Gerald Baumann

Modelle und Computersimulationen granularer Materie

Modelle und Computersimulationen granularer Materie

Vom Fachbereich Physik - Technologie
der Gerhard-Mercator-Universität -GH- Duisburg
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
genehmigte Dissertation von

Gerald Baumann
aus
Rees

Referent: Prof. Dr. Dietrich E. Wolf
Koreferent: Prof. Dr. Klaus Usadel
Tag der mündlichen Prüfung: 30. Juni 1997

für meine Frau,
Andrea Hommen-Baumann

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

Diese Arbeit befaßt sich mit verschiedenen Aspekten der Simulation granularer Materie. Neben einer anfänglichen Einführung über die Physik der granularen Materie in Kapitel 1 bestimmen zwei Schwerpunkte ihren Inhalt. Der erste Schwerpunkt ist die Simulation von rotierenden Trommelmischern und der zweite die Entwicklung neuer Simulationsmodelle. An anderen Stellen werden weitere wichtige Modellansätze vorgestellt. Diese fanden innerhalb dieser Arbeit keine Verwendung, sind aber im Forschungsgebiet der granularen Materie weit verbreitet.

Derjenige Schwerpunkt dieser Arbeit, der sich mit Trommelmischern befaßt, ist die konsequente Fortsetzung einer Diplomarbeit aus dem Dezember 1993 [Bau93]. In ihr wurde die Entwicklung des *Bottom-to-Top-Restructuring* (BTR) Modells und die anfänglichen Ergebnisse erster Simulationen festgehalten. Aufbauend auf dieser Diplomarbeit erfolgte eine systematische Untersuchung sowohl der Eigenschaften des Modells als auch der Struktur und Dynamik granularer Materie in rotierenden Trommelmischern. Aus diesem Grund bilden die Simulationsergebnisse zu Trommelmischern den weitaus größten Teil dieser Dissertation. Sie werden in den Kapiteln 2 und 3 geschildert und sind bereits teilweise in den folgenden Fachartikeln veröffentlicht:

[BJW94] G. Baumann, I.M. Jánosi und D.E. Wolf, *"Particle trajectories and segregation in a two-dimensional rotating drum"*, Europhysics Letters **27**, (3), 203, (1994)

[BJW95] G. Baumann, I.M. Jánosi und D.E. Wolf, *"Surface properties and flow of granular material in a two-dimensional rotating drum model"*, Physical Review E **51**, (3), 1879, (1995)

[BSJW96] G. Baumann, T. Scheffler, I.M. Jánosi und D.E. Wolf, *"Angle of repose in a two-dimensional rotating drum model"*, in *Traffic and Granular Flow*, Herausgeber: D.E. Wolf, M. Schreckenberg und A. Bachem, Seite 347, World Scientific Verlag, Singapur (1996)

[BW96] G. Baumann und D.E. Wolf, *"Self-organized criticality in a two-dimensional rotating drum model"*, Physical Review E **54**, (5), R 4504, (1996)

Kopien dieser Artikel befinden sich im Anhang.

Den zweiten Schwerpunkt dieser Arbeit bilden Entwicklungen neuer Modelle zur Simulation granularer Materie. In diesen Bereich fallen die Kapitel 4 und 5. Es werden ein neues Zellular-Automaten-Modell und das sogenannte Kontinuitätsmodell, das den Einfluß eines interstitiellen Fluids auf den Fluß granularer Materie berücksichtigt, vorgestellt.

Das vorletzte Kapitel 6 beinhaltet die Darstellung von wichtigen Methoden und Modellen zur Simulation granularer Materie, die in dieser Arbeit keine Anwendung fanden. Das letzte Kapitel 7 schließt die Arbeit mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick auf zukünftige Entwicklungen.

Danksagung

Für ihre Unterstützung während meiner Promotion bin ich besonders Dipl.-Phys. Sabine Dippel, Dipl.-Phys. Elmar Jobs, Dr. Jochen Schäfer, Priv-Doz. Dr. Michael Schreckenberg und Prof. Dr. Dietrich E. Wolf, sowie den übrigen Mitgliedern der *Computational Physics Group* dankbar.
Ein ganz besonderer Dank gilt meiner Frau Andrea, sowie Dr. Imre M. Jánosi für seine Mitwirkung an den Abschnitten 2.2.2, 2.2.3 und 2.2.4 und Dipl.-Phys. Tim Scheffler für seine Mitwirkung am Abschnitt 2.2.4 und den insgesamt daraus resultierenden Artikeln [BJW94, BJW95, BSJW96].

Kapitel 1

Granulare Materie

Annähernd jeder Mensch sammelt in seiner Kindheit Erfahrungen mit dem Prototypen aller granularen Materie, dem Sand. An diese fundamentalen Erfahrungen knüpfen schnell weitere Erlebnisse mit Bauklötzen, Lego-Steinen oder Zucker, Salz und Mehl an. Wer aufmerksam seine Umwelt beobachtet, wird feststellen, daß ein sehr großer Teil der Dinge, denen man im täglichen Leben begegnet, in granularer Form existiert. Die relative Häufigkeit, mit der granulare Materie auftritt, steigert sich, wenn man industrielle Abläufe betrachtet. Tatsächlich sind die meisten Stoffe in der Industrie granular. Man denke nur an Erze, Kohle, Schlacke, Schotter, Kies, Steine, Zement, Nägel, Schrauben, Getreide, Gemüse, Chemikalien, Pillen, Kunstoffgranulate, Toner, Müll und vieles mehr. All diese Dinge müssen in Kisten, Bunkern und Silos gelagert, mit Förderbändern, Rutschen und Rohren transportiert oder mit Mischern gemischt werden. Oftmals sind sowohl die Ausgangs- als auch die Endprodukte eines industriellen Prozesses granular, haben aber vollkommen unterschiedliche Eigenschaften. Die industrielle Bedeutung granularer Materie unterstreicht eine Untersuchung, die besagt, daß 40% der Investitionen der chemischen Industrie in die mechanische Verfahrenstechnik fließen und daß ebenfalls 40% der Kapazität industrieller Anlagen auf Grund von Problemen mit granularen Materialien nicht ausgeschöpft werden können [EGD94].

Einige industrielle Produkte an sich würde man nicht sofort als granulares Material klassifizieren. Verpackung und Transport vieler gleichartiger Teile heben diesen Charakter und die damit verbundenen Problematiken aber wieder hervor. Ein allgemein bekanntes, alltägliches Beispiel ist ein Wattestäbchen. Ein einzelnes würde man spontan nicht als granulare Materie bezeichnen, den Inhalt einer ganzen Dose schon. Steht man vor dem verschütteten Inhalt einer umgestürzten Dose, so stellt sich unwillkürlich die Frage, wie eine solche Menge Wattestäbchen maschinell geordnet und verpackt werden kann[1].

Diese Frage ist offensichtlich gelöst, aber auch bezeichnend für den gegenwärtigen Umgang mit granularer Materie. In jahrzehntelagem Sammeln von Erfahrungen und immer neuen Versuchen haben Ingenieure und Verfahrenstechniker unzählige Arten von Lager-, Transport-, Misch- und Verarbeitungsmöglichkeiten entwickelt. Die eigentliche Physik der granularen Materie war dabei jedoch nicht Gegenstand der Untersuchungen und blieb größtenteils unverstanden.

Die Historie der Physik der granularen Materie ist lang und im Bewußtsein der Physiker ein wenig in Vergessenheit geraten. Schon Coulomb hat 1773 [Cou73] wichtige Beiträge zur Reibung zwischen festen Körpern geliefert, die bis heute ihre Berücksichtigung finden. Hagen entwickelte 1852 eine Kontinuumstheorie der Druckverteilung in trockenem Sand [Hag52], Reynolds formulierte 1885 das Prinzip der Dilatanz [Rey85] und Bagnold stellte 1954 die erste phänomenologische Theorie für die Scherreibung in granularen Flüssen auf [Bag54, Bag66]. Weitere Beiträge zur Physik der granularen Materie stammen von bekannten Namen wie Chladni, Faraday, Hertz, Einstein und Kolmogorov. Der Grund für diese lange Tradition liegt in den außergewöhnlichen physikalischen Eigenschaften der granularen Materie und nicht zuletzt ebenfalls in der alltäglichen Begegnung mit Stoffen in granularer Form.

In jüngeren Jahren ergaben sich große Fortschritte in der Computertechnologie. Deshalb ermöglichen heute leistungsstarke Rechner einen vollkommen neuen Zugang zur granularen Materie. An Stelle der älteren statistischen Verfahren und Kontinuumsnäherungen sind Simulationsmodelle getreten. Mit diesen Modellen ist es möglich, die Trajektorie jedes einzelnen Teilchens zu berücksichtigen, und so eine im Vergleich sehr viel detailliertere Kenntnis über granulare Systeme zu erhalten. Man hofft, durch diese Detailkenntnisse und aus der Bestimmung statistischer Größen zu allgemein gültigen Aussagen und Gesetzmäßigkeiten zu finden. Die Teilchen in solchen Simulationen sind in der Regel idealisierte Kugeln oder Scheiben und deshalb noch weit von den Formen und Eigenschaften von Wattestäbchen entfernt. Dies ist aber ein wichtiger erster Schritt, wenn man die grundlegenden Prinzipien der Physik der granularen Materie erforschen und verstehen will.

[1] Dem interessierten Leser wird empfohlen, in einer stillen Stunde einen entsprechenden Versuch durchzuführen. Neben der hantelartigen Form erkennt man als Problem für die Verpackung die unterschiedlichen Eigenschaften der glatten Stäbchen und der rauhen Watte.

1.1 Definition

Als granulare Materie bezeichnet man im allgemeinsten Sinne eine Vielzahl von makroskopischen Teilchen aus festen Stoffen, die nur über Kontaktkräfte wechselwirken. Makroskopisch bedeutet in diesem Fall, daß die für die Teilchen relevante Kraft die Gravitationskraft ist. Für kleinere Teilchen, zum Beispiel Staub oder Puder, können zusätzlich zu den üblichen Kontaktkräften Kohäsionskräfte eine Rolle spielen. Thermische Einflüsse sind in jedem Fall irrelevant. Nicht enthalten in dieser Definition sind Spezialfälle von langreichweitigen Wechselwirkungen. Diese können zum Beispiel durch elektrostatische Aufladungen oder Einflüsse eines interstitiellen Mediums entstehen.

Granulare Materie, die in der mechanischen Verfahrenstechnik als Schüttgut oder als Granulat bezeichnet wird, nimmt eine Zwitterstellung bezüglich ihres Aggregatzustandes ein. Ein einzelnes ihrer Teilchen ist ein Festkörper. Alle Teilchen zusammen weisen dagegen sowohl Festkörper- als auch Flüssigkeitseigenschaften auf. In einem statischen System besitzt granulare Materie die Festkörpereigenschaften ihrer Einzelteile. Sie läßt sich zum Beispiel zu einem Hügel aufschütten, ohne zu zerfliessen, oder mit einem schweren Gegenstand belasten, ohne daß dieser versinkt. In dynamischen Systemen, denen von außen Energie zugeführt wird, zeigen sich dagegen Flüssigkeitseigenschaften. Man spricht von Fluidisierung. Der zuvor stabile Hügel zerfließt, wenn zum Beispiel der Untergrund in Vibration versetzt wird. Öffnet man den Ausgang eines gefüllten Silos, so fließt die granulare Materie aus. Da also granulare Materie offensichtlich nicht eindeutig einem der bekannten Aggregatzustände zuzuordnen ist, haben einige Physiker vorgeschlagen, den granularen Zustand als eigenständigen Aggregatzustand zu bezeichnen [JNB96].

1.2 Eigenschaften und Phänomene

Granulare Materie besitzt ein breites Spektrum von verschiedenen, grundlegenden Eigenschaften und Phänomenen. Die Mehrzahl davon ist der Wissenschaft seit langem bekannt. Trotz dieser Kenntnis existieren in vielen Fällen keine eindeutigen physikalischen Erklärungen oder Modelle. Auf der anderen Seite verwenden vorhandene Modelle oftmals makroskopische, phänomenologische Größen, obwohl ein Teil der relevanten Physik auf mikroskopischer Skala verborgen liegt.

Das große Ziel der wissenschaftlichen Forschung über granulare Materie ist es, eine einheitliche Theorie, wie sie zum Beispiel aus der Hydrodynamik oder

Elektrodynamik bekannt ist, für granulare Materie zu erstellen. Leider ist eine solche bei weitem nicht in Sicht. Dieser Mißstand liegt in der enormen Komplexität des Problems begründet. In granularen Systemen existiert ein sehr kompliziertes Wechselspiel zwischen den mehr mikroskopischen Eigenschaften der Kontaktwechselwirkungen und den mehr makroskopischen Vielteilcheneigenschaften. Beide Arten können im allgemeinen nicht zugunsten der anderen in einer Art *Mean-Field*-Ansatz vernachlässigt werden und sind außerdem, selbst einzelnd betrachtet, äußerst komplex.

Im Folgenden werden einige der Eigenschaften und Phänomene granularer Materie beschrieben. Leser die mehr über diese Grundlagen erfahren wollen, seien an die Übersichtsartikel [JN92, JNB96, Gla95, Her95, Wol96, Wei58] und Bücher [Bag41, Gol60, BR70, Joh85, BG89, Tho93, BH93, Meh94] verwiesen. Lesenswert ist in dieser Hinsicht ebenfalls das erste Kapitel der Dissertation von Jochen Schäfer [Sch96a].

1.2.1 Statik

1.2.1.1 Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel

Im statischen, nicht angeregten, also festen Zustand besitzt granulare Materie erstaunliche Eigenschaften. Eine dieser Eigenschaften ist der Unterschied zwischen Böschungswinkel α_r (englisch: *Angle of Repose*) und Stabilitätsgrenzwinkel α_m (englisch: *Angle of marginal Stability*). Für jede Art von granularer Materie sind beide Winkel mit Einschränkungen charakteristische Größen. Der Böschungswinkel ist der Winkel den die Oberflächen eines aufgeschütteten Hügels gegenüber der Horizontalen einnimmt. Kippt man den Untergrund eines solchen Hügels und vergrößert so den Winkel zwischen Oberfläche und Horizontalen, so bleibt der Hügel erstaunlicherweise zunächst stabil. Erst wenn der Winkel den Stabilitätsgrenzwinkel überschreitet, werden Lawinen an der Oberfläche ausgelöst. Diese Lawinen reduzieren sodann den Winkel zwischen Oberfläche und Horizontalen wieder auf die Größe des Böschungswinkels. Typischerweise ist der Stabilitätsgrenzwinkel um $2°$ bis $4°$ größer als der Böschungswinkel. Zu beachten ist allerdings, daß beide Winkel davon abhängen, auf welche Art und Weise der Hügel aufgeschüttet wurde [BR70].

1.2.1.2 Druckverteilung und Gewölbebildung

Während der Druck in einem mit einer Füssigkeit gefüllten Behälter von oben nach unten exponentiell zunimmt, ist der mittlere Druck in einem mit granularer Materie gefüllten Behälter konstant. Dies ist zum Beispiel der Grund für die konstante Fließgeschwindigkeit des Sandes in einer Sanduhr [Hag52]. Der mittlere Druck ist konstant, weil es innerhalb einer dichten Packung granularer Materie zu Gewölbebildungen ähnlich den Bögen in gotischen Kathedralen kommt. Die Gewölbe schirmen die darunterliegende Materie von der Gewichtskraft der darüberliegenden ab und leiten den Druck auf die Behälterwände. Ohne die Begrenzung durch Behälterwände in einem Sandhügel verursachen diese Gewölbe ein Druckminimum unterhalb des Zentrums des Hügels [Hem96].

Es existiert innerhalb einer ruhenden dichten Packung granularer Materie keine homogene oder kontinuierliche Druckverteilung sondern vielmehr ein komplexes Kontaktnetzwerk, über das die Drücke im System verteilt werden [LNS+95, Rad95]. In diesem Kontaktnetzwerk existieren Kontakte, die sowohl ein Vielfaches des mittleren Druckes als auch nur den Bruchteil der Gewichtskraft eines einzelnen Teilchens übertragen. Der Druck ist also eine äußerst inhomogene Größe, deren Fluktuationen in der Größenordnung ihres Mittelwertes selbst liegen. Der mittlere Druck ist deshalb keine eigentlich relevante Größe, aber ein typisches Beispiel für die oben erwähnten makroskopischen phänomenologischen Größen, die in verschiedenen Modellen Verwendung finden. Innerhalb des Kontaktnetzwerkes kann es punktuell zu enormen Drücken kommen. Dies ist insbesondere der Fall, wenn in dynamischen Prozessen das Kraftnetzwerk umstrukturiert wird. Als Folge stürzen zum Beispiel Silos hundertmal häufiger ein als andere vergleichbare Industrieanlagen [Eib84, Luo93].

Betrachtet man einen kleinen zweidimensionalen Hügel aus nur sechs identischen Teilchen, so stellt man interessanterweise fest, daß dieses Problem mathematisch unterbestimmt ist [GO95]. Es gibt zwei verschiedene Lösungen für die Verteilung der Drücke im Kontaktnetzwerk. Praktisch bedeutet dies für reale Systeme, daß das Kontaktnetzwerk und die Druckverteilung sowohl von der Geschichte der Entstehung der Packung als auch von den mikroskopisch kleinen Unregelmäßigkeiten der Teilchen abhängen.

1.2.1.3 Schallausbreitung

Eng verknüpft mit der Struktur des Kontaktnetzwerkes einer ruhenden dichten Packung ist das Problem der Schallausbreitung in granularen Medien [LN92, Mel96]. Der Schall besteht aus Kompressionswellen, die nur über das Kontaktnetzwerk übertragen werden können. Da im allgemeinen dieses Netzwerk im höchsten Maße anisotrop ist, kann man sich leicht vorstellen, daß das gleiche für die Schallausbreitung gilt. Hinzu kommt, daß sich das Kontaktnetzwerk durch die Kompressionswellen verändert, indem neue Kontakte geschlossen und alte Kontakte geöffnet werden.

Zusätzlich zu dieser Anisotropie des Kontaktnetzwerkes ist die Kraftübertragung von einem zum anderen Teilchen die zweite bestimmende Größe dieses Problems. Schon H. Hertz hat gezeigt, daß diese Kraftübertragung ein nichtlinearer Vorgang ist [Her82]. Die elastische Abstoßungskraft zwischen zwei Kugeln wächst proportional zur Wurzel aus der dritten Potenz der Auslenkung. Als Konsequenz aus all dem zeigen sich allerlei Anomalien [Mel96]. Bekannt ist zum Beispiel der sogenannte „Mirage Effekt" der besagt, daß die Schallgeschwindigkeit mit der Tiefe anwächst. Die theoretische Vorhersage [LN92], daß dies mit einem Potenzgesetz wie die sechste Wurzel aus der Tiefe geschieht, hat sich nicht bestätigt [Mel96]. Die Abhängigkeit ist weitaus komplizierter, und es gilt zusätzlich Oberflächeneffekte zu berücksichtigen.

Schallausbreitung ist zusammenfassend also ein schönes Beispiel für das erwähnte komplexe Wechselspiel von Vielteilcheneigenschaften (Kontaktnetzwerk) und den Eigenschaften der Kontaktwechselwirkungen (Kraftübertragung). Beide Eigenschaften sind in diesem Fall äußerst relevant und selbst einzelnd betrachtet nicht trivial.

1.2.2 Dynamik

1.2.2.1 Dilatanz

Eines der grundlegenden Prinzipien der Dynamik granularer Materie ist die Dilatanz. Von Reynolds 1885 formuliert, besagt sie, daß granulare Materie mit einer Packungsdichte oberhalb einer bestimmten kritischen Dichte sich nur unter einer Volumenvergrößerung verformen läßt [Rey85]. Ein alltägliches Beispiel ist vakuumverpackter Kaffee. Eine solche Packung ist sehr stabil, weil eine Verformung und damit Volumenvergrößerung durch die dichte Verpackung verhindert wird. Ein weiteres Beispiel ist ein Strandläufer, der trockene Fußspuren im nassen Sandstrand hinterläßt. Der Grund hierfür ist nicht etwa ein „Schwammeffekt", das heißt Auspressen des Wassers, sondern eine Vergrößerung der Räume zwischen den Sandkörnern, verursacht durch die Verformung des Sandes unter dem Druck des Fußes. Der Wasserspiegel sinkt lokal unterhalb des Fußes ab, indem das Wasser in die vergrößerten Zwischenräume fließt.

Eine andere anschauliche Demonstration der Dilatanz kann man mit einem Becherglas, einem Besenstiel und Sand vorführen. Zuerst stellt man den Besenstiel in die Mitte des Becherglases und füllt den verbleibenden Zwischenraum mit Sand auf. Anschließend verdichtet man den Sand durch Klopfen am Glas. Ist der Sand dicht genug, so läßt sich das gesamte System am Besenstiel durch die Luft tragen. Der Besenstiel läßt sich nicht mehr aus dem Sand ziehen, weil die dafür notwendige Volumenvergrößerung des Sandes durch die starren Becherglaswände verhindert wird.

1.2.2.2 Segregation

Vom Standpunkt der Ingenieure und Verfahrenstechniker aus betrachtet, ist die Segregation eine unangenehme Eigenschaft der Dynamik granularer Materie. Segregation bedeutet Entmischung. Bewegt man ein Gemenge aus verschiedenen granularen Materialien, so wird man feststellen, daß sich die verschiedenen Materialien bevorzugt in verschiedenen Raumbereichen des Systems sammeln [Wil76]. In der Praxis will man meistens genau das Gegenteil erreichen [Wei58]. Unterschiedliche granulare Materie soll möglichst gut gemischt werden. Leider steht diesem Ansinnen die Segregation prinzipiell entgegen. Die Verschiedenheit der Materialien kann sich auf alle physikalisch relevanten Größen beziehen, also Form, Ausdehnung, Gewicht, Oberflächen- oder Elastizitätseigenschaften. Die Bewegung kann auf alle erdenklichen Arten erfolgen, zum Beispiel Schütten, Vibrieren, Rotieren, Scheren oder Fallen. In jedem Fall tritt Segregation auf.

Zur Veranschaulichung sei exemplarisch angeführt, daß man am Fuße eines Sandhügels immer die großen Sandkörner finden kann [JM90], daß sich in rotierenden Trommeln innerhalb der ersten Umdrehung ein Kern mit kleineren oder schwereren Teilchen innerhalb der Füllung bildet [Oya39, Bau93, CB95], oder daß in einem Behälter unter Vibration die größeren Teilchen an die Oberfläche transportiert werden [AS73, RSPS87, JMP92, DRC93].

1.2.2.3 Konvektion

Mit dem Problem der Segregation unter Vibration ist das Phänomen der Konvektion verknüpft. Es ist zu beobachten, daß in vibrierten Behältern Konvektionsrollen entstehen [GHS92, LCB+94b, KEK+96]. Die granulare Materie wird entlang der Wände nach unten zum Behälterboden transportiert und taucht anschließend in der Mitte des Behälters wieder auf. In diesem Zusammenhang sehen einige Forscher die Konvektion als den wahren Grund der oben beschriebenen Größensegregation [KJN93]. Die großen Teilchen werden mit den kleinen an die Oberfläche transportiert, können dort aber nicht mehr in die Füllung eintauchen. Andere im letzten Abschnitt zitierte Forscher sehen einen eigenständigen Segregationseffekt ohne Konvektion. Dieser beruht darauf, daß die Wahrscheinlichkeit, daß ein kleines Teilchen durch die Vibration unter ein großes schlüpfen kann, größer ist, als für den umgekehrten Fall. Mittlerweile kristallisiert sich heraus, daß beide Standpunkte richtig sind, also beide Mechanismen existieren [DMCR93]. Ihr Auftreten ist Abhängig von der Frequenz und der Amplitude der Vibration.

1.2.2.4 Musterbildung

Segregation verschiedener granularer Materialien erzeugt grundsätzlich ein Muster in der Verteilung der Materialien. Auffällig ist zum Beispiel in rotierenden Trommeln die achsiale Segregation in parallele Streifen [Oya39, DR62], die die anfängliche radiale Segregation mit einem Kern ablöst, oder die Streifenbildung beim Aufschütten eines Hügels aus zwei ursprünglich gemischten Materialien [MHKS97].

Weniger bekannt sind Musterbildungen mit identischen Teilchen. Hier sind in erster Linie kristalline Packungsstrukturen [BJW93, Bau93, BH93] und die Entstehung von Mustern unter Vibration zu nennen. Dabei wurden verschiedene Arten von Mustern beobachtet. Sie unterscheiden sich im wesentlichen durch eine unterschiedlich starke Anregung des Systems und damit in der Fluidisierung [ESD90]. Bei niedrigen Anregungen kann man zunächst spontane konvektionsbedingte Haufenbildung beobachten [Raj91, LDF89]. Es ist sogar möglich, daß für sehr kleine Anregungen die Konvektion nur an der Grenze zwischen den Behälterwänden und der Oberfläche der Füllung entsteht. Die Konvektionsrollen sind nur wenige Teilchenradien groß und führen trotzdem zu einer Haufenbildung [CDR92, Job93]. In stark fluidisierten Systemen bei sehr großen Anregungen findet man eine Vielzahl von unterschiedlichen Oberflächenmustern, zum Beispiel Wellen, Streifen, Waben oder kleine Hügel [DHL87, PB93a, MUS94, MUS95, LCRD96]. Mit steigenden Anregungsenergien kann man Bifurkationen des Musters und Periodenverdoppelungen beobachten. Schließlich wurden kürzlich in solchen hochangeregten Systemen Zustände entdeckt, in denen die Oberflächenmuster periodische lokalisierte Schwingungen durchführen. Innerhalb solcher Schwingungen wechseln sich Haufen mit Vertiefungen ab. Diese Schwingungszustände werden als Oszillonen bezeichnet [UMS96].

Weitere, allgemein bekannte Muster sind Dünen und wellenförmige Rippel, die durch den Transport von Sand durch Luft oder Wasser entstehen [Bag41, NO93]. Selbst die Ringe des Saturn, ihre Entstehung, Form und ihr Aussehen werden durch die Eigenschaften der granularer Materie, aus der sie bestehen, bestimmt [Wie87, WD88, BGT85, Dil93, SHB95].

1.2.2.5 Dissipation

Die bedeutenste Eigenschaft granularer Materie ist ihre Fähigkeit zur Dissipation von kinetischer Energie. Jedes einzelne Teilchen granularer Materie besitzt eine Vielzahl von inneren Freiheitsgraden. Durch diese inneren Freiheitsgrade sind die Teilchen in der Lage, äußere Anregungen, wie zum Beispiel Stöße, in Wärme umzuwandeln. Atome oder Moleküle von Gasen oder Flüssigkeiten haben diese Dissipationsmöglichkeit nicht. Aus diesem Grunde lassen sie sich nicht wie granulare Materie zu einem Hügel aufschütten, können dafür aber zum Beispiel ohne Dichtewellen durch Rohre fließen. Granulare Materie zeigt in diesem Fall immer Dichtefluktuationen, ähnlich den Staus im Straßenverkehr [Her95, SSN96].

Durch die Dissipation der kinetischen Energie erreicht jedes System granularer Materie, dem von außen keine Energie zugeführt wird, in kurzer Zeit einen stationären Gleichgewichtszustand der Ruhe [JN92, MY92, MY94, GZ93]. Im Sinne der klassischen Thermodynamik entspricht dieser Gleichgewichtszustand dem absoluten Nullpunkt mit einer Temperatur $T = 0$. Angeregte, dynamische granulare Systeme sind dementsprechend in einem Nichtgleichgewichtszustand, für den im strengen klassischen Sinn keine Temperatur definiert werden kann. Trotzdem wird im allgemeinen granularen Systemen in Analogie zur Thermodynamik eine granulare Temperatur T_g zugeordnet, die erstmals von Ogawa eingeführt wurde [Oga78].

$$T_g = \left\langle \left(\vec{v}_i - \langle \vec{v}_i \rangle\right)^2 \right\rangle \qquad i = 1, \ldots, N \tag{1.1}$$

Die granulare Temperatur ist die mittlere quadratische Abweichnug der Teilchengeschwindigkeiten $\vec{v}_i$ von der mittlere Geschwindigkeit aller N Teilchen eines Systems.

Durch Dissipation von kinetischer Energie kommt es in granularen Systemen zu einer Angleichung der Teilchengeschwindigkeiten. Die granulare Temperatur nimmt demzufolge durch Dissipation ab [MY92, MY94]. Dieser Prozess wird dissipative Kühlung genannt [Sch96a]. Um die granulare Temperatur eines Systems aufrechtzuerhalten, muß deshalb von außen Energie zugeführt werden.

Grundsätzlich ist die granulare Temperatur keine homogen im System verteilte Größe, wie es von der Temperatur der Gleichgewichtsthermodynamik bekannt ist. Aus spontanen Fluktuationen, die immer existieren, entstehen kleinere lokale Gebiete mit niedrigerer granularer Temperatur als in ihrer Umgebung. Gleichzeitig ist innerhalb dieser lokalen Gebiete durch die niedrigere granulare Temperatur, das heißt durch die geringeren Relativgeschwindigkeiten zwischen den Teilchen, der Druck vermindert und die Dichte erhöht. Gegenüber der Umgebung existiert ein granularer Temperatur- und Druckgradient, der einen Zufluß von Teilchen aus der Umgebung in die Gebiete niedrigerer granularer Temperatur zur Folge hat. Aus diesem Grund wachsen kühlere Gebiete grundsätzlich gegenüber wärmeren Gebieten an und weisen eine erhöhte Dichte und einen verminderten Druck auf [Her95]. Allgemein geht deshalb mit einer inhomogenen und instabilen Temperaturverteilung zusätzlich immer eine inhomogene und instabile Druck- und Dichteverteilung einher.

1.2.2.6 Selbstorganisierte Kritizität

1987 führten P. Bak, C. Tang und K. Wiesenfeld das Konzept der selbstorganisierten Kritizität für Systeme mit einer Schwellwertdynamik ein. Selbstorganisierte Kritizität bedeutet, daß sich die Dynamik eines Systems von selbst in einen kritischen Punkt entwickelt und dort verbleibt. Am kritischen Punkt wird sodann Energie auf allen möglichen Skalen dissipiert. Das Verhalten wird charakterisiert durch eine Reihe von kritischen Exponenten, die über Skalenrelationen miteinander verknüpft sind, und es zeigt sich ein *Finite-Size-Scaling* [BTW87, BTW88, Ján91].

Als Beispiel für selbstorganisierte Kritizität stellten Bak, Tang und Wiesenfeld ein einfaches Sandhaufenmodell in Form eines zellularen Automats vor. Dieses Modell soll die Dynamik der Lawinen auf einem Sandhaufen simulieren, dem kontinuierlich an der Spitze neue Sandkörner zugeführt werden. Spätere Experimente mit entsprechenden Systemen ließen aber bezweifeln, daß reale Sandhaufen selbstorganisierte Kritizität zeigen [HSK+90, RVK93, Fed95]. Innerhalb dieser Arbeit wird dem Thema selbstorganisierte Kritizität im Abschnitt 2.2.5 noch weitere Aufmerksamkeit zuteil.

1.2.3 Problemkomplex Zweiteilchenkontakt

Da granulare Materie nur über Kontaktkräfte wechselwirkt, läßt sie sich gut als Summe von Zweiteilchenwechselwirkungen beschreiben. Fast alle Computersimulationsmodelle basieren im Prinzip auf diesem Ansatz. Man hofft auf diese Weise einige makroskopische Eigenschaften der granularen Materie auf die mikroskopischen Eigenschaften der einzelnen Teilchen beziehungsweise des Zweiteilchenkontaktes zurückzuführen. Ein typisches Beispiel hierfür ist der Unterschied zwischen Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel. Dieser wird direkt mit der Dilatanz, den Restitutions-[2], Gleitreibungs- und Haftreibungskoeffizienten in Verbindung gebracht [Bag66, JLNW90, DBW96].

Problematisch an diesem grundlegenden Konzept der Zweiteilchenwechselwirkungen ist, daß das granulare Zweiteilchenproblem auf Grund der zahlreichen inneren Freiheitsgrade mitnichten gelöst ist. Vielmehr ist die wahre Physik der Wechselwirkung zweier einzelner makroskopischer Teilchen teilweise genauso unverstanden wie die der gesamten granularen Materie. Exemplarisch sei der schiefe Stoß zweier Kugeln in einer reibungsfreien Umgebung angeführt. Die Geschehnisse während eines solchen Stoßes sind äußerst komplex. Einige bedenkenswerte Punkte werden im Folgenden angeführt. Ausführliche Darstellungen des Problems finden sich in [Gol60, Joh85]

Während eines Stoßes treten Kräfte und Deformationen auf, die sowohl normal als auch tangential zu den Kontaktflächen der Kugeln verlaufen. Sie erzeugen in beiden Richtung Kompressionswellen mit sowohl longitudinalen als auch transversalen Schwingungsmoden. Die Schwingungen sind in der Regel gedämpft, was einen Teil der Energiedissipation während des Stoßes ausmacht. Ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit ist richtungs- und materialabhängig. Wellen, die nicht über die Oberflächen der Teilchen laufen, werden an den Oberflächen reflektiert. Nur bei exakt kugelförmigen, homogenen Teilchen kehren diese Wellen nach der Reflexion an ihren Ausgangspunkt zurück. Während der Dauer eines Stoßes ist es insbesondere bei unregelmäßig geformten Teilchen möglich, daß die Wellen mehrmals von der Oberfläche reflektiert werden und kreuz und quer durch das Teilchen

[2] Die Restitutionskoeffizienten sind ein Maß für die Inelastizität eines Stoßes und definiert als Verhältnis der Relativgeschwindigkeit nach dem Stoß zu derjenigen vor dem Stoß. Es existieren zwei Restitutionskoeffizienten. Einer für die Geschwindigkeitskomponente normal zur Stoßrichtung und einer für die tangentiale Komponente. Oftmals wird nur ein Gesamtrestitutionskoeffizient für den Betrag der Relativgeschwindigkeit angegeben.

laufen[3]. Üblicherweise befinden sich die Teilchen aus diesem Grund nach einem Stoß weiterhin in Schwingungen, die dann nach und nach in Wärme umgesetzt werden. Überschreitet der Druck in den Kompressionswellen einen bestimmten Schwellwert, so kommt es zu dauerhaften plastischen Verformungen. Die jeweiligen Einzelheiten hängen stark von Materialeigenschaften und Mikrostruktur der Teilchen ab.

Die Kontaktflächen der Kugeln während des Stoßes sind zeitabhängige Größen, die ausgehend von einem Punkt anwachsen, eine maximale Ausdehnung erreichen und wieder auf einen Punkt zusammenschrumpfen. Ausgangs- und Endpunkt sind in der Regel nicht identisch. Die Druckverteilungen über die Kontaktflächen sind sehr inhomogen und nicht linear. Während an den Rändern der Kontaktflächen nur wenig Druck zwischen den Kugeln herrscht, ist er in der Mitte maximal. Auf Grund von Oberflächenwellen kann es zu Resonanzschwingungen an den Kontaktflächen kommen.

Der normale Druck senkrecht zu den Kontaktflächen ist eine entscheidende Größe für die Wechselwirkung der beiden Oberflächen. Bei kleinen normalen Drücken ergibt sich ein Gleiten unter Reibung, bei größeren ein Haften. Dementsprechend ist es typisch, daß beide Kugeln in der Mitte der Kontaktflächen haften und außen gleiten. Man spricht von mikroskopischem Gleiten (englisch: *Micro-Slip*). Zu Beginn und am Ende eines Stoßes ist jedoch kein Haften der Oberflächen möglich, da die normalen Drücke nicht ausreichend sind. Manchmal ergibt sich auch ein Regime des Quietschgleitens (englisch: *Stick-Slip*), bei dem die Oberflächen periodisch aneinander haften und übereinander reiben. Wichtig sind in diesem Zusammenhang Oberflächeneigenschaften der Teilchen und der Einfluß von Verschmutzungen und Abrieb.

Alles in allem ist ein Stoß folglich nicht nur eine viskoelastische Deformation zweier Teilchen, sondern ein komplexes dynamisches Problem. Die komplizierten zeitabhängigen Tangential- und Normalkräfte während eines Stoßes hängen nicht nur von der Schiefe und den Ausgangsgeschwindigkeiten ab, sondern sind das Resultat der mikroskopischen Eigenschaften an den Oberflächen und innerhalb der Teilchen. Dies macht deutlich, daß der zeitliche Verlauf eines Stoßes, die auftretenden Kräfte und die Dissipation von einer Vielzahl von Parametern abhängen, die zum Teil experimentell und theoretisch nicht zugänglich sind. In diesem Sinne sind mikromechanische Größen wie Restitutions- oder Reibungs-

[3] Eine kurze, lesenswerte Einführung zu dieser Problematik ist das Kapitel 51-3, „Wellen in Festkörpern“, der Feynman Vorlesungen über Physik [FLS63]. Darin werden als Beispiel die Wellen im Festkörper Erde beschrieben.

koeffizienten, auf die die Physik der granularen Materie zurückgeführt werden soll, keine Konstanten sondern nur statistisch gemittelte Materialeigenschaften, von denen es im Einzelfall große Abweichungen geben kann. Es wurde zum Beispiel festgestellt, daß die Restitutionskoeffizienten bei einem Zweiteilchenstoß selbst mit vereinfachenden Annahmen von der anfänglichen Relativgeschwindigkeit, der Geometrie des Stoßes und den Reibungskoeffizienten abhängen [SL92]. Der Haftreibungskoeffizient für Zweiteilchenkontakte ist eine von der Zeitdauer des Kontaktes abhängige Größe [HBP+94].

1.3 Fazit

Granulare Materie zeigt eine Fülle von höchst interessanten Verhaltensformen und Phänomenen. Computersimulationen sind in der Lage, neue Phänomene zu entdecken und bekannte Phänomene zu erklären. Diese Erklärungen beschränken sich allerdings im wesentlichen auf das makroskopische Verhalten der granularen Materie. Viele Phänomene basieren auf den äußerst komplexen mikroskopischen Eigenschaften der einzelnen Teilchen und ihrer Kontaktwechselwirkungen. Schon die Physik eines „einfachen“ Zweiteilchenstoßes ist zu kompliziert, als daß sie in ihrer Gesamtheit verstanden wäre. In dieser Hinsicht ist die vollständige deterministische Kenntnis über die Entwicklung eines Systems granularer Materie ein bis heute und wahrscheinlich auch zukünftig unerreichbares Ziel. Alle Computersimulationen und Experimente können aus diesem Grund letztlich nur dazu dienen, die wesentlichen von den unwesentlichen Größen und Parametern zu trennen. Anschließend wird man vielleicht in der Lage sein eine geeignete einheitliche Theorie der granularen Materie aufzustellen. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt hierbei auf dem gegenwärtigen Stand der Forschung, dem Entdecken und Erklären der makroskopischen Phänomene und der Entwicklung von neuen Modellen, die in bestimmten Teilbereichen der Physik granularer Materie eingesetzt werden können.

Kapitel 2

BTR-Modell

Das *Bottom-to-Top-Restructuring* (BTR) Modell wurzelt im bekannten Modell der ballistischen Ablagerung, das von W.M. Visscher und M. Bolsterli 1972 eingeführt wurde [VB72]. Es ist geeignet, die zeitliche Entwicklung quasi-statischer granularer Systeme mit geringer Fluidisierung zu simulieren. Das Modell der ballistischen Ablagerung war zunächst von R. Jullien, P. Meakin und A. Pavlovitch für Simulationen der Segregation granularer Materie durch Vibration erweitert worden [JMP92, JB93, JMP93]. Die abschließende Entwicklung zum BTR-Modell, das die genaue Form der äußeren Anregung der Systeme berücksichtigt, erfolgte durch G. Baumann, E. Jobs und D.E. Wolf [BJW93, Bau93, Job93]. Das BTR-Modell ist benannt nach der Regel, mit der in jedem Zeitschritt eine Umstrukturierung der Teilchenpositionen erfolgt. Die Regel besagt, daß dies in einer sequentiellen Reihenfolge von unten nach oben zu erfolgen hat. Bis heute wurde das BTR-Modell erfolgreich für Simulation zweidimensionaler granularer Materie in Trommelmischern und in vibrierten Boxen eingesetzt.

