitsgradienten-Tensor

$$\underline{\underline{W}} = \frac{1}{2}(\nabla \otimes \mathbf{v}) + \frac{1}{2}(\nabla \otimes \mathbf{v})^T, \quad (\text{B.5})$$

V_{part} das Teilchenvolumen und m die Teilchenmasse.

Der Spannungstensor $\underline{\underline{\sigma}}$ ist durch

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P \underline{\underline{1}} + 2\mu \left(\underline{\underline{W}} - \frac{1}{\mathcal{D}} \text{spur} \underline{\underline{W}} \right) - \zeta \nabla \cdot \mathbf{v} \underline{\underline{1}} \quad (\text{B.6})$$

und der Wärmefluss \mathbf{Q} durch

$$\mathbf{Q} = -\kappa \nabla T \quad (\text{B.7})$$

gegeben.

Den homogenen Druck P haben wir bereits in (Gl. 4.45) hergeleitet, die Abkühlrate η in (Gl. A.44). Die übrigen Materialgesetze kann man durch Betrachtungen der mittleren freien Weglänge ableiten. Für den Grenzfall kleiner Dichten¹ und geringer Dissipation erhält man die Materialgesetze [105–107]:

$$\text{Druck:} \quad P = \frac{\nu T}{V_{\text{part}}} \quad (\text{B.8})$$

$$\text{Abkühlrate:} \quad \eta = \eta_0 \lambda \nu^2 T^{3/2} = \frac{\mathcal{D} 2^{\mathcal{D}-2}}{\sqrt{\pi m a}} \lambda \nu^2 T^{3/2} \quad (\text{B.9})$$

$$\text{Temperaturleitwert:} \quad \kappa = \kappa_0 T^{1/2} = \frac{(\mathcal{D} + 2)^2 \sqrt{\pi a}}{(\mathcal{D} - 1) 2^{\mathcal{D}+2} \sqrt{m}} T^{1/2} \quad (\text{B.10})$$

$$\text{Scherviskosität:} \quad \mu = \mu_0 \frac{m}{V_{\text{part}}} T^{1/2} = \frac{(\mathcal{D} + 2) \sqrt{\pi a}}{\mathcal{D} 2^{\mathcal{D}+1} \sqrt{m}} \frac{m}{V_{\text{part}}} T^{1/2} \quad (\text{B.11})$$

$$\text{Volumenviskosität:} \quad \zeta = \zeta_0 \frac{m}{V_{\text{part}}} \nu^2 T^{1/2} \ll \mu \quad (\text{B.12})$$

Die homogene Lösung für die Differentialgleichungen (B.1) bis (B.3) lautet:

$$\nu(\mathbf{r}, t) = \nu_h \quad (\text{B.13})$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0} \quad (\text{B.14})$$

$$T(\mathbf{r}, t) = T_h(t) = T_h(0)(1 + t/t_{\text{hom}})^{-2} \quad (\text{B.15})$$

Betrachten wir nun eine kleine räumliche Fluktuation $h \ll 1$ dieser homogenen Lösung der Form

$$\nu = \nu_h (1 - h \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \quad \nabla \nu = \nu_h h \mathbf{k} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{B.16})$$

$$T = T_h (1 + h \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \quad \nabla T = -T_h h \mathbf{k} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (\text{B.17})$$

die in erster Näherung zu keinen Druckschwankungen führt ($P = P_h + \mathcal{O}(h^2)$).

¹Die Korrekturterme für größere Dichten liegen in der Größenordnung von $(1 + \nu)$, betragen also nur einige Prozent. Siehe dazu auch [87, 104].

In (B.3) eingesetzt erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}}{2}\nu_h(1-h\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))\frac{D}{Dt}T_h(1+h\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})) &= -\kappa_0 h k^2 \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) T_h^{3/2} \\ &\quad -\eta_0 \lambda \nu_h^2 (1-2h\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})) \\ &\quad \times T_h^{3/2} \left(1 + \frac{3}{2}h\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right) \\ &\quad + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Mit der homogenen Gleichung $\frac{D}{2}\nu_h\frac{D}{Dt}T_h = -\eta_0\lambda\nu_h^2T_h^{3/2}$ erhalt man also:

$$\frac{D}{2}\nu_h T_h \frac{d}{dt}h = -\kappa_0 h k^2 T_h^{3/2} + \frac{1}{2}\eta_0 \lambda \nu_h^2 h T_h^{3/2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (\text{B.19})$$