Da das BTR-Modell auf den rein geometrischen Ansätzen der ballistischen Ablagerungberuht, ist es ein minimalistisches Modell (englisch: *Toy-Model*). Bestimmte, komplexere physikalische Eigenschaften werden vernachlässigt oder nur in Grenzfällen berücksichtigt. Auf diese Weise hebt man die Rolle einer einzelnen Eigenschaft, hier die der Geometrie, hervor. Da in solchen minimalistischen Modellen keine komplizierten Differentialgleichungen zu lösen oder komplexe Wechselwirkungen zu berechnen sind, ist die Geschwindigkeit der Simulationsalgorithmen einer ihrer entscheidenden Vorteile.

2.1 Bisherige Ergebnisse

Das BTR-Modell wird in dieser Arbeit zur Simulation der Dynamik granularer Materie in zweidimensionalen, rotierenden Trommel verwendet. Ausgangspunkt sind die Ergebnisse, die zuvor in einer Diplomarbeit [Bau93] erarbeitet und in [BJW93] veröffentlicht wurden. Darin sind die folgenden Punkte ausführlich geschildert.

Das BTR-Modell hat einen stroboskopartigen Charakter. Dies bedeutet, daß nicht die vollständige Zeitentwicklung eines Systems simuliert wird, sondern nur dessen Zustände in zeitlich konstanten Abständen. Die granulare Materie wird in den physikalischen Grenzfällen sehr großer Haftreibung, vernachlässigter Trägheit und verschwindender Restitutions- und Gleitreibungskoeffizienten modelliert. Diese Eigenschaften ergeben sich unmittelbar aus den rein geometrischen Ansätzen des Modells und betonen den geometrischen Charakter der Ergebnisse.

Der Ablauf einer Simulation rotierender Trommeln gestaltet sich wie folgt: In jedem der aufeinanderfolgenden Zeitschritte erfolgt zuerst eine Modellierung der Rotation, indem die gesamte Konfiguration mit einer festen Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ um den Mittelpunkt der Trommel gedreht wird. Anschließend erfolgt eine Sortierung der Teilchen nach aufsteigender Höhe. Diese Sortierung wird genutzt, um die Teilchen in sequentieller Reihenfolge von unten nach oben in das nächste lokale Minimum relaxieren zu lassen. Die Relaxation erfolgt nach den Regeln der ballistischen Ablagerung und vernachlässigt alle höher liegenden Teilchen. Dies ist zulässig, da sich die Teilchen entweder auf parallelen Trajektorien innerhalb der Füllung bewegen oder an der Oberfläche über genügend Dilatanz verfügen, so daß höhere Teilchen leicht von niedrigeren verdrängt werden können. Der Einfluß höherer Teilchen ist also vernachlässigbar. Ein Zurückgleiten der Teilchen in die ursprünglichen Positionen wird verhindert, indem die Trommelwand in ihrem unteren Bereich als haftend simuliert wird. Physikalisch entspricht dies der Tatsache, daß die Haftreibung in diesem Bereich größer ist als die tangentiale Komponente der Gravitationskraft. Eine genaue und detailgetreue Beschreibung des Algorithmus befindet sich in [Bau93].

Die Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ ist nicht mit der Rotationsgeschwindigkeit eines echten Experimentes zu verwechseln. Es existieren keine natürlichen Einheiten im BTR-Modell, die den Simulationszeitschritt mit der physikalischen Zeit verknüpfen. Der simulierte physikalische Grenzfall vernachlässigter Trägheit der Teilchen bedeutet vielmehr eine Simulation mit langsamer Rotation der Trommel. Die genaue Rolle von $\Delta\Phi$ wird später, innerhalb dieser Arbeit geklärt.

Das BTR-Modell ist in der Lage, das bekannte physikalisch richtige Verhalten in rotierenden Trommel zu reproduzieren. Hierzu gehört die radiale Segregation der kleineren Teilchen einer bidispersen Füllung[1] zu einem Kern nahe der Oberfläche. Als Mechanismus der Segregation wurde ein rein geometrischer Effekt erkannt. Für die kleineren Teilchen ist die Wahrscheinlichkeit größer, innerhalb einer Lawine von einer Nische an der Oberfläche eingefangen zu werden, als für ein großes Teilchen. Demzufolge bewegen sich die kleinen Teilchen bevorzugt auf Trajektorien nahe der Trommelmitte und die großen bevorzugt auf solchen nahe der Trommelwand.

Als Indikator für die Existenz der Segregation wurde ein endlicher Abstand zwischen den Schwerpunkten der kleinen und großen Teilchen erkannt. Mit diesem Indikator konnte gezeigt werden, daß Segregation für alle Radienverhältnisse $r = r_s/r_l \leq 0.9$ auftritt. Der Indikator hängt absolut und relativ von der Systemgröße ab. Der Winkel zwischen der Oberfläche und der Horizontalen ist eine Funktion des Radienverhältnisses. Ein Maß für den Füllungsgrad einer Trommel ist der auf den Trommelradius normierte Abstand zwischen dem Schwerpunkt aller Teilchen und dem Trommelmittelpunkt.

In monodispersen Systemen existiert eine strukturelle Selbstorganisation. Die Konfigurationen der Teilchen in der Trommel zeigen eine kristalline Packungsstruktur mit verschiedenen Domänen und Defektlinien und einem amorphen Bereich im oberen Teil der Füllung. Durch die Rotation ist diese Struktur dynamischen Umstrukturierungen unterworfen. Um künstliche Periodizitäten der Struktur zu vermeiden war es notwendig die Rotationsschrittweite irrational zu wählen. Dies wurde fortan und so auch in dieser Arbeit berücksichtigt. Ein typischer Wert, der ab hier als elementare Einheit der Rotationsschrittweite definiert sei, ist $\Delta\Phi = (\sqrt{99}/10)^\circ \doteq 1$ (eine Winkeleinheit).

[1] Bidisperse Füllungen bestehen aus einer Teilchenmischung zweier Größen. Monodisperse Füllungen besitzen eine einheitliche Teilchengröße.

2.2 Dynamik in einer rotierenden Trommel

Horizontal rotierende Trommeln werden seit langem zur Mischung granularer Materie eingesetzt. Jedem Leser werden die Betonmischer bekannt sein, die auf Lastkraftwagen installiert sind. Sie werden im Werk getrennt mit Zement, Wasser, Kies und Sand befüllt und mischen den Beton auf dem Weg zum Kunden. Andere Einsatzorte von Trommelmischern sind zum Beispiel Müllverbrennungsöfen, Zementherstellung oder Mahlwerke. In der mechanischen Verfahrenstechnik und damit in nahezu jedem Industriezweig, allen voran der chemischen Industrie, werden rotierende Trommeln zum Trocknen, Befeuchten, Mischen, Heizen, Kühlen, Verbrennen, Pelletieren, Zerkleinern oder für Reaktionen zwischen Gasen und Festkörpern verwendet. Daß dies nicht immer unproblematisch ist, zeigt eine Staubexplosion die kürzlich ein ganzes Mahlwerk in Wesel zerstörte. In diesem Mahlwerk wurde das Mahlgut mit Hilfe von großen, sehr schweren Stahlkugeln,

Die Druckwelle der Explosion im Versuchsmahlwerk bei Welsch fegte die komplette Dachverkleidung weg. Lediglich Eternit–Fetzen hafteten noch am kahl-gesprengten Stahlgerüst, das standhielt. RP-Fotos: Ekkehart Malz

Abbildung 2.1: Foto aus der Rheinischen Post vom 13.11.1996.

die zusätzlich zum Mahlgut in eine rotierende Trommel gegeben wurden, zerkleinert. Ein solches Mahlwerk nennt man Kugelmühle.

Wegen ihrer weiten Verbreitung sind rotierende Trommeln seit langem Gegenstand der Forschung. Die erste dokumentierte fundamentale Arbeit geht auf Y. Oyama aus dem Jahre 1939 zurück [Oya39]. Leider ist diese Arbeit in Japanisch verfasst, sodaß ein Mitteleuropäer ihren Inhalt in der Regel nur anhand der vielen interessanten Bilder und Schemata erfassen kann. Eine Überblick über diese Arbeit gibt S.S. Weidenbaum [Wei58]. Demnach sind bereits von Oyama alle wesentlichen Mechanismen in rotierenden Trommeln erkannt worden. Sie werden im Folgenden dargestellt.

2.2.1 Bisherige Befunde im Überblick

In rotierende Trommeln existieren unterschiedliche dynamische Regime in Abhängigkeit von der Rotationsgeschwindigkeit der Trommel [Wei58, Raj90]. Für langsame Umdrehungen ergibt sich ein Regime mit diskreten Lawinen. Darin ist die Zeitdauer der Lawinen in der Regel sehr viel kürzer als der Zeitraum zwischen den Lawinen. Das Oberflächenprofil ist im wesentlichen linear. Dieses Regime ist Gegenstand der Simulationen mit dem BTR-Modell, dieser Arbeit, sowie den meisten anderen bekannten Arbeiten. Erhöht man die Rotationsgeschwindigkeit der Trommel, so geht man zu einem Regime mit kontinuierlicher Lawinenaktivität an der Oberfläche über. Hierbei wird das Oberflächenprofil mit steigender Geschwindigkeit immer S-förmiger. Das anschließende Regime ist dadurch gekennzeichnet, daß sich einzelne Teilchen aus der Oberfläche lösen und im freien, bogenförmigen Flug zum Fuß der Füllung zurückkehren. Schließlich erreicht man das letzte Regime, wenn die Rotationsgeschwindigkeit so groß wird, daß alle Teilchen durch die Zentrifugalkraft an der Wand gehalten werden und keine Lawinen mehr zu beobachten sind. Die jeweiligen Übergänge zwischen den einzelnen Regimen sind fließend.

Der Mischprozeß in dreidimensionalen rotierenden Trommeln basiert auf zwei verschiedenen Mechanismen [Wei58]. Es existieren innerhalb der Lawinen ein sogenannter lokaler Mischmechanismus durch Scherung und ein sogenannter globaler Mischmechanismus durch Diffusion in axialer Richtung. Der lokale Mechanismus ist ein zweidimensionaler Effekt, was besagt, daß er in radialer Richtung, senkrecht zur Rotationsachse der Trommel auftritt. Kürzlich konnten Metcalfe *et al.* mit einem zweidimensionalen Experiment zeigen, daß dieser Mechanismus am effektivsten ist, wenn die Trommel zu einem Viertel gefüllt ist [MSMO95].

Der globale Mischmechanismus basiert auf einer Art *Random-Walk* in axialer Richtung, den die Teilchen beim Hinunterrollen ausführen. Dies hat zum Beispiel zur Folge, daß sich zwei anfänglich in der rechten und linken Hälfte einer Trommel getrennte Teilchensorten durchmischen. Da es sich um einen stochastischen Prozeß handelt, läßt er sich durch eine Diffusionsgleichung beschreiben [Lac54, HCHF66, CDFL92]. Der globale Mischmechanismus ist erheblich langsamer als der lokale.

Mit den beiden Mischmechanismen ist die Segregation granularer Materie eng verknüpft. Wird eine Trommel mit verschiedenartigen, zum Beispiel bidispersen Teilchen gefüllt, so stellt sich an Stelle einer guten Mischung duch die beiden Mechanismen eine Segregation, also Entmischung der verschiedenen Teilchensorten ein [Oya39, Wei58, DR62, RC71, Wil76, SKB91, ZLL+94, Nak94, NACF97, HK95, HKC96]. Entsprechend der Geschwindigkeit des lokalen Mechanismuses entsteht die dadurch verursachte radiale Segregation schon innerhalb der ersten Umdrehung der Trommel. Die radiale Segregation äußert sich in einem Kern aus kleinen Teilchen innerhalb der Füllung nahe der Oberfläche. Sie wird ebenfalls in zweidimensionalen Systemen beobachtet [CB95, Can95, CDR93, CRD95]. Die axiale Segregation, die durch den globalen Mechanismus verursacht wird und deshalb viel später entsteht, äußert sich in Bändern aus Teilchen alternierender Größe. Abhängig von den verwendeten Teilchen und ihren Eigenschaften stellt sich nach vielen Umdrehungen ein dynamisches Gleichgewicht bezüglich der Segregation ein. Dieser Gleichgewichtszustand kann aus rein axialer oder rein radialer Segregation oder einer Mischform bestehen [Oya39, DR62]. Als Ursache für die axiale Segregation wird im allgemeinen ein Unterschied im Böschungswinkel zwischen monodispersen und bidispersen Bereichen einer Füllung angesehen. Nachwievor ist aber umstritten, ob die Stirnwände der Trommeln die axiale Segregation induzieren oder nicht. Einige Forscher sehen dies als gegeben [DR62, Nak94] andere nicht [ZLL+94, HK95]. Interessanterweise haben neuere Untersuchungen gezeigt, daß es möglich ist durch eine Verringerung der Rotationsgeschwindigkeit die axiale Segregation wieder rückgängig zu machen [HK94, HK95].

Weitere interessante Aspekte bieten die Analysen von Lawinenstatistiken in rotierenden Trommeln. Dem Modell der selbstorganisierten Kritizität von P. Bak, C. Tang und K. Wiesenfeld zufolge [BTW87, BTW88] erwartete man, daß Lawinen in rotierenden Trommeln ein entsprechendes kritisches Verhalten zeigen würden. Es stellt sich aber heraus, daß an Stelle des kritischen Verhaltens ein eher periodisches Verhalten bestimmter Lawinenaktivitäten zu verzeichnen ist

[JLN89, ER89, Eve91, CDFL92, CLDBR95]. Letzteres kann mit einem stochastischen Markov-Prozeß beschrieben werden [MGLARR+93].

2.2.2 Segregation

Wie schon erwähnt ist das BTR-Modell in der Lage, die radiale Segregation der Teilchen einer bidispersen Mischung in einer zweidimensionalen rotierenden Trommel zu reproduzieren. Eine entsprechende Simulation ist durch die folgenden Größen charakterisiert. Alle Längen werden in Einheiten des Radiuses der großen Teilchen $r_l = 1$ gemessen. Das Radienverhältnis r der großen und kleinen Teilchen ist definiert als $r = r_s/r_l \leq 1$. Hierbei ist r_s der Radius der kleinen Teilchen. R bezeichnet den Radius der Trommel und N die Anzahl der Teilchen in der Trommel. Diese ist in bidispersen Systemen die Summe der Anzahl der kleinen Teilchen N_s und der großen Teilchen N_l. Dies definiert wiederum die Konzentration $c = N_s/N$ der kleinen Teilchen innerhalb der Füllung. Schließlich ist der Füllungsgrad der Trommel Γ eine Funktion der Füllhöhe h, bis zu der die Trommel gefüllt ist [Bau93]. Fast alle bisherigen und folgenden Untersuchungen verwenden annähernd halb gefüllte Trommeln mit einer Füllhöhe von $h = 0.95R$, was einem Füllungsgrad von $\Gamma = 0.45$ entspricht. Mehr als halb gefüllte Trommeln besitzen einen Kern von Teilchen innerhalb der Füllung, der nicht an den Oberflächenlawinen partizipiert, und deshalb die Ergebnisse verfälschen kann [DR62, MSMO95]. Der letzte verbliebene Parameter einer Simulation ist die Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ der Trommelrotation.

Die Abbildung 2.2 zeigt das Ergebnis einer typischen Simulation radialer Segregation in einer rotierenden, annähernd halb gefüllten Trommel. Die Parameter der Simulation sind der Abbildung zu entnehmen, die in a) die Anfangskonfiguration und in b) das gleiche System nach drei Umdrehungen der Trommel zeigt. Man erkennt sehr deutlich die Segregation der Teilchen. Die kleinen Teilchen haben sich in einem Kern gesammelt und die großen sind bevorzugt nahe der Trommelwand zu finden. Die Konfiguration der großen Teilchen zeigt Ansätze kristalliner Packungsstrukturen, wie sie in rein monodispersen Systemen auftreten. Die dargestellte Segregation entsteht in BTR Simulationen analog zu den experimentellen Befunden [CB95] schon innerhalb der ersten Umdrehung der Trommel. Die Form und die Position der „Segregationswolke“ der kleinen Teilchen kann sich in Abhängigkeit von den Simulationsparametern innerhalb der zweiten und dritten Umdrehung ein wenig ändern. Spätestens mit Abschluss der dritten Umdrehung sind alle anfänglichen Transienten abgeschlossen [Bau93].

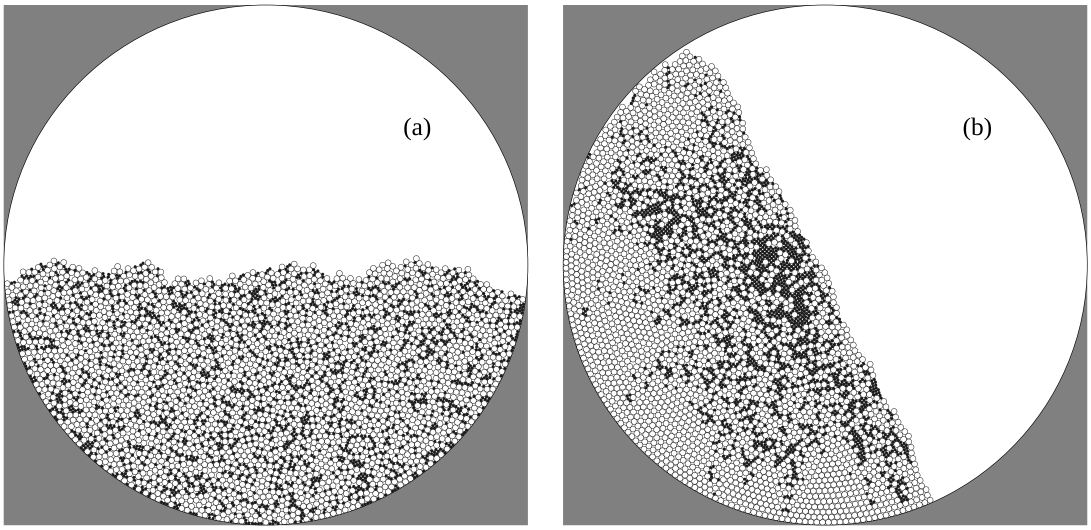

Abbildung 2.2: Segregation in einer typischen BTR-Simulation. (a) zeigt die gemischte Anfangskonfiguration und (b) das gleiche System nach 3 Umdrehungen. Die Parameter sind $R = 90$, $N = 4955$, $r = 0.5$, $c = 0.5$, $\Gamma = 0.45$ und $\Delta\Phi = 1$.

2.2.2.1 Trajektorien und Ergodizität

Meistens ist es in Experimenten zu kompliziert oder sogar unmöglich die Bewegungen aller Teilchen nachzuhalten. Aus diesem Grund verwenden Experimentatoren sehr oft die Untersuchungsmethode der markierten Teilchen. Dabei verfolgt man die Dynamik einzelner markierter Teilchen, die zum Beispiel eine andere Farbe haben [CCF+96], um so auf die Dynamik des gesamten Systems zu schließen. Voraussetzung für diese Methode ist, daß das untersuchte System ergodisch ist. Ergodisch bedeutet in diesem Fall, daß die statistischen Eigenschaften des Ensemblemittels über das System identisch mit denen des Zeitmittels über die beobachteten Trajektorien der markierten Teilchen sind.

Um die Ergodizität in rotierenden Trommeln zu prüfen wurden die Trajektorien eines großen und eines kleinen markierten Teilchens in einem System mit den Parametern aus Abbildung 2.2 über 500 Umdrehungen aufgenommen[2]. Die Abbildung 2.3 zeigt einen Ausschnitt von circa 55 Umdrehungen aus diesen Trajektorien. Beide Trajektorien bestehen ungefähr aus halbkreisförmigen Abschnitten innerhalb der Füllung und aus geraden Abschnitten an der Oberfläche. Die

[2]Die Effizienz und Schnelligkeit des BTR-Algorithmuses zeigt sich daran, daß für diese Trajektorien nur 21 Stunden Rechenzeit auf einer *IBM RS6000/355 Risc Workstation* benötigt wurden.

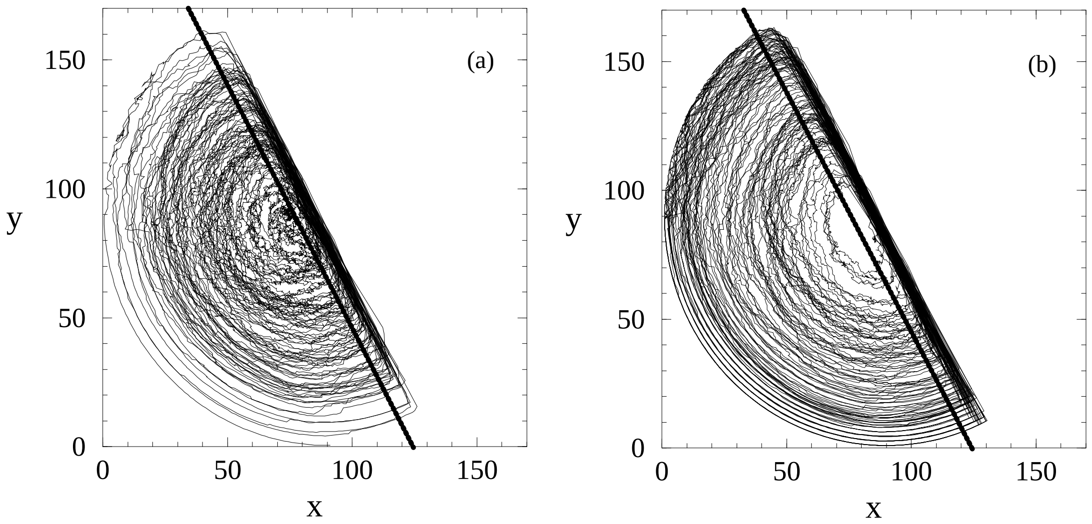

Abbildung 2.3: Trajektorien eines markierten a) kleinen und b) großen Teilchens in dem System aus Abbildung 2.2. Die dicken Linien separieren die Lawinenzone vom Rest der Füllung.

geraden Abschnitte kennzeichen die Lawinenzone, die ungefähr eine Breite von 6 Längeneinheiten aufweist. Mit diesem Verhalten wird noch einmal deutlich die Berechtigung für das sequentielle Vorgehen von unten nach oben des BTR-Modells bestätigt. Innerhalb der Füllung bewegen sich alle Teilchen auf parallelen halbkreisförmigen Bahnen. Höherliegende Teilchen können während der Umstrukturierungen eines Zeitschrittes vernachlässigt werden, weil sich die relativen Positionen der Teilchen zueinander nicht wesentlich ändern. In der Lawinenzone kennzeichnen größere Wegstrecken eine vermehrte Dilatanz, das heißt geringere Dichte. Tieferliegende Teilchen rutschen prinzipiell vor höhergelegenen die Oberfläche hinab. Sie sind, um voranzurutschen, in der Lage höherliegende Teilchen wenn nötig zur Seite zu schieben (Dilatanz).

In Abbildung 2.3 ist die Lawinenzone durch eine Linie vom Rest der Füllung getrennt. Der Winkel dieser Linie mit der Horizontalen ist der mittlere *Angel of Repose* $\alpha_r = 62.4°$ in diesem System. Die Trennungslinie ist so positioniert, daß alle abwärts gerichteten Bewegungen auf ihrer rechten Seite liegen und die Segregation deutlich auf ihrer linken Seite stattfindet. Die Segregation des kleinen Teilchens ist daran zu erkennen, daß es sich bevorzugt auf Bahnen nahe der Trommelmitte bewegte. Das große Teilchen zeigt einen bevorzugten Aufenthalt nahe der Wand. Qualitativ entspricht die dargestellte Segregation des kleinen beziehungsweise großen markierten Teilchens den experimentellen Ergebnissen von E. Clément, J. Duran und J. Rajchenbach, die eine einzelne kleine beziehungsweise große Scheibe in einem ansonsten monodispersen zweidimensionalen System untersuchten [CDR93, CRD95].

Für eine genaue Quantifizierung der Segregation wurde die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(m)$ für das Auffinden des kleinen beziehungsweise großen Teilchens in einem relativen Abstand m vom Mittelpunkt der Trommel untersucht. Dazu wurde die halbgefüllte Trommel in n konzentrische Schalen der Breite w unterteilt und ein Histogramm $H(m_i)$ aufgestellt, das angibt, wie oft das Teilchen sich in der i-ten Schale mit mittlerem Abstand m_i vom Trommelmittelpunkt befunden hat. Berücksichtigung fanden nur die Teile der Trajektorien, die außerhalb der Lawinenzone lagen. Es gelten:

$$w = \frac{R}{n}\,, \qquad m_i = (i - 0.5)w\,, \qquad i = 1, \ldots, n \qquad . \tag{2.1}$$

Die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung erhält man, wenn man das Histogramm mit der auf die Gesamtfläche aller Schalen normierten Fläche A_i der i-ten Schale normiert:

$$P(m_i) = \frac{H(m_i)}{A_i \sum_i H(m_i)} \qquad . \tag{2.2}$$

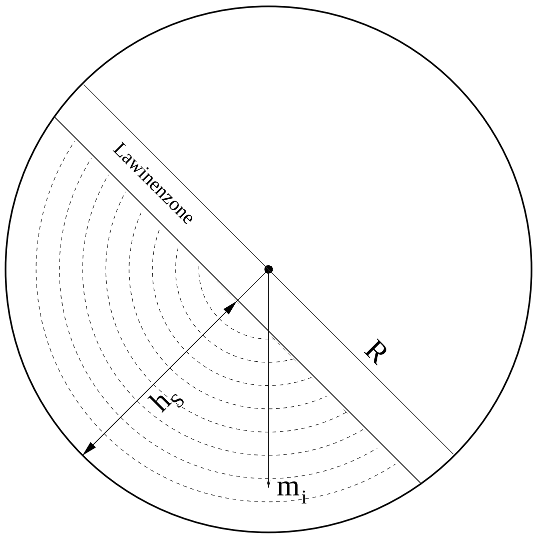

Abbildung 2.4: Schema der Geometrie der Schalen zur Ermittelung der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Die Fläche A_i einer Schale ergibt sich unter Berücksichtigung der Gesamtfläche der Füllung zu:

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{m_i \arccos\left(\frac{R-h_S}{m_i}\right)}{\sum\limits_i m_i \arccos\left(\frac{R-h_S}{m_i}\right)} \\ &= \frac{2wm_i \arccos\left(\frac{R-h_S}{m_i}\right)}{0.5\pi R^2 - (R-h_S)\sqrt{R^2-(R-h_S)^2} - R^2 \arcsin\left(\frac{R-h_S}{R}\right)} \end{aligned} \tag{2.3}$$

Dabei ist die absolute Höhe h_S der Gesamtfläche, dargestellt in Abbildung 2.4, insbesondere bei Trommeln, die nicht halbgefüllt sind, eine wichtige Größe.

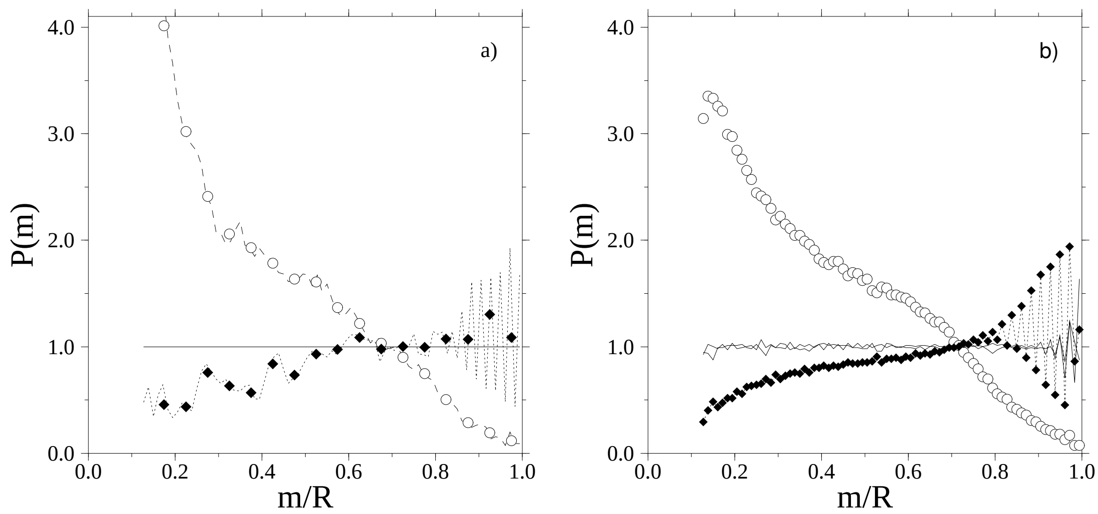

Abbildung 2.5: Radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung für a) jeweils ein markiertes kleines und großes Teilchen. Kleines Teilchen: gestrichelte Linie ($w = 1.0$) und Kreise ($w = 4.5$). Großes Teilchen: gepunktete Linie ($w = 1.0$) und Rauten ($w = 4.5$). Die waagerechte Linie stellt die Gleichverteilung P_u dar. b) für die Gesamtheit der kleinen (Kreise) beziehungsweise großen (Rauten) Teilchen. Die Linien zeigen die Verteilungen für beide Größen gemittelt über 75 Anfangskonfigurationen ($w = 1.0$ in allen Fällen).

In dieser Form ist Gleichung (2.3) nur für Trommeln gültig, die halb oder weniger als halb gefüllt sind. Für größere Füllungen ergibt sich aus analogen geometrischen Überlegungen eine ähnliche Gleichung. Die Normierung der Flächen A_i der Schalen ist notwendig, damit $P(m_i)$ den Charakter einer Dichte behält. Dies gilt insbesondere, wenn keine Segregation vorhanden ist. Das Histogramm ist dann entsprechend der Flächen der Schalen verteilt $[H(m_i) = A_i \sum_i H(m_i)]$ und die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung ist eine Gleichverteilung:

$$P_u\,(m_i) \,=\, 1 \qquad . \tag{2.4}$$

In Abbildung 2.5a) ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das große und das kleine markierte Teilchen dargestellt, die aus den Trajektorien über 500 Umdrehungen gewonnen wurde. Beide Verteilungen weichen deutlich voneinander und von der ebenfalls dargestellten Gleichverteilung ab. Für das kleine Teilchen erkennt man eine erhöhte Aufenthaltwahrscheinlichkeit nahe der Oberfläche, unterhalb der Lawinenzone und für das große Teilchen eine solche nahe der Wand. Dort zeigt die Kurve des großen Teilchens Oszillationen, die nur für kleinere Schalenbreiten zu erkennen sind. Sie entstehen durch die strukturelle Selbstorganisation der großen Teilchen zu konzentrischen Schalen entlang der Wand, die deutlich in Abbildung 2.2b) zu sehen ist.

Zum Vergleich ist in Abbildung 2.5b) die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Gesamtheit der kleinen beziehungsweise großen Teilchen dargestellt. Diese wurden ermittelt, indem die Anzahl der jeweiligen Teilchen in den Schalen über 180 statistisch unabhängige Konfigurationen entsprechend der Gleichung (2.2) in die Histogramme aufgenommen wurden. Die statistische Unabhängigkeit war dadurch gewährleistet, daß zwischen zwei Messungen 200 Zeitschritte lagen. Für halbgefüllte Trommeln mit der gewählten Größe der Rotationsschrittweite von $\Delta\Phi = 1$ bedeuten circa 180 Zeitschritte eine totale Umwälzung der gesamten Füllung.

Vergleicht man die beiden Darstellungen in Abbildung 2.5, so ist zu erkennen, daß sie beide sehr gut übereinstimmen. Sowohl das markierte kleine als auch große Teilchen besitzen im zeitlichen Mittel die gleiche radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung wie die Gesamtheit der jeweiligen Teilchensorte im Ensemblemittel. Das Verhalten ist demzufolge ergodisch. Die gemischten Anfangskonfigurationen entsprechen der theoretischen Gleichverteilung. Es muß betont werden, daß dieses Ergebnis nicht trivial ist. Es war durchaus denkbar, daß der Hauptteil einer „Segregationswolke“ auf Dauer aus den gleichen kleinen Teilchen besteht.

Mit Hilfe der Methode der markierten Teilchen läßt sich hervoragend ein Nachweis über die Existenz von Segregation für unterschiedliche Radienverhältnisse r der Teilchen führen. Untersucht wurden Radienverhältnisse im Bereich $0.5 \leq r \leq 0.9$. In Abbildung 2.6 ist die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung der Trajektorie eines markierten kleinen Teilchens eines Systems mit Radienverhältnis $r = 0.9$ dargestellt. Für dieses und alle kleineren Radienverhältnisse ist $P(m)$ keine Gleichverteilung. Allerdings ist die Segregation deutlich schwächer ausgeprägt als für den Fall von $r = 0.5$. Man beachte die Absolutwerte von $P(m)$ im Vergleich zur Abbildung 2.5a).

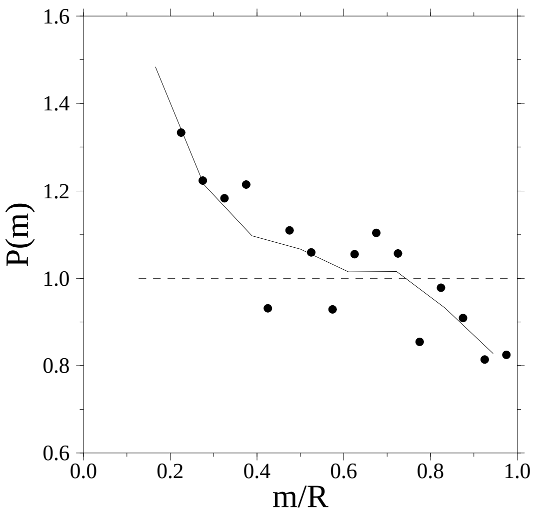

Abbildung 2.6: Radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Trajektorie eines kleinen Teilchens mit $r_s = 0.9$ in einem bidispersen System ($c = 0.5$, $R = 90$): Punkte ($w = 4.5$) und Linie ($w = 10.0$). Die Striche zeigen die Gleichverteilung.

Aus der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung der kleinen Teilchen läßt sich ein Maß für die Segregation ableiten. Dieses Maß ist die relative Abweichung der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung von der Gleichverteilung:

$$M = \sum_i A_i \left| P\left(m_i\right) - P_u \right| \qquad . \tag{2.5}$$

M läßt sich in sinnvoller Weise normieren und stellt somit ein wirkliches Maß für die Segregation dar. Dies ist für den Abstand Λ des Schwerpunktes der kleinen Teilchen $\vec{S}_s$ vom Gesamtschwerpunkt aller Teilchen $\vec{S}_{ges}$,

$$\Lambda = \left| \vec{S}_s - \vec{S}_{ges} \right| \tag{2.6}$$

nicht der Fall. Dieser Abstand war zuvor als Indikator für die Existenz der Segregation erkannt worden [Bau93]. Λ ist ohne Segregation offensichtlich gleich Null und vergrößert sich je stärker die Segregation wird.

In Abbildung 2.7 sind sowohl M als auch Λ als Funktion des Radienverhältnisses r aufgetragen. Die Fehlerbalken sind die Standardabweichung der Mittelung über 30 verschiedene Systeme. Für jedes einzelne System wurden die Daten über 5 Umdrehungen der Trommel aufgenommen. Dabei wurden jeweils 3 anfängliche Umdrehungen außer Acht gelassen. Beide Größen zeigen ein ähnliches Verhalten. Die Stärke der Segregation nimmt monoton mit steigendem Radienverhältnis ab und ist für alle untersuchten Radienverhältnisse ungleich Null.

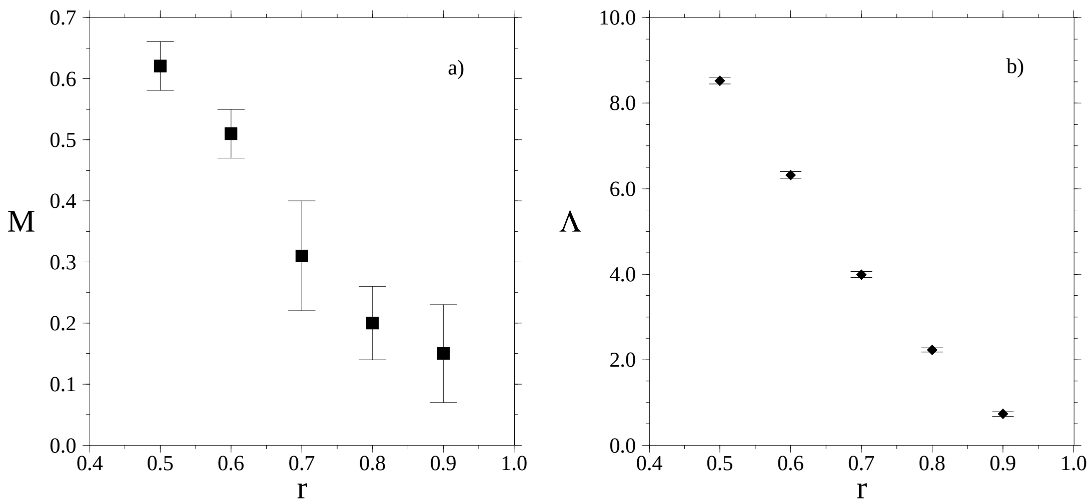

Abbildung 2.7: a) relative Abweichung M der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung von der Gleichverteilung der Trajektorien eines kleinen markierten Teilchens und b) der Abstand der Schwerpunkte der kleinen Teilchen und der Gesamtheit der Teilchen Λ als Funktion des Radienverhältnisses r in Trommeln der Größe $R = 90$ mit Konzentration der kleinen Teilchen $c = 0.5$.

2.2.2.2 Segregationsmechanismus in der Lawinenzone

Die Abbildung 2.7 läßt vermuten, daß Segregation für alle Radienverhältnisse $r < 1.0$ existiert. Ihre Entstehung basiert auf einem Entmischungseffekt, der in der Lawinenzone anzusiedeln ist, wie die halbkreisförmigen Trajektorien innerhalb der Füllung in Abbildung 2.3 beweisen. Es wird allgemein angenommen, daß die Segregation durch eine erhöhte Einfangwahrscheinlichkeit der Nischen an der

Oberfläche für kleine Teilchen zustandekommt [DR62]. Hinzu kommt ein Entmischungseffekt der durch das *Random-Fluctuating-Sieve-Model* von S.B. Savage und C.K.K. Lun beschrieben wird [SL88]. In scherenden Systemen mit erhöhter Dilatanz, wie sie Lawinenzonen typischerweise darstellen, kommt es zu einer vermehrten Ansammlung der kleinen Teilchen in den unteren Bereichen der Scherzone, weil für die kleinen Teilchen eine größere Wahrscheinlichkeit besteht, in eine Lücke und unter ein großes Teichen zu schlüpfen, als für den umgekehrten Fall. Versteht man unter der Oberfläche einer Trommelfüllung die Grenze zwischen Teilchen, die in stabilen Positionen liegen und den Lawinenteilchen, so rollt demzufolge ein erhöhter Anteil von kleinen Teilchen über diese Oberfläche, vorausgesetzt die Lawinenzone besteht nicht nur aus einer Monolage.

Im BTR-Modell befinden sich alle Teilchen nach einem Zeitschritt in einer stabilen Position. Dies macht seinen stroboskopartigen Charakter aus. Es läßt sich deshalb nicht ermitteln, welche Teilchen während eines Zeitschrittes eine Lawine gebildet haben und welche nicht. Da die Lawinen im allgemeinen sehr dünn sind, bildet die Oberfläche des vorangegangenen Zeitschrittes die Nischen, die im folgenden Zeitschritt die Teilchen einfangen.

Für eine genaue Untersuchung des Segregationsprozesses wurden die Verteilungsfunktionen der lokalen Steigungen Φ der Oberfläche ermittelt. Diese lokale Steigung ergaben sich nach Beendigung eines Zeitschrittes aus dem Winkel zwischen der Horizontalen und der Verbindungslinie zwischen den Mittelpunkten zweier benachbarter Teilchen der Oberfläche. Da die Tangente an zwei benachbarte Teilchen nicht parallel zu ihrer Verbindungslinie ist, wenn die Teilchen unterschiedlich groß sind, wurden vier partielle Verteilungen gemessen. Die vier verschiedene Steigungen Φ_{ij} sind der Abbildung 2.8 zu entnehmen. Der Index i steht für die Größe des weiter links liegenden Teilchens, der Index j entsprechend für das weiter rechts liegende.

Die Verteilungen der lokalen Steigungen wurden in halbgefüllten Trommeln der Größe $R = 90$ mit Konzentrationen der kleinen Teilchen $c = 0.5$ für verschiedene Radienverhältnisse ermittelt. Eine Messung erfolgte jeweils über 100 Umdrehungen der Trommel, wobei die ersten 3 Umdrehungen vernachlässigt

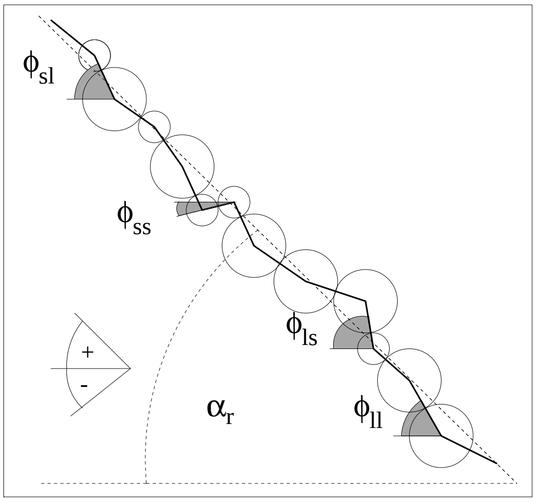

Abbildung 2.8: Definition der lokalen Steigungen Φ_{ij} der vier elementaren Oberflächenkonfigurationen. Die gestrichelte Linie zeigt den Böschungswinkel, der durch eine lineare Regression der Oberfläche ermittelt wurde.

wurden. Die Rotationsschrittweite betrug $\Delta\Phi = 1$. Die Bestimmung der lokalen Steigungen wurden in einer Höhe von $1.5R$ abgebrochen. Dies war notwendig, da sich die Oberfläche im oberen Viertel der Trommel in Richtung der Trommelwand neigt [siehe Abbildung 2.2b)]. Es hätte sich kein repräsentatives Bild im Bezug auf den Oberflächenbereich der Segregation ergeben, wenn man diesen Teil ebenfalls berücksichtigt hätte.

In Abbildung 2.9 und 2.10 sind die Verteilungsfunktionen der lokalen Steigungen aus Systemen mit $r = 0.5$ und $r = 0.9$ aufgetragen. Die jeweils in a) dargestellten Kurven zeigen die Gesamtverteilung aller Steigungen ohne Unterteilung nach Größe der beteiligten Teilchen. In Abbildung 2.9a) ist zusätzlich die Verteilung in einem entsprechenden System der Größe $R = 120$ aufgetragen. Da die Kurven für beide Systemgrößen identisch sind, beweist dies, daß die Verteilungsfunktionen unabhängig von der Systemgröße sind. In den Darstellungen der partiellen Verteilungen sind jeweils die Gewichte P_{ij} der entsprechenden Verteilungen an der Gesamtverteilung aus a) angegeben. Hierbei gilt $\sum P_{ij} = 1$.

In Abbildung 2.11 ist die Verteilungsfunktion der lokalen Steigungen in einem monodispersen System aufgetragen. Für Vergleichszwecke enthält die Abbildung ebenfalls die Verteilungen $P(\Phi_{ll})$ aus den Abbildungen 2.9(b) und 2.10(b). Diese wurden mit ihrem jeweiligen Gewicht P_{ll} normiert.

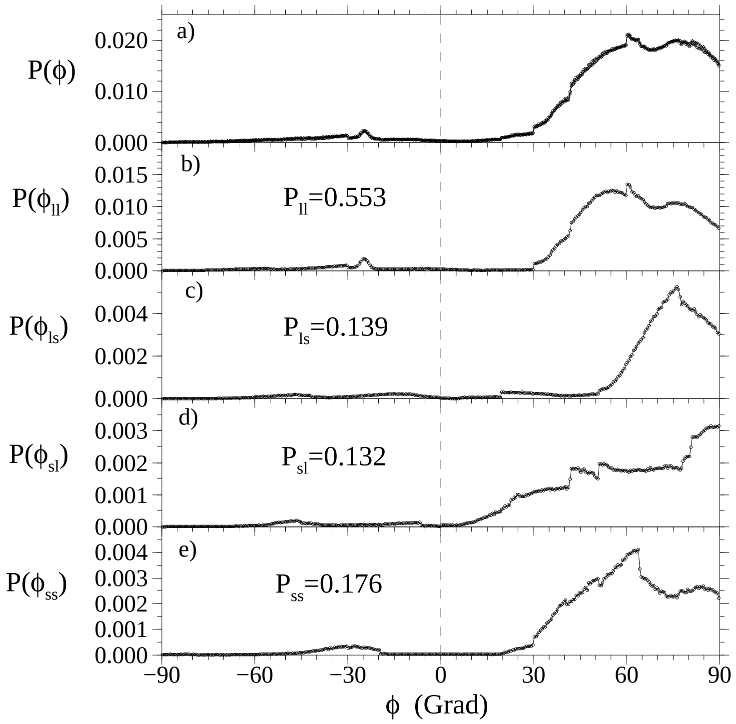

Abbildung 2.9: Verteilungsfunktionen der lokalen Steigungen der Oberfläche in einem System mit $r = 0.5$.

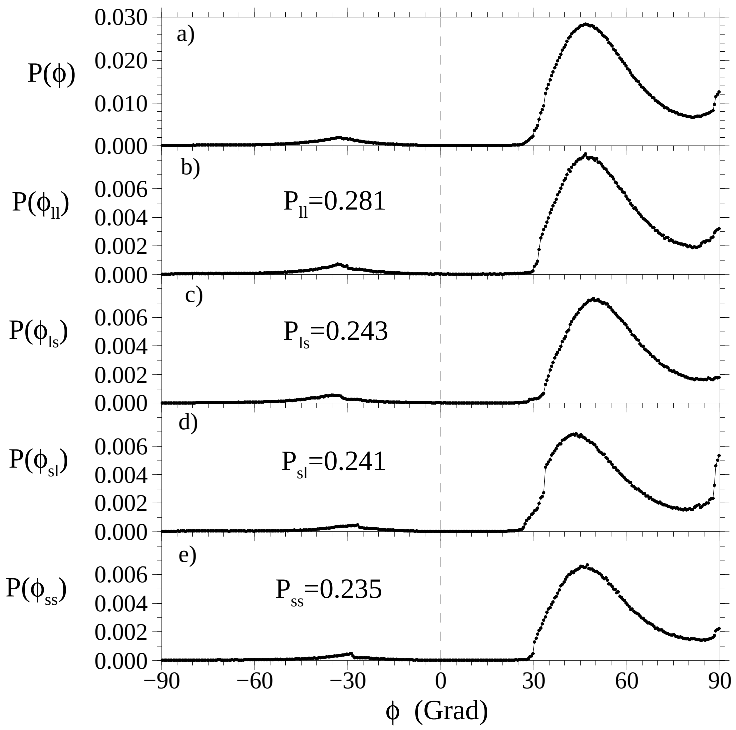

Abbildung 2.10: Verteilungsfunktionen der lokalen Steigungen der Oberfläche in einem System mit $r = 0.9$.

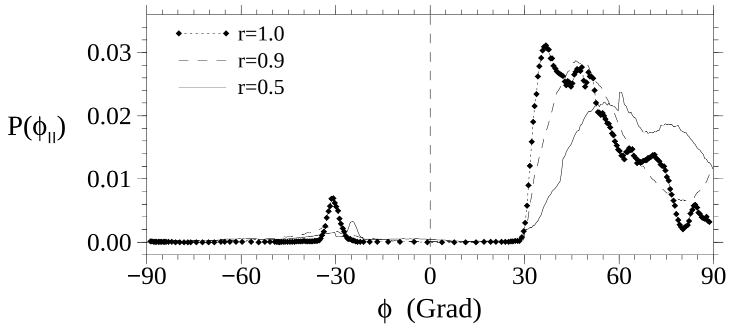

Abbildung 2.11: Normierte Verteilungsfunktionen der lokalen Steigungen der Oberfläche $P(\Phi_{ll})$ für große Teilchen.

Eine Interpretation der obigen Verteilungen verlangt eine Kenntnis darüber, wann zwei benachbarte Teilchen eine Nische bilden, die ein anderes Teilchen einfangen kann. Von Interesse sind hierbei im wesentlichen zwei große Teilchen, weil diese naturgemäß die größten Nischen bilden und somit die größten Einfangwahrscheinlichkeiten besitzen. Diese Kombination von Teilchengrößen besitzt außerdem das größte Gewicht an den Gesamtverteilungen. In Abbildung 2.12 ist eine solche lokale Nische dargestellt. Der Winkel $\Psi = 90° - \Phi$ bestimmt die Größe der Nische. Man sieht sofort, daß für $\Psi \leq 30°$ keine Möglichkeit zum Einfangen eines anderen Teilchens besteht. Für größere Werte von Ψ ergeben sich die Ein-

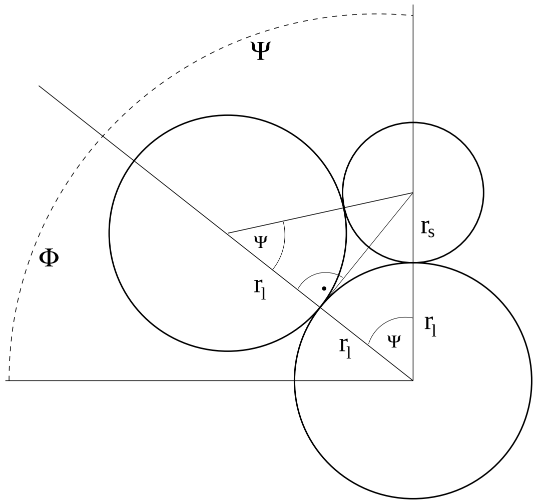

Abbildung 2.12: Schema für die Bestimmung der Nischengrößen.

fangmöglichkeiten für kleinere Scheiben durch einfache geometrische Überlegungen bis zu einem maximalen Radienverhältnis:

$$r = \begin{cases} 0 & : \quad 0^\circ \leq \Psi \leq 30^\circ \\ 2\sin\Psi - 1 & : \quad 30^\circ < \Psi \leq 45^\circ \\ (1-\cos\Psi)\cos\Psi & : \quad 45^\circ < \Psi \leq 60^\circ \\ 1 & : \quad 60^\circ < \Psi \leq 90^\circ \end{cases} \quad . \tag{2.7}$$

Aus Abbildung 2.11 ist zu entnehmen, daß für alle gemessenen Radienverhältnisse die Verteilung $P(\Phi_{ll})$ für alle $\Phi > 30^\circ$ größer als Null ist. Dies bedeutet, daß auf einer ausreichend langen Oberfläche, das heißt für ausreichend große Trommeln, immer Nischen existieren, die eine kleine Kugel einfangen können, während eine große Kugel darüber hinwegrollen würde. Dies gilt für jedes Radienverhältnis r einschließlich monodisperser Systeme. Folglich ist somit bewiesen, daß im BTR-Modell kein kritisches Radienverhältnis existiert, oberhalb dessen Segregation nicht mehr auftreten würde. Größensegregation ist vielmehr für alle Radienverhältnisse $r < 1.0$ existent.

Aus den Abbildungen der Verteilungen der lokalen Steigungen geht weiterhin hervor, daß in allen Fällen eine große Zahl von lokalen Konfigurationen existiert, die sich an der Grenze zur Instabilität ($\Phi = 90^\circ$) befinden. Das bedeutet, daß schon die kleinste Rotation zu weiterer Lawinenaktivität führen könnte. Im BTR-Modell wird dies zunächst mit der festen Rotation um $\Delta\Phi$ im nächsten Zeitschritt vermieden. Erst nach dieser festen Rotation relaxiert die Oberfläche. In realen Systemen kann dies der Fall sein, wenn Kohäsion, Adhäsion oder Haftreibung ein Wegrollen oder Weggleiten zunächst verhindern. In diesem Sinne kann die Rotationsschrittweite als Hysteres zwischen Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel interpretiert werden. Wie später noch eingehender untersucht wird, sind zusätzlich Vibationseffekte mit der Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ verknüpft.

Der Böschungswinkel ist eine wichtige charakteristische Größe für ein granulares Material. Aus der Gesamtverteilung der lokalen Steigungen der Oberflächen [Abbildungen 2.9a) und 2.10a)] läßt sich eine mittlere Steigung berechnen:

$$\langle\Phi\rangle = \int \Phi \, P(\Phi) \, d\Phi \quad . \tag{2.8}$$

Diese mittlere Steigung $\langle\Phi\rangle$ ist eine Näherung für den Böschungswinkel. Da die unterschiedliche Längen der Verbindungslinien nicht berücksichtigt werden, ist $\langle\Phi\rangle$ immer etwas kleiner als der Böschungswinkel. Dieser wird exakt durch eine lineare Regression der Oberflächenteilchen ermittelt. Er ist zusammen mit $\langle\Phi\rangle$ in Abbildung 2.13 als Funktion des Radienverhältnisses r aufgetragen. Je

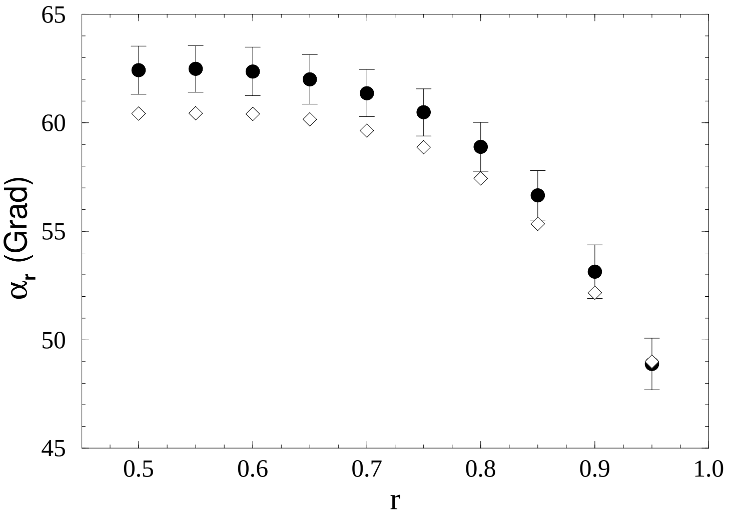

Abbildung 2.13: Böschungswinkel α_r (Punkte mit Fehlerbalken) und der gemittelte lokale Winkel $\langle\Phi\rangle$ (Rauten) als Funktion des Radienverhältnisses r ermittelt in halbgefüllten Trommeln der Größe $R = 90$ über 20 Umdrehungen.

ähnlicher sich die beiden Teilchenradien sind, desto näher sind sich die beiden Meßwerte. Die gezeigten Fehlerbalken sind die Standardabeichungen der Fluktuationen des Böschungswinkels und nicht der statistische Fehler der Messung. Mit zunehmendem Radienverhältnis und folglich abnehmender Segregation wird die Oberfläche immer flacher. Ein vergrößerter Böschungswinkel in bidispersen Systemen gegenüber monodispersen konnte ebenfalls in experimentellen Untersuchungen beobachtet werden [HK95].

Mit zunehmender Segregation werden kleine Teilchen an der Oberfläche immer seltener und große Teilchen immer wahrscheinlicher. Dies drückt sich in den Gewichten der Verteilungen der lokalen Steigungen P_{ij} an der Gesamtverteilung aus. Dies führt auf ein alternatives Maß der Segregation. Dieses Maß ist das Verhältnis von benachbarten großen P_{ll} Teilchen zu benachbarten kleinen Teilchen P_{ss}, das mit zunehmendem Radienverhältnis schwächer wird. In Abbildung 2.14 ist dieses Verhältnis aufgetragen. Die gestrichelte Linie zeigt den bestmöglichen *Fit* an dieses Verhalten, ein Potenzgesetz. Die Existenz des Potenzgesetzes verdeutlicht mit einem Exponenten von ungefähr -1.7 noch einmal, daß kein kritisches und damit charakteristisches Radienverhältnis existiert.

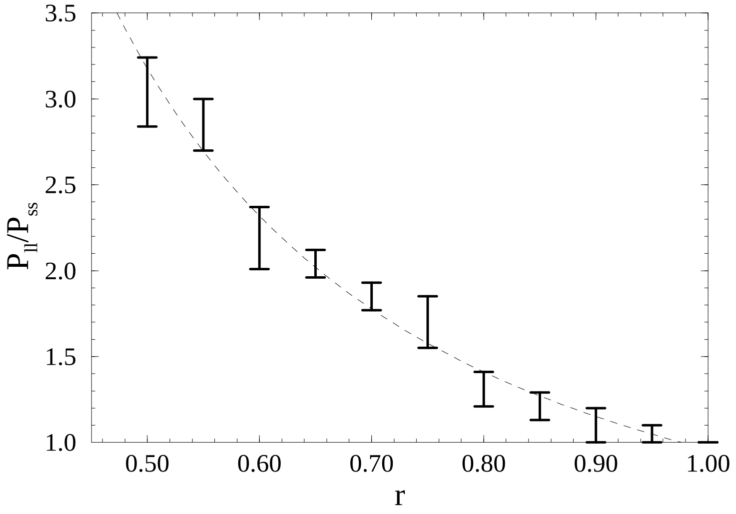

Abbildung 2.14: Verhältnis der Gewichte der partiellen Verteilungen für benachbarte große und kleine Teilchen P_{ll}/P_{ss} als Funktion des Radienverhältnisses r ermittelt in halbgefüllten Trommeln der Größe $R = 90$ über 20 Umdrehungen. Die Fehlerbalken sind die Standardabweichung der statistischen Schwankungen des Verhältnisses während der Umdrehungen. Die gestrichelte Linie zeigt einen *Fit* mit $P_{ll}/P_{ss} \propto r^{-1.7}$.

2.2.3 Lawinenaktivität

Im letzten Abschnitt wurde der Segregationsmechanismus anhand statischer Oberflächeneigenschaften untersucht. Nun soll die Aufmerksamkeit auf die dynamischen Aspekte der Teilchenbewegungen gerichtet werden. Während der Rotation der Trommel, das heißt während eines Zeitschrittes im BTR-Modell, verändern alle Teilchen ihre Positionen. Generell ist es nicht möglich, Positionswechsel, die durch die Rotation bedingt sind, von solchen zu unterscheiden, die sich auf Grund von Oberflächenaktivitäten ergeben. Durch kleine Umstrukturierungen nehmen auch die Teilchen innerhalb der Füllung nicht diejenigen Positionen ein, die sie auf Grund der reinen Rotation erhalten haben. Dieser Umstand ist zum Beispiel an den Fluktuationen der halbkreisförmigen Trajektorien in Abbildung 2.3 zu erkennen.

Um die Größe kollektiver Bewegungen durch Lawinen an der Oberfläche zu quantifizieren wurde eine Aktivität s definiert. Diese ist die Summe aller euklidschen Abstände zwischen den Positionen $\vec{r}$ der Teilchen vor (Index i) und nach (Index f) einem Zeitschritt:

$$s \doteq \sum_{j \in LZ} \left| \vec{r}_j^{(f)} - \vec{r}_j^{(i)} \right| \qquad . \tag{2.9}$$

In dieser Definition ist es notwendig, nur diejenigen Teilchen zu berücksichtigen, die sich in der Lawinenzone (LZ) befinden. Ohne Beschränkung auf die Lawinenzone kommt ein starkes Hintergrundrauschen der anderen Bereiche der Füllung zum Tragen. Die exakte räumliche Ausdehnung der Lawinenzone ist in realen Systemen und im BTR-Modell eine fluktuierende Größe. Es variiert sowohl ihre Breite als auch der Winkel gegenüber der Horizontalen. Für praktische Zwecke ist jedoch eine statische, empirische Definition der Lawinenzone sinnvoll. Zu diesem Zweck wurde der mittlere Böschungswinkel gemessen und die Grenze zur Lawinenzone durch eine Linie parallel zur mittleren Oberfläche festgelegt (siehe Abbildung 2.3). Der Abstand der mittleren Oberfläche zum Trommelmittelpunkt betrug in allen Systemen $0.05R$. Der Abstand der Grenzlinie wurde einheitlich auf $0.225R$ festgelegt. Abwärts gerichtete Teilchenbewegungen wurden stets nur oberhalb dieser Grenzlinie beobachtet. Andere Bewegungen innerhalb der auf diese Weise festgelegten Lawinenzone, die im wesentlichen nur auf der Rotation beruhen, erbringen nur minimale Beiträge zur Aktivität s und sind deshalb vernachlässigbar. Insgesamt ist die auf diese Weise definierte Aktivität zwar nicht in der Lage, die exakte Größe einer Lawine zu messen, aber große Lawinen sind auf jeden Fall immer mit einer großen Aktivität verbunden. Ihre Aussagekraft ist in diesem Sinne mindestens so groß wie der emitierte Geräuschpegel von Lawinen, der in einigen Experimenten gemessen wurde [ER89, Eve91, CDFL92].

Zunächst wurde die Aktivität in bidispersen Systemen mit Radienverhältnis $r = 0.5$ untersucht. Ermittelt wurden die Verteilungsfunktionen $P(s, R)$ der totalen Aktivät und der partiellen Aktivitäten der großen und kleinen Teilchen für verschiedene Trommelradien. Jede Verteilung beruht auf einer Messung während 100 Umdrehungen mit einer Rotationsschrittweite von $\Delta\Phi = 1$. Wie üblich wurden die ersten drei transienten Umdrehungen der Trommel nicht berücksichtigt und alle Verteilungen normiert:

$$\int P\left(s,R\right)\,ds \;=\; 1 \qquad . \tag{2.10}$$

Anschließend wurden die ermittelten Verteilungen mit einem *Finite-Size-Scaling*-Ansatz reskaliert [KNWZ89]:

$$P\left(s,R\right) \;\propto\; R^{-\nu}\cdot\mathcal{F}\left(\frac{s}{R^{\beta}}\right) \qquad . \tag{2.11}$$

Hierbei ist $\mathcal{F}$ eine geeignete Skalenfunktion und ν und β sind die Skalenexponenten. Aus der Normierung (2.10) erhält man sofort durch einfaches Einsetzen des *Finite-Size-Scaling*-Ansatzes:

$$\nu \;=\; \beta \qquad , \tag{2.12}$$

vorrausgesetzt die Skalenfunktion fällt für große Aktivitäten rapide genug ab.

In den Abbildungen 2.15,2.16 und 2.17 sind die ermittelten und reskalierten Verteilungen der Aktivitäten aufgetragen. Es ist zu erkennen, daß der *Finite-Size-Scaling*-Ansatz nur im Falle der großen Teilchen (Abbildung 2.16) ein befriedigendes Ergebnis liefert. Die totale Aktivität und die Aktivität der kleinen Teilchen lassen sich offensichtlich nicht zu einem Datenkollaps reskalieren. Für die großen Teilchen läßt sich das Skalenverhalten unabhängig, anhand einer Skalenrelation testen. Dazu sei angenommen, daß die mittlere Aktivität $\langle s\rangle$ von der Systemgröße wie ein Potenzgesetz mit Exponent m abhängt:

$$\langle s\rangle \;=\; \int s\,P(s,R)\,ds \;\propto\; R^{m} \qquad . \tag{2.13}$$

Durch Einsetzen des Skalenansatzes (2.11) in diese Gleichung und Substitution mit $z = s/R^{\beta}$ erhält man die Skalenrelation

$$2\beta - \nu \;=\; m \qquad . \tag{2.14}$$

Zusammen mit Gleichung (2.12) folgt:

$$\beta \;=\; \nu \;=\; m \qquad . \tag{2.15}$$

Durch numerische Mittelwertbestimmungen der Verteilungen aus Abbildung 2.16 ergibt sich ein Wert von $\beta = \nu = m = 3.01 \pm 0.05$. Dieser Wert führt auch zum bestmöglichen Datenkollaps der Verteilungen für große Teilchen. Das so offenbarte kubische Skalenverhalten der mittleren Aktivität $\langle s \rangle \propto R^3$ ist eine Folge der Massenerhaltung der Systeme. Die gesamte Masse einer Füllung wird bei gleichbleibendem Füllungsgrad und gleichbleibender Rotationsschrittweite in einer bestimmten Anzahl von Zeitschritten unabhängig von der Systemgröße umgewälzt. Deshalb muß in jedem einzelnem Zeitschritt eine Masse proportional zum Quadrat der Systemgröße durch die Lawinenzone transportiert werden. Die mittlere Transportlänge ist dabei einfach proportional zur Systemgröße. Dementsprechend skalt die Aktivität insgesamt kubisch.

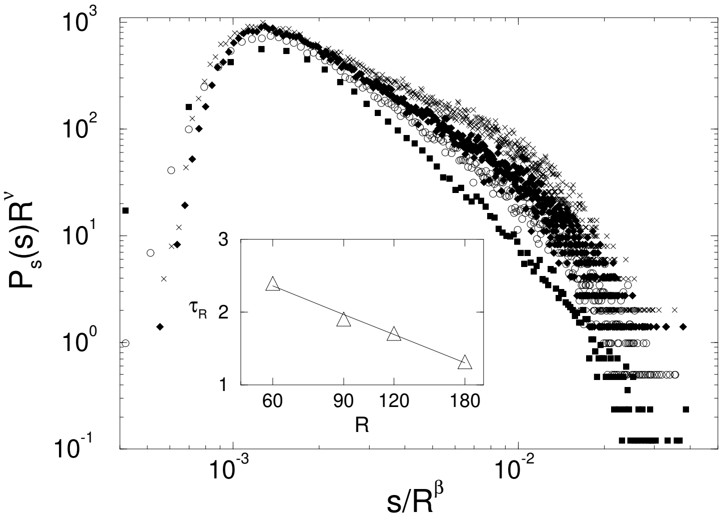

Abbildung 2.15: Mit $\beta = \nu = m = 3.01$ reskalierte partielle Verteilungen der Aktivitäten der kleinen Teilchen $P_s(s, R)$. Alle Ergebnisse wurden in halbgefüllten Trommeln mit $r = 0.5$ und $\Delta\Phi = 1$ mit Systemgrößen $R = 60$ (gefüllte Quadrate), $R = 90$ (Kreise), $R = 120$ (gefüllte Rauten) und $R = 180$ (Kreuze) gewonnen. In einem begrenztem Bereich zwischen 10^{-3} und 10^{-2} zeigt sich ein Potenzgesetz [Gleichung (2.17)]. Im eingesetzten Bild ist die Abhängigkeit des Exponenten τ_R von der Systemgröße abgebildet.

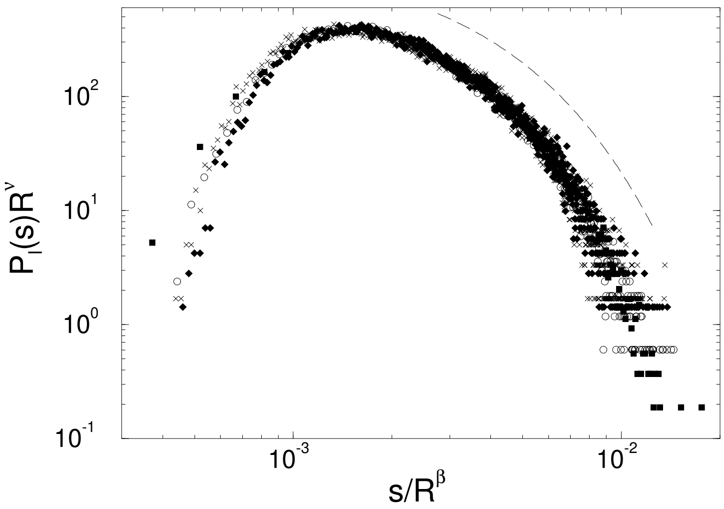

Abbildung 2.16: Analog zu Abbildung 2.15 dargestellte partielle Verteilungen der Aktivitäten der großen Teilchen $P_l(s,R)$. Die gestrichelte Linie zeigt einen exponentiellen *Fit* [Gleichung(2.16)] mit dem Exponenten $1/\alpha = 632.5$.

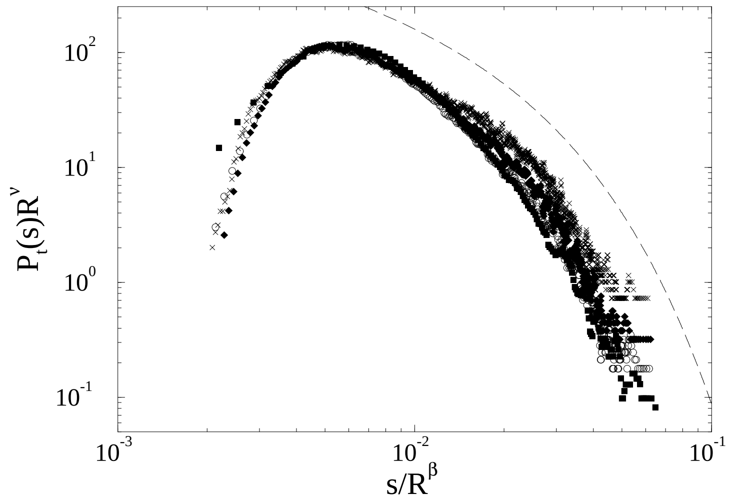

Abbildung 2.17: Analog zu Abbildung 2.15 dargestellte Gesamtverteilungen der Aktivitäten aller Teilchen $P_t(s,R)$. Die gestrichelte Linie zeigt einen *Fit* mit Gleichung (2.18) und den Exponenten $\tau_R^* = 0.68$ und $1/\alpha_R^* = 67.97$.

Die Skalenfunktion $\mathcal{F}_l$ der Verteilungen $P_l(s, R)$ der Aktivitäten der großen Teilchen besitzt im Bereich fallender Aktivitäten ein exponentielles Verhalten. Die gestrichelte Linie in Abbildung 2.16 zeigt einen *Fit* mit:

$$\mathcal{F}_l(z) \propto \exp\left(-\frac{z}{\alpha}\right) \quad . \tag{2.16}$$

Hierbei ist α eine charakteristische, mit R^3 skalierte Aktivität.

Die Verteilungen $P_s(s, R)$ für die kleinen Teilchen zeigen kein *Finite-Size-Scaling* (Abbildung 2.15). Außerdem ist im Gegensatz zu den großen Teilchen das Verhalten nicht exponentiell. Vielmehr kann man in einem begrenzten Bereich ein Potenzgesetz:

$$\mathcal{F}_s(z) \propto z^{-\tau_R} \tag{2.17}$$

erkennen. Der Exponent τ_R wird kleiner mit steigender Systemgröße. Offensichtlich steigt die Anzahl der kleinen Teilchen in der Lawinenzone durch die Segregation schneller als mit R^2 an. Dies erklärt die Systemgrößenabhängigkeit des Exponenten und die Vergrößerung der mittleren Aktivität mit steigendem Trommelradius. Der logarithmische *Fit*, der im eingesetzen Bild von Abbildung 2.15 zu sehen ist, läßt vermuten, daß sich die Systemgrößenabhängigkeit bei einer Größe von circa $R \approx 690$ ändern müßte. Diese Größe ist mit ungefähr 290.000 Teilchen leider fern jeder möglichen Realisierbarkeit. Deshalb sollte man diese Aussage nur qualitativ interpretieren.

Da sich die totale Aktivität aller Teilchen additiv aus den partiellen Aktivitäten der kleinen und großen Teilchen zusammensetzt, zeigen die Verteilungen $P_t(s, R)$ in Abbildung 2.17 ebenfalls kein *Finite-Size-Scaling*. Der Beitrag der kleinen Teilchen verhindert dies. Die Skalenfunktion $\mathcal{F}_t$ läßt sich für abfallende Aktivitäten gut mit einem Produktansatz der beiden Skalenfunktionen der partiellen Verteilungen *fitten*:

$$\mathcal{F}_t(z) \propto z^{-\tau_R^*} \cdot \exp\left(-\frac{z}{\alpha_R^*}\right) \quad . \tag{2.18}$$

Allerdings sind diesesmal beide Exponenten systemgrößenabhängig. Die ermittelten Werte deuten an, daß zwischen den Exponenten aus den Gleichungen 2.17 und 2.18 die Relation $\tau_R^* \simeq \tau_R/3$ besteht.

In Analogie zur kollektiven Aktivität s aller Teilchen in der Lawinenzone läßt sich eine individuelle Aktivität d eines einzelnen Teilchens definieren. d ist der euklidsche Abstand zwischen den Positionen eines Teilchens vor und nach einem Zeitschritt. Mit Hilfe der Methode der markierten Teilchen wurden die Verteilungen der individuellen Aktivitäten $P(d)$ für eine großes und ein kleines Teilchen

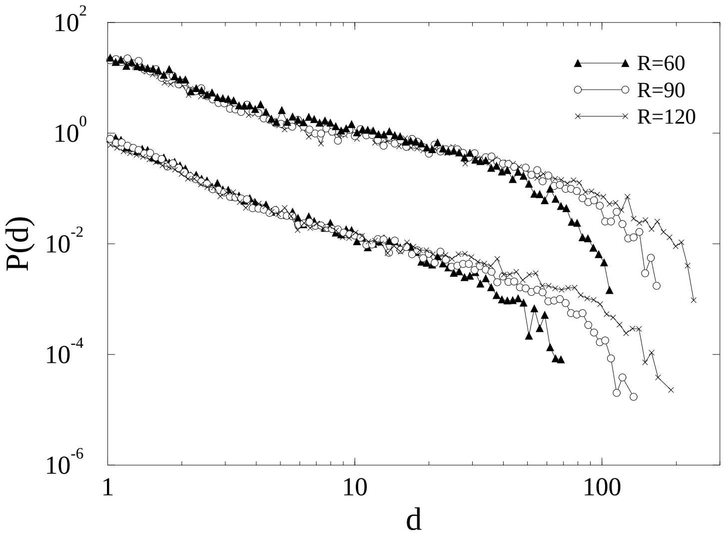

Abbildung 2.18: Verteilungen $P(d)$ der individuellen Aktivitäten (d) von markierten Teilchen in der Lawinenzone. Ermittelt in bidispersen Systemen über 100 Umdrehungen. Die unteren Kurven zeigen das Ergebnis für ein kleines Teilchen mir $r_s = 0.5$ und die oberen das Ergebnis für ein großes Teilchen.

in bidispersen Systemen innerhalb der Lawinenzone gemessen und in Abbildung 2.18 aufgetragen. Aus dieser Abbildung erkennt man zunächst einmal, daß die Aktivität des kleinen Teilchens durchweg geringer ist als die des großen Teilchens. Der Grund dafür liegt zweifelsohne in der Segregation, die darauf basiert, daß kleine Teilchen sehr viel schneller von einer Nische an der Oberfläche eingefangen werden und deshalb im Mittel kleinere Strecken zurücklegen. Im Gegensatz zur kollektiven Aktivität ist für beide Teilchengrößen kein *Finite-Size-Scaling* zu beobachten. Stattdessen sind die Verteilungen der kleineren Aktivitäten für alle Systemgrößen identisch. Mit steigender Systemgröße nimmt die Wahrscheinlichkeit für große Aktivität kontinuierlich zu. Dieses Ergebnis zeigt, daß die Aktivität eines einzelnen Teilchens auf kleiner Skala nur von den lokalen Eigenschaften der Oberfläche abhängt. Solche lokalen Eigenschaften sind im wesentlichen unabhängig von der Systemgröße, wie die Verteilungen der lokalen Steigungen für verschiedene Trommelgrößen in Abbildung 2.9a) gezeigt haben. Der Übergang zwischen den identischen Verteilungen für kleine Aktivitäten und dem Beginn des Einflußes der Systemgröße scheint bei einer charakteristischen Aktivität von ungefähr $d \approx 5$ zu liegen. In den Kurven der Abbildung 2.18 zeigt sich dort ein entsprechender Knick in den Verteilungen. Unterhalb des Knickes läßt sich ein systemgrößenunabhängiges Potenzgesetz an die Verteilungen *fitten*, das im Falle des kleinen Teilchens einen Exponenten von -2.0 ± 0.1 und im Falle des großen Teilchens von -1.8 ± 0.1 liefert. Oberhalb des Knickes liefert der Ansatz eines Potenzgesetzes ein nur dürftiges Ergebnis.

Die unterschiedlichen Verteilungen der Aktivitäten s und d in den Abbildungen 2.15, 2.16 und 2.18 widersprechen nicht der im Abschnitt 2.2.2 gemachten Feststellung der Ergodizität. Die beiden unterschiedlichen Aktivitäten s und d sind im Sinne dieser Ergodizität nicht identisch, weil die Anzahl der Teilchen des Ensemblemittels s in der Lawinenzone einer Fluktuation unterworfen ist, die für das Zeitmittel d nicht existiert. Außerdem ist die Aktivität s per Definition eine kollektive Größe. Für ihre Verteilung ist die Wechselwirkung aller Teilchen der Lawinenzone während eines einzelnen Zeitschrittes bestimmend. Diese Wechselwirkung geht in der Erstellung eines Zeitmittels der Bewegung eines einzelnen Teilchens über viele Zeitschritte verloren.

Experimentelle Ergebnisse zur Lawinenaktivität in rotierenden Trommeln sind leider praktisch nicht vorhanden. Die einzige Arbeit, die eine Statistik der Lawinengröße zeigt, ist mit den obigen Ergebnissen nicht zu vergleichen [CDFL92]. Dort wurden die Fluktuationen der Grenzline zwischen Trommelwand und Füllung, am Boden der Trommel gemessen. Sprünge in der Position der Grenzlinie wurden als Lawinen interpretiert und die Weite der Sprünge mit der Größe der Lawinen identifiziert. Sieht man von der Ungenauigkeit dieser Methode und von der Tatsache, daß die Experimente dreidimensional waren, einmal ab, so bleibt immer noch festzuhalten, daß Lawinen nicht erfasst wurden, die den Boden der Trommel nicht erreichten. Die auf diese Weise experimentell gefundene Verteilung mit scharfen Spitzen ist aus diesen Gründen nicht mit den hier dargestellten Ergebnissen zu vergleichen.

Da im BTR-Modell keine physikalische Zeitskala existiert, ist ein Vergleich mit anderen experimentellen Ergebnissen, die in Systemen mit größerer Nähe zu den Eigenschaften des BTR-Modells bestimmt wurden [JLN89, ER89, Eve91], leider ebenfalls nicht möglich. In diesen Arbeiten wurden Statistiken über die Dauer von Lawinen und über die Zeiträume zwischen den Lawinen aufgestellt.

Überraschenderweise finden sich in experimentellen Ergebnissen zu Lawinen, die bei der Entstehung von Sandhaufen beobachtet wurden [HSK+90, BCKN92, RVK93], eine größere Übereinstimmung mit dieser Arbeit. J. Rosendahl, M. Vekić und J. Kelley [RVK93] haben zum Beispiel die Größenverteilung von Lawinen in relativ kleinen Sandhaufen mit Hilfe einer Präzisionswaage gemessen. Sie finden ebenfalls eine breite Verteilung der Lawinengrößen, kein *Finite-Size-Scaling* und einen Knick in der Verteilung, wie in Abbildung 2.18. Wenn man akzeptiert, daß das allmähliche Rotieren einer granularen Packung eine nicht viel andere Anregung als das Aufschütten von Teilchen auf die Spitze eines Sandhaufens ist, so kann man schließen, daß geometrische Faktoren, die das BTR-Modell bestimmen, eine erhebliche Rolle für Lawinenaktivitäten in realen Systemen spielen.