Die Fluktuationen h wachsen an, wenn

$$\frac{d}{dt}h > 0 \quad (\text{B.20})$$

gilt, also:

$$-\kappa_0 k^2 + \frac{1}{2}\eta_0 \lambda \nu_h^2 > 0 \quad (\text{B.21})$$

Die grotmogliche Wellenlange $2\pi/k = L$ angenommen:

$$\lambda > \frac{2\kappa_0}{\eta_0} \left(\frac{2\pi}{\nu_h L} \right)^2 \quad (\text{B.22})$$

η_0 (Gl. B.9) und κ_0 (Gl. B.10) eingesetzt:

$$\lambda > \frac{(\mathcal{D}+2)^2 \pi^3}{\mathcal{D}(\mathcal{D}-1)2^{2\mathcal{D}-1}} \left(\frac{2a}{\nu_h L} \right)^2 \quad (\text{B.23})$$

Mit Hilfe der optischen Tiefe l_{opt} ausgedruckt:

$$\lambda > \frac{(\mathcal{D}+2)^2}{\mathcal{D}(\mathcal{D}-1)2^{2\mathcal{D}-1}} \frac{\pi^3}{l_{\text{opt}}^2} \quad (\text{B.24})$$

Die Abschatzung der kritischen Dissipation fur die Clusterbildung liefert somit

$$\lambda_{\text{cl}} \approx \begin{cases} \frac{\pi^3}{l_{\text{opt}}^2} & (2\text{D}) \\ \frac{25\pi^3}{192l_{\text{opt}}^2} & (3\text{D}) . \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

Für eine genauere Analyse, die auch für größere Dichten noch gültig ist, siehe in 2D auch [87].

Analog zu dieser Stabilitätsanalyse für Dichte- und Temperaturschwankungen lässt sich auch die Stabilität anderer Moden untersuchen und man stellt fest, dass eine Schermode bereits bei etwas geringerer Dissipation $\lambda_{\text{sh}} < \lambda_{\text{cl}}$ instabil wird [87]:

$$\lambda_{\text{sh}} \approx \frac{2\mu_0}{\eta_0} \left(\frac{2\pi}{\nu_h L} \right)^2 \quad (\text{B.26})$$

$$= \frac{\mathcal{D} + 2}{\mathcal{D}^2} \frac{\pi^3}{2^{2\mathcal{D}-2} l_{\text{opt}}^2} \quad (\text{B.27})$$

$$= \begin{cases} \frac{\pi^3}{4l_{\text{opt}}^2} & (2\text{D}) \\ \frac{5\pi^3}{144l_{\text{opt}}^2} & (3\text{D}) \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

Diese führt zu Scherströmungen, aber nicht zu Dichte- und Temperaturschwankungen.

Symbolverzeichnis

Mathematische Symbole

Vektoren $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{v}}$ kennzeichnen wir durch Fettdruck; dabei bezeichnet v den Betrag und der Einheitsvektor $\hat{\mathbf{v}}$ die Richtung.

Die Abkürzung $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ wird oft für den Differenzvektor verwendet.

Für das Skalarprodukt benutzen wir das Symbol \cdot , für das Kreuzprodukt \times und für das dyadische Produkt \otimes .

Tensoren 2. Stufe $\underline{\underline{\mathbb{T}}}$ werden durch doppelte Unterstreichung gekennzeichnet.

$\underline{\underline{\mathbb{1}}}$ bezeichnet die Einheitsmatrix.

Für das Produkt eines Tensors mit einem Vektor oder einem anderen Tensor benutzen wir ebenfalls das Symbol \cdot .

Operatoren O^+ sind am hochgestellten Kreuz erkennbar.

Wenn das Symbol i nicht als Index auftritt, bezeichnet es die imaginäre Einheit $i = \sqrt{-1}$.

$\langle \dots \rangle$ kennzeichnet gemittelte Werte – soweit sich aus dem Kontext nichts Abweichendes ergibt, handelt es sich dabei um Ensemble-Mittelwerte.

$\delta(x)$ ist die diracsche Deltafunktion, $\Theta(x)$ die heavisidesche Sprungfunktion und $x! = \Gamma(1+x)$ die mit Hilfe der Gammafunktion verallgemeinerte Fakultät.

$\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ ist der Nabla-Operator.

Das Phasenraumintegral $\int d\Gamma$ ist eine abkürzende Schreibweise für $\int d\Gamma = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \dots d\mathbf{v}_N$.