2.2.3.1 Monodisperse Systeme

Es wurde schon erwähnt, daß in monodispersen Systemen eine strukturelle Selbstorganisation der granularen Packung existiert [BJW93, Bau93]. Aus einer ungeordneten Anfangskonfiguration entsteht ein geordneter stationärer Zustand innerhalb der ersten 90° Drehung der Trommel. Zu beobachten sind verschiedene geordnete Domänen, die durch Defektlinien voneinander getrennt sind (Abbildung 2.19). Im oberen Bereich der Füllung erhöht sich die Anzahl der Defekte, so daß für die meisten Konfigurationen die Struktur dort eher mit amorph als mit kristallin bezeichnet werden kann. Obwohl die Rotation der Trommel für eine ständige Dynamik sorgt, ist die Struktur der Packung in dem Sinne statisch, daß sich die Positionen der Defektlinien nicht ändern. Neben dieser Zeitunabhängig-

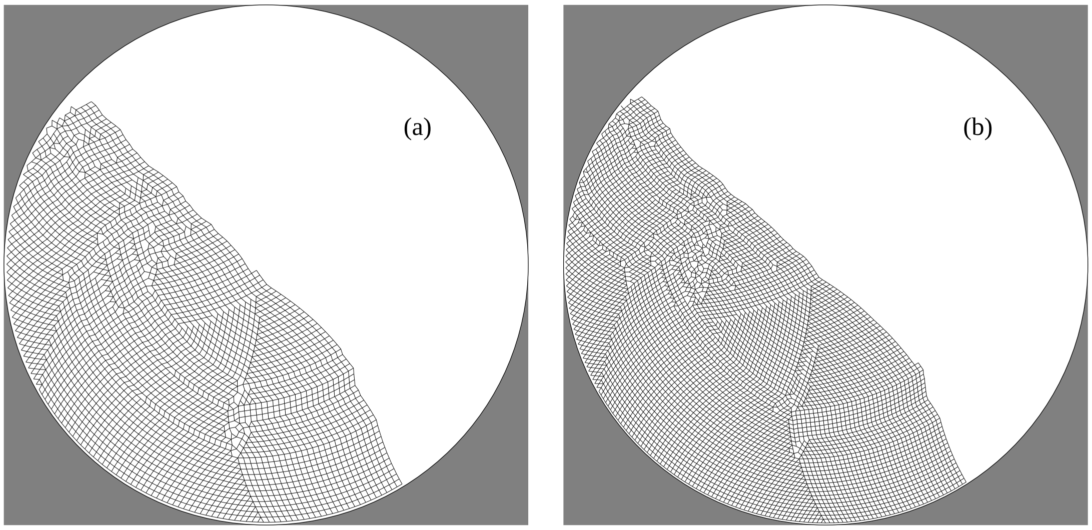

Abbildung 2.19: Typische Konfigurationen monodisperser Systeme in Trommeln der Größen (a) $R = 90$ und (b) $R = 120$. Das Netzwerk entsteht durch die Verbindung der Mittelpunkte benachbarter Teilchen, die sich berühren.

keit der Packungsstruktur ist zusätzlich eine Selbstähnlichkeit zu verzeichnen. Unabhängig von der Größe der Trommel entstehen strukturell gleiche Domänen an gleichen Positionen. Die Selbstähnlichkeit wird deutlich an Abbildung 2.19, die die Packungsstruktur zweier unterschiedlich großer Trommeln mit monodisperser Füllung zeigt.

Die in Abbildung 2.19 zu sehende gekrümmte Oberfläche monodisperser Systeme macht es schwierig einen Böschungswinkel zu definieren und zu messen. Generell ist zu beobachten, daß für annähernd halb gefüllte Trommeln ein charakteristischer Knick der Oberfläche in einer Höhe von $h \approx 0.66R$ existiert, oberhalb dessen die Oberfläche nahezu linear ist. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, den Böschungswinkel als die Steigung des mittleren Bereiches der Oberfläche zu definieren, und dort durch eine lineare Regression zu bestimmen. Der mittlere Bereich der Oberfläche wird durch den charakteristischen Knick bei $h = 0.66R$ nach unten und durch die schon geschilderte, einsetzende Krümmung der Oberfläche bei $h = 1.5R$ nach oben beschränkt.

In der vorangegangenen Diplomarbeit war ein periodisches Verhalten der Packungsstruktur in monodispersen Systemen durch rein visuelle Betrachtungen der Simulationen erkannt worden [Bau93]. In Folge dessen wurde die Rotationsschrittweite irrational gewählt. Eine zeitabhängige Messung des Böschungswinkels zeigt nun, daß eine irrationale Rotationsschrittweite die künstlichen Periodizitäten des BTR-Modells für monodisperse Systeme nicht verhindert (Abbildung 2.20). Es werden vielmehr nur verschiedene, sich überlagernde Perioden auf unterschiedlich langen Zeitskalen eingeführt und insgesamt die Dauern der Perioden verlängert. In Abbildung 2.20 beträgt die kürzeste Periodendauer 44 Rotationsschritte.

Die beobachtbaren Periodizitäten in monodispersen Systemen haben natürlich Auswirkungen auf die Lawinenaktivität s. In Abbildung 2.21 ist die Verteilung der Aktivität in monodispersen Systemen dargestellt. Man erkennt, daß im Gegensatz zu bidispersen Systemen die Verteilung nicht kontinuierlich ist, sondern aus vielen einzelnen Spitzen besteht.

Untersucht man den zeitlichen Verlauf der Lawinenaktivitäten von monodispersen und bidispersen Systemen mit einer Autokorrrelationsfunktion

$$A(n) = \langle s(n') \cdot s(n' + n) \rangle \qquad , \tag{2.19}$$

so bietet sich ein analoges Bild (Abbildung 2.22). Das monodisperse System zeigt Periodizitäten verschiedener Längenskalen. Die größte Skala beträgt ungefähr 1300 Rotationsschritte, was immerhin 3.6 Trommelumdrehungen entspricht. Das

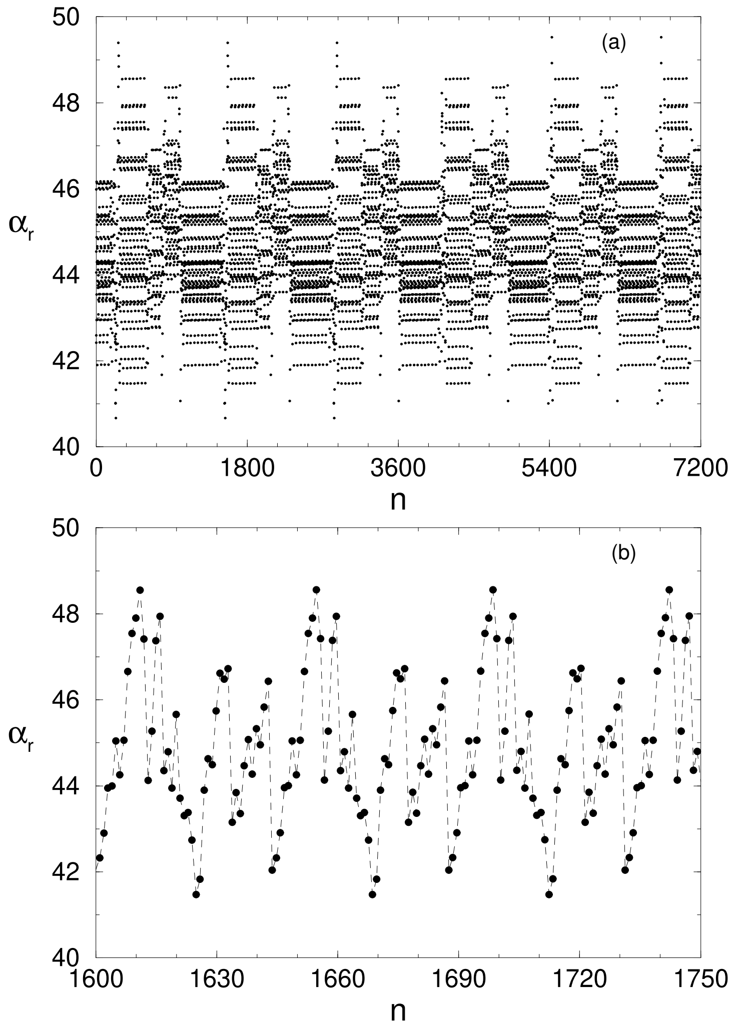

Abbildung 2.20: Zeitlicher Verlauf des Böschungswinkels α_r als Funktion der Anzahl der Rotationsschritte n in einer monodispers gefüllten Trommel mit $R = 90$ und $\Delta\Phi = 1$. (b) zeigt einen Ausschnitt aus (a) mit drei Subperioden.

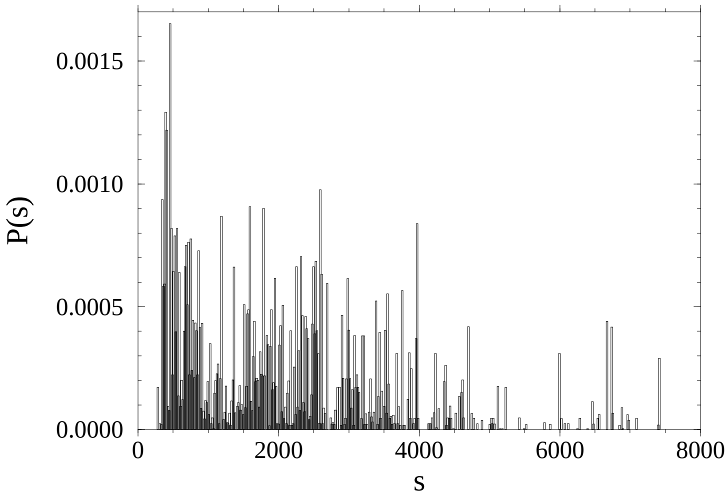

Abbildung 2.21: Histogramm der Verteilung der Aktivität $P(s)$ in einem monodispersen System mit $R = 90$ und $\Delta\Phi = 1$ ermittelt in der Lawinenzone über 100 Umdrehungen der Trommel.

bidisperse System zeigt überhaupt keine langreichweitigen Korrelationen. Es sind offensichtlich nur die unmittelbar aufeinanderfolgenden Lawinen korreliert. Eine solche Korrelation ist in jedem Fall unvermeidbar. Die entsprechenden Frequenzspektren der Autokorrelationsfunktionen in Abbildung 2.23 unterstreichen dieses Bild. Das monodisperse System zeigt ein Spektrum mit scharfen diskreten Werten und das bidisperse System weißes Rauschen.

Die obigen Beobachtungen unterstreichen die wichtige Rolle der Unordnug in Packungsstrukturen bidisperser Systemen. Diese Unordnung genügt, um die Periodizitäten monodisperser Systeme zu zerstören. Sie ist bisher neben der beschränkten Darstellungsgenauigkeit der Rechner die einzige Quelle für Rauschen im BTR-Modell. Die Periodizitäten der monodispersen Systeme entstehen durch die beschränkte Anzahl möglicher Konfigurationen der Teilchen. Diese werden durch die gekrümmte Trommelwand vorgegeben. Solche Periodizitäten und die starke Ordnung monodisperser Systeme wurden explizit in Experimenten noch nicht untersucht, deuten sich aber an [CDR93, CRD95].

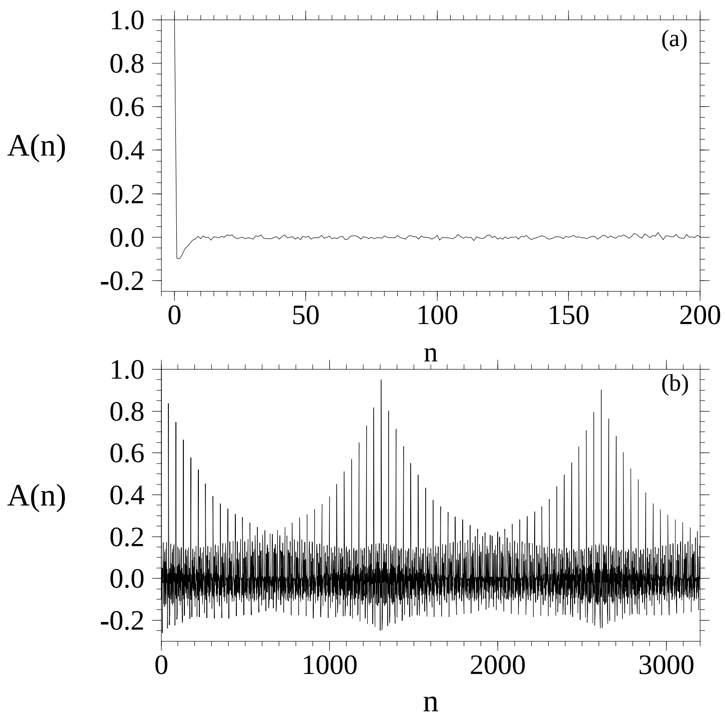

Abbildung 2.22: Normierte Autokorrelationsfunktion $A(n)$ der totalen Aktivität als Funktion der Anzahl der Rotationsschritte n in einem (a) bidispersen ($r = 0.5$) und (b) monodispersen System mit $R = 90$ und $\Delta\Phi = 1$.

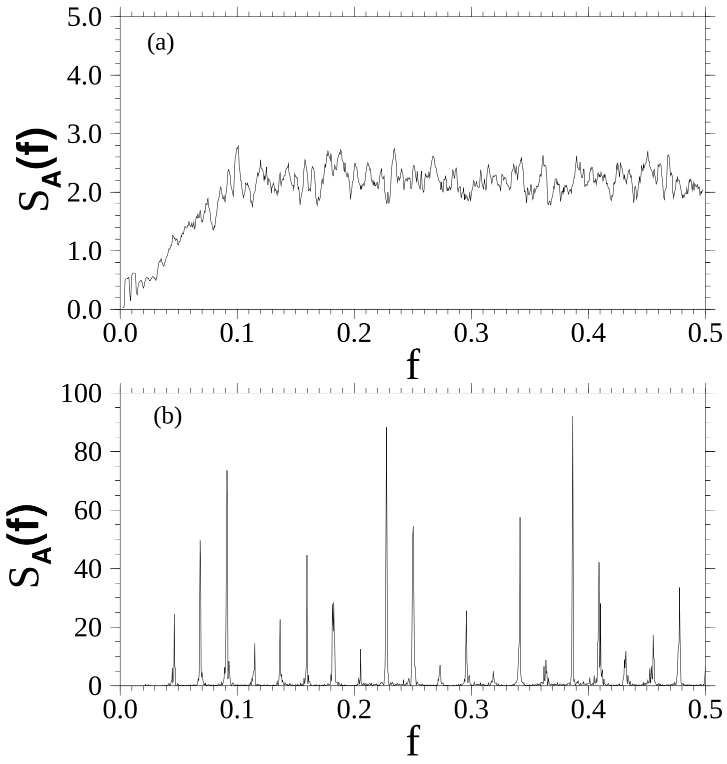

Abbildung 2.23: Frequenzspektrum $S_A(f)$ der Autokorrelationsfunktionen aus Abbildung 2.22 des (a) bidispersen und (b) monodispersen Systems.

2.2.3.2 Rolle der Rotationsschrittweite

Die physikalische Bedeutung der Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ läßt sich erkennen, wenn man sich noch einmal den Ablauf eines Zeitschrittes im BTR-Modell vergegenwärtigt. Innerhalb eines Zeitschrittes wird zuerst die gesamte Konfiguration um $\Delta\Phi$ gedreht und anschließend erfolgt eine Umstrukturierung der Teilchen von unten nach oben. Alle lokalen Konfigurationen der Oberfläche bleiben zunächst während der Rotation erhalten. Erst mit der Umstrukturierung zerfallen sie. Der Erhalt gilt auch für eigentlich instabile lokale Konfigurationen, die schon nach sehr kleinen Rotationen auftreten (siehe Abschnitt 2.2.2). Dies steht im Einklang zum modellierten Grenzfall sehr großer Haftreibung und ist in diesem Sinne realistisch.

Insgesamt kann die Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ als Hysterese zwischen Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel interpretiert werden. Diese Hysterese ist in realen Systemen eine feste materialabhängige Größe. Für den Wert der Rotationsschrittweite im BTR-Modell ist deshalb nur ein Wert sinnvoll, der kleiner oder gleich dem Wert der Hysterese realer Systeme ist. Für einen kleineren als den realen Wert von $\Delta\Phi$ *triggert* das BTR-Modell die Hysterese. Es wird jedesmal nachdem der Böschungswinkel um $\Delta\Phi$ vergrößert wurde eine Lawine ausgelöst.

Der Auslöser einer Lawine ist die Umstrukturierung der Teilchen. Dieser Schritt verläuft identisch zu Simulationen von R. Julien, P. Meakin und A. Pavlovitch vibrierter granularer Materie [JMP92, JB93, JMP93]. Aus diesem Grund kann die Umstrukturierung im BTR-Modell als eine schwache Vibration, die der Rotation überlagert ist, interpretiert werden. Die Vibration *triggert* den Stabilitätsgrenzwinkel und die Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ ist folglich das Verhältnis aus Rotationsgeschwindigkeit ω der Trommel und Frequenz ν der überlagerten Vibration:

$$\Delta\Phi = \frac{\omega}{\nu} \quad . \tag{2.20}$$

Je kleiner $\Delta\Phi$ ist, desto größer ist die Anzahl der Vibrationszyklen pro Umdrehung. Die Existenz der zusätzlichen Vibration ist nicht nur eine sinnvolle Erklärung für das *Triggern* der Hysterese zwischen Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel sondern auch für die kleinen Positionsverschiebungen, die innerhalb der Füllungen zu beobachten sind.

In einem Experiment von H.M. Jaeger, C. Liu und S.R. Nagel wurde ein komplettes Verschwinden der Hysterese beim Einschalten einer zusätzlichen Vibration beobachtet [JLN89]. Dieses komplette Verschwinden ist auf eine im Vergleich zum BTR-Modell sehr viel größere Frequenz der Vibration zurückzuführen. Man benutzte zur Erzeugung der Vibration einen Lautsprecher. Gegenstand der Arbeit von Jaeger, Liu und Nagel war die Relaxation der Steigung der Oberfläche gegenüber der Horizontalen in einer rotierenden und gleichzeitig vibrierenden Trommel. Eine wesentliche Beobachtung war, daß die Steigung kleiner wurde, wenn die Rotation stoppte und nur noch die Vibration wirkte. Je größer die Intensität und Frequenz der Vibration war, desto schneller fiel die Steigung ab. Zur Erklärung dieses Verhaltens stellten Jaeger, Liu und Nagel ein einfaches Modell auf [JLN89]. Dessen wesentliche Annahmen sind, daß die mechanische Vibration als eine effektive Temperatur interpretiert werden kann. Die Wahrscheinlichkeit für das Entkommen eines Teilchen aus einem mittleren Potentialminimum, das von den Nachbarteilchen gebildet wird, hängt exponentiell von der inversen effektiven Temperatur ab. Für den zeitlichen Abfall der Steigung α ergab sich eine Differentialgleichung der folgenden Form:

$$\frac{d\alpha}{dt} = -A\alpha e^{c\alpha} \quad . \tag{2.21}$$

Hierbei sind A und c Konstanten, die von der Intensität der Vibration abhängen. Die Gleichung (2.21) war in der Lage, die experimentellen Ergebnisse sehr gut wiederzugeben [JLN89].

Wenn nun im BTR-Modell ebenfalls eine permanente Rotation existiert, die die Steigung vergrößert, und gleichzeitig eine Vibration, die die Steigung verringert, dann wird sich ein Gleichgewicht zwischen beiden Prozessen einstellen. Für die Steigung α_s des daraus resultierenden stationären Zustandes ergibt sich demnach:

$$\frac{d\alpha_s}{dt} = \omega - A\alpha_s e^{c\alpha_s} \quad . \tag{2.22}$$

Offensichtlich entspricht der Böschungswinkel α_r im BTR-Modell der stationären Steigung α_s. Zusammen mit Gleichung (2.20) ergibt sich auf diese Weise ein funktioneller Zusammenhang zwischem dem Böschungswinkel und $\Delta\Phi$:

$$\Delta\Phi = \frac{A}{\nu}\,\alpha_r\,e^{c\alpha_r} \quad . \tag{2.23}$$

Um diesen Zusammenhang zu verifizieren, wurde für ein bidisperses System die Abhängigkeit des Böschungswinkels von der Rotationsschrittweite gemessen. Das Ergebnis ist in Abbildung 2.24 zu sehen. Der dargestellte *Fit* basiert auf Gleichung (2.23). Es wurde für den *Fit* angenommen, daß die Frequenz ν der Vibration konstant und $\Delta\Phi$ proportional zu ω ist. Diese Annahme muß nicht zutreffen, da $\Delta\Phi$ das Verhältnis von ω und ν ist. Man kann eine Änderung von

$\Delta\Phi$ ebenfalls in umgekehrtem Sinne interpretieren: konstante Rotationsgeschwindigkeit und veränderliche Vibrationsfrequenz. Nichtsdestotrotz ist die Übereinstimmung zwischen den Messwerten und dem *Fit* befriedigend. Zumindest ergab dieser *Fit* die weitaus beste Übereinstimmung aller denkbaren *Fits* mit einfachen zweiparametrigen Testfunktionen.

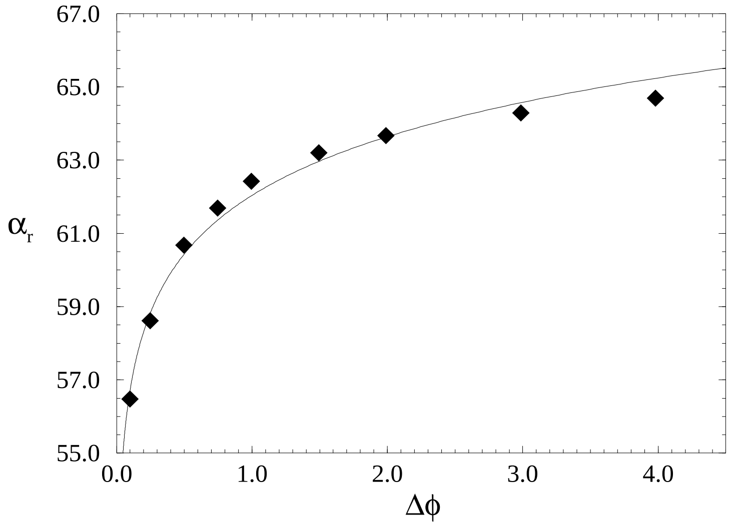

Abbildung 2.24: Gemittelter Böschungswinkel α_r als Funktion der Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ gemessen in einer Trommel mit $R = 90$ und $r = 0.5$ über 20 Umdrehungen. Die Linie zeigt einen auf Gleichung (2.23) basierenden *Fit*.

Die hier dargestellte Interpretation von $\Delta\Phi$ läßt sich leider nicht eindeutiger verifizieren. Zum Beispiel ist eine direkte Messung der Relaxation der Steigung mit ausgeschalteter Rotation analog zu [JLN89] im BTR-Modell nicht möglich. Ohne Rotation erhält man nach wenigen Vibrationszyklen eine stabile Konfiguration, die nicht weiter relaxiert. Insgesamt zeigen aber die Hysterese und Abbildung 2.24, daß die Gleichung (2.20) die richtige Interpretation der Rotationsschrittweite darstellt. In diesem Sinne müssen alle bisherigen und zukünftigen Ergebnisse als Resultate eines gleichzeitig rotierenden und vibrierenden Systems interpretiert werden. Der untersuchte Böschungswinkel α_r ist immer ein Gleichgewichtszustand aus beiden konkurrierenden dynamischen Prozessen. Er ist streng genommen weder mit dem Böschungswinkel stationärer Systeme noch mit dem dynamischen Böschungswinkel rotierender Trommeln im Regime kontinuierlicher Lawinen [Can95] identisch. Absolut betrachtet sind diese Unterschiede allerdings gering. Selbst in stationären Zuständen ist der Böschungswinkel keine eindeutige

Größe [BR70].

Für weitergehende Untersuchungen des Einflußes der Rotationsschrittweite wurde das Frequenzspektrum der Zeitreihen von α_r für verschiedene $\Delta\Phi$ aufgenommen. Die Spektren zeigen Potenzgesetze mit einem *Cutoff* für kleine Frequenzen f:

$$S(f, \Delta\Phi) \propto f^{-y(\Delta\Phi)} \quad . \tag{2.24}$$

Der Exponent y hängt von der Größe der Rotationsschrittweite ab. Diese Abhängigkeit ist gegeben durch:

$$y\,(\Delta\Phi) = \frac{1}{a + b\,\Delta\Phi} \quad . \tag{2.25}$$

Die Konstanten $a = 0.48 \pm 0.05$ und $b = 0.29 \pm 0.03$ sind durch einen *Fit* ermittelt worden. Das Verhalten des Exponenten ist dem eingesetzten Bild von Abbildung 2.25, die die verschiedenen Frequenzspektren zeigt, zu entnehmen.

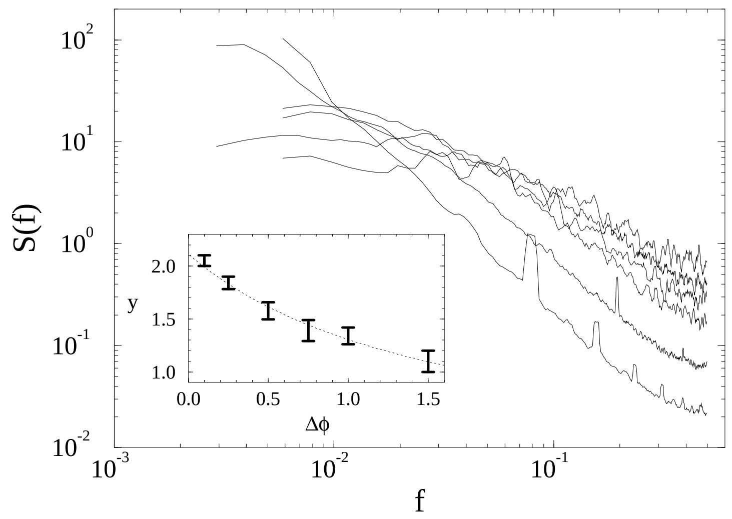

Abbildung 2.25: Frequenzspektrum $S(f)$ einer zeitlichen Sequenz des Böschungswinkels in einem System mit $R = 90$, $r = 0.5$ und $c = 0.5$ für verschiedene Rotationsschrittweiten $\Delta\Phi = 0.25,\ 0.5,\ 0.75,\ 1.0,\ 1.5,\ 2.0$ (von unten nach oben). Das eingesetzte Bild zeigt den ermittelten Exponenten aus Gleichung (2.24) und den *Fit* mit Gleichung (2.25).

Die Frequenzspektren aus Abbildung 2.25 wurden ermittelt, indem der Böschungswinkel nach jedem Zeitschritt aufgenommen wurde. Dies bedeutet unter der

Annahme, daß die Rotationsgeschwindigkeit jeweils konstant war und die Vibrationsfrequenz variierte, daß die Spektren mit unterschiedlicher, diskreter Aufnahmerate $\Delta t = 1/\nu = \Delta\Phi/\omega$ aufgenommen wurden. Es ist eine allgemein bekannte Tatsache, daß das Fourier Spektrum kontinuierlicher Funktionen von der Aufnahmerate abhängt [PTVF92]. Aus diesem Grund ist zu überprüfen, ob dies eine Auswirkung auf den Exponenten y hat. Als Test wurden die Frequenzspektren verschiedener neuer Sequenzen von α_r bestimmt. Die verschiedenen Sequenzen ergaben sich aus einer Simulation mit $\Delta\Phi = 1$, einer Simulation mit $\Delta\Phi = 0.25$, bei der nur nach jedem vierten Zeitschritt ein Messwert aufgenommen wurde und einer Simulation mit $\Delta\Phi = 1$, wobei innerhalb eines Zeitschrittes auf die Rotation jeweils vier Umstrukturierungen folgten. Das Ergebnis des Tests ist in Abbildung 2.26 dargestellt. Die Spektren wurden wie in Abbildung 2.25 für eine sinnvolle Darstellung versetzt zueinander aufgetragen. Die skalenden Teile der Spektren mit einem Potenzgesetzverhalten zeigten ursprünglich einen Datenkollaps.

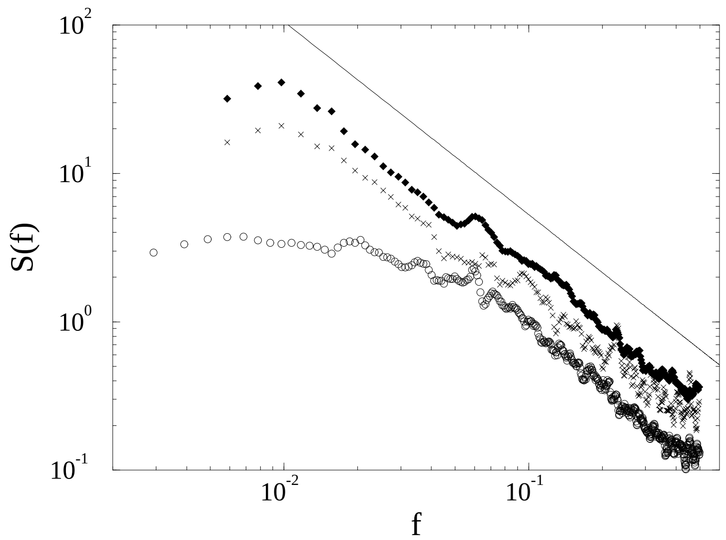

Abbildung 2.26: Frequenzspektrum $S(f)$ zeitlicher Sequenzen des Böschungswinkels in einem System mit $R = 90$ und $r = 0.5$ für $\Delta\Phi = 1.0$ (gefüllte Rauten), für $\Delta\Phi = 0.25$ mit Messung nach jedem vierten Zeitschritt (Kreise) und für einen Rotationschritt mit $\Delta\Phi = 1.0$ gefolgt von 4 Umstrukturierungsschritten innerhalb eines Zeitschrittes (Kreuze). Die Linie zeigt ein Potenzgesetz mit Exponent $y = 1.3$.

Demzufolge läßt sich festhalten, daß die Abhängigkeit des Exponent y von der Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ in Abbildung 2.25 eine Folge der unterschiedlichen Aufnahmeraten der Meßwerte ist. Zusätzlich konnte im untersuchten Bereich ($0.5 \leq r \leq 0.9$) keine Abhängigkeit der Frequenzspektren aus Abbildung 2.26 vom Radienverhältnis der Teilchen festgestellt werden. Allerdings zeigen monodisperse Systeme auf Grund der beobachteten Periodizitäten des Böschungswinkels kein kontinuierliches Frequenzspektrum. Eine sinnvolle Näherung für den korrekten Wert des Exponenten y, der nicht von der Aufnahmerate der Meßwerte abhängen darf, ist der asymptotische Wert, der einer kontinuierlichen Aufnahme der Sequenzen entspricht ($\Delta\Phi = 0$). Aus dem *Fit* mit Gleichung (2.25) erhält man $y(0) = 1/a \approx 2$. Der Böschungswinkel fluktuiert mit einem $1/f^2$-Rauschen im BTR-Modell. Ein solches $1/f^2$-Rauschen wurde ebenfalls in Experimenten beobachetet [CDFL92, HSK+90]. Es ist typisch für Systeme mit äußerst kurzen zeitlichen Korrelationen und steht deshalb in Übereinstimmung mit der ermittelten Autokorrelationsfunktion der Aktivität bidisperser Systeme [Abbildung 2.22(a)].

Änderungen der Rotationsschrittweite haben ebenfalls Auswirkungen auf die Segregation. Analog zum Böschungswinkel ist die Segregation ein Ergebnis zwei-

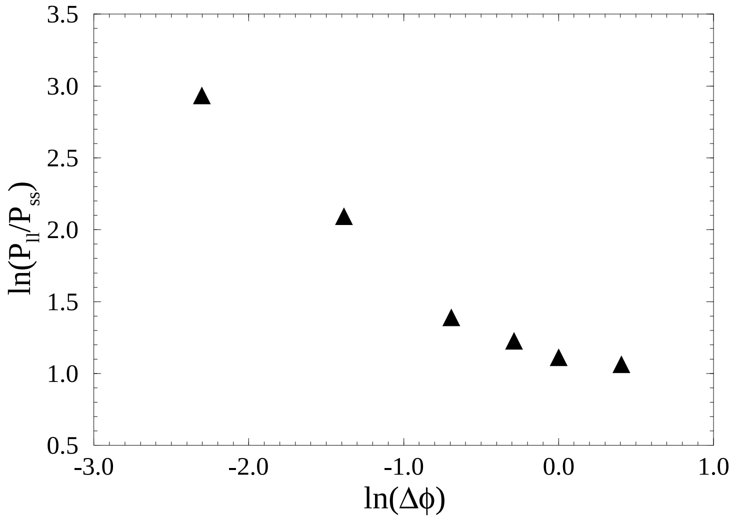

Abbildung 2.27: Verhältnis der Gewichte der partiellen Verteilungen für benachbarte große und kleine Teilchen P_{ll}/P_{ss} als Funktion der Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ in doppellogarithmischer Darstellung ermittelt in halbgefüllten Trommeln der Größe $R = 90$ mit $r = 0.5$ über 20 Umdrehungen.

er Prozesse, Segregation durch Rotation und Segregation durch Vibration. Die Segregation durch Vibration führt zu einem Absinken der kleinen Teilchen innerhalb der Füllung, was eine dichtere „Segregationswolke“ und weniger kleine Teilchen in der Lawinenzone verursacht. Mit zunehmender Anzahl der Vibrationen pro Umdrehung ergibt sich in Folge dessen eine immer stärkere Segregation. Dies zeigt Abbildung 2.27, in der das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten für zwei benachbarte große Teilchen zu der für kleine Teilchen an der Oberfläche als Funktion der Rotationsschrittweite aufgetragen ist. Nach einem schnellen Abfall dieses Verhältnisses mit steigendem $\Delta\Phi$ scheint sich eine Sättigung abzuzeichnen, die anzeigt, daß Segregation durch Vibration für genügend große Rotationsgeschwindigkeiten unterdrückt wird.

Wenn die Segregation von $\Delta\Phi$ abhängt, so ist dies sicherlich ebenfalls für die Aktivität der Oberfläche s der Fall. In Abbildung 2.28 sind die Verteilungen der totalen Aktivität für verschiedene $\Delta\Phi$ aufgetragen. Es ist klar zu erkennen, daß

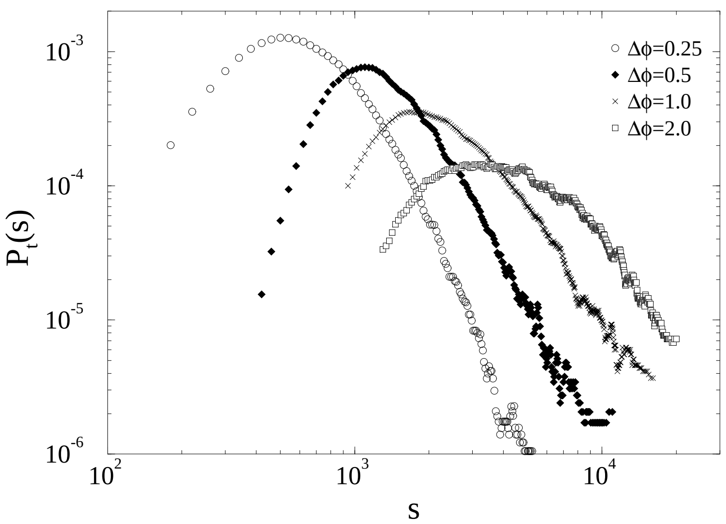

Abbildung 2.28: Normierte Verteilung $P_t(s)$ der totalen Aktivität s in der Lawinenzone einer Trommel mit $R = 90$ und $r = 0.5$ für verschiedene Rotationsschrittweiten $\Delta\Phi$.

die Verteilungen mit steigendem $\Delta\Phi$ immer breiter und flacher werden. Hinzu kommt, daß der abfallende Teil der Verteilungen immer weniger das rein exponentielle Verhalten der Gleichung (2.16) zeigt und mehr zu einer Form der Gleichung (2.18) übergeht. Da das exponentielle Verhalten für die partielle Verteilung der großen Teilchen charakteristisch ist, läßt sich dies damit erklären, daß für starke Vibration, also für kleines $\Delta\Phi$ die Anzahl der kleinen Teilchen in der

Lawinenzone sehr gering ist, und somit die totale Aktivität nur von großen Teilchen bestimmt wird. Mit wachsendem $\Delta\Phi$ steigt die Zahl der kleinen Teilchen in der Lawinenzone und die totale Aktivität geht zu einer gemischte Verteilung der Form (2.18) über.

Die partiellen Verteilungen der Aktivitäten der kleinen Teilchen, die hier nicht extra abgebildet wurden, zeigen für alle Werte von $\Delta\Phi$ im abfallendem Bereich der Verteilungen das Potenzgesetzverhalten der Gleichung (2.17). Allerdings nimmt das Gewicht dieser partiellen Aktivität an der totalen Aktivität mit $\Delta\Phi$ ab und der Exponent τ zeigt eine Abhängigkeit von der Rotationsschrittweite:

$$\tau(\Delta\Phi) = \frac{1}{a' + b' \, \Delta\Phi} \quad . \tag{2.26}$$

Die Konstanten ergeben sich aus einem in Abbildung 2.29 dargestellten *Fit* zu $a' = 0.173 \pm 0.004$ und $b' = 0.358 \pm 0.005$.

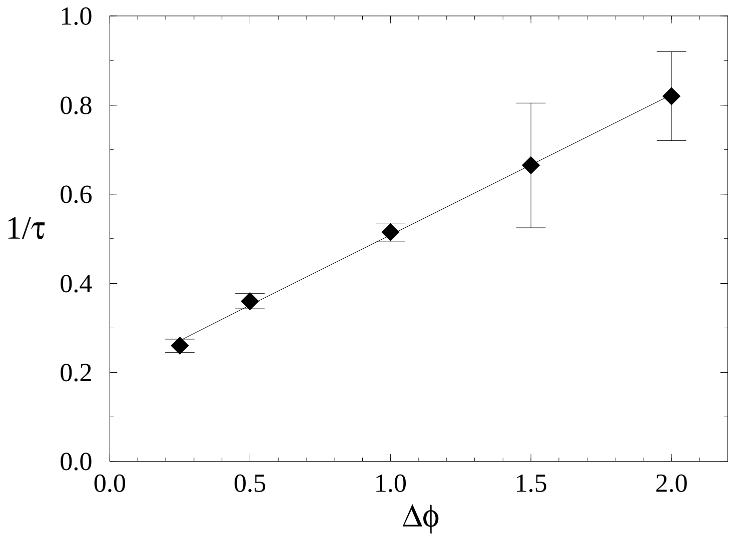

Abbildung 2.29: Inverser Exponent τ der *Fits* mit Gleichung (2.17) an die partiellen Verteilungen $P_s(s)$ der Aktivitäten der kleinen Teilchen für verschiedene $\Delta\Phi$. Die Linie zeigt den *Fit* mit Gleichung (2.26).

2.2.4 Böschungswinkel

Bis jetzt wurde festgestellt, daß der Böschungswinkel im BTR-Modell vom Radienverhältnis der Teilchen r und von der Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ abhängt. Diese Ergebnisse scheinen im Widerspruch zu entsprechenden zweidimensionalen Experimenten zu stehen. In der Dissertation von Florence Cantelaube [Can95] ist eine Untersuchung der Abhängigkeit des Böschungswinkels von der Rotationsgeschwindigkeit ω der Trommel dargestellt (Abbildung 2.30).

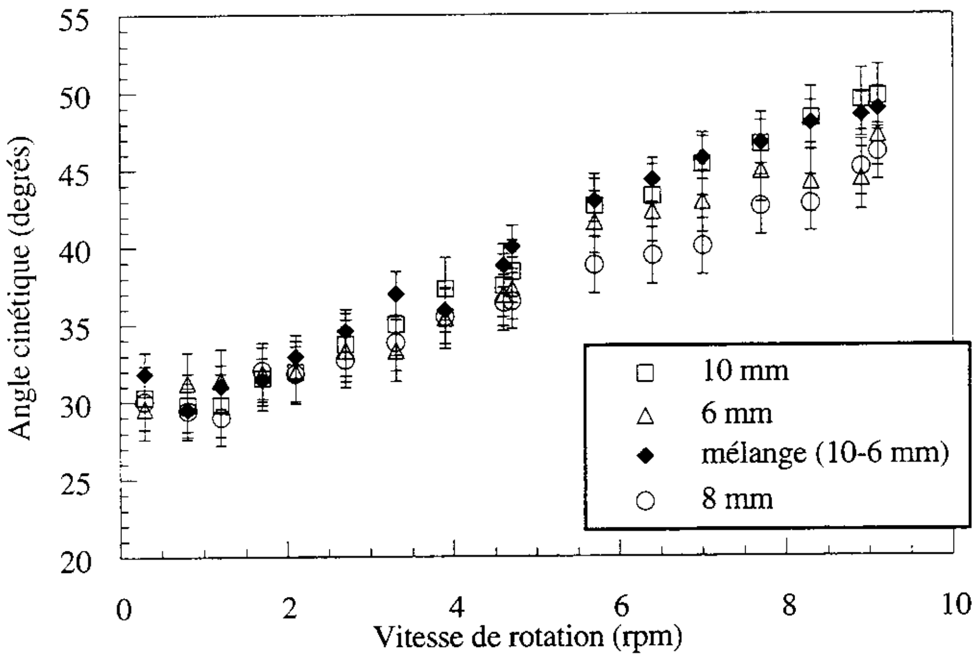

***Figure V.5** : Variation de l'angle cinétique en fonction de la vitesse de rotation du tambour pour un système composé de disques de 10mm (carrés), 8mm (cercles), 6mm (triangles) et d'un mélange de 6 et 10 mm (losanges noirs).*

Abbildung 2.30: Böschungswinkel als Funktion der Rotationsgeschwindigkeit ω aus der Dissertation von F. Cantelaube [Can95].