Physikalische Symbole

a	: Teilchenradius
α	: Clusterwachstumsrate (Gl. 5.29)
b^+	: Kollisionsoperator (Gl. 4.18)
β	: Clusterzerfallsrate (Gl. 5.30)
C	: Zellenanzahl
\mathcal{C}^+	: Wechselwirkungsoperator (Gl. 4.18))
\mathfrak{C}	: Gesamtzahl der Kollisionen (Gl. 4.31))
\mathcal{D}	: Dimension
δ	: Clusterdefinitionslänge (Gl. 5.11)
ϵ	: normaler Restitutionskoeffizient (Gln. 2.7, 4.1)
η	: Abkühlrate (Gl. B.9)
f_E	: Kollisionsfrequenz (Gl. 4.34)
φ	: tangentialer Restitutionskoeffizient (Gl. 2.7)
g	: Paarverteilungsfunktion (Gl. 4.35)
\mathbf{g}	: Gravitation (Gl. 2.2)
Γ	: Phasenraum (Gl. 4.21)
\mathcal{H}	: Hamiltonfunktion (Gl. 4.13)
I	: Teilchen-Trägheitsmoment
$\hat{\mathbf{k}}$: Stoßrichtung (Gl. 2.7)
κ	: Wärmeleitwert (Gl. B.10)
l_E	: mittlere freie Weglänge (Gl. 4.38)
l_{opt}	: optische Tiefe (Gl. 4.9)
L	: Kantenlänge des Simulationsraums
\mathcal{L}^+	: (Pseudo-)Liouville-Operator (Gl. 4.13)
λ	: Dissipation (Gl. 4.7)
m	: Teilchenmasse
M_k	: k -tes Moment der Clustergrößenverteilung (Gl. 5.12)
μ	: Viskosität (Gl. B.11)
n	: Clusteranzahl
N	: Teilchenanzahl
ν	: Volumenanteil (Gl. 4.3)
$\boldsymbol{\omega}$: Winkelgeschwindigkeit (Gl. 2.7)
p	: Wahrscheinlichkeit
\mathbf{p}	: Teilchenimpuls

P	: Druck (Gl. 4.45)
\mathcal{P}	: Anzahl der Prozesse
\mathfrak{P}	: reduzierter Druck (Gl. 4.63)
q_x	: Massenanteil des Perkolationsclusters (Gl. 5.13)
\mathbf{Q}	: Wärmefluss (Gl. B.7)
\mathbf{r}	: Teilchenposition
ϱ	: Phasenraumdicke (Gl. 4.26)
$\underline{\underline{\sigma}}$: Spannungstensor (Gl. 4.40)
t	: Zeit
T	: granulare Temperatur (Gl. 4.13)
τ	: skalierte, dimensionslose Zeit (Gl. 4.56)
ϑ, Θ	: Parameter der Perkolationsstheorie (Gln. 5.21, 5.23)
u_a	: Teilchen-Wachstumsrate (Gl. 2.16)
\mathbf{v}	: Geschwindigkeit
V	: Volumen
\mathcal{V}	: Wechselwirkungspotential (Gl. 2.5)
$\underline{\underline{W}}$: symmetrischer Geschwindigkeitsgradient (Gl. B.5)
ξ	: Fragmentierungsparameter (Gl. 5.30)
z	: Massenverteilung (Gl. 2.7)
ζ	: Volumenviskosität (Gl. B.12)

Abbildungsverzeichnis

1.1	Beispiel für Clusterbildung in 2D	5
2.1	Skizze der grundlegenden Ereignisdynamik-Routine	11
2.2	Wichtigste Datenstrukturen	13
2.3	Rechenzeit über Zellenanzahl	15
2.4	Kollision weicher Kugeln	19
2.5	Kugel-Faden-Modell	21
2.6	Rechenzeit über Teilchenanzahl	27
3.1	Zellnummerierung	32
3.2	Kausale Ordnung	35
3.3	Skizze des parallelen Algorithmus	38
3.4	Randzone	40
3.5	Parallele Rechenleistung ($N = \text{const.}$, homogen)	44
3.6	Parallele Rechenleistung ($N/\mathcal{P} = \text{const.}$, inhomogen)	45
3.7	Speicherbedarf	46
4.1	Abkühlung beim homogenen Zustand	67
4.2	Zustandsgleichung	69
4.3	Reduzierter Druck in Abhängigkeit von der Wachstumsrate	72
4.4	Clusterbildung in 3D	73

5.1	Schnappschüsse vom Clusterwachstum in 2D	78
5.2	Energie über skalierte Zeit	80
5.3	Energie über unskalierte Zeit	80
5.4	Kollisionsfrequenz über skalierte Zeit	83
5.5	Kollisionsfrequenz über unskalierte Zeit	83
5.6	Mittlere freie Weglänge über skalierte Zeit	84
5.7	Geschwindigkeitsverteilung	85
5.8	Momentaufnahme der Teilchengeschwindigkeiten in 2D	86
5.9	Momentaufnahme der Dichteveriationen in 3D	89
5.10	Dichteverteilung	90
5.11	Teilchenkonfiguration in 2D-Cluster	91
5.12	Dichteverteilung über Zeit	92
5.13	Paarverteilungsfunktion	93
5.14	Momente der Clustergrößenverteilung	96
5.15	Skalierung für τ_p	98
5.16	Zeitlich reskalierte Momente in 3D	99
5.17	Einfluss von N auf die Clustergrößen	100
5.18	Einfluss von ν auf die Clustergrößen	101
5.19	Clustergrößenverteilung bei Simulationsbeginn	104
5.20	Clustergrößenverteilung am Perkulationspunkt	105
5.21	Clustergrößenverteilung bei Simulationsende	106
5.22	Maximale Clustergröße	110
5.23	Clustergrößenverteilung bei geringer Dissipation	111
5.24	Numerische Lösung der Mastergleichung	112
5.25	Clustergrößenverteilung bei geringer Dichte	114
5.26	Vergleich des 1. Moments mit den berechneten Werten	115

Literaturverzeichnis

- [1] Boris D. Lubachevsky. How to simulate billiards and similar systems. *J. Comput. Phys.*, 94:255–283, 1991.
- [2] Boris D. Lubachevsky. Simulating billiards: Serially and in parallel. *Int. J. Comput. Simul.*, 2:372–411, 1992.
- [3] S. Luding and H. J. Herrmann. Cluster growth in freely cooling granular media. *Chaos*, 9(3):673–681, 1999.
- [4] S. Luding. From microscopic simulations to macroscopic material behavior. *Computer Physics Communications*, 147:134–140, 2002.
- [5] Stefan Miller and Stefan Luding. Cluster growth in two- and three-dimensional granular gases. *cond-mat/0304637*, 2003.
- [6] M. Mareschal and E. Kestemont. Measurements of long-range correlations by nonequilibrium molecular dynamics. *Phys. Rev. A*, 30:1158, 1984.
- [7] M. Mareschal and E. Kestemont. Order and fluctuations in nonequilibrium molecular dynamics simulations of two-dimensional fluids. *J. Stat. Phys.*, 48:1187, 1987.
- [8] D. C. Rapaport. Molecular-dynamics study of Rayleigh-Bénard convection. *Phys. Rev. Lett.*, 60:2480, 1988.
- [9] S. W. Smith, C. K. Hall, and B. D. Freeman. Molecular dynamics for polymeric fluids using discontinuous potentials. *J. Comput. Phys.*, 134:16–30, 1997.
- [10] Stefan Miller. Dynamik einfacher Membranen. Diploma thesis, University of Stuttgart, Germany, 2000.

- [11] Stefan Miller, Stefan Luding, and Gerhard Gompper. Tethered membranes revisited. In preparation, 2003.
- [12] N. V. Dokholyan, S. V. Buldyrev, H. E. Stanley, and E. I. Shakhnovich. Molecular dynamics studies of folding of a protein-like model. *Folding & Design*, 3:577–587, 1998.
- [13] A. F. Babich, J. Grason, and D. L. Parnas. Significant event simulation. In *Communications of the ACM*, volume 18, pages 323–329, 1975.
- [14] Boris D. Lubachevsky. Fast simulation of multicomponent dynamic systems. *Bell Labs Tech. J.*, 5(2):134–156, 2000.
- [15] D. M. Nicol. Mapping a battlefield simulation onto a message-passing parallel architecture. In *SCS Multiconference*, volume 19 of *Simulation Series*, pages 141–146. SCS, 1988.
- [16] F. Wieland, L. Hawley, et al. Distributed combat simulation and Time Warp: The model and its performance. In *SCS Multiconference*, volume 21 of *Simulation Series*, pages 14–20. SCS, 1989.
- [17] B. J. Alder and T. E. Wainwright. *J. Chem. Phys.*, 31(2):459, 1959.
- [18] D. R. Jefferson. Virtual time. In *ACM Trans. on Programming Languages and Systems*, volume 7, pages 404–425, 1985.
- [19] P. Hontales, B. Beckmann, et al. Performance of the colliding pucks simulation of the Time Warp operating systems. In *SCS Multiconference*, volume 21 of *Simulation Series*, pages 3–7, 1989.
- [20] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, Oxford, 1987.
- [21] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [22] D. E. Knuth. *The Art of Computer Programming*. Addison-Wesley, Reading, MA, 1968.
- [23] Mauricio Marín, Dino Risso, and Patricio Cordero. Efficient algorithms for many-body hard particle molecular dynamics. *J. Comput. Phys.*, 109:306–317, 1993.