Der Abbildung 2.30 ist zu entnehmen, daß für kleine Rotationsgeschwindigkeiten $\omega < 1.5\,rpm$ der Böschungswinkel einen konstanten Meßwert im Rahmen eines Fehlers von ungefähr $\pm 2°$ zeigt. Erst für größere Rotationsgeschwindigkeiten steigen die Werte linear an. Der lineare Anstieg kennzeichnet das Regime kontinuierlicher Lawinen mit einem dynamischen Böschungswinkel (französisch:

Angle cinétique). Für den Vergleich mit dem BTR-Modell sind die Meßwerte des konstanten Bereiches mit diskreten Lawinen interessant. Dort zeigt im Rahmen der Fluktuationen der Böschungswinkel keine unterschiedlichen Meßwerte für monodisperse und bidisperse Systeme. Wie läßt sich dieser Widerspruch zwischen Experiment und BTR-Modell erklären?

Eine genauere Betrachtung des Experiments zeigt, daß alle Messungen in einer Trommel vorgenommen wurden, die einen Durchmesser von $59cm$ hatte. Die Trommel war an der Innenseite der Wand mit Teilchenhälften verschiedener Durchmesser an zufälligen Positionen beklebt. Die Teilchen der monodispersen und der entsprechenden bidispersen Füllungen hatten Radien der Größen $r_l = 5mm$ und $r_s = 3mm$. Dies entspricht im BTR-Modell einer Trommel mit Radius $R = 59$ und für den bidispersen Fall einem Radienverhältnis von $r = 0.6$. Insgesamt unterscheiden sich die experimentell untersuchten Systeme von den bisher untersuchten Systemen des BTR-Modells also durch die angeklebten Wandteilchen und durch die kleinere Systemgröße.

Um den möglichen Widerspruch zwischen Experiment und BTR-Modell aufzuklären, wurden im BTR-Modell ebenfalls feste Wandteilchen an zufälligen Positionen der Wand eingeführt. Diese Wandteilchen sind in Abbildung 2.31 dargestellt. Ihre zufälligen Positionen wurden mit zwei verschiedenen Methoden verwirklicht. Die erste Methode, genannt Global-Zufällige-Methode, erzeugte für jedes Wandteilchen eine Zufallszahl aus dem Intervall $[0; 2\pi R]$ und plazierte das Teilchen auf eine entsprechende Position an der Wand. Für den Fall, daß eine solche Position zu einer Überlappung mit einem schon plazierten Wandteilchen führte, wurde eine neue Zufallszahl gezogen. Die zweite Methode, genannt Zufallsgitter-Methode, unterteilte die Trommelwand in gleichlange Abschnitte und plazierte die Wandteilchen zufällig innerhalb dieser Abschnitte. Die Plazierung erfolgte so, daß die Wandteilchen nicht über die Grenzen ihres Abschnittes hinausragen konnten.

Die Dichte der Wandteilchen ist ein Maß für die Rauhigkeit der Wand. Sie kann durch den mit Wandteilchen bedeckten Bruchteil der Trommelwand ρ_w charakterisiert werden. Dieser ist bis auf Korrekturen für die Krümmung der Wand gegeben durch:

$$\rho_w = \frac{N_w r_w}{\pi R} \quad . \tag{2.27}$$

Hierbei ist N_w die Anzahl der Wandteilchen und r_w ihr Radius. Dieser Radius wurde für alle folgenden Simulationen immer zu $r_w = r_l = 1.0$ gewählt. Dieses war sinnvoll, um die Anzahl der Parameter des Modells zu reduzieren. Weiterhin sind in monodispersen Systemen auf diese Weise alle Teilchen gleich groß.

In bidispersen Systemen verursacht die Segregation eine unmittelbare Wechselwirkung der Wandteilchen mit hauptsächlich großen Teilchen. Die Zufallsgitter-Methode ermöglicht es, die Wandteilchen äußerst dicht, bis zu einer perfekten Monolage auf der Wand, zu plazieren. Mit der Global-Zufällige-Methode besteht diese Möglichkeit nicht. Der maximal zu realisierende Wert für ρ_w ist deutlich kleiner als 1.

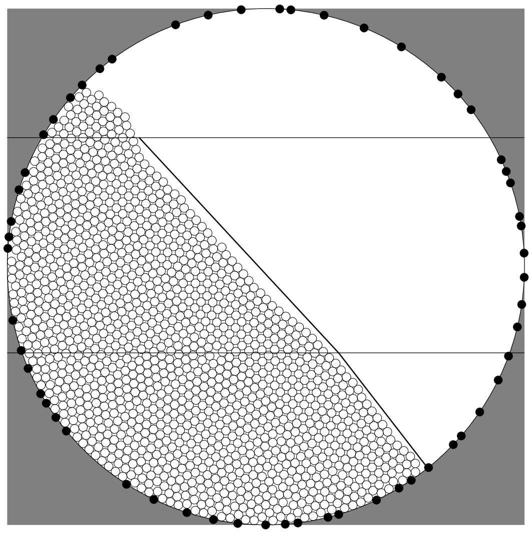

Abbildung 2.31: Trommel mit $R = 60$ annähernd halb gefüllt mit 1350 monodispersen Teilchen nach einer Umdrehung. Die Wand besitzt 57 Wandteilchen ($\rho_w = 0.3$), die mit der Global-Zufälligen-Methode plaziert wurden. Die horizontalen Linien zeigen die Grenzen der drei Bereiche der Oberfläche. Die Steigungen der *Fits* an die Oberfläche im mittleren und unteren Bereich definieren den Böschungswinkel und den Winkel des Fußes.

Schon in Abschnitt 2.2.3 wurde beschrieben, daß die Oberfläche insbesondere bei monodispersen Füllungen nicht linear sondern gekrümmt ist. Die Oberfläche wurde deshalb typischerweise in drei Bereiche unterteilt (siehe Abbildung 2.31). Diese Unterteilung wird in diesem Abschnitt auch für bidisperse Füllungen beibehalten. Allgemein kann beobachtet werden, daß der obere Bereich der Oberfläche sehr starke Fluktuationen in Form und Länge zeigt. Der mittlere Bereich hat die größte Ausdehnung und besitzt in der Regel ein lineares Profil. Seine Steigung wurde deshalb als der Böschungswinkel definiert. Der untere Bereich wird Fuß der Oberfläche genannt. Das Profil des Fußes ist meistens etwas weniger linear als das des mittleren Bereiches und seine Steigung, der Winkel des Fußes

α_f ist vom Böschungswinkel verschieden. Die Grenzen zwischen den Bereichen sind natürlich nicht scharf und deshalb nur äußerst schwer zu bestimmen. Für praktische Zwecke wurden sie deshalb auf diejenigen Werte festgelegt, die bereits aus monodispersen Systemen ohne Wandteilchen bekannt sind (siehe Abschnitt 2.2.3). Dort ist zum Beispiel die untere Grenze durch den Knick der Oberfläche in einer Höhe von $h = 0.66R$ relativ gut definiert.

Zuerst wurde die Abhängigkeit des Böschungswinkels von der Systemgröße für eine feste Wandteilchendichte $\rho_w = 0.5$ untersucht. Die Wandteilchen wurden mit der Zufallsgitter-Methode plaziert. Simuliert wurden sowohl monodisperse Systeme und als auch bidisperse Systeme mit Radienverhältnis $r = 0.5$ und Konzentration der kleinen Teilchen $c = 0.5$ beziehungsweise $c = 1/8$. Alle Trommeln waren wie üblich annähernd halb gefüllt mit einem Füllungsgrad von $\Gamma = 0.45$ und wurden mit einer Rotationsschrittweite $\Delta\Phi = 1$ rotiert. Die in diesem Abschnitt gezeigten Meßwerte beruhen auf Mittelungen über jeweils 20 Umdrehungen und 10 Systeme. Die Fehlerbalken sind die Standardabweichungen der Systemmittel.

Aus Abbildung 2.32 erkennt man zunächst, daß der Böschungswinkel für größere Systeme eine Abhängigkeit proportional zum Kehrwert der Systemgröße zeigt. Außerdem hängt er stark vom Radienverhältnis r und von der Komposition der Füllung ab. Für kleinere Trommeln wird diese Abhängigkeit immer geringer, bis sie bei $R \approx 30$ verschwindet. Auffällig ist, daß zwischen monodispersen und bidispersen Systemen ein erheblicher qualitativer Unterschied besteht. Der Böschungswinkel steigt in bidispersen Systemen mit der Systemgröße, wogegen er in monodispersen Systemen fällt. Abweichungen vom regulären Verhalten setzen ungefähr für $R \approx 60$ ein. Dies ist der Bereich in dem schon zuvor signifikante *Finite-Size*-Effekte beobachtet wurden [Bau93]. Die Meßwerte für bidisperse Systeme mit wenigen kleinen Teilchen zeigen, daß es einen Übergang zwischen dem Ansteigen des Böschungswinkels für bidisperse Systeme mit $c = 0.5$ und dem Abfallen für monodisperse Systeme mit steigender Trommelgröße gibt. Es ist denkbar, daß eine Konzentration der kleinen Teilchen existiert, für die der Böschungswinkel für alle Systemgrößen einen konstanten Wert zeigt.

Wie der Böschungswinkel und der Winkel des Fußes von der Konzentration der kleinen Teilchen der Füllung c abhängt, zeigt Abbildung 2.33. Darin sind Ergebnisse aus Simulationen mit glatten und rauhen ($\rho_w = 0.5$) Wänden dargestellt. Die Kurven für den Böschungswinkel sind beinahe symmetrisch und sowohl für glatte als auch rauhe Wände fast identisch. Offensichtlich spielt die Rauhig-

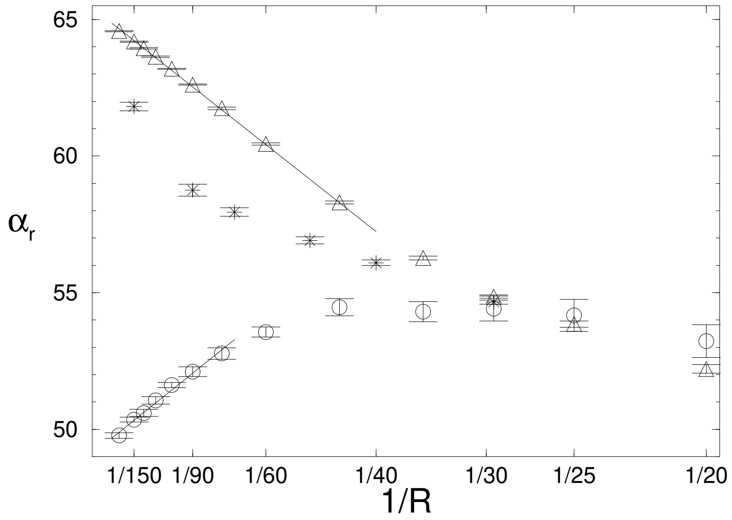

Abbildung 2.32: Abhängigkeit des Böschungswinkels α_r in Grad vom Kehrwert des Trommelradiuses $1/R$ für monodisperse (Kreise), bidisperse $c = 0.5$ (Dreiecke) und bidisperse $c = 1/8$ (Sterne) Füllungen.

keit der Wand nur eine untergeordnete Rolle für den Böschungswinkel. Erst in der Nähe monodisperser Systeme ($c = 0$ und $c = 1$) zeigen sich signifikante Abweichungen zwischen den beiden Kurven. Ihre leichte Asymetrie läßt sich mit Abbildung 2.32 erklären. Das monodisperse System für $c = 1$ ist doppelt so groß wie das für $c = 0$.

Der Winkel des Fußes zeigt in Abbildung 2.33 größere Abweichungen zwischen den beiden unterschiedlichen Fällen von glatten und rauhen Wände. Im Bereich von $0.4 \leq c \leq 0.9$ sind hier aber ebenfalls beide Kurven identisch. Dies bedeutet, daß in diesem Bereich die Unordnung, die durch eine rauhe Wand in die Packungsstruktur eingeführt wird, nicht relevant ist. Durch die Anwesenheit sowohl kleiner als auch großer Teilchen im Bereich des Fußes wird soviel Unordnung erzeugt, daß der Beitrag durch Wandteilchen nicht zum Tragen kommt. Bei kleineren Konzentrationen als $c = 0.4$ werden kleine Teilchen im Bereich des Fußes durch die Segregation selten. Deshalb hat Wandrauhigkeit mit abnehmender Konzentration einen immer größeren Einfluß.

Im Vergleich ist auffällig, daß der Böschungswinkel meistens größer ist als der Winkel des Fußes. Dies entspricht dem experimentell beobachteten leicht S-förmigen Profil der Oberfläche [Raj90]. Auf Grund der räumlichen Begrenzung durch die Trommelwände erzeugen Lawinen am Fuße der Oberfläche leich-

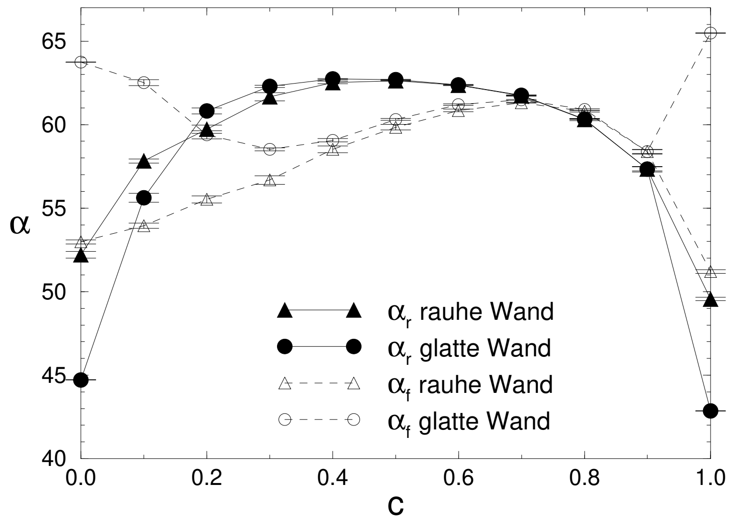

Abbildung 2.33: Abhängigkeit der charakteristischen Winkel α_r und α_f in Grad von der Konzentration der kleinen Teilchen c der Füllung ermittelt in Trommeln mit $R = 90$, $r = 0.5$ und $\rho_w = 0.5$ für rauhe Wände.

te Aufschüttungen, die ein flacheres Profil als der Rest der Oberfläche besitzen. Gleiches ist am Fuße von einfachen Sandhügeln zu beobachten [AH96]. Nur in der Nähe monodisperser Systeme dreht sich dieses Verhältnis um. Dort ist der Böschungswinkel flacher. Es ist anzunehmen, daß diese Konfigurationen mit einem steileren Fuß nur stabil sind, weil sie ein hohes Maß an Ordnung in ihrer Struktur enthalten.

Grundsätzlich gilt, daß monodisperse Systeme eine ungleich ausgeprägtere Ordnung ihrer Packungsstruktur besitzen als bidisperse Systeme. Aus diesem Grund ist die Wirkung von zufällig plazierten Wandteilchen in monodispersen Systemen sehr viel größer als in bidispersen Systemen. Dies läßt sich unschwer an Abbildung 2.33 erkennen. Die Rolle der Wandteilchendichte ρ_w wurde deshalb in monodispersen Systemen untersucht und in Abbildung 2.34 aufgetragen. Man erkennt zunächst, daß die Winkel nicht von der Plazierungsmethode der Wandteilchen abhängen. Weiterhin sind die Meßwerte für glatte Trommelwände ($\rho_w = 0$) annähernd identisch mit denen für eine Monolage von Wandteilchen ($\rho_w = 1$). Hierfür gibt es die einfache Erklärung, daß monodisperse Systeme mit glatten Wänden eine fast perfekte Monolage entlang der Wand ausbilden. Diese Monolage wird im anderen Fall durch die Wandteilchen selber gebildet. Erstaunlich ist, daß die Wandteilchen offensichtlich für eine Dichte von $\rho_w \approx 0.7$

den größten Einfluß ausüben. Aus Symmetriegründen würde man erwarten, daß die meiste Unordnung und damit die größten Abweichungen von den identischen Fällen $\rho_w = 0$ und $\rho_w = 1$ für eine mittlere Dichte $\rho_w = 0.5$ auftritt.

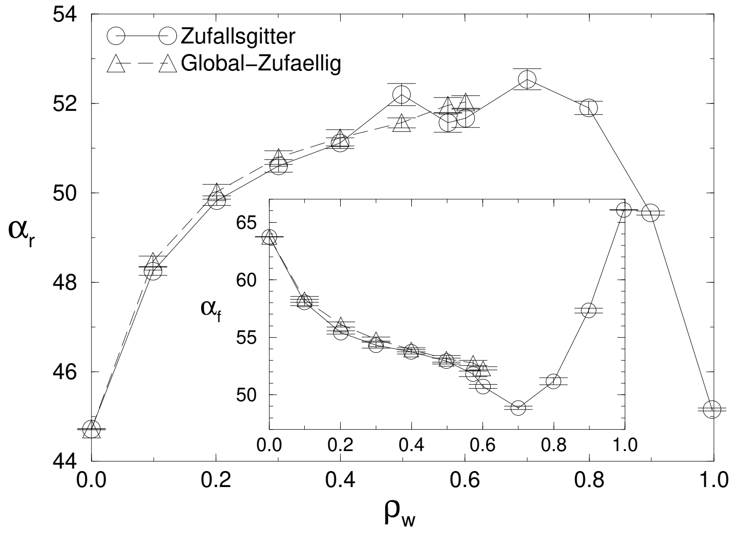

Abbildung 2.34: Böschungswinkel α_r und Winkel des Fußes α_f (im eingesetzten Bild) in Grad als Funktion der Dichte der Wandteilchen ρ_w. Kreise mit durchgezogener Linie für die Zufallsgitter-Methode und Dreiecke mit gestrichelter Linie für die Global-Zufällige-Methode der Positionierung.

Zusammenfassend ist der Böschungswinkel im BTR-Modell von der Systemgröße R, dem Radienverhältnis r, der Rotationsgeschwindigkeit ω, der Vibrationsfrequenz ν, der Konzentration der kleinen Teilchen c und der Dichte der Wandteilchen ρ_w abhängig. Eine Abhängigkeit von Füllungsgrad der Trommel Γ wurde nicht untersucht, ist aber wahrscheinlich. Für unterschiedlich große Füllungen ändert sich der Winkel am Übergang zwischen Trommelwand und Oberfläche. Dies hat sicherlich Einfluß auf die lokale und damit weitergehende Steigung der Oberfläche.

Die hier gefundenen Abhängigkeiten werden qualitativ entsprechend in experimentellen Untersuchungen zu beobachten sein. Vorraussetzung ist allerdings, daß die Systeme groß genug sind und ausreichend langsam rotieren. Es ist daher wahrscheinlich, daß die in Abbildung 2.30 wiedergegebenen experimentellen Daten auf *Finite-Size*-Effekten beruhen. Die Möglichkeit ungenauer Meßmethoden läßt sich natürlich ebenfalls nicht ausschließen. Diese werden durch große Fluktuationen der Meßwerte gleicher Systeme für unterschiedliche kleine Rotationsgeschwindigkeiten angedeutet. In ausreichend großen Trommeln wird der charakteristische Unterschied zwischen monodispersen und bidispersen Systemen experimentell sicherlich zu beobachten sein, da dieser Unterschied mit zunehmender Systemgröße anwächst.

Für die Ergebnisse des BTR-Modells und gegen Abbildung 2.30 spricht weiterhin eine neuere experimentelle Untersuchung von K.M. Hill und J. Kakalios [HK95]. Danach ist die Ursache für axiale Bändersegregation in dreidimensionalen Systemen eine Verringerung des Böschungswinkels in monodispersen Bereichen gegenüber bidispersen Bereichen einer Füllung. Diese Verringerung treibt den Diffusionsprozess zur Entmischung der Teilchengrößen an der Oberfläche. Bidisperse Systeme haben nach R.B.S. Oakeshott und S.F. Edwards einen größeren Böschungswinkel als monodisperse Systeme, weil sie eine dichtere Packung besitzen und deshalb einer größeren Scherkraft wiederstehen können [OE94]. Diese Beobachtungen stehen in Übereinstimmung mit denen des BTR-Modells.

2.2.5 Selbstorganisierte Kritizität

P. Bak, C. Tang und K. Wiesenfeld führten 1987 das Konzept der selbstorganisierten Kritizität ein [BTW87]. Es besagt, daß die Dynamik räumlich ausgedehnter, dissipativer, langsam getriebener Systeme selbständig in einen kritischen Punkt laufen kann [BTW87, BTW88, BC91, Ján91]. Langsamer Antrieb ist im Sinne einer Separation von Zeitskalen zu verstehen. Dies bedeutet, daß die Zeiträume der Energiezuführung wesentlich länger sind als die der Dissipationsereignisse. *„Energie wird auf allen Längenskalen dissipiert. Sobald der kritische Punkt einmal erreicht ist, verbleiben die Systeme dort. Das Verhalten von Systemen am selbstorganisierten kritischen Punkt wird durch eine Reihe von kritischen Exponenten charakterisiert, die durch Skalenrelationen verknüpft sind, und die Systeme zeigen ein "Finite-Size-Scaling" analog zu statistischen Gleichgewichtssystemen an ihrem kritischen Punkt“* [BTW88]. Als typisches Merkmal von selbstorganisiert kritischen Systemen gelten Verteilungen der Energiedissipation, die ein Potenzgesetzverhalten zeigen. Potenzgesetze sind die einzigen Funktionen, die keine charakteristische Größe aufweisen. Die Abwesenheit jeder charakteristischen Größe ist gerade eines der Merkmale, die selbstorganisiert kritische Systeme auszeichnen. Ein typisches und weithin bekanntes Beispiel für selbstorganisierte Kritizität ist das empirische Gutenberg-Richter Gesetz. Dieses besagt, daß die weltweite Häufigkeit von Erdbeben in Abhängigkeit von der in ihnen freigesetzten Energie wie ein Potenzgesetz mit einem Exponenten zwischen -0.8 und -1.1 abnimmt [SS89].

Bak, Tang und Wiesenfeld demonstrierten selbstorganisierte Kritizität anhand eines Modells, das die Dynamik der Lawinen eines Sandhaufens, dem kontinuierlich neue Sandkörner an seiner Spitze zugeführt werden, beschreiben sollte. Dieses Sandhaufenmodell ist einer der wesentlichen Gründe für das in den letzten Jahren gesteigerte Interesse der Forschung an granularer Materie. Ihm folgten eine Reihe von Experimenten, die versuchten, selbstorganisierte Kritizität in realen Sandhaufensystemen nachzuweisen [JLN89, HSK+90, BCKN92, GMH+93, RVK93, Noe93]. Es stellte sich jedoch heraus, daß diese Systeme kein solches Verhalten zeigen. Insbesondere eine Zusammenfassung und genauere Analyse dieser Experimente durch J. Feder zeigte, daß die meisten Systeme eine gestreckte Exponentialfunktion in der Verteilung der Lawinengröße zeigen. Solche sind nicht mit selbstorganisierter Kritizität vereinbar [Fed95]. Andere Experimente zeigten charakteristische Periodizitäten, die darauf zurückgeführt wurden, daß granulare Materie nicht einen einzelnen, bestimmten kritischen Punkt besitzt.

Die Dynamik oszilliert vielmehr zwischen dem Böschungswinkel und dem Stabilitätsgrenzwinkel [JLN89, RVK93].

Die im Abschnitt 2.2.3 geschilderten Untersuchungen zur Aktivität s in der Lawinenzone entsprechen nicht dem Konzept der selbstorganisierten Kritizität. Die Vorraussetzungen für ein *Finite-Size-Scaling* ist diesem Konzept nach eine kleine, konstant treibende Kraft für alle Systemgrößen. Im Falle der Sandhaufenmodelle von Bak, Tang und Wiesenfeld bedeutet dies zum Beispiel, daß die Rate, mit der neue Sandkörner den Spitzen der Sandhaufen zugeführt werden, für alle Sandhaufengrößen gleich ist. Es muß also sichergestellt sein, daß die mittlere Masse der Lawinen pro Zeitschritt konstant ist. Dies war im Abschnitt 2.2.3 nicht der Fall. Dort wurde durch die konstante Rotationsschrittweite und auf Grund der Massenerhaltung eine mittlere Masse pro Zeitschritt durch die Lawinenzone transportiert, die proportional zum Quadrat der Systemgröße war. Um die Voraussetzungen für eine Untersuchung auf selbstorganisierte Kritizität zu schaffen, ist es deshalb notwendig die Rotationsschrittweite

$$\Delta\Phi \propto \frac{1}{R^2} \tag{2.28}$$

zu wählen.

Es sei daran erinnert, daß die Rotationsschrittweite das Verhältnis von Rotationsgeschwindigkeit zur Vibrationsfrequenz darstellt und als der *getriggerte* Unterschied zwischen Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel verstanden werden kann.

Untersucht wurden zunächst bidisperse Systeme mit Radienverhältnis $r = 0.5$, Konzentration der kleinen Teilchen $c = 0.5$ und Dichte der Wandteilchen $\rho_w = 0.5$. Die Rotationsschrittweite wurde für verschiedene Systemgrößen entsprechend der Gleichung (2.28) gewählt:

R	60	90	120	150	180	210
$\Delta\Phi$	1	4/9	1/4	4/25	1/9	4/49

Die Trommeln waren wie üblich annähernd halb, bis zu einem Füllungsgrad von $\Gamma = 0.45$ gefüllt. Dies entspricht einer Füllhöhe bis zu einem Abstand der Oberfläche vom Trommelmittelpunkt von $0.05R$. Für jede Trommelgröße wurde der mittlere Böschungswinkel wie in Abschnitt 2.2.4 bestimmt. Die Grenze zwischen Lawinenzone und Rest der Füllung wurde anschließend mit dieser mittleren Steigung in einem Abstand von $0.05R + b_{LZ}$ vom Trommelmittelpunkt festgelegt. Dabei ist b_{LZ} die Breite der Lawinenzone. Es wurden Meßreihen mit verschiedenen Breiten ($b_{LZ} = 8$, 12 oder $0.15R$) durchgeführt, um zu zeigen, daß die Ergebnisse nicht von dieser Breite abhängen. Es sei vorweggenommen, daß dies tatsächlich der Fall war, weil die Breite der Lawinenzone stets größer als die unbekannte und flukturierende tatsächliche Breite der Lawinen war. In diesem Abschnitt werden deshalb nur noch die Ergebnisse zur Lawinenzonenbreite $b_{LZ} = 0.15R$ abgebildet. Die Ergebnisse mit anderen Breiten der Lawinenzone zeigen jeweils vollkommen analoge Bilder. Abbildung 2.35 stellt eine entsprechende Trommel mit Wandteilchen, Lawinenzone und deutlich erkennbarer Segregation dar.

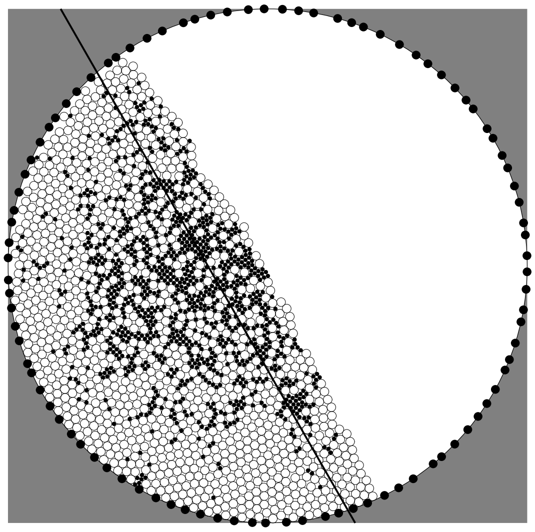

Abbildung 2.35: Trommel mit $R = 60$, $r = 0.5$, $c = 0.5$, $\rho_w = 0.5$ nach drei Umdrehungen. Die Linie im Abstand $0.2R$ vom Mittelpunkt der Trommel zeigt die Grenze der Lawinenzone. Ihr Winkel gegenüber der Horizontalen ist der mittlere Böschungswinkel $\alpha_r = 60.44°$ in diesem System.

Im Gegensatz zum Abschnitt 2.2.3 wurde nicht die Aktivität s der Lawinen untersucht. Stattdessen wurde die Änderung der potentiellen Energie ΔE_{pot} der Systeme ermittelt, wie es das Konzept der selbstorganisierten Kritizität vorsieht. ΔE_{pot} wurde während der Simulationen separat für kleine und große Teilchen aufgenommen und ist definiert als die Summe der Differenzen der vertikalen Koordinaten der Teilchen vor und nach einem Zeitschritt. Beide Summen sind mit der Masse der jeweiligen Teilchengröße, also dem Quadrat der Teilchenradien zu multiplizieren. Gezählt wurden nur Teilchen innerhalb der Lawinenzone. Die Verteilung der Änderungen der potentiellen Energie ergab sich für jede Systemgröße in einem zur Aktivität analogen Verfahren. Dieses sah jeweils eine Aufnahme eines Histogramms über zehn verschiedene Systeme und fünf Umdrehungen der

Trommeln vor. Drei anfängliche Umdrehungen wurden wie üblich verworfen. Alle Verteilungen $P(\Delta E_{pot}, R)$ wurden zuerst normiert:

$$\int P(\Delta E_{pot}, R)\, d\Delta E_{pot} \;=\; 1 \qquad , \tag{2.29}$$

und anschließend mit dem *Finite-Size-Scaling*-Ansatz [Gleichung (2.11)] reskaliert. Die Normierung (2.29) impliziert die Skalenrelation $\nu = \beta$.

Ein optimaler Datenkollaps konnte sowohl in monodispersen als auch bidispersen Systemen durch ein Skalen der Verteilungen mit der Systemgröße ($\nu = \beta = 1$) erzielt werden. Dieses Ergebnis war zu erwarten, da die Oberflächenaktivität in Abschnitt 2.2.3 kubisch skalt und sich daraus ein quadratischer Anteil durch die Massenerhaltung bei konstantem $\Delta\Phi$ ergab. Dieser ist hier nicht mehr gegeben. Weiterhin steht dieses Ergebnis in Übereinstimmung zu Experimenten von V. Frette *et al.*, die die Dissipation von Energie in einem Reishaufen untersuchten [FCMS+96]. Ursächlich für das lineare Skalen mit der Systemgröße ist wiederum nach L.A.N. Amaral und K.B. Lauritzen eine Fluktuation in der Größe der zugeführten potentiellen Energie pro Zeitintervall [AL96a, AL96b]. Sie untersuchten ein zellulares Reishaufenmodell, wobei eine Art stroboskopisches Meßverfahren verwendet wurde, das die potentielle Energiedifferenz der Oberflächenkonfigurationen vor und nach der Ablagerung von ungefähr fünf Teilchen ermittelte. Da nicht jedes Teilchen gleich viel potentielle Energie dem System zuführt, ergaben sich Fluktuationen in der Größe der zugeführten Energie pro Zeitintervall der Messung. Solche Fluktuationen waren sowohl im Experiment von Frette *et al.* als auch in den Simulationen des BTR-Modells vorhanden. Die Anzahl der Teilchen, die in die Lawinenzone hinein und aus ihr hinaus transportiert wurden, und die potentielle Energie, die pro Zeitschritt dem System durch die Rotation zugeführt wurde, waren keine Konstanten, sondern hingen von der Konfiguration der Teilchen im vorangegangenen Zeitschritt ab. Ohne Fluktuationen der zugeführten Energie ergaben sich bei Amaral und Lauritzen vollkommen andere Verteilungen der Energiedissipation mit einem anderen Skalenverhalten.

In Abbildung 2.36 sind die reskalierten Verteilungen der Dissipation der Energie der kleinen Teilchen bidisperser Mischungen aufgetragen. Man erkennt deutlich für den skalenden Bereich größerer Lawinen ein Potenzgesetzverhalten, wie es für selbstorganisiert kritische Systeme erforderlich ist. Allerdings ist auffällig, daß die unteren Enden der Verteilungen für die jeweils größten Lawinen in dieser Auftragung nicht skalen. Offensichtlich kann man einen besseren Datenkollaps erhalten, wenn man die Verteilungen entlang der Geraden, die das Potenzgesetz charakterisiert, verschiebt. Zu diesem Zweck führt man in den *Finite-Size-*

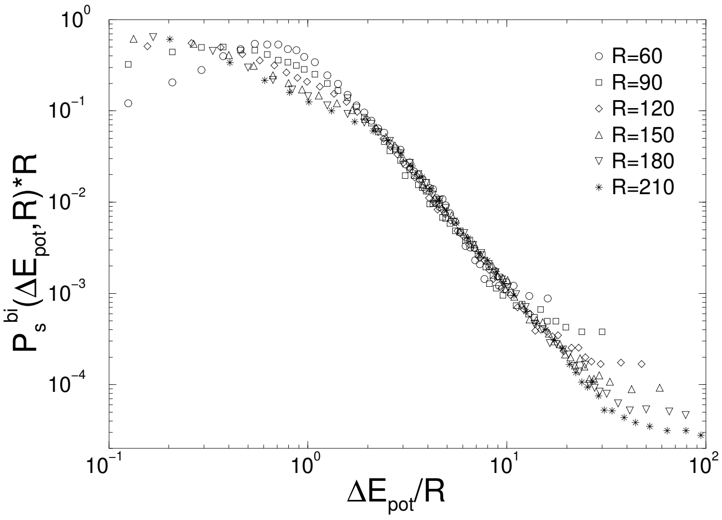

Abbildung 2.36: Linear skalierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der dissipierten potentiellen Energie für kleine Teilchen in bidispersen Systemen. Die Breite der Lawinenzone betrug $b_{LZ} = 0.15R$.

Scaling-Ansatz (2.11) einen neuen Exponenten μ für die Verschiebung ein und erhält:

$$P(\Delta E_{pot}, R)\, R^{\nu+\mu} = \mathcal{F}\left(\frac{\Delta E_{pot}}{R^{\beta+\mu/\alpha}}\right) \qquad \text{mit} \qquad \mathcal{F}(x) \approx x^{-\alpha} \qquad . \tag{2.30}$$

Diese Reskalierung erhält die Normierung der Verteilungen nicht. Für die Untersuchung der skalenden Teile der Verteilungen ist dies legitim, da die Normierung für die gesamten Verteilungen inklusive der nicht skalenden Teile gilt. Der beste Datenkollaps konnte durch eine Verschiebung mit einem Exponenten $\mu = \alpha$ erreicht werden. Dies ist in Abbildung 2.37 dargestellt. Da der zusätzliche Exponent identisch mit dem Exponenten des Potenzgesetzes ist, zeigt dies, daß in den Systemen keine neue unabhängige Größe existiert. Das resultierende Skalen der größten Lawinen mit R^2 basiert auf der Tatsache, daß diese Lawinen aus fast allen segregierten kleinen Teilchen an der Oberfläche bestehen ($\propto R$), die eine Strecke proportional zu R herunterfließen.

Der Exponent α des Potenzgesetzes wurde aus den Steigungen der linearen Teile der Verteilungen ermittelt. Hierbei wurde das Verfahren der aufeinanderfolgenden Steigungen (englisch: *consecutive slopes*) verwendet. Dieses Verfahren ermittelt jeweils die Steigung in einem beschränkten lokalen Bereich des Potenzgesetzes. Dieser Bereich hat auf der logarithmischen Skala eine konstante Breite und wird fortlaufend um einen Bruchteil seiner Breite verschoben. Auf diese Wei-

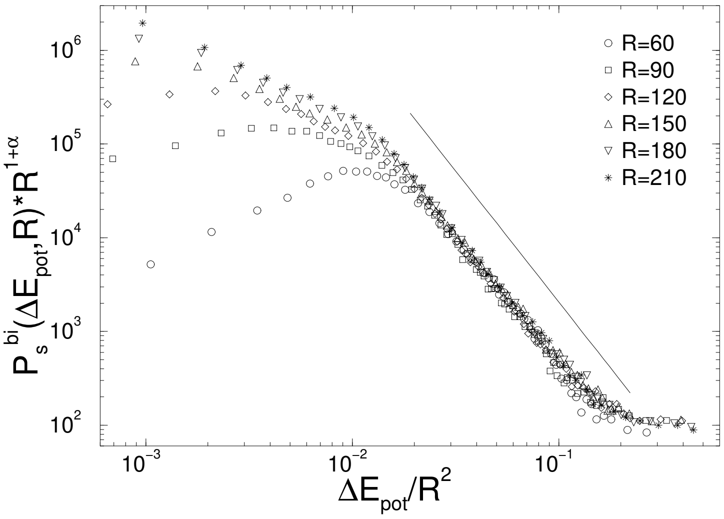

Abbildung 2.37: Reskalierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der dissipierten potentiellen Energie für kleine Teilchen in bidispersen Systemen. Die Breite der Lawinenzone betrug $b_{LZ} = 0.15R$. Die Linie zeigt die Steigung des für alle Systemgrößen und Breiten der Lawinenzone ermittelten Potenzgesetzes $\alpha = 2.8$.

se erhält man eine Folge von lokalen Steigungen α_l über dem skalenden Bereich der Verteilungen. Ein Potenzgesetz ist in diesem Verfahren durch ein Plateau nahezu konstanter Werte der lokalen Steigungen gekennzeichnet und in Abbildung 2.38 zu erkennen. In dieser Abbildung sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nur die aufeinanderfolgenden Steigungen für zwei Trommelradien aufgetragen. Der Exponent des Potenzgesetzes ergibt sich jeweils aus dem Mittelwert der Meßwerte des Plateaus. Eine Auftragung dieser Mittelwerte für alle Systemgrößen zeigt einen leichten Anstieg mit der Systemgröße. Die Stärke des Anstiegs verlangsamt sich aber mit zunehmendem Trommelradius. Insgesamt ist es eine gute Abschätzung, den Exponenten für beliebig große Trommeln mit $\alpha = 2.8 \pm 0.2$ anzugeben. Diese Abschätzung berücksichtigt alle systematischen Fehler.

Der Wert des Exponenten α ist im BTR-Modell größer als im Experiment von Frette *et al.* ($\alpha \approx 2.04$). Dies ist einsichtig, da im BTR-Modell die Wahrscheinlichkeit, eine große Lawine zu finden, sehr viel geringer sein muß als in Experimenten. In Experimenten ist es möglich, daß Lawinen sich während ihrer Abwärtsbewegung durch Kollisionen mit Teilchen aus der stabilen Füllung vergrößern. Folglich muß in Experimenten eine breitere und flachere Verteilung der Wahrscheinlichkeiten für Lawinen gegeben sein als im BTR-Modell.

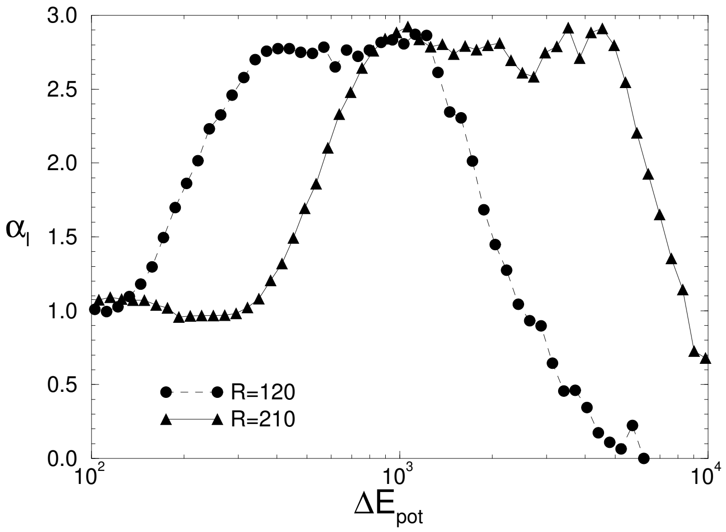

Abbildung 2.38: Folgen der aufeinanderfolgenden lokalen Steigungen α_l zweier Verteilungen aus Abbildung 2.36/2.37 innerhalb ihrer skalenden Bereiche.