-
- [24] Mauricio Marín and Patricio Cordero. An empirical assessment of priority queues in event-driven molecular dynamics. *Comput. Phys. Commun.*, 92:214–224, 1995.
- [25] Mauricio Marín. Event-driven hard-particle molecular dynamics using bulk-synchronous parallelism. *Comput. Phys. Commun.*, 102:81–96, 1997.
- [26] P. K. Haff. Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon. *J. Fluid Mech.*, 134:401–430, 1983.
- [27] I. Goldhirsch and G. Zanetti. Clustering instability in dissipative gases. *Phys. Rev. Lett.*, 70(11):1619–1622, 1993.
- [28] S. Luding. Granular materials under vibration: Simulations of rotating spheres. *Phys. Rev. E*, 52(4):4442, 1995.
- [29] S. Luding, M. Huthmann, S. McNamara, and A. Zippelius. Homogeneous cooling of rough dissipative particles: Theory and simulations. *Phys. Rev. E*, 58:3416–3425, 1998.
- [30] S. Luding. Liquid-solid transition in bi-disperse granulates. *Advances in Complex Systems*, 4(4):379–388, 2002.
- [31] Yacov Kantor, Mehran Kardar, and David R. Nelson. Statistical mechanics of tethered surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 57(7):791, 1986.
- [32] Stefan Miller and Stefan Luding. Event-driven molecular dynamics in parallel. *J. Comp. Phys.*, 193(1):306–316, 2004. physics/0302002.
- [33] Message Passing Interface Forum, University of Tennessee, Knoxville. *MPI: A Message-Passing Interface Standard*, 1995.
- [34] Message Passing Interface Forum, University of Tennessee, Knoxville. *MPI-2: Extensions to the Message-Passing Interface*, 1997.
- [35] ANSI/ISO/IEC 14882:1998. *International Standard for C++*, 1998.
- [36] Attila Caglar, Michael Grieber, Marc A. Schweitzer, and Gerhard Zumbusch. Dynamic load-balancing of hierarchical tree algorithms on a cluster of multiprocessor PCs and on the Cray T3E. In H. W. Meuer, editor, *14th Supercomputer Conference*, 1999. ISBN 3-932178-08-4.

- [37] Boris D. Lubachevsky. Simulating colliding rigid disks in parallel using bounded lag without Time Warp. In *SCS Multiconference*, volume 22 of *Simulation Series*, pages 194–202, 1990.
- [38] G. Korniss, M. A. Novotny, P. A. Rikvold, H. Guclu, and Z. Toroczkai. Going through rough times: from non-equilibrium surface growth to algorithmic scalability. *Materials Research Society Symposium Proceedings Series*, 700:297–308, 2001.
- [39] Boris D. Lubachevsky. Efficient parallel simulations of asynchronous cellular arrays. *Complex Systems*, 1(6):1099–1123, 1987.
- [40] Boris D. Lubachevsky. Efficient distributed event-driven simulation of multiple-loop networks. In *Communications of the ACM*, volume 32, pages 111–131, 1989.
- [41] H. M. Jaeger and S. R. Nagel. Physics of the granular state. *Science*, 255:1523, 1992.
- [42] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer. The physics of granular materials. *Physics Today*, 49(4):32–38, 1996.
- [43] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, 68(4):1259–1273, 1996.
- [44] Olaf Herbst. Das Abkühlverhalten eines granularen Gases mit coulomb-scher Reibung. Diploma thesis, University of Göttingen, 2000.
- [45] H. J. Herrmann and S. Luding. Modeling granular media with the computer. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 10:189–231, 1998.
- [46] Y. Kishino, editor. *Powders & Grains 2001*, Rotterdam, 2001. Balkema.
- [47] S. McNamara and W. R. Young. Dynamics of a freely evolving, two-dimensional granular medium. *Phys. Rev. E*, 53(5):5089–5100, 1996.
- [48] T. Pöschel and S. Luding, editors. *Granular Gases*, Berlin, 2001. Springer. Lecture Notes in Physics 564.
- [49] Stefan Luding. Private communications.

-
- [50] B. Bernu and R. Mazighi. One-dimensional bounce of inelastically colliding marbles on a wall. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 23:5745, 1990.
- [51] S. McNamara and W. R. Young. Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium. *Phys. Fluids A*, 4(3):496, 1992.
- [52] S. McNamara and W. R. Young. Inelastic collapse in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 50(1):R28–R31, 1994.
- [53] S. Luding and S. McNamara. How to handle the inelastic collapse of a dissipative hard-sphere gas with the TC model. *Granular Matter*, 1(3):113–128, 1998. cond-mat/9810009.
- [54] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, and J. Duran. Anomalous energy dissipation in molecular dynamics simulations of grains: The “detachment effect”. *Phys. Rev. E*, 50:4113, 1994.
- [55] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, and J. Duran. Interaction laws and the detachment effect in granular media. In *Fractal Aspects of Materials*, volume 367, pages 495–500, Pittsburgh, Pennsylvania, 1995. Materials Research Society, Symposium Proceedings.
- [56] S. Luding. Collisions & contacts between two particles. In H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E350*, page 285, Dordrecht, 1998. Kluwer Academic Publishers.
- [57] Stefan Luding. Molecular dynamics simulations of granular materials. In H. Hinrichsen and D. Wolf, editors, *The Physics of Granular Media*. Wiley-VCH, 2004.
- [58] J. C. Maxwell. Illustrations of the dynamical theory of gases. *Phil. Mag.*, 19,20(4), 1860.
- [59] J. C. Maxwell. On the dynamical theory of gases. *Phil. Trans.*, 157, 1867.
- [60] Ludwig Boltzmann. Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. *Sitzungsbericht d. Kaiserl. Akad. Wiss. Wien*, 66:275–370, 1872.

- [61] Ludwig Boltzmann. Über die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatze der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung, respective den Sätzen über das Wärme Gleichgewicht. *Sitzungsbericht d. Kaiserl. Akad. Wiss. Wien*, 76:373–435, 1877.
- [62] Ludwig Boltzmann. *Vorlesungen über Gastheorie*. Leipzig, 1895.
- [63] D. Enskog. Kinetische Theorie der Wärmeleitung, Reibung und Selbstdiffusion in gewissen verdichteten Gasen und Flüssigkeiten. *Kungl. Svenska Vetenskapsakademiens Handlingar*, 63(4), 1922.
- [64] S. Chapman and T. G. Cowling. *The Mathematical Theory of Nonuniform Gases*. Cambridge University Press, London, 1970.
- [65] M. H. Ernst, J. R. Dorfmann, W. R. Hoegy, and J. M. J. van Leeuwen. *Physica*, 45:127, 1969.
- [66] J. P. Hansen and I. R. McDonald. *Theory of simple liquids*. Academic Press Limited, London, 1986.
- [67] Martin Huthmann and Annette Zippelius. Dynamics of inelastically colliding rough spheres: Relaxation of translational and rotational energy. *Phys. Rev. E*, 56:6275–6278, 1997.
- [68] T. P. C. van Noije and M. H. Ernst. Ring kinetic theory for an idealized granular gas. *Physica A*, 251:266–283, 1998.
- [69] Oliver Strauss. Kontinuumsbeschreibung inhomogener granularer Medien. Diploma thesis, University of Stuttgart, 1999.
- [70] L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Mechanik*. Akademie Verlag Berlin, Berlin, 1987. 12. Auflage.
- [71] Chiara Corticelli. Random packing di un gas di sfere dure in tre dimensioni studiato per mezzo di una dinamica molecolare. Master's thesis, University of Genova, 2001.
- [72] F. H. Ree and W. G. Hoover. *J. Chem. Phys.*, 40:939, 1964.
- [73] W. F. Carnahan and K. E. Starling. Equation of state for non-attracting rigid spheres. *J. Chem. Phys.*, 51:635, 1969.