Das Verhalten der großen Teilchen wird von den kleinen Teilchen in Analogie zur Segregation kaum beeinflußt. Deshalb findet man für große Teilchen bidisperser Mischungen eine andere Skalenfunktion. In Abbildung 2.39 sind die ermittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen aufgetragen. Man beachte, daß auf der Ordinate der Logarithmus der Verteilungen in einer logarithmischen Skala aufgetragen ist. Interessanterweise gehorchen die Verteilungen für große Teilchen nicht einem Potenzgesetz, sondern einer gestreckten Exponentialverteilung der Form:

$$P(\Delta E_{pot}, R)\, R \;=\; \frac{\gamma}{\xi^{1/\gamma}\Gamma\left(\frac{1}{\gamma}\right)} \exp\left[-\xi^{-1}\left(\frac{\Delta E_{pot}}{R}\right)^{\gamma}\right] \qquad , \tag{2.31}$$

wie sie J. Feder für viele experimentelle Ergebnisse nachgewiesen hat [Fed95]. Hierbei ist ξ ein charakteristischer Wert für die dissipierte potentielle Energie pro Trommelradius. Man kann ihn über den Mittelwert

$$\left\langle \frac{\Delta E_{pot}}{R} \right\rangle \;=\; \xi^{1/\gamma}\frac{\Gamma(2/\gamma)}{\Gamma(1/\gamma)} \tag{2.32}$$

bestimmen. Zuvor ist der Exponent γ aus der Steigung des linearen Teils der Verteilungen (Abbildung 2.39) zu ermitteln. Es ergaben sich für bidisperse Systeme $\gamma_{bi} = 0.61 \pm 0.05$ und $\xi_{bi} \approx 1.0$. Der Fehler von γ ergibt sich aus der Standardabweichung der Mittelung über alle Systemgrößen und Breiten der Lawinenzone.

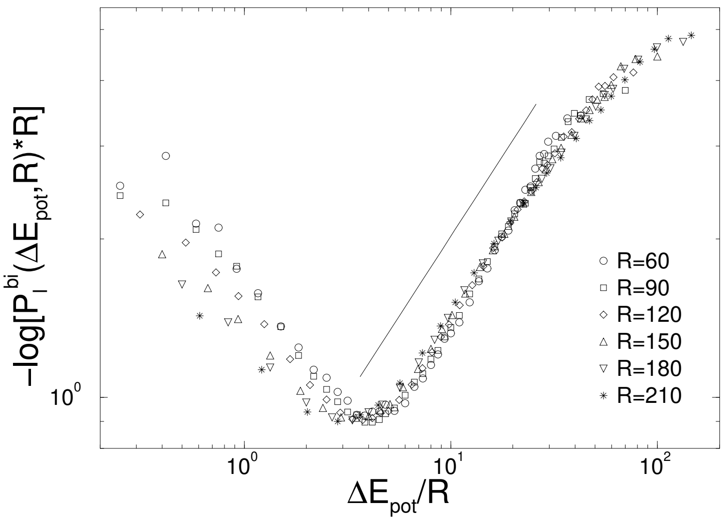

Abbildung 2.39: Logarithmus der linear skalierten Wahrscheinlichkeitsverteilung der dissipierten potentiellen Energie für große Teilchen in bidispersen Systemen. Die Breite der Lawinenzone betrug $b_{LZ} = 0.15R$. Die Linie zeigt den mittleren Wert des Exponenten γ_{bi} aus Gleichung (2.31) für alle Systemgrößen und Breiten der Lawinenzone.

Berücksichtigt man diesen Fehler in der Berechnung von ξ_{bi}, so ergeben sich Abweichungen, die in der Größenordung von ξ_{bi} selbst liegen. Folglich kann der angegebene Wert von ξ_{bi} nur als eine Näherung betrachtet werden.

Die gestreckte Exponentialfunktion wird in rein monodispersen Systemen sehr viel deutlicher. Die linear skalierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind in Abbildung 2.40 aufgetragen. Darin findet man über die gesamte Breite der Verteilungen, also über drei Größenordnungen das gestreckte Exponentialverhalten. Es ergeben sich $\gamma_{mono} = 0.31 \pm 0.02$ und $\xi_{mono} \approx 0.9$.

Insgesamt zeigen im Vergleich aller Ergebnisse nur die kleinen Teilchen bidisperser Systeme keine charakteristische Lawinengröße und damit selbstorganisiert kritisches Verhalten. Dies muß im Zusammenhang mit dem Segregationseffekt stehen. Betrachtet man die Abbildung 2.35, so erkennt man, daß die Oberfläche relativ glatt ist. In Abschnitt 2.2.3 wurde gezeigt, daß nur für kleine Teilchen einer bidispersen Füllung eine breite Verteilung zahlreicher Nischen an der Oberfläche existiert. Für große Teilchen gibt es nur sehr wenige Nischen, die in der Lage sind, sie einzufangen. Insbesondere in monodispersen Systemen läßt sich meistens die Zahl der Nischen an einer Hand abzählen (siehe zum Beispiel

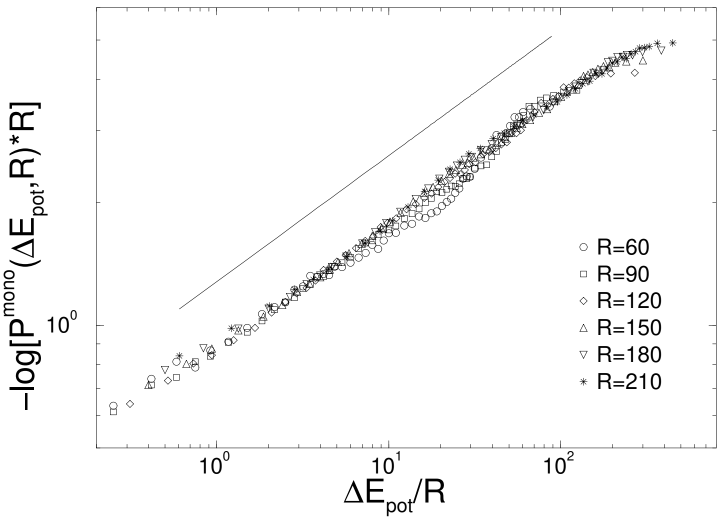

Abbildung 2.40: Logarithmus der linear skalierten Wahrscheinlichkeitsverteilung der dissipierten potentiellen Energie in monodispersen Systemen. Die Breite der Lawinenzone betrug $b_{LZ} = 0.15R$. Die Linie zeigt den mittleren Wert des Exponenten γ_{mono} aus Gleichung (2.31) für alle Systemgrößen und Breiten der Lawinenzone.

Abbildung 2.31). Ohne ausreichende Anzahl von Nischen ist die Mehrzahl der großen Teilchen einer Lawine gezwungen, bis zum Fuß der Oberfläche zu rollen. Das führt dazu, daß kleinere Lawinen unterdrückt werden, und daß eine charakteristische Länge vorhanden ist. Diese Länge ist die typische Wegstrecke, die die Lawinen bis zum Fuß der Oberfläche zurücklegen. Ein gutes Argument für diese Beobachtung ist, daß die charakteristische Größe der dissipierten Energie ξ der Gleichung (2.31) für monodisperse und bidisperse nahezu den gleichen Wert besitzt, obwohl die Exponenten der Verteilungen sich um einen Faktor 2 unterscheiden. Große Lawinen mit großen Teilchen werden also bevorzugt, weil große Teilchen sowohl in monodispersen als auch in bidispersen Systemen ohne ausreichende Zahl von Nischen bis zum Fuß der Oberfläche rollen. Im Unterschied zu großen Teilchen werden die kleinen Teilchen einer Lawine in der Regel durch Nischen eingefangen, bevor sie den Fuß der Oberfläche erreichen. Dieses Einfangen ist in jeder Höhe der Oberfläche möglich.

Diese fundamentalen Beobachtungen sind wichtig zum Verständnis selbstorganisierter Kritizität in granularen Systemen. Für die Existenz selbstorganisierter Kritizität ist es demzufolge notwendig, daß Lawinen sowohl in jeder möglichen Größe ausgelöst, als auch in jeder Höhe der Oberfläche zum Stoppen gebracht werden können. Voraussetzung hierfür ist eine breite Verteilung zahlreicher Nischen, also eine rauhe Oberfläche. Dies erklärt warum Frette *et al.* selbstorganisierte Kritizität nur für längliche Reiskörner mit einer rauhen Oberfläche des Reishaufens beobachten konnten [FCMS+96]. Die Reissorten mit runderen Körnern und glatterer Oberfläche zeigten gestreckte Exponentialverteilungen in Analogie zu den großen Teilchen des BTR-Modells.

An diese Stelle wird ebenfalls klar, warum die Analysen verschiedener Experimente durch J. Feder [Fed95] gleichermaßen gestreckte Exponentialverteilungen zeigen. In den Experimenten wurden kleine Lawinen, die auf der Oberfläche stoppten nicht gezählt. Gemessen wurde jeweils nur die Masse, die über den Rand des Systems floß. Auf diese Weise führte man durch den Meßprozess eine künstliche charakteristische Länge ein, die der typischen Wegstrecke großer Teilchen im BTR-Modell entspricht. Zellulare Sandhaufenmodelle wie diejenigen von Bak, Tang und Wiesenfeld oder Amaral und Lauritzen [BTW87, AL96a] zeigen selbstorganisierte Kritizität, weil sie rauhe Oberflächen simulieren. Jeder Gitterplatz, der durch Hinzufügen eines Teilchens nicht „umkippt“, stellt eine Nische dar.

2.2.6 Mischen

Das Haupteinsatzgebiet rotierender Trommeln ist das Mischen granularer Materie. Da granulare Materie in dieser Hinsicht leider die unangenehme Eigenart besitzt, schon bei leicht unterschiedlichen Eigenschaften zu segregieren, ist es in der Praxis notwendig, zusätzliche Schaufeln in die Trommelmischer einzubauen. Kürzlich führten G. Metcalfe, T. Shinbrot, J.J. McCarthy und J.M. Ottino eine Untersuchung des Mischprozesses in quasi-zweidimensionalen, um horizontale Achsen rotierende Trommeln ohne eingebaute Schaufeln durch [MSMO95]. Sie zeigten experimentell und theoretisch, daß eine optimale Mischeffizienz in zu einem Viertel gefüllten Trommeln gegeben ist. Ihr Modell besteht aus einer geometrischen Abbildung. Es geht davon aus, daß durch die Rotation ein keilförmiger Bereich der Füllung entlang der oberen Hälfte der Oberfläche instabil wird und eine Lawine bildet. Innerhalb dieser Lawine werden alle Teilchen optimal gemischt. Abschließend lagert sich die Lawine als wieder keilförmiger Bereich an die untere Hälfte der Füllung an. Die Spitzen der Keile liegen jeweils in der Mitte der Oberfläche. B.A. Peratt und J.A. Yorke zeigten in einer nachfolgenden Arbeit, daß ein ähnliches Modell für schneller rotierende Trommeln im Regime kontinuierlicher Lawinen ein analoges Ergebnis zeigt [PY96]. Leider sind beide Modelle nur für Teilchen mit identischen physikalischen Eigenschaften gültig. Sie können deshalb Segregation von unterschiedlichen Teilchen nicht erfassen. Die beiden im Experiment gemischten Materialien wurden durch ihre Farbe unterschieden.

Metcalfe *et al.* definierten und maßen eine Größe, die sie Centroid nannten. Der Centroid ist die Länge der Projektion des Massenschwerpunktes der Teilchen einer Farbe auf die Schwerpunktslinie der gesamten Füllung. Die Schwerpunktslinie ist die Gerade, die durch den Mittelpunkt der Trommel und den Gesamtschwerpunkt der Füllung verläuft. In der Anfangskonfiguration sind die beiden verschiedenfarbigen Materialien durch die Schwerpunktslinie getrennt und der Centroid wird auf Eins normiert. Während des Mischvorganges wechselt der Centroid sein Vorzeichen, wenn der Schwerpunkt der Farbe die Schwerpunktslinie kreuzt. Aus Symmetriegründen ist klar, daß der Centroid der einen Farbe bis auf das Vorzeichen identisch mit dem der anderen Farbe ist, wenn beide Farben mit gleichen Massen vertreten sind. Die Definition des Centroids berücksichtigt im Gegensatz zum Abstand der Schwerpunkte der beiden Farben die Symmetrie der Füllung. Der Abstand der Schwerpunkte war in [Bau93] als Indikator für Segregation erkannt worden. Zur Veranschaulichung ist die Definition des Centroids in Abbildung 2.41 und die Anfangskonfiguration für eine Mischung in Abbildung 2.42a) dargestellt. Eine perfekte Mischung führt zu einem Centroid von Null, weil die Schwerpunkte der beiden Farben übereinanderfallen.

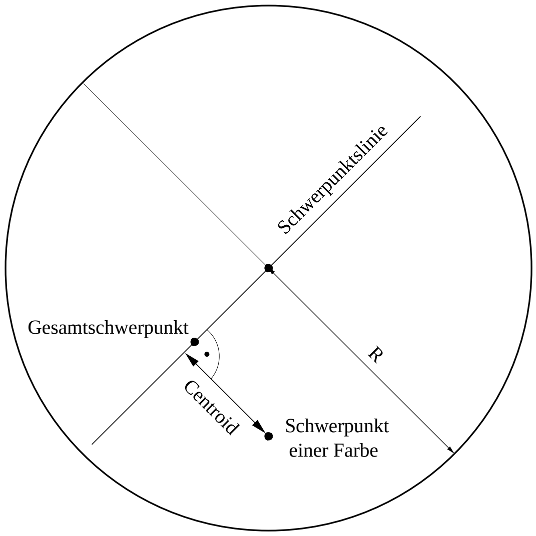

Abbildung 2.41: Schema zur Definition des Centroids.

Metcalfe *et al.* verwendeten für ihre Experimente eine dreidimensionale Trommel der Größe $R = 240$ und Breite $B = 40$. Das granulare Material bestand aus unterschiedlich gefärbten, kubischen Salzkörnern identischer Größe. Um ihre Ergebnisse mit dem BTR-Modell zu reproduzieren wurde eine Trommel der Größe $R = 120$ und die übliche Rotationsschrittweite $\Delta\Phi = 1$ gewählt. Eine doppelt so große Trommel hätte für die notwendigen Simulationen eine zu lange Rechenzeit benötigt. Durch den dreidimensionalen Aufbau des Experimentes waren geordnete Packungsstrukturen der monodispersen Systeme ausgeschlossen. Aus diesem Grund wurden sie im BTR-Modell ebenfalls, aber hier durch Wandteilchen der Dichte $\rho_w = 0.5$ verhindert. Die Abbildung 2.42 zeigt die Anfangskonfiguration einer mit 9000 Teilchen mehr als halb gefüllten Trommel und das gleiche System nach einer 180° Drehung der Trommel. Die Auswirkungen des Mischprozesses in Lawinen ist zu erkennen. Die ursprünglich scharfe Grenzlinie zwischen den beiden Farben ist aufgeweicht [unterer rechter Quadrant der Trommel b)].

Metcalfe *et al.* [MSMO95] und Donald und Roseman [DR62] beschreiben für mehr als halbgefüllte Trommeln die Existenz eines Kerns innerhalb der Füllung, der nicht an der Mischung durch Lawinen partizipiert. Dieser Kern ist ebenfalls in BTR-Simulationen vorhanden aber in Abbildung 2.42b) nicht klar zu er-

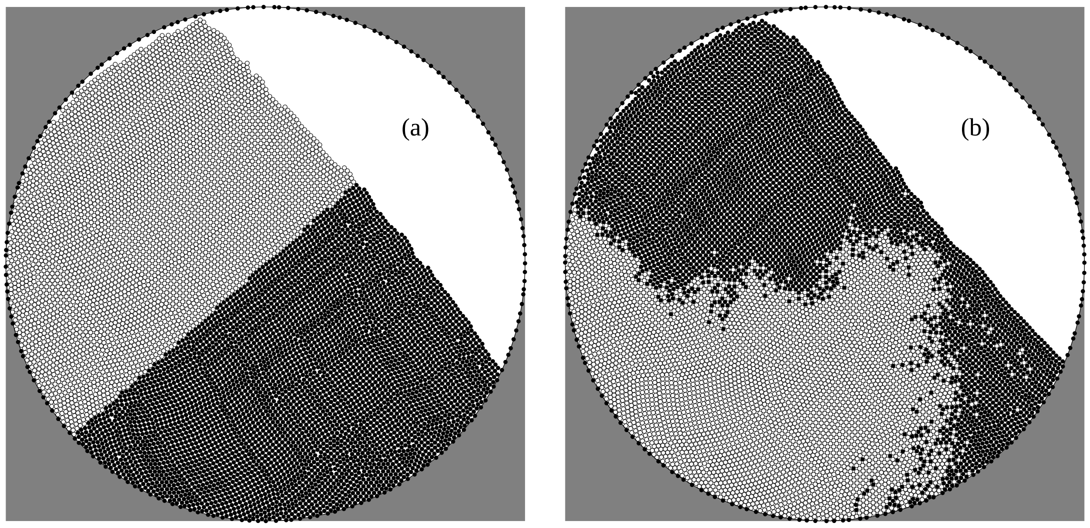

Abbildung 2.42: Anfangskonfiguration a) und Konfiguration nach einer 180° Drehung b) einer Trommel mit Radius $R = 120$ und $\rho_w = 0.5$ gefüllt mit 9000 monodispersen Teilchen. Der Füllungsgrad beträgt $f = 0.728$.

kennen. In Trickfilm-Animationen der BTR-Simulationen war zu erkennen, daß der Grund hierfür in einem schwachen, zusätzlichen Mischprozess liegt, der auf Scherungen innerhalb der Füllung basiert. Intuitiv ist verständlich, daß in rotierenden Trommeln die Kräfte, die von den Wänden auf die Teilchen ausgeübt werden, nicht immer vollständig in die Füllung propagieren können. Manchmal brechen Verbindungen des Kontaktnetzwerkes der Teilchen auf Grund der großen Scherkräfte. Solche Ereignisse verursachen sodann Veränderungen in der lokalen Konfiguration der Packung. Wegen der zweidimensionalen Natur der Simulation sind ihre Packungseigenschaften verschieden von denen des dreidimensionalen Experimentes. Die Packungsdichte ist in zwei Dimensionen zum Beispiel geringer. Folglich ist die Wahrscheinlichkeit für Änderungen lokaler Konfigurationen in zweidimensionalen Systemen größer. Zusätzlich werden in zweidimensionalen Packungsstrukturen entsprechende Änderungen für alle darüberliegendenen Teilchen spürbar. Dies ist in drei Dimensionen nicht unbedingt der Fall. Vertikale Vibration, die im BTR-Modell vorhanden ist, unterstützt ebenfalls die Entstehung von Scherprozessen. Die Vibration löst Kontakte zwischen Teilchen und öffnet Lücken.

Grundsätzlich gilt, daß Scherung in allen rotierenden Trommeln vorhanden ist. Allerdings bestimmen die physikalischen Eigenschaften der Systeme die Anzahl und Größe der Scherprozesse und damit die Stärke des Mischens durch Scherung. Scherung tritt in zweidimensionalen eher als in dreidimensionalen Systemen, für runde eher als für eckige Teilchen und mit Vibration eher als ohne auf. Dies erklärt, warum Metcalfe *et al.* den zusätzlichen Mischprozess nicht beobachteten.

In Übereinstimmung mit Metcalfe *et al.* wurde der Centroid in monodispersen BTR-Simulationen gemessen und festgestellt, daß der Centroid ein beinahe perfektes Verhalten der folgenden Form zeigt:

$$\mathcal{F}(t) = \exp(-\gamma t) \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \qquad . \tag{2.33}$$

Darin ist t die Zeit, die in Umdrehungen der Trommel gemessen wird, und T die Periodendauer der Oszillation des Centroids. Die Zerfallskonstante γ definiert eine Mischrate [MSMO95]. Sie kann ebenfalls im Sinne einer Diffusionskonstanten eines diffusiven Mischprozesses zweier ursprünglich separierter Phasen interpretiert werden. In Abbildung 2.43 ist als Beispiel der gemessene Centroid einer Simulation mit einer *angefitteten* Funktion der Form (2.33) für ein Füllniveau

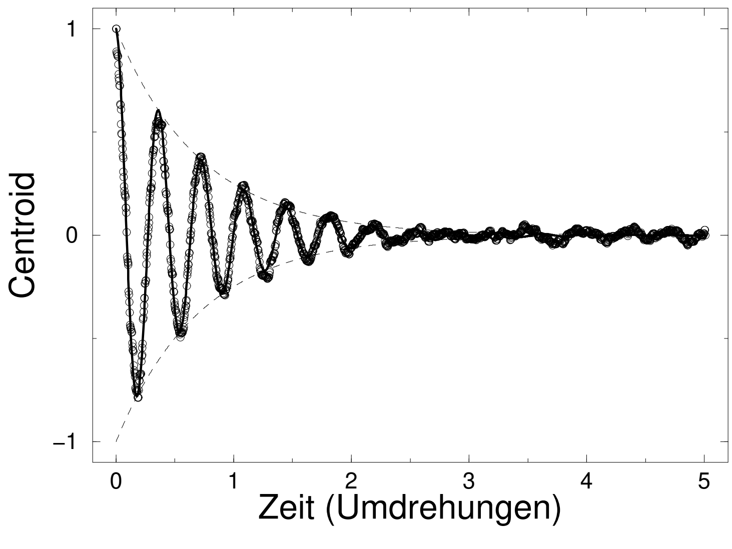

Abbildung 2.43: Ermittelter Centroid (Kreise) einer Trommel gefüllt mit 3000 monodispersen Teilchen. Das Füllniveau beträgt $f = 0.308$. Der *Fit* (durchgezogene Linie) mit Gleichung (2.33) ergibt $\gamma = 1.39$ und $T = 0.36$. Die gestrichelte Linie zeigt den exponentiellen Teil der Gleichung (2.33).

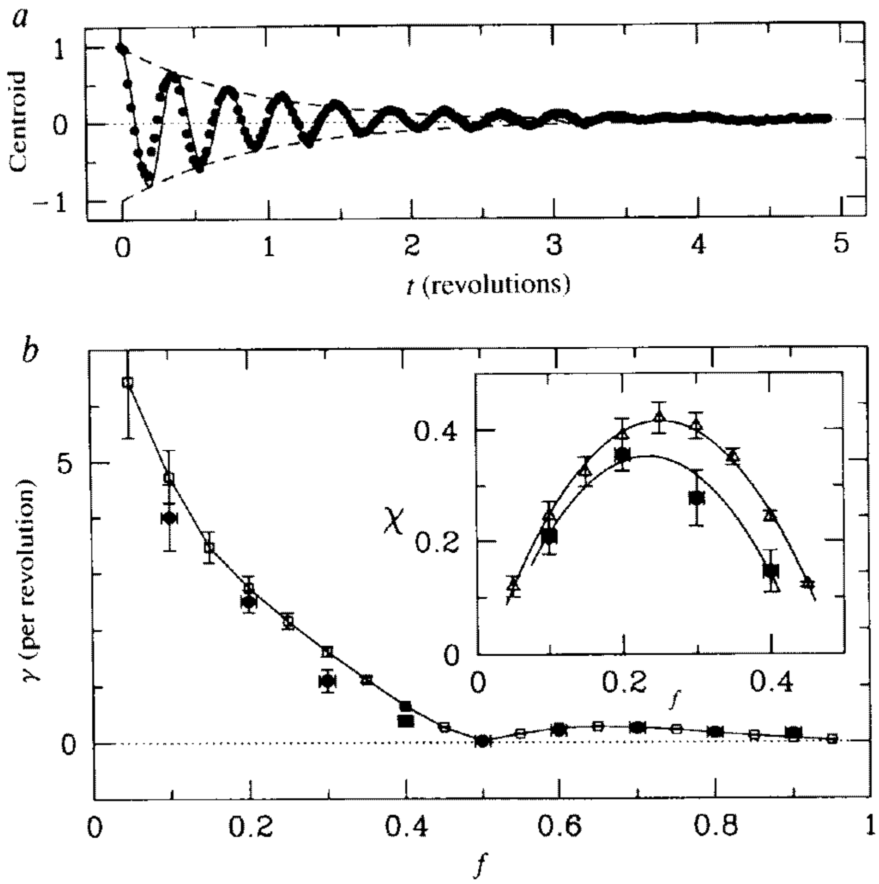

FIG. 3 *a*, Centroid position projected onto the material's centreline for an experiment at fill level $f = 0.30$. The centroids' positions are taken relative to that of the whole material and normalized to one initially. When the material is perfectly mixed, the colour centroids coincide with each other at the origin. The centroids are calculated from digital pictures taken as the disk rotates. The same algorithm is used to calculate experimental and simulated centroid positions. Dots are experimental data; solid lines are a fit to $\exp(\gamma t)\cos(2\pi t/T)$ with mixing rate $\gamma = 1.1 \pm 0.2$, period $T = 0.37 \pm 0.02$, and time t in units of revolutions. The exponential envelopes are emphasized by dashed lines. *b*, Mixing rate γ versus fill level f. Open symbols are obtained from fits to simulated data from the model; filled symbols are experiments. For $f > 0.5$ the core is excluded from the calculation of γ. Inset, the volume mixed per characteristic time, χ ($\equiv \gamma V$), versus f. The experimental (calculated) optimum is $f = 0.23$ ($f = 0.25$).

Abbildung 2.44: Die *Figure 3* von Metcalfe *et al.* aus [MSMO95].

von $f = 30\%$ dargestellt. Zum Vergleich zeigt Abbildung 2.44 das Ergebnis von Metcalfe *et al.* [MSMO95]. Man erkennt eine nahezu perfekte Übereinstimmung.

Das von Metcalfe *et al.* eingeführte Füllniveau f ist der Bruchteil des Durchmessers der Trommel, der von der Füllung bedeckt wird. Das Füllniveau steht in einem einfachen Zusammenhang zu dem in der Diplomarbeit [Bau93] definierten Füllhöhe h:

$$f = \frac{h}{2R} \quad . \tag{2.34}$$

In den BTR Simulationen wurde das Füllniveau über den Füllungsgrad Γ der Trommeln bestimmt. Dieser ist der relative Abstand zwischen dem Schwerpunkt der Füllung und dem Trommelmittelpunkt. Beide sind über die folgende Relation verknüpft:

$$\Gamma(f) = \frac{\frac{16}{3}\left(f - f^2\right)^{\frac{3}{2}}}{2\,(2f-1)\,\sqrt{f-f^2} + \arcsin\left(2f-1\right) + \frac{\pi}{2}} \quad . \tag{2.35}$$

Da die Oberfläche in Experimenten und Simulationen nicht immer linear ist, ist eine direkte Bestimmung des Füllniveaus oft schwierig. In solchen Fällen gibt Γ eine sehr gute Näherung [Bau93].

Der Centroid wurde für verschiedene Füllniveaus der Trommel mit $R = 120$ gemessen. Jeder Mesung folgte wie in Abbildung 2.43 ein *Fit* der Daten mit Gleichung (2.33). Für jedes Füllniveau wurden die *Fitparameter* über 10 verschiedene Systeme gemittelt. Als Ergebnis erhält man die Mischrate als Funktion des Füllniveaus, dargestellt in Abbildung 2.45. Die Fehlerbalken zeigen die Standardabweichungen der Mittelungen über jeweils 10 Systeme. Es war nicht möglich, Systeme zu simulieren, die ein größeres Füllniveau als $f \approx 0.73$ hatten. Das BTR-Modell ist nicht in der Lage, Systeme zu simulieren, deren oberes Ende der Oberfläche im rechten oberen Quadranten der Trommel liegt [Bau93].

Das Ergebnis der experimentellen Untersuchung von Metcalfe *et al.* in Abbildung 2.44 zeigt im Vergleich zu Abbildung 2.45 wiederum eine sehr gute Übereinstimmung. Die einzige Abweichung des Ergebnisses der BTR Simulationen gegenüber dem Experiment besteht in der Position des Minimums der Mischrate. Es liegt bei $f = 0.58$ und nicht bei $f = 0.50$. Der Grund für diese Abweichung liegt im zusätzlichen Mischprozess durch Scherung, der gerade dann zum Tragen kommt, wenn das Mischen durch Lawinen schwach ist. Erkennbar ist dieser Umstand daran, daß der Wert des Minimums von γ nicht wie bei Metcalfe *et al.* Null ist. Folglich ist in BTR-Simulationen immer ein Mischprozess vorhanden, der selbst für exakt halb gefüllte Trommeln nicht verschwindet. Dies ist nur

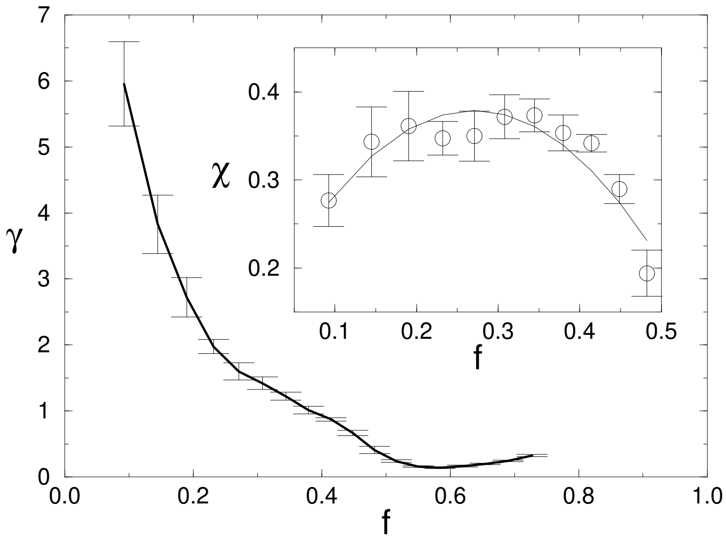

Abbildung 2.45: Mischrate γ als Funktion des Füllniveaus f für monodisperse Füllungen. Das eingesetzte Bild zeigt das Volumen gemischter Materie pro charakteristischer Zeit χ. Das Maximum des quadratischen *Fits* (durchgezogene Linie) liegt bei $f = 0.27$.

mit dem in den Experimenten nicht beobachteten zusätzlichen Mischen durch Scherung zu erklären.

Ebenfalls analog zu [MSMO95] wurde im eingesetzen Bild von Abbildung 2.45 das Volumen gemischter Materie pro charakteristischer Zeit ($\chi = \gamma V$) aufgetragen. Es ist ein Maß für die Effizienz des Mischprozesses. Das Volumen V wurde auf das Volumen der gesamten Trommel normiert. Das Modell von Metcalfe *et al.* sagt ein quadratisches Verhalten voraus. Ein entsprechender *Fit* der Daten ergibt ein Optimum für $f = 0.27$. Dies steht in guter Übereinstimmung zu [MSMO95], worin das Optimum für $f = 0.25$ ermittelt wurde.

Nachdem nun gezeigt wurde, daß das BTR-Modell hervorragende Übereinstimmungen mit den theoretischen und experimentellen Ergebnissen von Metcalfe *et al.*, selbst in den absoluten Werten der untersuchten Variablen besitzt, wird eine Frage untersucht, die von R.P. Behringer in einem Vorwort zu [MSMO95] aufgeworfen wurde. Wie werden die gewonnenen Ergebnisse beeinflußt, wenn die zu mischenden Materialien verschiedene Teilchengrößen aufweisen? Welche Rolle spielt also die Segregation?

Zur Klärung dieser Frage wurden Trommeln der Größe $R = 120$ untersucht, die mit Teilchen der Radien $r_l = 1.0$ und $r_s = 0.5$ gefüllt wurden. Um die Symmetrie der beiden Centroide der Farben zu erhalten wurden beide Teilchengrößen mit gleichen Massen verwendet. Das bedeutet, daß viermal so viele kleine wie große Teilchen Verwendung fanden ($c = 0.8$).

Es wurden zwei unterschiedliche Anfangskonfigurationen untersucht. Die erste Anfangskonfiguration bestand aus verschiedenen Farben für verschiedene Teilchengrößen. Dies bedeutete, daß zu Beginn die großen Teilchen rechts und die kleinen Teilchen links der Schwerpunktslinie waren. Da diese Anfangskonfiguration schwer zu präparieren war, war es notwendig die Simulationen mit einer horizontalen Oberfläche zu starten. Dies war bei anderen Simulationen des Centroids nicht der Fall. Abbildung 2.46 zeigt den ermittelten Verlauf des Centroids in einem beispielhaften System mit dieser Anfangskonfiguration. Man erkennt

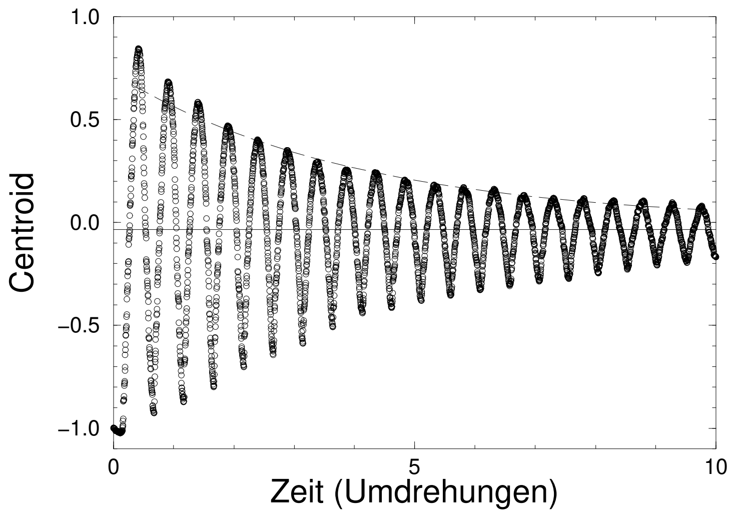

Abbildung 2.46: Ermittelter Centroid von 11200 kleinen Teilchen in einer annähernd halb gefüllten Trommel mit insgesamt 14000 Teilchen. Präpariert wurde die erste Anfangskonfiguration: die Teilchen verschiedener Größe hatten verschiedene Farben. Der Centroid ist anfänglich auf der linken (negativen) Seite der Schwerpunktslinie. Die waagerechte Linie zeigt den Mittelwert des Centroids. Die gestrichelte Linie zeigt einen eponentiellen *Fit* an den Abfall des positiven Teils der Oszillation. Das Füllniveau betrug $f = 0.489$.

zunächst, daß der Mittelwert des Centroids nicht Null ist. Dies ist die direkte Folge der Segregation, die dafür verantwortlich ist, daß im Gegensatz zu den monodispersen Systemen die Positionen der Schwerpunkte der beiden Farben nach sehr langer Zeit nicht identisch waren. Demzufolge ist es unmöglich, daß ein Mischprozess granularer Materie in einer guten Mischung resultiert, wenn beide Materialien unterschiedliche Verteilungen der Korngrößen besitzen. Diese Aussage unterliegt der Einschränkung, daß beide Materialien die gleiche Dichte haben. Kürzlich zeigten G. Metcalfe und M. Shattuck in einer zweiten Arbeit, daß es möglich ist, den Segregationseffekt der Teilchengrößen mit einem entgegengesetztem Segregationseffekt durch die Dichte der Teilchen aufzuheben, um eine gute Mischung zu produzieren [MS96]. Die kleinen Teilchen hatten eine geringere Dichte als die großen.

Weiterhin erkennt man an der Oszillation der Meßwerte aus Abbildung 2.46, daß sie nicht länger cosinus-artig und asymmetrisch zu ihrem Mittelwert ist. Der obere Teil der Oszillation fällt schneller ab als der untere und beide Abfälle sind weder exponentiell noch von einem anderen einfachen Typ. Der in der Abbildung gezeigte *Fit* ist der beste exponentielle *Fit* an den Abfall des positiven Teils der Amplitude der Oszillation. Analog zu monodispersen Systeme war festzustellen, daß in weniger gefüllten Trommeln die Oszillationen schneller abfallen. Die anfängliche Unregelmäßigkeit der Daten ist eine Folge der horizontalen Oberfläche der Anfangskonfiguration.

Für das in Abbildung 2.46 zu sehende komplexe Verhalten sind die folgenden Gründe verantwortlich. Das Mischen durch Lawinen und die Segregation sind zwei Prozesse, die nicht unabhängig voneinander ablaufen. Beide Prozesse werden durch die Dynamik der Teilchen in der Lawinenzone getrieben und sind deshalb stark miteinander verknüpft. Das Modell von Metcalfe *et al.* des Lawinenmischprozesses setzt zum Beispiel voraus, daß alle Teilchen in einer Lawine gut gemischt werden. Die Segregation verursacht aber eine Entmischung von Teilchengrößen in der Lawinenzone. Insgesamt ist deshalb das resultierende Verhalten des Centroids weitaus komplexer als zum Beispiel eine einfache Summe aus dem Mischverhalten monodisperser Systeme und einer Verschiebung des Mittelwertes durch die Segregation. Es ist nicht möglich, dieses Verhalten mit irgendeiner einfachen mathematischen Funktion zu beschreiben. Nichtsdestotrotz zeigt ein von Null verschiedener Mittelwert die Existenz der Segregation und damit eine Trennung der Farben an und ein endgültiges Abklingen der Oszillationen bedeutet das Ende des Mischprozesses.

Die zweite Anfangskonfiguration, die untersucht wurde, ist eine bidisperse Mischung für beide Farben. Dies bedeutet, daß die Materialien einer Farbe aus Teilchen beider Größen zu gleichen Massenverhältnissen bestehen. In Abbildung 2.47 ist der ermittelte Centroid eines entsprechenden Systems mit annähernd halb gefüllter Trommel dargestellt. Man sieht, daß das Verhalten sich grundsätzlich von dem der ersten Anfangskonfiguration unterscheidet. Eine genaue Untersuchung zeigte, daß die Daten sehr gut durch die folgende Funktion approximiert werden können:

$$\mathcal{F}(t) = \frac{1}{2}\left[\exp(-\gamma_s t)\,\cos\left(\frac{2\pi t}{T_s}\right) + \exp(-\gamma_l t)\,\cos\left(\frac{2\pi t}{T_l}\right)\right] \quad . \tag{2.36}$$

Gleichung (2.36) impliziert, daß der Centroid der Mittelwert aus zwei partiellen Centroiden für die kleinen (Index s) und die großen (Index l) Teilchen ist. Die partiellen Centroide verhalten sich jeweils wie der Centroid eines monodispersen Systems. Diese implizite Annahme der Gleichung (2.36) wurden durch die Messung der partiellen Centroide überprüft und erwies sich als richtig. Als Anmerkung sei erwähnt, daß ein *Fit* mit einem Produkt aus zwei Cosinus- und einer Exponential-Funktion kein befriedigendes Ergebnis lieferte.

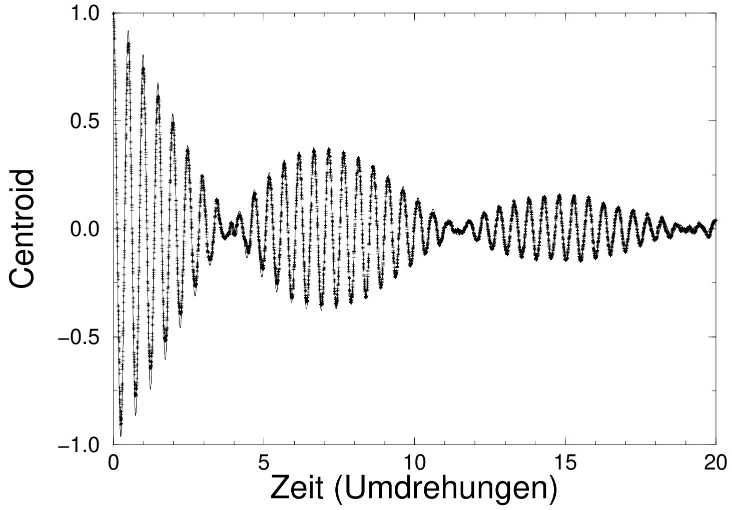

Abbildung 2.47: Ermittelter Centroid (Kreuze) in einer annähernd halb gefüllten Trommel mit insgesamt 14000 Teilchen. Präpariert wurde die zweite Anfangskonfiguration: die Teilchen einer Farbe hatten verschiedene Größen. Die durchgezogene Linie zeigt einen *Fit* mit Gleichung (2.36), der $T_l = 0.478$, $T_s = 0.509$, $\gamma_l = 0.143$ und $\gamma_s = 0.124$ ergibt. Das Füllniveau betrug $f = 0.489$.