-
- [74] D. Henderson. A simple equation of state for hard discs. *Mol. Phys.*, 30:971–972, 1975.
- [75] L. Verlet and D. Levesque. Integral equations for classical fluids. III. the hard disks system. *Mol. Phys.*, 46(5):969–980, 1982.
- [76] B. J. Alder and T. E. Wainwright. Phase transition for a hard sphere system. *J. Chem. Phys.*, 27:1208, 1957.
- [77] B. J. Alder and T. E. Wainwright. Phase transition in elastic disks. *Phys. Rev.*, 127(2):359–361, 1962.
- [78] William G. Hoover and Francis H. Ree. Melting transition and communal entropy for hard spheres. *J. Chem. Phys.*, 49(8):3609–3617, 1968.
- [79] Hikaru Kawamura. A simple theory of hard disk transition. *Prog. Theor. Physics*, 61(6):1584–1596, 1979.
- [80] T. M. Truskett, S. Torquato, S. Sastry, P. G. Debenedetti, and F. H. Stillinger. Structural precursor to freezing in the hard-disk and hard-sphere systems. *Phys. Rev. E*, 58(3):3083, 1998.
- [81] James G. Berryman. Random close packing of hard spheres and disks. *Phys. Rev A*, 27(2):1053–1561, 1983.
- [82] Jan Tobochnik and Phillip M. Chapin. Monte carlo simulation of hard spheres near random closest packing using spherical boundary conditions. *J. Chem. Phys.*, 88(9):5824–5831, 1988.
- [83] S. Luding and O. Strauß. The equation of state of polydisperse granular gases. In T. Pöschel and S. Luding, editors, *Granular Gases*, pages 389–409, Berlin, 2001. Springer. cond-mat/0103015.
- [84] S. Luding. Global equation of state of two-dimensional hard sphere systems. *Phys. Rev. E*, 63:042201–1–4, 2001.
- [85] George Szpiro. Mathematics: Does the proof stack up? *Nature*, 424:12–13, 2003.
- [86] S. Torquato, T. M. Truskett, and P. G. Debenedetti. Is random close packing of spheres well defined? *Phys. Rev. Lett.*, 84(10):2064–2067, 2000.

- [87] S. McNamara. Hydrodynamic modes of a uniform granular medium. *Phys. Fluids A*, 5(12):3056 – 3070, 1993.
- [88] H. A. Weaver and L. Danly, editors. *The Formation and Evolution of Planetary Systems*. Cambridge Univ. Press, 1989.
- [89] F. Spahn, J. M. Hertzsch, and N. V. Brilliantov. The role of particle collisions for the dynamics in planetary rings. *Chaos, Solitons & Fractals*, 5:1945, 1995.
- [90] Sean McNamara. Private communications.
- [91] I. Goldhirsch, M.-L. Tan, and G. Zanetti. A molecular dynamical study of granular fluids I: The unforced granular gas in two dimensions. *Journal of Scientific Computing*, 8:1–40, 1993.
- [92] R. Caferio, S. Luding, and H. J. Herrmann. Two-dimensional granular gas of inelastic spheres with multiplicative driving. *Phys. Rev. Lett.*, 84:6014–6017, 2000.
- [93] S. Luding. Structures and non-equilibrium dynamics in granular media. *Comptes Rendus Academie des Science*, 3:153–161, 2002.
- [94] X. B. Nie, E. Ben-Naim, and S. Y. Chen. Dynamics of freely cooling granular gases. *Phys. Rev. Lett.*, 89(204301), 11 2002.
- [95] Scott A. Hill and Gene F. Mazenko. Granular clustering in a hydrodynamic simulation. *Phys. Rev. E*, 67, 2003.
- [96] S. K. Das and S. Puri. Inhomogeneous cooling in inelastic granular fluids. *Physica A*, 318(1-2):55–62, 2003.
- [97] S. K. Das and S. Puri. Pattern formation in the inhomogeneous cooling state of granular fluids. *Europhys. Letters*, 61(6):749–755, 2003.
- [98] R. Brito and M. H. Ernst. Extension of Haff’s cooling law in granular flows. *Europhys. Lett.*, 43(15):497–502, 1998. cond-mat/9807224.
- [99] S. Chen, Y. Deng, X. Nie, and Y. Tu. Clustering kinetics of granular media in three dimensions. *Phys. Lett.*, 269:218, 2000. cond-mat/9804235.