Die in Abbildung 2.47 zu erkennenden Minima der Modulation der Amplitude der Oszillation des Centroids sind für mehr als halb gefüllte Trommeln größer als Null. Dies ist auf die Existenz des nicht an der Mischung beteiligten Kerns innerhalb der Füllung zurückzuführen. Für nur gering gefüllte Trommeln ist wiederum die Modulation nicht klar zu erkennen, da ein schneller Abfall der Oszillation dies verhindert. Der Mittelwert der Oszillation ist stets Null. Dies zeigt, daß im Gegensatz zur ersten Anfangskonfiguration eine gute Durchmischung der beiden unterschiedlichen Materialien nach vielen Rotationen nicht verhindert wird. Zu bedenken ist dabei allerdings, daß der Centroid eine eventuelle Segregation, die symmetrisch zur Schwerpunktslinie ist, nicht erfassen kann. Eine solche Symmetrie war für die erste Anfangskonfiguration offensichtlich nicht gegeben.

In Abbildung 2.48 sind die ermittelten Periodendauern der Oszillationen der partiellen Centroide als Funktion des Füllniveaus aufgetragen. Man erkennt, daß die Periodendauer der kleinen Teilchen immer größer ist als die der großen. Dies kann mit Hilfe des Mischprozesses durch Scherung verstanden werden. Die Segregation sammelt die kleinen Teilchen bevorzugt im Inneren einer Füllung. Dieser Bereich der Füllung rotiert durch die vorhandene Scherung im Mittel langsamer als die äußeren Bereiche der Füllung mit großen Teilchen. Zusätzlich ist die Wahrscheinlichkeit für kleine Teilchen, in eine Lücke zu schlüpfen, die durch einen Scherprozess geöffnet wurde, größer als für große Teilchen [SL88]. Verschiebungen der Konfiguration durch Scherung sind immer entgegengesetzt zur Rotationsrichtung. Folglich rotieren die kleinen Teilchen im Mittel langsamer als die großen und haben eine größere Periodendauer der Oszillation des partiellen Centroids. Dieser Unterschied der Periodendauern ist für die Modulation der Amplitude des Gesamtcentroids verantwortlich.

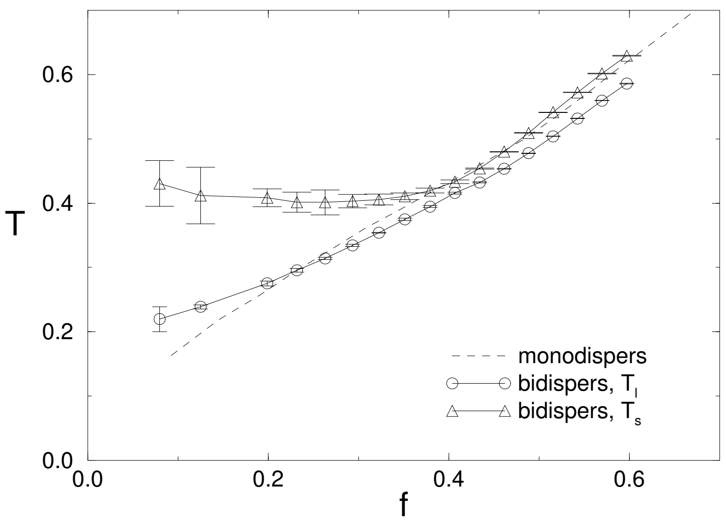

Abbildung 2.48: Periodendauern T der Oszillationen der partiellen Centroide als Funktion des Füllniveaus f für monodisperse ($r = 1.0$) und bidisperse ($r = 0.5$) Systeme mit zweiter Anfangskonfiguration.

Da die kleinen Teilchen im Mittel langsamer rotieren als die großen, würde man intuitiv erwarten, daß ihr Mischprozess langsamer und damit ihre Mischrate γ_s kleiner ist. Betrachtet man aber die ermittelten Mischraten in Abbildung 2.49, so erkennt man, daß die Mischrate der kleinen Teilchen meist größer ist als die der großen Teilchen. Nur für einen kleinen Bereich mit etwas weniger als halb gefüllten Trommeln ($0.43 < f < 0.50$) mischen die kleinen Teilchen langsamer. Der Grund für dieses Ergebnis ist folgender: Wie schon erwähnt,

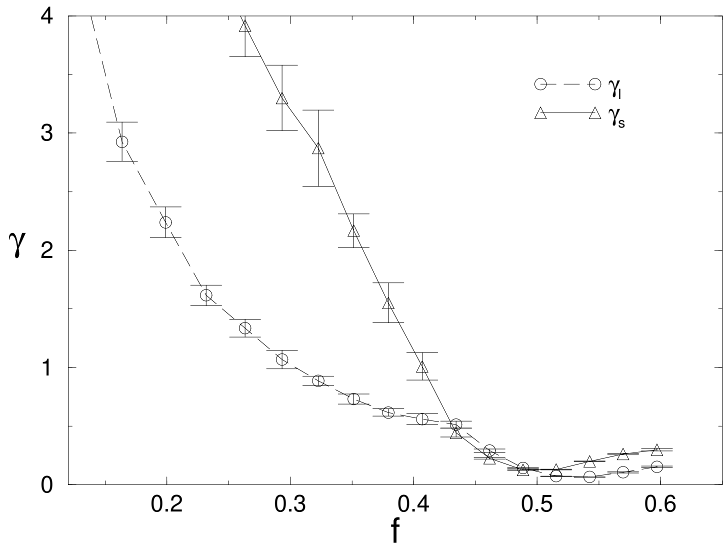

Abbildung 2.49: Mischrate γ der partiellen Centroide als Funktion des Füllniveaus f für bidisperse Systeme mit zweiter Anfangsbedingung.

beschreiben Metcalfe *et al.* den Mischprozess durch Lawinen erfolgreich als ein Mischen von keilförmigen Bereichen [MSMO95]. In weniger als halb gefüllten Trommeln transportiert die Rotation die Spitze eines Keils, der gerade durch eine Lawine gemischt wurde, in den Keil, der als nächstes gemischt wird. Die Keile überlappen. Die meisten der Teilchen, die sich in den Spitzen der Keile aufhalten, sind auf Grund der Segregation kleine Teilchen. Deshalb partizipieren kleine Teilchen öfter am Lawinenmischprozess als große Teilchen, mischen also schneller. Erst wenn die Trommel nahezu halb gefüllt ist, kommt die langsamere Rotation des inneren Bereichs der Füllung zum Tragen. An diesem Punkt wird das Mischen der kleinen Teilchen langsamer als das der großen, weil die Keile nicht mehr signifikant überlappen. Wenn schließlich eine Trommel mehr als halb gefüllt ist, so existiert kein Überlappen verschiedener Keile. Das Mischen durch Lawinen ist für alle Regionen der Füllung außerhalb des Kerns gleich stark. Ein zusätzlicher Faktor ist in diesem Fall aber das Mischen durch Scherung im Kern. Der Kern besteht hauptsächlich aus kleinen Teilchen, und deshalb mischen diese für mehr als halb gefüllte Trommeln insgesamt wieder schneller als große.

In Abbildung 2.50 ist die Mischeffizienz, das Volumen gemischter Materie pro charakteristischer Zeit χ aufgetragen. Die gesamte Mischeffizienz ist die Summe der partiellen. Ihr Maximum liegt bei einem Füllniveau von $f = 0.248$, was in Übereinstimmung mit den monodispersen Systemen und den Ergebnissen von Metcalfe *et al.* steht. Nichtsdestotrotz muß man sich vergegenwärtigen, daß das Mischen in bidispersen Systemen inhomogen ist, und daß die wirkliche Mischeffizienz durch die Teilchengröße bestimmt wird, die am schlechtesten mischt. Dies sind die großen Teilchen. Ihr Maximalwert von χ ist viel kleiner als der der kleinen Teilchen oder monodisperser Systeme. Das Maximum der beinahe linearen Funktion liegt bei einem Füllniveau von $f = 0.132$. In Folge dessen gilt, daß eine optimale Mischeffizienz in bidispersen Systemen für Trommeln erreicht wird, die nur etwas mehr als 1/8-tel gefüllt sind. Dies ist wesentlich weniger als für monodisperse Systeme.

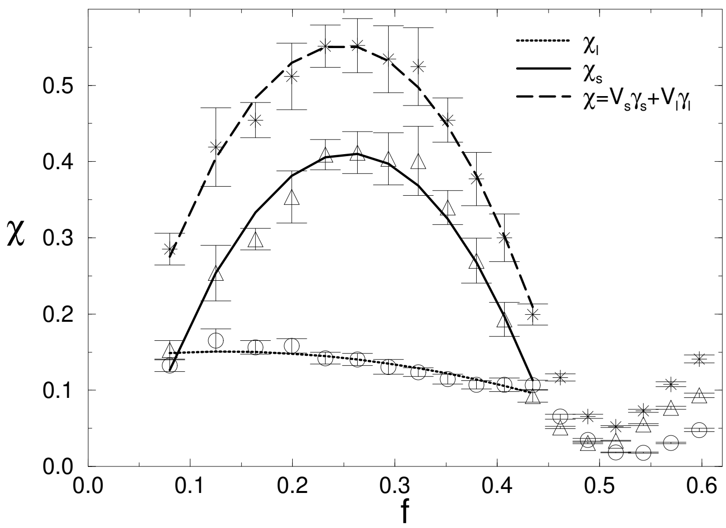

Abbildung 2.50: Volumen gemischter Materie pro charakteristischer Zeit χ als Funktion des Füllniveaus f in bidispersen Systemen. Die Maxima der quadratischen *Fits* liegen für große Teilchen bei $f = 0.132$ und für kleine Teilchen bei $f = 0.255$.

2.2.6.1 Neues Mischverfahren

Die bisherigen Betrachtungen der Mischprozesse gehen in der herkömmlichen Weise davon aus, daß für eine gute Mischung eine Trommel viele Umdrehungen lang zu rotieren hat. Wenn die Amplitude der Oszillation des Centroids weit genug abgeklungen ist, ist eine gute Mischung erreicht. Dieses Verfahren besitzt, wie oben gezeigt, für bidisperse Systeme eine geringere Effizienz als für monodisperse.

An dieser Stelle soll nun gezeigt werden, daß die komplizierten Wechselwirkungen von Scherungen, Segregation und Mischen durch Lawinen ein viel schnelleres und effizienteres Mischen möglich machen. Ein gemischter Zustand zeichnet sich durch das Verschwinden der Oszillationen des Centroids aus. Dies ist nicht nur nach langen Zeiten der Fall, sondern für bidisperse Systeme mit zweiter Anfangskonfiguration ebenfalls in den Minima der Modulation der Oszillationen des Centroids (siehe Abbildung 2.47). Die Modulation erreicht ein Minimum, wenn sich die Oszillationen der partiellen Centroide der kleinen und großen Teilchen in Maxima mit verschiedenen Vorzeichen befinden. Demnach wird das erste Minimum der Modulation zu einer Zeit t_m erreicht, für die der Phasenunterschied der beiden Oszillationen gerade π beträgt:

$$\frac{2\pi t_m}{T_s} - \frac{2\pi t_m}{T_l} = \pi \qquad \Rightarrow \qquad t_m = \frac{T_s T_l}{2\,(T_s - T_l)} \quad . \tag{2.37}$$

Die Abbildung 2.51 zeigt eine halbgefüllte Trommel zum Zeitpunkt t_m.

Für halbgefüllte Trommeln ist das Mischen durch Lawinen sehr schwach ausgeprägt. Die Anfangskonfiguration kann man interpretieren als vier verschiedene tortenstückförmige Segmente für jeweils die schwarzen kleinen, schwarzen großen, weißen kleinen und weißen großen Teilchen. Jedes Segment ist so groß wie ein Viertel der Trommel. Die Segmente der Teilchen mit gleicher Farbe überlappen zu Anfang. Während der Rotation bewegen sich nun die Segmente, die die kleinen Teilchen beinhalten, langsamer als die der großen Teilchen. Wenn der Zeitpunkt t_m erreicht wird, überlappt gerade das Segment der kleinen schwarzen Teilchen mit dem der großen weißen Teilchen und das der kleinen weißen Teilchen mit dem der großen schwarzen Teilchen. Auf diese Wiese ist eine gute Mischung der Farben entstanden. Diese ist nicht ganz perfekt, da die Segregation innerhalb der überlappenden Segmente die Farben ein wenig trennt. Dies fällt aber nicht sehr stark ins Gewicht, da die Mischprozesse in herkömmlicher Weise ebenfalls gewirkt haben.

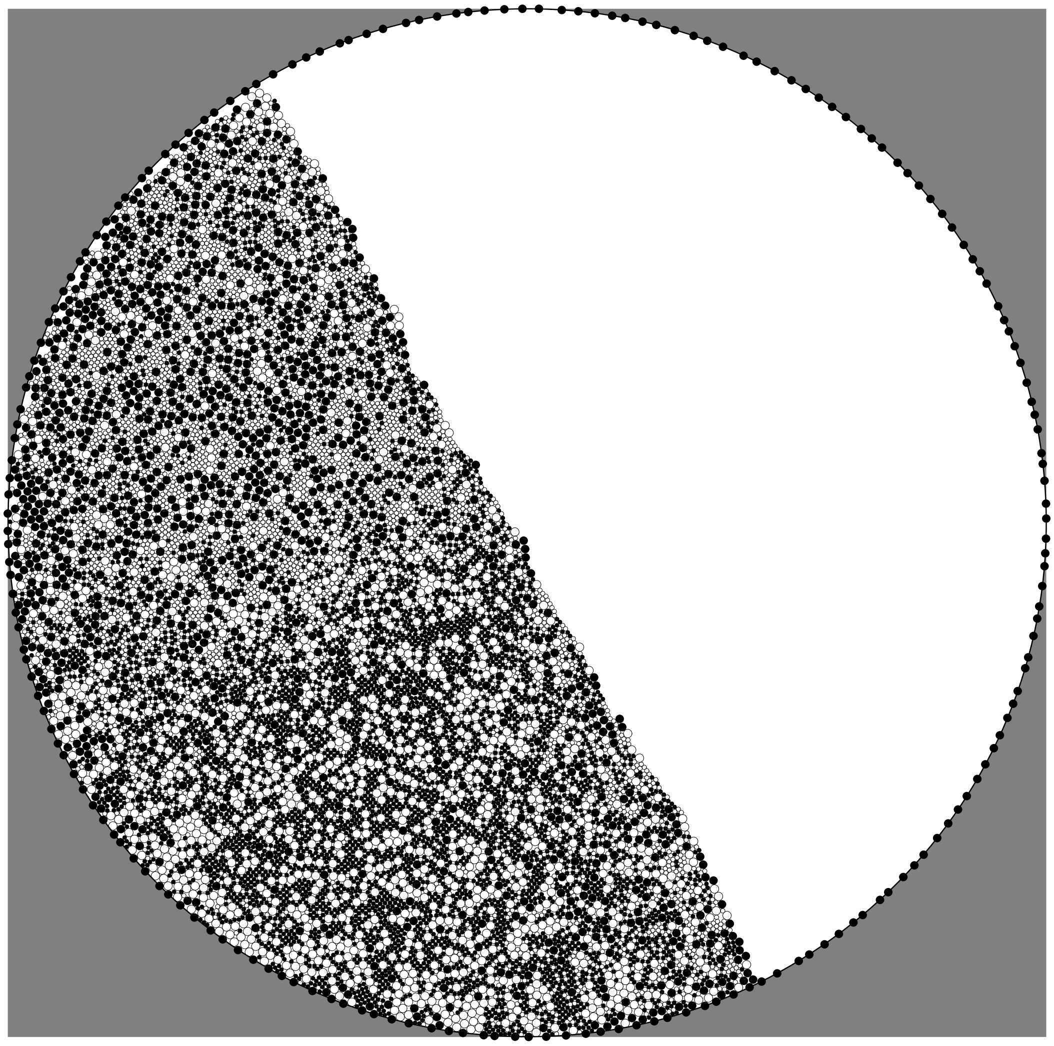

Abbildung 2.51: Eine $R = 120$ Trommel mit 14000 bidispersen Teilchen zum Zeitpunkt t_m. Das Füllniveau beträgt $f = 0.489$. Man erkennt, daß die tortenstückförmigen Segmente der kleine schwarzen mit denen der großen weißen Teilchen und umgekehrt überlappen.

Der untersuchte Centroid ist nicht in der Lage die Separation der Farben durch Segregation zu erfassen, wenn die Segregation symmetrisch zur Schwerpunktslinie ist. Um diese Separation der Farben ebenfalls zu messen, muß auf den Abstand der Schwerpunkte Λ der beiden Farben zurückgegriffen werden [Bau93]. Wenn beide Farben perfekt gemischt sind, ist Λ gleich Null. Umgekehrt gilt diese Aussage insofern, als daß in den Systemen keine ausreichende Symmetrie vorhanden ist, die mit nicht gemischten Konfigurationen Λ gleich Null erzeugen könnte. In Abbildung 2.52 ist die Zeitentwicklung von Λ für das System aus Abbildung 2.47 dargestellt. Analog zum Centroid wurde Λ auf den Ausgangswert normiert. Man sieht, daß Λ um t_m auf einen Wert von ungefähr 3% abfällt. Im nächsten Minimum zum Zeitpunkt $3t_m$, wenn die Phasendifferenz der Oszillationen 3π beträgt und das Mischen auf herkömmliche Weise länger gewirkt hat, ist Λ auf ungefähr 1.5% abgefallen. Eine Größenordung von 1% bis 1.5% ist typisch für die Fluktuationen von Λ, die jedes System auch noch nach langen Zeiten zeigt.

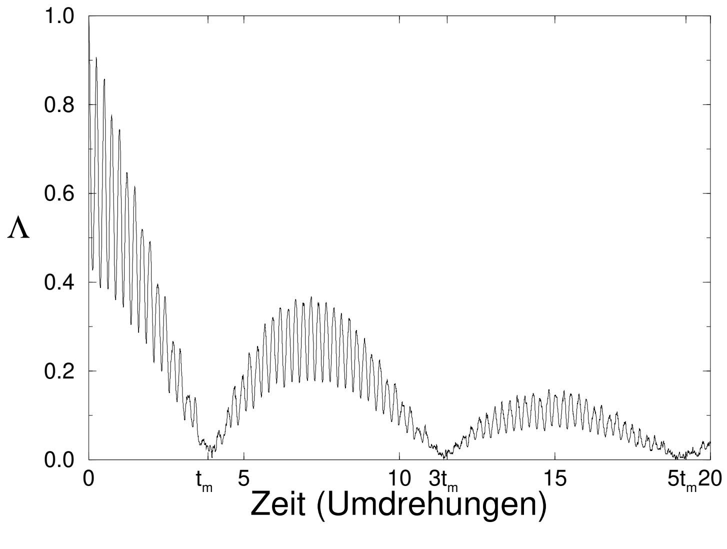

Abbildung 2.52: Zeitliche Entwicklung des normierten Abstandes der Schwerpunkte der beiden Farben Λ des Systems aus Abbildung 2.47 mit $t_m = 3.841$.

Ein neues Mischverfahren kann nun wie folgt definiert werden: Zum Mischen zweier granularer Materialien verwende man jeweils für jedes Material Teilchen zweier verschiedener Größen. Beide Teilchengrößen sollten jeweils mit gleichen Massen vertreten sein. Man fülle eine Trommel halb mit je einem Material auf einer Seite der Schwerpunktslinie. Anschließend wird die Trommel nur noch exakt bis zum Zeitpunkt t_m gedreht!

Dieses Verfahren ist wesentlich schneller und effizienter als das Mischen mit optimaler Effizienz nach Metcalfe *et al.*. In kürzerer Zeit mischt es ungefähr dreimal mehr Materie. Das Verfahren hängt jedoch stark von der Anzahl und Größe der Scherprozesse während der Rotation ab. Ohne Scherungen existiert keine Modulation der Oszillation des Centroids. Aus diesem Grund ist zu erwarten, daß dieses Verfahren nicht generell funktioniert. Allerdings muß betont werden, daß man die Scherrate erhöhen kann, indem man eine zusätzliche vertikale Vibration der Trommel einführt, wie sie das BTR-Modell simuliert. Aus diesem Grund besteht kein Zweifel, daß dieses neue Verfahren mit Experimenten verifiziert werden kann. Mögliche Kandidaten für Experimente sind Materialien, die runder als die kubischen Salzkörner von Metcalfe *et al.* sind, und die kleine Reibungskoeffizienten besitzen.

Kapitel 3

Molekulardynamik

Die Molekulardynamik ist eine der älteren Computersimulationsmethoden. Wie der Name besagt, wird die Dynamik eines Ensembles von Teilchen (Molekülen) simuliert. Mit ihr wurde ein vollkommen neuer Zugang zu Vielteilchensystemen, die zuvor nur statistisch untersucht werden konnten, eröffnet. Der herausragende Fortschritt besteht darin, daß die Bewegungsgleichung aller Teilchen in der Zeit integriert wird. Auf diese Weise erlangt man Kenntnis über die korrekte Zeitentwicklung eines Systems, das heißt über die Trajektorie eines jeden Teilchens. Gegenüber anderen mittelwertbildenden oder schematisierenden Methoden bedeutet dies einen enormem Zuwachs an Information.

Eine Molekulardynamiksimulation verläuft im allgemeinen folgendermaßen: Zuerst wird eine der Physik des Systems entsprechende Anfangskonfiguration erzeugt. Jedem Teilchen werden hierbei ein Ort und eine Geschwindigkeit zugeordnet. Anschließend wird die Newton'sche Bewegungsgleichung

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i \tag{3.1}$$

für jedes Teilchen (Index i) mit Masse m_i in Abhängigkeit von der Kraft $\vec{F}_i$, die auf das Teilchen wirkt, integriert.

Die Dynamik ist, physikalisch gesehen, nach der Wahl der Anfangsbedingung deterministisch. Allerdings hängt sie praktisch und im Detail von der Wahl des Integrationsverfahrens für Gleichung (3.1) ab. Eine Übersicht über die verschiedenen Verfahren zur Integration vom einfachsten Euler-Algorithmus bis zu komplizierten Prädiktor-Korrektor Verfahren findet man in den Referenzen [KFA89] und [PTVF92]. Jedes Verfahren bietet Vor- und Nachteile hinsichtlich Geschwindigkeit, Stabilität, Genauigkeit und Erhaltungsgrößen.

Der entscheidende Faktor in einer Molekulardynamik ist weniger die Wahl des Integrationsverfahrens als vielmehr die Bestimmung der Kräfte $\vec{F}_i$. Diese

Kräfte setzen sich zumeist aus mehreren Komponenten zusammen. Dabei sind die Komponenten, die die Wechselwirkungen mit äußeren Feldern beschreiben, in der Regel exakt bekannt. Wechselwirkungen der Teilchen untereinander müssen dagegen üblicherweise mangels genauer Kenntnis genähert werden. Als Beispiel sei die Näherung eines Lennard-Jones Potentials für die Wechselwirkung zwischen Molekülen von Gasen und Flüssigkeiten angeführt [KFA89]. Für granulare Materie verhält es sich entsprechend. Die Kraft des äußeren Gravitationsfeldes auf jedes Teilchen ist exakt bekannt. Die Kräfte zwischen den Teilchen, die nur während eines Kontaktes auftreten, konnten aber bis jetzt theoretisch und experimentell nicht ermittelt werden (siehe Kapitel 1). Aus diesem Grund ist man bei den Kontaktwechselwirkungen auf Näherungen angewiesen. Auf diese Näherungen wird im weiteren Verlauf genauer eingegangen.

3.1 Zwei Methoden

In der Molekulardynamik unterscheidet man grundsätzlich zwei verschiedene Methoden. Die eine Methode ist die zeitschrittgetriebene Molekulardynamik für weiche Teilchen, die andere ist die ereignisgesteuerte Molekulardynamik für harte Teilchen. Beide Methoden sind ausführlich in der Dissertation von Jochen Schäfer beschrieben [Sch96a]. Eine weitere hervorragende Darstellung findet sich in [AT87]. Neben den reinen Molekulardynamikmethoden werden dort zusätzlich grundlegende Techniken für Simulationen, wie zum Beispiel Nachbarschaftslisten, Behandlung von langreichweitigen Kräften und Effizienzsteigerungen beschrieben. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich deshalb nur noch auf die Vorstellung der grundlegenden Konzepte.

3.1.1 Harte Teilchen

Die allererste Molekulardynamiksimulation war eine ereignisgesteuerte Molekulardynamik für einen Phasenübergang in einem System von 32 harten Kugeln [AW57]. Bei granularer Materie nutzt man die ereignisgesteuerte Molekulardynamik zur Simulation dynamischer Regime. Dynamische Regime sind gekennzeichnet durch eine geringe bis mittlere Dichte bei denen Teilchenkontakte hauptsächlich in Form von binären Kollisionen auftreten [Sch96a]. Für die Näherung der Kontaktkräfte zwischen zwei Teilchen wird in dieser Methode vereinfachend angenommen, daß bei einer Berührung die Kräfte divergieren. Der Stoß zweier Teilchen findet deshalb instantan statt, benötigt also keine Zeit, und es kommt zu keiner Verformung der Teilchen. Aus diesem Grund spricht man von harten Teilchen.

In einem Stoß tauschen jeweils zwei Teilchen kinetische Energie und Impuls aus. Der Gesamtimpuls bleibt erhalten und ein Teil der kinetischen Energie wird dissipiert. Da es sich um ausgedehnte Teilchen handelt, sind die Stöße zumeist schief. Für solche ist es notwendig, die Rotation der Teilchen zu berücksichtigen. Insgesamt lassen sich die Translations- und Rotationsgeschwindigkeiten der Teilchen nach einem Stoß entsprechend einer vereinfachten Theorie von Walton [Wal88, Sch96a] und der klassischen Mechanik für schiefe inelastische Stöße aus den Geschwindigkeiten vor dem Stoß, den geometrischen Stoßparametern und nur drei weiteren Parametern berechnen. Die drei zusätzlichen Parameter sind der normale und tangentiale Restitutionskoeffizient, ϵ_n und ϵ_s und der Gleitreibungskoeffizient μ.

Eine Simulation mit einer ereignisgesteuerten Molekulardynamik verläuft nach folgendem Schema: So lange kein Stoß stattfindet, sind die Trajektorien der Teilchen im Gravitationsfeld einfach zu berechnen. Dies wird in der ereignisgesteuerten Molekulardynamik ausgenutzt. Aus einer gegebenen Konfiguration des Systems wird die zukünftige Entwicklung der Trajektorien bestimmt. Aus diesen Trajektorien ergeben sich die Orte und Zeiten zukünftiger Stöße. Der Zeitschritt der Integration der Gleichung (3.1) gestaltet sich in Folge dessen variabel. In einem einzigen Zeitschritt wird das gesamte System bis zum ersten eintretenden Stoß (Ereignis) weiterentwickelt. Anschließend erfolgt die Berechnung des Stoßes der beiden beteiligten Teilchen mit einer Änderung ihrer Geschwindigkeiten. Für den darauffolgenden Zeitschritt brauchen nur diejenigen Ereignisse neu berechnet zu werden, an denen die zuvor beteiligten Teilchen partizipieren. Das System kann anschließend bis zum nächsten Ereignis weiterentwickelt werden und so weiter.

Wie wir noch sehen werden, liegen die Vorteile dieser Molekulardynamikmethode gegenüber der anderen Methode in ihrer Effizienz und Geschwindigkeit. Voraussetzung ist allerdings, daß granulare Systeme in den oben beschriebenen dynamischen Regimen simuliert werden. Der Grund hierfür liegt im Zenon-Effekt, so benannt wegen seiner Ähnlichkeit zum Paradoxon von Achill und der Schildkröte. Durch ihre dissipativen Eigenschaften tendiert granulare Materie zu einer Bildung von Zonen hoher Dichte [MY92, MY94]. In diesen Zonen kommt es zu einer Abfolge von Stößen in immer kürzeren Zeitabständen. Da die Zeitentwicklung des Systems in der ereignisgesteuerten Molekulardynamik immer nur bis zum nächsten Stoß erfolgt, kann es zum Erliegen der Dynamik des Gesamtsystems kommen. Die Simulation konvergiert auf einen Zeitpunkt, an dem die Teilchen zu langanhalten Kontakten übergehen. Langanhaltende Kontakte sind mit dieser Methode prinzipiell nicht zu simulieren. Besitzen zwei Teilchen vor einem Stoß eine von Null verschiedene Relativgeschwindigkeit, so hat sie sich zwar nach dem Stoß verringert, ist aber immer noch von Null verschieden.

Da sich diese Dissertation hauptsächlich mit der Dynamik granularer Materie in Trommelmischern beschäftigt, wurden keine größeren Simulationen mit ereignisgesteuerter Molekulardynamik durchgeführt. In rotierenden Trommeln sind die meisten Kontakte zwischen Teilchen langanhaltend. Nur im Kapitel 4 wird eine ereignisgesteuerter Molekulardynamik verwendet. Dort wird die Dynamik eines eindimensionalen Systems von granularen Teilchen in einer reibungsfreien Röhre untersucht.

3.1.2 Weiche Teilchen

Die zweite Molekulardynamikmethode ist die zeitschrittgetriebene Molekulardynamik. Sie verwendet für die Integration der Bewegungsgleichung (3.1) einen konstanten Zeitschritt. Als Folge des konstanten Zeitschrittes wird die Simulation von Teilchenstößen komplizierter. Der exakte Zeitpunkt, an dem zwei Teilchen aufeinandertreffen, liegt in der Regel zwischen zwei Zeitschritten. Demzufolge haben die Teilchen im Zeitschritt zuvor noch keinen Kontakt und im darauffolgenden Zeitschritt überlappen sie schon. Der Überlapp ξ wird als ein Maß für die Verformung, die reale Teilchen während eines Stoßes erfahren, angesehen und ist definiert als:

$$\xi \ = \ \max(0, R_i + R_j - |\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \tag{3.2}$$

Hierbei sind $R_{i,j}$ die Radien und $\vec{r}_{i,j}$ die Positionen der beiden Teilchen.

In der zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik wird versucht, die Kontaktkräfte, die während eines Stoßes auftreten, realistisch zu simulieren. Dies bedeutet zunächst, das ein Stoß nicht instantan verläuft, sondern eine gewisse Zeit benötigt, während der die Teilchen im wesentlichen viskoelastisch verformt werden. Aus diesem Grund spricht man von weichen Teilchen. Die Kontaktkraft $\vec{F}_{ij}$ zwischen Teilchen ist eine Funktion von ξ und $\dot{\xi}$, der Größe und Geschwindigkeit ihrer Verformung. Sie teilt sich in eine normale und tangentiale Komponente bezüglich der Kontaktfläche zwischen den beiden Teilchen auf:

$$\vec{F}_{ij} \ = \ F_n\vec{n} + F_t\vec{t} \tag{3.3}$$

Die Lage der Einheitsvektoren $\vec{n}$ und $\vec{t}$ ist zusammen mit dem Überlapp ξ in der Abbildung 3.1 dargestellt. Der Winkel α ist ein Maß für die Schiefe des Stoßes.

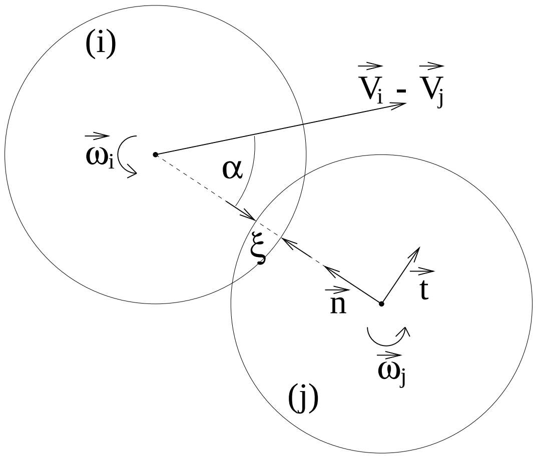

Abbildung 3.1: Schema für den Stoß zweier Teilchen [(i) und (j)] in einer zeitschrittgetriebenen Molekulardynamiksimulation. $\vec{v}ij$ sind die Translations- und $\vec{\omega}_{ij}$ die Rotationsgeschwindigkeiten der Teilchen.

Für die Normalkraft F_n und die Tangentialkraft F_t hat es eine ganze Reihe von verschiedenen Ansätzen gegeben. Eine ausführliche Beschreibung und Untersuchung dieser Ansätze, die sich im allgemeinen aus einem repulsiven und einem dissipativen Term zusammensetzen, durch J. Schäfer, S. Dippel und D.E. Wolf findet sich in [SDW96, Sch96a]. Dort wurden die verschiedenen Ansätze anhand der Simulation von Zweiteilchenstößen untersucht und mit experimentellen Befunden [FLCA94] verglichen. Ohne auf die weiteren Details und Ergebnisse dieser Untersuchung einzugehen, sei angeführt, daß nur der Ansatz nach H. Hertz, G. Kuwabara und K. Kono [KK87] für die Normalkraft ein realistisches Verhalten in den Simulationen reproduzieren kann. Er erzeugt als einziger für viskoelastische Teilchen die richtige Abhängigkeit eines sinkenden normalen Restitutionskoeffizienten mit wachsender anfänglicher Relativgeschwindigkeit. Der Ansatz lautet:

$$F_n = -k_n \xi^{3/2} - \gamma_n \xi^{1/2} \dot{\xi} \qquad . \tag{3.4}$$

Hierbei ist k_n eine normale Federkonstante und γ_n eine normale Dämpfungskonstante. Beide Konstanten können theoretisch auf die Materialparameter Young-Modul, Poisson Zahl, Dichte, Viskosität und transversale und longitudinale Schallgeschwindigkeiten zurückgeführt werden [HSB95, BSHP96].

Die Tangentialkraft F_t verlangt eine Unterscheidung zwischen Haft- und Gleitreibung. Deshalb modelliert man:

$$F_t = -\min(F_h, \mu F_n) \cdot \operatorname{sign}(\zeta) \qquad . \tag{3.5}$$

Hierbei ist μ der Gleitreibungskoeffizient und F_h die Haftreibung. Diese wirkt solange, wie sie kleiner als die Gleitreibung μF_n ist. ζ ist die tangentiale Auslenkung, die ab dem Zeitpunkt t_0 des ersten Kontaktes der Teilchen über die tangentiale Relativgeschwindigkeit v_t ermittelt wird:

$$\zeta(t) = \int_{t_0}^{t} v_t(t')\, dt' \qquad . \tag{3.6}$$

In den Untersuchungen erwiesen sich für die Haftreibung zwei verschiedene Ansätze als realistisch. Einer dieser Ansätze ist eine lineare Tangentialfeder, die von P.A. Cundall und O.D.L. Strack eingeführt wurde [CS79]:

$$F_h = k_t \zeta \qquad . \tag{3.7}$$

k_t ist eine empirische tangentiale Federkonstante, die so gewählt wird, daß die Stoßsimulationen das gewünschte Verhalten zeigen.

Der zweite realistische Ansatz für die Haftreibung stammt von O.R. Walton und R.L. Braun [WB86]. Sie führten ein kraftabhängiges k_t ein, so daß in jedem Zeitschritt

$$F_h = F_h^* + k_t(\zeta - \zeta^*) \tag{3.8}$$

ist. Hierbei bezieht sich der * auf die Werte der Größen im vorangehenden Zeitschritt. k_t ist unter Belastung ($\zeta - \zeta^* > 0$) größer als unter Entlastung.

3.1.2.1 Methodische Artefakte

Die zeitschrittgetriebene Molekulardynamik besitzt zwei intrinsische Artefakte, die zu unrealistischen Simulationsergebnissen führen können. Einer dieser systematischen Fehler ist das von Jochen Schäfer entdeckte Bremsversagen [SW95, SDW96, Sch96a]. Bremsversagen tritt bei nahezu streifenden, also sehr schiefen Kollisionen auf. Typische Situationen findet man in scherenden Geometrien wie zum Beispiel an den Wänden bei vertikalem Rohrfluß oder in der Lawinenzone von rotierenden Trommeln. Für sehr schiefe Kollisionen kann die Dauer des Kontaktes nur wenige Integrationszeitschritte groß sein. Die Kollisionskräfte, insbesondere die Tangentialkraft können in diesen Fällen nicht ihre volle Wirkung entfalten. Es kommt zu einem streifenden Durchfliegen der Teilchen, ohne daß eine wesentliche Bremswirkung erzielt wird. Der Effekt verstärkt sich, je größer die Relativgeschwindigkeit der Teilchen ist. Prinzipiell läßt sich dieses Bremsversagen durch die Festlegung einer kürzeren Kontaktdauer bei Stößen verringern. Der Effekt tritt dann seltener und nur bei Stößen mit noch größerer Schiefe auf. Diesem Ansinnen steht allerdings das fundamentale Problem entgegen, daß die damit verbundene Länge des Zeitschrittes umgekehrt proportional zur Simulationsdauer ist. Der Zeitschritt sollte deshalb immer möglichst groß gewählt werden. Insgesamt kommt es durch das Bremsversagen bei streifenden Kollisionen mit größeren Relativgeschwindigkeiten zu einer unrealistisch niedrigen Dissipation kinetischer Energie.

Der zweite systematische Fehler in zeitschrittgetriebenen Molekurdynamiksimulationen ist der von Stefan Luding entdeckte *Detachment*-Effekt [LCB+94a, LHB94, LCB+94b]. Dieser Effekt ist ein kollektives Phänomen und wurde ursprünglich nur auf eine unrealistisch lange Kontaktzeit für Stöße von Teilchen bezogen. Ein eindimensionales System mehrerer, nur wenig separierter Teilchen, die sich mit gleichförmiger Geschwindigkeit auf eine Wand zubewegen, vollzieht eine Vielzahl von rasch hintereinanderfolgenden binären Stößen. Die Vielzahl der binären Stößen hat eine große Dissipation kinetischer Energie zur Folge. Durch eine in der Simulation unrealistisch lange Kontaktzeit der Stöße kommt es in diesem Szenario zu einem kollektiven Stoß aller Teilchen. In dieser Situation wechselwirken die Teilchen durch den gleichzeitigen Kontakt als ein Kette von gekoppelten Oszillatoren und nicht als separate Teilchen. Dadurch kommt es zu einer unrealistisch niedrigen Dissipation und zu einer vermehrten Trennung (englisch: *Detachment*) der Teilchen nach dem Stoß. Es sei ausdrücklich erwähnt, daß das Szenario des *Detachment*-Effekts realistisch ist. In realen Systemen kommt es durch endliche Kontaktzeiten ebenfalls zu gleichzeitigen Kontakten vieler Teilchen. Allerdings sind in der Regel die realen Kontaktzeiten wesentlich kürzer als die der Simulationen.

Ein wichtiger Punkt ist, daß der *Detachment*-Effekt nicht nur bei Stößen mit langen Kontaktzeiten auftritt, sondern daß er prinzipiell bei allen langanhaltenden Kontakten existiert. In dichtgepackten Systemen unter niedrigen äußeren Anregungen, wie zum Beispiel in leicht vibrierten Boxen, kommt es deshalb zu einer mangelhaften Dissipation, was zu einer vermehrten und unrealistischen Fluidisierung führt [LCB+94b, und Referenzen darin].

3.2 Vergleich mit BTR-Modell

Oftmals wurde von Seiten der Molekulardynamik, speziell der zeitschrittgetriebenen, der Anspruch erhoben, das einzige wirklich realistische Modell für Simulationen granularer Materie zu sein. Andere Modelle seien weniger realistisch, da sie mehr oder minder große Näherungen für die Kontaktwechselwirkungen oder Trajektorien der Teilchen verwenden. Um dieses Argument zu bestätigen oder zu entkräften, wurde ein Vergleich von Simulationen einer rotierenden Trommel zwischen zeitschrittgetriebener Molekulardynamik und BTR-Modell vorgenommen. Vergleichsgröße war die radiale Segregation, die innerhalb der ersten Umdrehung der Trommeln auftritt und deren qualitative Größe aus Experimenten [CB95] bekannt ist. Simuliert wurden zwei verschiedene Trommelgrößen mit $R = 35$ und $R = 50$. Beide Trommeln waren annähernd halb gefüllt mit $N = 730$ beziehungsweise $N = 1530$ bidispersen Teilchen mit Radienverhältnis $r = 0.5$ und Konzentration der kleinen Teilchen $c = 0.5$.