-
- [100] D. Stauffer and A. Aharony. *Introduction to Percolation Theory*. Taylor & Francis, London, 2nd edition, 1994.
- [101] Jan Tobochnik. Granular collapse as a percolation transition. *Phys. Rev. E*, 60:7137–7142, 1999.
- [102] Stefan Miller and Stefan Luding. Cluster population dynamics. In preparation, 2003.
- [103] Sidney Redner. Fragmentation. In H. J. Herrmann and S. Roux, editors, *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*, pages 321–346. Elsevier, 1990.
- [104] James T. Jenkins and Chao Zhang. Kinetic theory for identical, frictional, nearly elastic spheres. *Phys. Fluids*, 14(3), 2001.
- [105] J. T. Jenkins and M. Shahinpoor. Macroscopic phase transitions in two-dimensional granular materials. In J. T. Jenkins and M. Satake, editors, *Mechanics of Granular Materials: New Models and Constitutive Relations*, pages 339–346, Amsterdam, 1983. Elsevier.
- [106] J. T. Jenkins and R. W. Richman. Grad’s 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 87:355, 1985.
- [107] Vicente Garzo and J. M. Montanero. Transport coefficients of a heated granular gas. *Physica A*, 313(3-4):336–356, 2002.

Abstract

Granular media are omnipresent in everyday life. Examples range from sugar and salt to sand dunes. They often resemble simple solids, liquids, or gases, but their properties are not understood very well. Simple analytical descriptions are seldom successful. So, the main research method is computer simulation.

This thesis deals with granular gases—granular media of low density. The difference between granular gases and ordinary gases is that the former consist of macroscopic particles and the latter consist of microscopic particles. So, classical mechanics is sufficient to describe the dynamics of granular gases, but one has to take into account the dissipative nature of the collisions.

Dissipation leads to a cooling of the system. However, the initial homogeneous cooling state becomes unstable to perturbations and the system develops inhomogeneities in temperature and density. Clusters of particles emerge and start to grow, until finally, they reach system size.

The first part of this thesis is concerned with event-driven molecular dynamics. This algorithm can be used to simulate granular gases efficiently, but it is also suitable for a large variety of other problems. This method discretizes time with a variable time-step adapted to the sequence of events. Unlike primitive event-driven algorithms which update the whole system after each event, our method updates only those two particles which were involved in the last collision.

Event-driven molecular dynamics is by nature a serial algorithm, but nevertheless we have developed an efficient parallel implementation by means of a

complex rollback protocol which corrects inevitable causality errors. Computing time scales with the number \mathcal{P} of processes like $\mathcal{P}^{-1/2}$ and memory requirements scale like \mathcal{P}^{-1} . Communication between the processes is minimized by overlapping domains of the processes. Additionally, the algorithm makes use of dynamic load-balancing. Hence it is especially suited to simulate inhomogenous systems.

The second part of the thesis deals with granular gases. A simple model which has all essential features of granular gases is the inelastic hard spheres model. However, this model shows a problematic artifact—inelastic collapse, i. e. an infinite number of collisions in finite time. Thus, we have to modify the inelastic hard spheres model with the TC model, which reduces dissipation for actual multi-particle collisions. This minor modification prevents inelastic collapse, but the effect on real physical quantities is negligible.

The formation of clusters in granular gases can be explained via a stability analysis of the hydrodynamical equations of motion. Provided that the dissipation is above a critical threshold, the system becomes unstable to the formation of clusters. This can be understood as follows: If the density in a region is larger than in a neighboring region due to a fluctuation, the collision frequency and therefore the dissipated energy is larger in that region. So the granular temperature in the dense region will decrease, which causes a decrease in pressure. The resulting pressure gradient will lead to a flux of particles into that region, thus further increasing its density and decreasing its pressure. So the particle cluster starts to grow, if the hydrodynamic mechanisms that may disperse the agglomeration of particles are slower than the clustering process.

However, once the clusters have emerged, these theoretical concepts are no longer sufficient to describe the evolution of the system. Thus, numerical simulations are necessary. The results of these simulations show that the evolution of the cluster growth consists of three regimes. It yields the cooling law $T(\tau) \sim (1 + \tau)^{-2}$, where T is the granular temperature and τ is the scaled time. Initially, the system is in the homogeneous cooling state and can be described by means of the kinetic theory. Strong dissipation leads to a fast decay of the temperature, weak dissipation to a slow decay.

Then, clusters start to grow and one large cluster emerges which contains a macroscopic fraction of all the particles. The cooling slows down to $T(\tau) \sim \tau^{-1}$. Moreover, the evolution of the system becomes more and more independent of the dissipation and approximates an asymptotic behavior.

Finally, this large cluster reaches system size and the size distribution of the small clusters follows a power law. The system has reached a very inhomogeneous state, but the evolution of the temperature again resembles the homogeneous cooling state.