3.2.1 Parameter der Molekulardynamik

Um dem Anspruch der Molekulardynamik gerecht zu werden, wurden möglichst realistische Parameter gewählt. Diese stehen im Gegensatz zu den stark vereinfachenden Annahmen des geometrischen BTR-Modells. Für die Molekulardynamik wurde ein sehr genaues Verfahren der Integration der Bewegungsgleichung (3.1) verwendet. In diesem Falle war dies ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren der 5. Ordnung nach Gear. Ausführliche Beschreibungen dieses Verfahrens findet man in [AT87, PTVF92]. Weiterhin wurden die oben beschriebenen möglichst realistischen Ansätze für die Kontaktkräfte verwendet. Die normale Komponente modelliert der Herz-Kuwabara-Kono-Ansatz (3.4). Für die tangentiale Haftreibung wurden Simulationen sowohl mit dem Ansatz nach Walton und Braun (3.8), als auch mit dem Ansatz nach Cundall und Strack (3.7) durchgeführt. Der Cundall-Strack-Ansatz einer linearen Feder wurde um einen dissipativen Dämpfungsterm erweitert, um der zu erwartenden mangelhaften Dissipation durch Bremsversagen und *Detachment*-Effekt entgegenzuwirken. Dieser Ansatz einer tangentialen linearen gedämpften Feder sieht mit einer zusätzlichen Dämpfungskonstanten γ_t wie folgt aus:

$$F_h = k_t\zeta + \gamma_t\dot{\zeta} \qquad . \tag{3.9}$$

Die Wahl der Konstanten der Kraftansätze ist eine komplizierte Aufgabe. Es soll zunächst die Normalkraft betrachtet werden. Wie schon erwähnt, lassen sich die Konstanten des Herz-Kuwabara-Kono-Ansatzes theoretisch auf spezifische Materialgrößen zurückführen [HSB95, BSHP96]. Problematisch an dieser Theorie ist, daß sie eine anisotrope Viskosität der Festkörper verwendet. Diese Viskosität ist praktisch für keinen Festkörper bekannt, oder läßt sich zumindest nicht in der einschlägigen Literatur (zum Beispiel [BHH+71, Lid96]) finden. Aus diesem Grund kann nur die Federkonstante k_n aus dieser Theorie gewonnen werden, weil in diese die Viskosität nicht eingeht:

$$k_n = \frac{2Y\sqrt{R_{eff}}}{3\,(1-\nu^2)} \qquad . \tag{3.10}$$

Hierbei sind Y der Young-Modul, ν die Poisson Zahl und $R_{eff} = R_i R_j/(R_i + R_j)$ der effektive Radius. Die Dämpfungskonstante γ_n muß indirekt bestimmt werden. Dies erfolgt über die Festlegung des normalen Restitutionskoeffizienten ϵ_n. Diese Festlegung muß sich auf eine bestimmte normale relative Referenzgeschwindigkeit $\tilde{v}$ beziehen, weil die Restitutionskoeffizienten geschwindigkeitsabhängig sind. Die Anpassung von γ_n an ϵ_n erfolgt dann über die Simulation von binären zentralen Stößen in Abhängigkeit von effektivem Radius und effektiver Masse. Die effektive Masse ist definiert als $M_{eff} = m_i m_j/(m_i + m_j)$.

Ein weiterer wichtiger Punkt für die Wahl der Parameter des normalen Kraftansatzes ist die Kollisionsdauer t_n eines binären Stoßes, die sich aus den Simulationen zur Bestimmung von γ_n ermitteln läßt. Die Kollisionsdauer ist unabhängig von tangentialen Kräften und wie der normale Restitutionskoeffizient leicht von der Anfangsgeschwindigkeit vor dem Stoß abhängig. Sie kann näherungsweise für die Berechnung anderer Parameter als konstant angenommen werden und sie ist die entscheidende Größe für die Wahl des elementaren Zeitschrittes der Integration. Grundsätzlich darf das Ergebnis in einer sinnvollen Simulation nicht von der Größe des Zeitschrittes abhängen. Um dies zu gewährleisten, ist es notwendig eine minimale Anzahl von Zeitschritten für eine binäre Kollision aufzubringen. Für relativ harte Materialien ist die Kollisionsdauer nur kurz und folglich muß der Zeitschritt sehr klein gewählt werden. Ein kleiner Zeitschritt schränkt aber die physikalische Zeitdauer einer Simulation erheblich ein. Die Wahl von k_n und γ_n und damit die Härte der Teilchen ist deshalb über die zur Verfügung stehende Rechenzeit beschränkt.

Die tangentiale Federkonstante beim Walton-Braun-Ansatz ist zeitabhängig. Ihr anfänglicher Wert k_t^{init} ist in guter Näherung [MD53, Sch96a] mit der Kollisionsdauer und dem normalen Restitutionskoeffizienten verknüpft wie:

$$k_t^{init} = \frac{2M_{eff}\left(\pi^2 + (\ln \epsilon_n)^2\right)}{3t_n^2} \quad . \tag{3.11}$$

Die Zeitabhängigkeit der Federkonstante gestaltet sich folgendermaßen [WB86, Sch96a]:

$$k_t = \begin{cases} k_t^{init}\left(1 - \frac{F_t^* - \hat{F}_t}{\mu F_n - \hat{F}_t}\right)^{1/3} & \text{für} \quad (\zeta - \zeta^* > 0) \\ -k_t^{init}\left(1 - \frac{\hat{F}_t - F_t^*}{\mu F_n + \hat{F}_t}\right)^{1/3} & \text{für} \quad (\zeta - \zeta^* < 0) \end{cases} \quad . \tag{3.12}$$

Hierbei sind wie schon erwähnt alle Werte mit * diejenigen des vorhergehenden Zeitschrittes. $\hat{F}_t$ ist zu Beginn stets Null und nimmt den Wert von F_t^* an, wenn $\zeta - \zeta^*$ das Vorzeichen wechselt.

Für die Parameter der linearen gedämpften Feder des erweiterten Cundall-Strack-Ansatzes existieren keine theoretischen Modelle. Ihre Festlegung muß deshalb auf eine andere sinnvolle Weise erfolgen. Die Periodendauer der Schwingung T_t der tangentialen Feder und der Restitutionskoeffizient ϵ_t sind mit den Parametern k_t und γ_t verknüpft:

$$k_t = \frac{\pi^2 + (\ln \epsilon_t)^2}{\left(\frac{T_t}{2}\right)^2} M_{eff} \quad , \tag{3.13}$$

$$\gamma_t = -2\frac{\ln \epsilon_t}{\frac{T_t}{2}} M_{eff} \quad . \tag{3.14}$$

Es ist deshalb sinnvoll, die Parameter über eine Festlegung der Periodendauer und des Restitutionskoeffizienten zu wählen. Als halbe Periodendauer bietet sich in Analogie zum Walton-Braun-Ansatz [Gleichung (3.11)] die Kollisionsdauer eines zentralen Stoßes mit der Referenzgeschwindigkeit $\tilde{v}$ an ($T_t/2 = t_n$). In diesem Fall wird bei einem schiefen Stoß mit einer Normalkomponente der Größe $\tilde{v}$ die Periodendauer der tangentialen und normalen Schwingung gleich groß sein. Der Kontakt der Teilchen löst sich in diesem Fall genau in dem Augenblick, in dem die tangentiale Feder wieder entlastet ist. Die Sinnhaftigkeit dieser Annahme bestätigt eine theoretische Vorhersage, die N. Maw, J.R. Barber und J.N. Fawcett für die Periodendauer für einem vereinfachten linearen Ansatz der normalen Kontaktkraft zusammen mit dem Cundall-Strack-Ansatz geben [MBF76].

Es ist bei der Festlegung aller Parameter der normalen und tangentialen Kraftansätze zu berücksichtigen, daß sie von der effektiven Masse M_{eff} und dem effektiven Radius R_{eff} direkt oder indirekt abhängen. Die absoluten Ausdehnungen der simulierten Systeme spielt deshalb in der Molekulardynamik im Gegensatz zum BTR-Modell eine Rolle.

Für die Simulation der rotierenden Trommel war ursprünglich beabsichtigt, Zelluloseazetat als simuliertes Material zu wählen. Zelluloseazetat ist das einzige Material, für das experimentelle Daten zu tangentialen Kräften vorliegen ([FLCA94], siehe [Sch96a]). Für die Untersuchung des Segregationseffektes war eine Simulation über insgesamt 3 Umdrehungen der Trommel notwendig. Die Rotation durfte nicht zu schnell sein, da ansonsten der Vergleich mit dem BTR-Modell nicht zulässig wäre. Für größere Rotationsgeschwindigkeiten würde man das Regime diskreter Lawinen verlassen und wäre zu einem Regime kontinuierlicher Lawinen übergegangen. Ein sinnvoller Wert war deshalb eine Umdrehung pro Minute. Insgesamt mußten demzufolge 3 Minuten physikalischer Zeit simuliert werde. Weiterhin wurden als realistische Werte der Ausdehnungen exemplarischer Systeme Kugeln von $2.5\,mm$ und $5\,mm$ Radius in Trommeln mit Radien von $17.5\,cm$ und $25\,cm$ angesehen.

Sodann wurde anhand von binären Stößen simulierter Zelluloseazetat-Kugeln überprüft, wie groß der maximale Zeitschritt der Integration sein darf, und ob die Einführung des Dämpfungsterms in die Tangentialfeder [Gleichung (3.9)] zulässig war. Dies läßt sich an einem sogenannten MBF-Diagramm ablesen [MBF76]. Darin wird

$$\Psi^f = v_t^f / v_n^i \qquad \text{über} \qquad \Psi^i = v_t^i / v_n^i \tag{3.15}$$

aufgetragen. Der hochgestellte Index i der tangentialen und normalen Relativgeschwindigkeitskomponenten steht hierbei für die initialen Anfangsrelativgeschwindigkeiten vor dem Stoß und der Index f für die finalen Endrelativgeschwindigkeiten nach dem Stoß. Die MBF-Auftragung hat den Vorteil, daß man direkt den tangentialen Restitutionskoeffizienten $\epsilon_t = \Psi^f / \Psi^i$ ablesen kann. In Abbildung 3.2 ist das MBF-Diagramm für die Simulation der Zelluloseazetat-Kugeln sowohl mit der tangentialen Feder als auch mit dem Walton-Braun-Ansatz aufgetragen. Man erkennt, daß die Simulationen gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen, und daß beide Ansätze annähernd das gleiche Ergebnis liefern. Insbesondere der Bereich negativer tangentialer Restitutionskoeffizienten ($\Psi^f < 0$) wird gut erfasst.

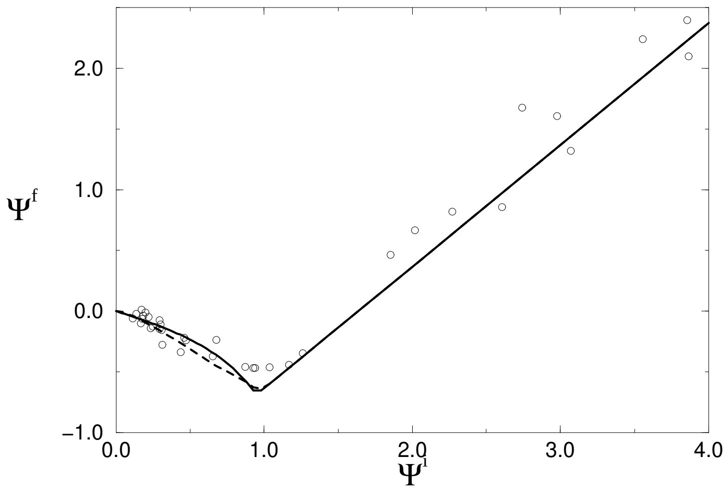

Abbildung 3.2: MBF-Diagramm von Zelluloseazetat-Kugeln, experimentelle Daten aus [FLCA94] (Kreise) und Simulation mit normalem Herz-Kuwabara-Kono-Ansatz und tangentialer gedämpfter linearer Feder (durchgezogene Linie) oder tangentialem Walton-Braun-Ansatz (gestrichelte Linie). Anfangsrelativgeschwindigkeit war $1\,m/sec$.

Für die Simulationen der Zelluloseazetat-Kugeln wurden die folgenden Größen, die in [FLCA94] und [Sch96a] angegeben sind, verwendet: Dichte $\rho = 1.32 \cdot 10^3\,kg/m^3$, Young-Modul $Y = 3.2 \cdot 10^9\,N/m^2$, Poisson Zahl $\nu = 0.28$, Coulomb'scher Gleitreibungskoeffizient $\mu = 0.25$, normaler Restitutionskoeffizient $\epsilon_n = 0.89$ und tangentialer Restitutionskoeffizient $\epsilon_t = 0.39$. Die Referenzrelativgeschwindigkeit $\tilde{v}$ war $1\,m/sec$, wie sie auch zur Bestimmung der experimentellen Daten verwendet wurde. Aus den Materialgrößen ergaben sich die Parameter der Simulationen zu:

$$\begin{aligned} k_n &= 2.31 \cdot 10^9\,Nm^{-2} \cdot \sqrt{R_{eff}}\ , \\ \gamma_n &= 1863.9\,kg\,m^{-1/2}sec^{-1}\ , \\ k_t &= 4.59 \cdot 10^9\,sec^{-2} \cdot M_{eff}\ , \\ \gamma_t &= 3.89 \cdot 10^4\,sec^{-1} \cdot M_{eff}\ , \\ k_t^{init} &= 2.81 \cdot 10^9\,sec^{-2} \cdot M_{eff}\ . \end{aligned}$$

Ein äußerst interessantes Ergebnis zeigte sich im Verlauf der Untersuchungen der Ansätze der tangentialen Kräfte. Bei kleinen Schiefen α läßt sich beobachten, daß der tangentiale Restitutionskoeffizient in Abhängigkeit von der Anfangsrelativgeschwindigkeit periodisch das Vorzeichen ändert. In Abbildung 3.3 ist zu sehen, daß der tangentiale Restitutionskoeffizient für große Relativgeschwindigkeiten ($v^i > \tilde{v}$) negativ ist, wie es dem MBF-Diagramm entspricht. Mit abnehmender Relativgeschwindigkeit wechselt er mehrmals das Vorzeichen. Zu erkennen ist ebenfalls, daß im Mittel der Betrag des tangentialen Restitutionskoeffizienten bei der linearen gedämpften Feder kleiner ist als beim Walton-Braun-Ansatz. Die Dissipation der tangentialen Relativbewegungen ist also bei ersterem deutlich stärker. Insbesondere für sehr kleine Relativgeschwindigkeiten wird nahezu die gesamte tangentiale kinetische Energie dissipiert.

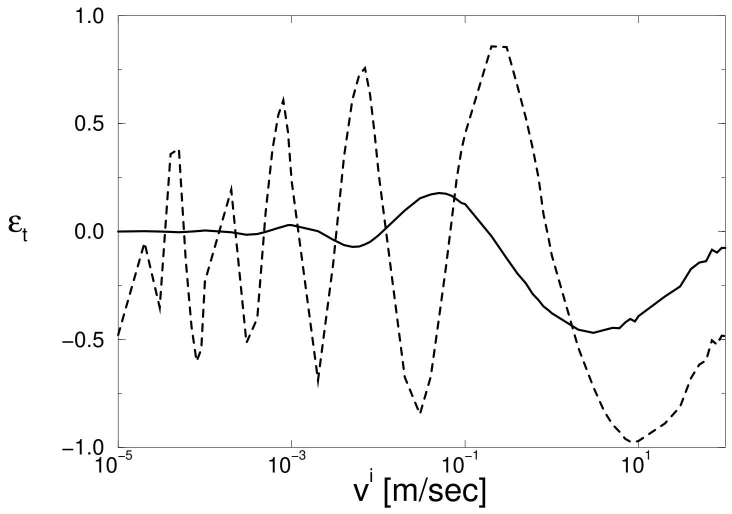

Abbildung 3.3: Abhängigkeit des tangentialen Restitutionskoeffizienten von der Anfangsrelativgeschwindigkeit v^i bei konstanter kleiner Schiefe $\sin(\alpha) = 0.02$ für Zelluloseazetat-Kugeln. Tangentiale Kraftansätze sind die gedämpfte lineare Feder (durchgezogene Linie) und der Walton-Braun-Ansatz (gestrichelte Linie).

Das periodische Wechseln des Vorzeichens in Abbildung 3.3 ist leicht zu erklären. Die Kontaktdauer des Stoßes wird durch die normalen Kräfte bestimmt und nimmt mit sinkender Anfangsrelativgeschwindigkeit zu. Die Periodendauer der tangentialen Kräfte ist dagegen eine Konstante. Alle Kräfte sind nun so ausgelegt, daß für große Anfangsrelativgeschwindigkeiten die tangentialen Kräfte während der Kontaktzeit genau einmal gespannt werden und sich der Kontakt wieder löst, wenn die tangentialen Kräfte sich wieder entspannen. In diesem Fall resultiert eine verbleibende tangentiale Relativgeschwindigkeit, die entgegengesetzt zur anfänglichen Bewegungsrichtung steht. Der tangentiale Restitutionskoeffizient ist negativ. Verlängert sich die Kontaktzeit aber, so wird sich die Bewegungsrichtung der tangentialen Kräfte erneut umkehren und wieder die anfängliche Richtung einnehmen. Der tangentiale Restitutionskoeffizient wird positiv.

Auf diese Weise kann sich die Kontaktzeit für kleine Anfangsrelativgeschwindigkeiten über mehrere Schwingungsperioden der tangentialen Kräfte erstrecken.

Das in Abbildung 3.3 dargestellte Verhalten wurde in realen Systemen noch nicht untersucht. Deshalb ist nicht zu sagen, ob es sich hierbei um ein weiteres Artefakt handelt oder nicht. Sollten in realen Systemen die normalen und tangentialen Kräfte tatsächlich weitgehend entkoppelt sein, so wie es die hier dargestellte Wahl der Kraftansätze der zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik annimmt, dann ist es wahrscheinlich, daß ein solches oder ähnliches Verhalten realistisch ist und zu beobachten sein wird. Es sei darauf hingewiesen, daß in den Untersuchungen von Schäfer *et al.* [SDW96] die normalen und tangentialen Kräfte durch die Verwendung von linearen Kraftansätzen in beiden Richtungen wegen konstanter Periodendauern nicht entkoppelt waren. Für diese Wahl der Kraftansätze ergibt sich allerdings das schon geschilderte Problem der fehlenden Abhängigkeit des normalen Restitutionskoeffizienten von der anfänglichen Relativgeschwindigkeit.

Mit den obigen Simulationsparametern für Zelluloseazetat ist die Kontaktzeit eines Stoßes $t_n = 4.84 \cdot 10^{-5}\, sec$ für die anfängliche Referenzgeschwindigkeit $\tilde{v} = 1\, m/sec$. Eine Unabhängigkeit der Simulationsergebnisse vom Integrationszeitschritt war erst gewährleistet, als der Zeitschritt $dt < t_n/80$ war. Aus diesem Grund wurde für alle Simulationen der Zeitschritt auf $t_n/100$ festgelegt. Für $3\, min$ simulierter Zeit wären im Falle der Zelluloseazetat-Kugeln also $3.72 \cdot 10^8$ Zeitschritte aufzuwenden gewesen. Diese Zahl überschritt die zur Verfügung stehende Rechenzeit, weil die nichtlinearen normalen Kräfte einen erheblichen Rechenaufwand verursachen. Es war deshalb notwendig, ein Material zu simulieren, das weicher ist als Zelluloseazetat. Die Wahl fiel auf einen nicht näher spezifizierten exemplarischen Kunststoff mit folgenden, für diese Stoffe typischen Kenngrößen [BHH+71, Lid96] $\rho = 1.5 \cdot 10^3\, kg/m^3$, $Y = 4 \cdot 10^7\, N/m^2$, $\nu = 0.3$, $\mu = 0.4$, $\epsilon_n = 0.6$ und $\epsilon_t = 0.3$. Daraus resultierten die Parameter der Simulationen zu:

$$\begin{aligned}
k_n &= 2.93 \cdot 10^7\, Nm^{-2} \cdot \sqrt{R_{eff}}\ , \\
\gamma_n &= 88.2\, kg\, m^{-1/2} sec^{-1}\ , \\
k_t &= 1.81 \cdot 10^8\, sec^{-2} \cdot M_{eff}\ , \\
\gamma_t &= 9.63 \cdot 10^3\, sec^{-1} \cdot M_{eff}\ , \\
k_t^{init} &= 1.09 \cdot 10^8\, sec^{-2} \cdot M_{eff}\ .
\end{aligned}$$

Der Zeitschritt ergab sich nun zu $2.5 \cdot 10^{-6}\, sec$. Das entspricht $7.2 \cdot 10^7$ Zeitschritten für $3\, min$ oder 66666 Zeitschritte für eine Rotation der Trommel um $1°$.

3.2.2 Ergebnisse des Vergleichs

Aus Experimenten ist bekannt, daß die radiale Segregation innerhalb der ersten Umdrehung einer rotierenden Trommel entsteht [CB95]. Um die Segregation zu untersuchen, wurden deshalb die Simulationen bis zur dritten Umdrehung ausgeführt und die Daten erst ab der ersten Umdrehung in Betracht gezogen. Untersucht wurden Trommeln der Größen $R = 35$ und $R = 50$. Diese wurden jeweils aus 99 beziehungsweise 141 Wandteilchen gebildet, was einer Wandteilchendichte von $\rho_w = 0.9$ entspricht. Für die BTR-Simulation wurde die übliche Rotationsschrittweite $\Delta\Phi = 1$ verwendet. Die Abbildung 3.4 zeigt die Trommeln für eine a) Molekulardynamik und b) BTR-Simulation nach der ersten Umdrehung. Man erkennt deutlich, daß die Segregation in der Molekulardynamiksimulation äußerst schwach ausgeprägt ist. Der Zustand scheint sich auf den ersten Blick nicht vom gemischten Anfangszustand zu unterscheiden. Die Segregation im BTR-Modell ist dagegen deutlich sichtbar und durchaus von der Qualität der Experimente [CB95, Can95]. Für die Abbildung 3.4a) wurde der tangentiale Ansatz der gedämpften linearen Feder verwendet. Dieser Ansatz zeigte gegenüber dem Walton-Braun-Ansatz eine deutlichere Segregation.

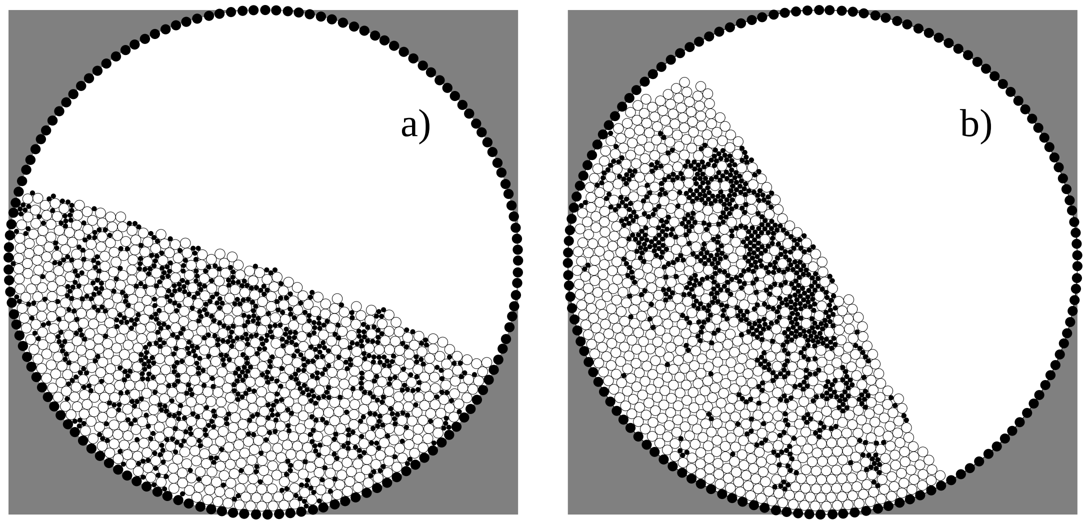

Abbildung 3.4: Trommeln mit Radius $R = 50$, 1530 bidispersen Teilchen, Radienverhältnis $r = 0.5$ und 141 großen Wandteilchen nach der ersten Umdrehung: a) Ergebnis der Molekulardynamik, b) der BTR-Simulation.

Für eine genauere Quantifizierung der Segregation wurde die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(m)$ für das Auffinden eines kleinen beziehungsweise großen Teilchens in einem relativen Abstand m vom Mittelpunkt der Trommel untersucht. Das Verfahren zur Ermittlung der Verteilung ist bereits in Abschnitt 2.2.2 dargestellt worden. Abweichend von dieser Darstellung wurde hier auf die Festlegung einer speziellen Lawinenzone verzichtet und die Verteilung jeweils für die gesamte Konfiguration aller Teilchen aufgenommen. Die Festlegung einer Lawinenzone war, wie später gezeigt wird, in der Molekulardynamik nicht möglich. Außerdem ist zu erwarten, daß Unterschiede zwischen Verteilungen, die mit oder ohne Lawinenzone aufgenommen werden, nur sehr gering sind, weil die Segregation innerhalb der Lawinenzone erzeugt wird. Die folgenden Verteilungen wurden in allen Simulationen während der zweiten und dritten Umdrehung aufgenommen, wobei Daten jeweils nach einer Drehung um $1°$ hinzugefügt wurden.

In den Abbildung 3.5, 3.6 und 3.7 sind die radialen Wahrscheinlichkeitsverteilungen für $R = 50$ aufgetragen. Die kleineren Trommeln mit $R = 35$ zeigen ein vollkommen analoges Bild. Ihre Ergebnisse sind deshalb hier nicht abgebildet. Man sieht in Übereinstimmung mit Abbildung 3.4, daß die Segregation im BTR-Modell sehr viel ausgeprägter ist als in der Molekulardynamik. Das Maximum für kleine Teilchen ist bei der BTR-Simulation viel höher und nicht so weit vom

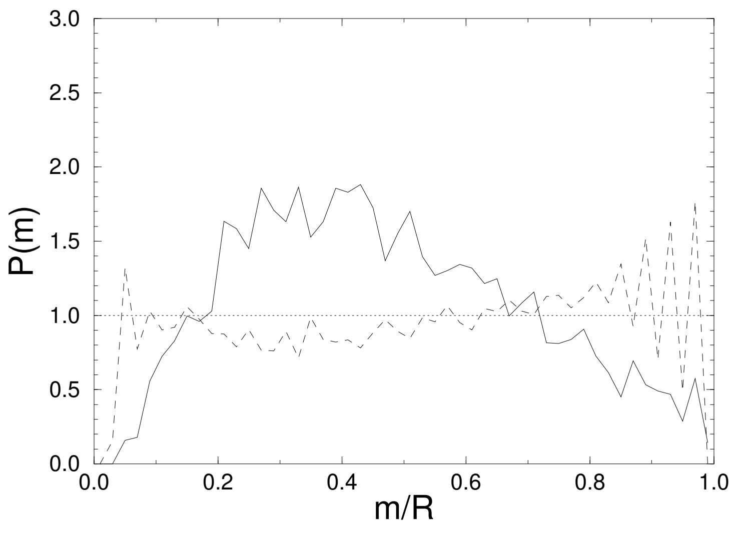

Abbildung 3.5: Radiale Wahrscheinlichkeitsverteilungen einer Molekulardynamiksimulation mit gedämpfter linearer Feder als Tangentialkraft. Die Punkte zeigen die Gleichverteilung P_u. Die durchgezogene (gestrichelte) Linie zeigt die Verteilung für kleine (große) Teilchen, die mit $n = 50$ konzentrischen Schalen ermittelt wurde.

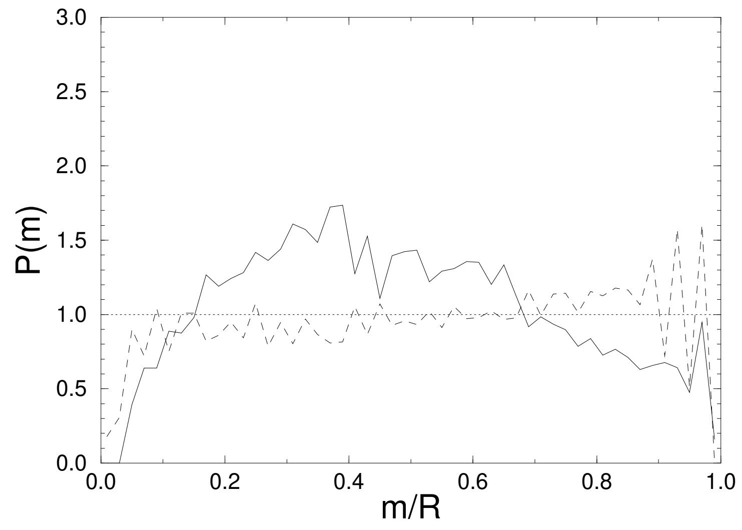

Abbildung 3.6: Radiale Wahrscheinlichkeitsverteilungen einer Molekulardynamiksimulation mit Walton-Braun-Ansatz als Tangentialkraft. Die Punkte zeigen die Gleichverteilung P_u. Die durchgezogene (gestrichelte) Linie zeigt die Verteilung für kleine (große) Teilchen, die mit $n = 50$ konzentrischen Schalen ermittelt wurde.

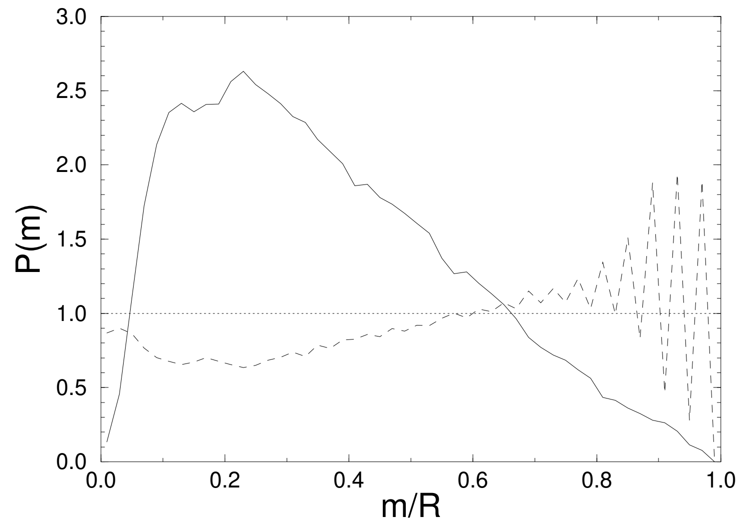

Abbildung 3.7: Radiale Wahrscheinlichkeitsverteilungen für eine BTR-Simulation. Die Punkte zeigen die Gleichverteilung P_u. Die durchgezogene (gestrichelte) Linie zeigt die Verteilung für kleine (große) Teilchen, die mit $n = 50$ konzentrischen Schalen ermittelt wurde.

Mittelpunkt der Trommel entfernt. Die bekannten Oszillationen der Kurven für die großen Teilchen entstehen durch die Anordnung der Teilchen entlang der Wand in konzentrischen Schalen. Diese schon bekannte strukturelle Selbstorganisation wird nur zum Teil durch die zufälligen Abstände der Wandteilchen gestört. Im Vergleich ist ebenfalls zu erkennen, daß die Segregation in der Molekulardynamik mit tangentialem Walton-Braun-Ansatz weniger ausgeprägt ist als mit tangentialer gedämpfter linearer Feder. Aus diesem Grund werden im Folgenden nur noch Ergebnisse mit dem Ansatz der tangentialen gedämpften linearen Feder präsentiert.

Die schwache Segregation der Molekulardynamik ist eine Folge von sehr großen Lawinen. In visuellen Animationen der Simulationen läßt sich erkennen, daß die Breite der Lawinen in Molekulardynamiksimulationen sehr viel größer ist als in BTR-Simulationen. Die kleinen Teilchen, die sich nahe der Oberfläche sammeln wollen, werden immer wieder von großen Lawinen in die äußeren Bereiche der Trommel transportiert. Außerdem partizipieren, als Folge der Existenz von sehr unterschiedlich großen Lawinen, größere Teile der Füllung abwechselnd mal an den Lawinen und mal nicht. Es war auf diese Weise nicht möglich eine Lawinenzone in sinnvoller Weise festzulegen.

Der Grund für große Lawinen ist vermutlich in den beiden Artefakten des Modells zu sehen. Das Bremsversagen und der *Detachment*-Effekt verursachen eine mangelhafte Dissipation von kinetischer Energie. Diese resultiert schließlich in einer vermehrten Fluidisierung der Systeme, was zu großen Lawinen führt.

Um die Auswirkungen der Modellartefakte zu demonstrieren sind in Abbildung 3.8 die Verbindungen der Positionen der Teilchen von zwei aufeinanderfolgenden $1°$-Drehungen der Trommel während einer Lawine dargestellt. Man sieht, daß die Breite der Lawine unrealistischerweise ungefähr 14 Radien der großen Teilchen beträgt. Realistische Werte sind kleiner als die Hälfte dieses Wertes [RCD93, CRD95]. Im oberen Teil der Lawine sind die Spuren lang und sie kreuzen sich. Dies ist ein Zeichen für starke Fluidisierung. Im tieferen Teil der Lawinen sind die Spuren kürzer und mehr parallel. Dort bewegen sich die Teilchen in kompakteren Gruppen. Schließlich wird die Lawine durch eine Folge von kleinen Konvektionsrollen vom stabilen Rest der Füllung getrennt. Solche Konvektionsrollen wurden zuvor schon in Molekulardynamiksimulationen rotierender Trommeln beobachtet [PB95], konnten aber bis heute nicht experimentell verifiziert werden.

Die Fluidisierung in der Molekulardynamik läßt sich messen. Zu diesem Zweck wertet man jedes Teilchen als fluidisiert, das sich nicht in einer stabilen lokalen

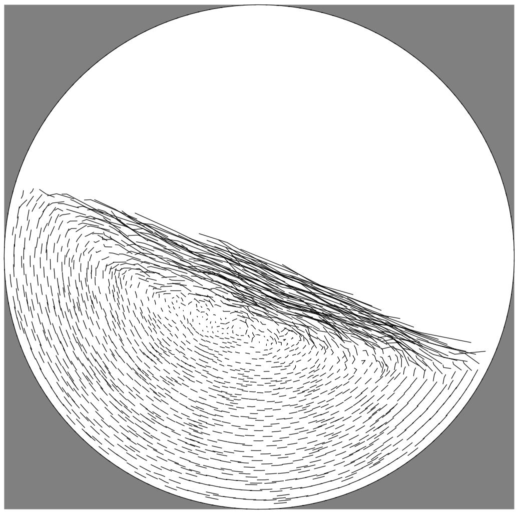

Abbildung 3.8: Spuren der Bewegung der Teilchen während einer großen Lawine in einer Molekulardynamiksimulation. Dargestellt sind die Verbindungen der Teilchenpositionen zwischen drei verschiedenen Konfigurationen, die jeweils 1° auseinanderliegen.

Konfiguration befindet. Dies ist der Fall, wenn das Teilchen nicht mindestens auf jeder Seite, rechts und links vom Mittelpunkt mit einem anderen Teilchen in Kontakt ist. Diese Definition von Fluidisierung ist nicht besonders exakt, da es instabile lokale Konfigurationen gibt, die diese Bedingung erfüllen. Es können ebenfalls Teilchen als stabil gewertet werden, deren Kontaktpartner instabil sind. Nichtsdestotrotz stellt diese Definition zumindest eine untere Schranke für die tatsächliche Fluidisierung dar.

Die Auswertung der Molekulardynamiksimulation mit tangentialer gedämpfter linearer Feder ergab, daß im Mittel $21.5\% \pm 3.2\%$ aller Teilchen in der Trommel während der zweiten und dritten Umdrehung fluidisiert waren. Der Fehler ist die Standardabweichung des Mittelwertes. Das Maximum war mit 32.7% und das Minimum mit 12.9% gegeben. Obwohl die Fluidisierung in Experimenten noch nicht gemessen wurde, ist zu vermuten, daß diese großen Werte nicht realistisch sind. In Experimenten mit kleinen Rotationsgeschwindigkeiten sind nahezu alle Teilchen permanent in stabilen Konfigurationen. Nur einige wenige Teilchen befinden sich in dünnen Lawinen in einer Bewegung, die durch instabile Konfigurationen gekennzeichnet ist. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß per Definition das BTR-Modell eine Fluidisierung nicht explizit simuliert. Vielmehr durchläuft die Dynamik eine Folge von stationären Zuständen.

Um den Zusammenhang zwischen Fluidisierung und Lawinen nachzuweisen sind in Abbildung 3.9 eine gleichzeitige Sequenz der Fluidisierung und des Böschungswinkels dargestellt. Die Fluidisierung erschwerte die Bestimmung einer Oberfläche und damit die übliche lineare Regression des Böschungswinkels. Aus diesem Grund wurde der Böschungswinkel über den Schwerpunkt aller Teilchen bestimmt. Die Strecke zwischen diesem Schwerpunkt und dem Trommelmittelpunkt ist orthogonal zur Oberfläche. In Abbildung 3.9 erkennt man deutlich die

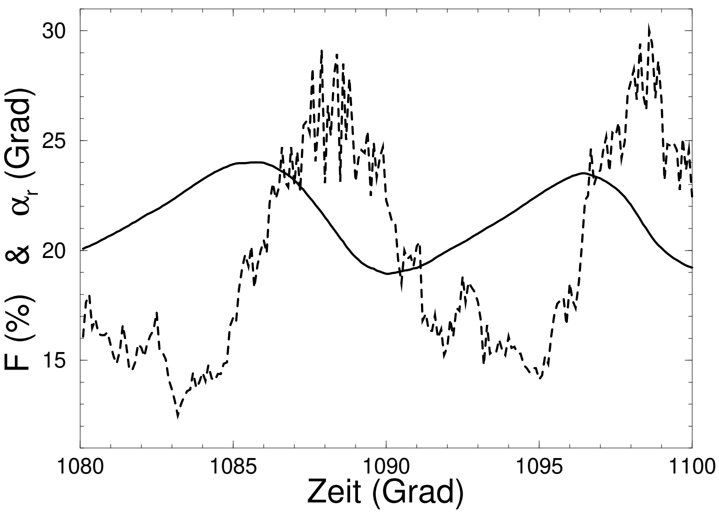

Abbildung 3.9: Fluidisierung (F) [gestrichelte Linie] und Böschungswinkel (α_r) [durchgezogene Linie] in der Molekulardynamik nach der dritten Umdrehung der Trommel. Die Zeit wird durch die Rotation der Trommel gemessen.

Korrelation zwischen Fluidisierung und Böschungswinkel. Wenn der Böschungswinkel ohne Lawinen kontinuierlich und linear durch die Rotation vergrößert wird, nimmt die Fluidisierung ab. Während einer Lawine, die den Böschungswinkel wieder erniedrigt, hat die Fluidisierung ein Maximum. Auffällig ist, daß die Fluidisierung bereits ansteigt, bevor der Böschungswinkel sein Maximum erreicht. Dies ist ein deutliches Zeichen dafür, daß die Fluidisierung einer der Auslöser der Lawinen ist.

3.2.3 Fazit

Die zeitschrittgetriebene Molekulardynamik ist nicht in der Lage, die radiale Segregation in rotierenden Trommel befriedigend zu reproduzieren. Sie wird in diesem Maße nicht ihrem großen Realitätsanspruch gerecht. Dieser Mißstand liegt in der mangelnden Dissipation kinetischer Energie begründet. Diese führt zu einer vermehrten Fluidisierung innerhalb der Systeme. Selbst die Wahl der bis lang realistischsten und komplexesten Ansätze für die Kontaktwechselwirkungskräfte war nicht in der Lage, diesen Mangel zu beseitigen. Obwohl das rein geometrische BTR-Modell den physikalischen Grenzfall sehr geringer Fluidisierung simuliert, zeigt es im Vergleich wesentlich bessere Ergebnisse.

Für die zeitschrittgetriebene Molekulardynamik bleibt festzuhalten, daß sie in weniger kompakten Systemen mit weniger langanhaltenden Kontakten sicherlich ihrem Realitätsanspruch gerechter werden kann. In solchen Systemen kommen ihre methodischen Fehler weniger zum Tragen. Für rotierende Trommeln wird ein besseres Ergebnis zu erzielen sein, wenn man die methodischen Artefakte durch die Simulation noch härterer Teilchen weiter unterdrückt. Inwieweit die Güte des BTR-Modells erreicht werden kann, ist an dieser Stelle nicht abzuschätzen.

In diesem Kapitel zeigte sich ein interessanter Effekt: Oszillationen des tangentialen Restitutionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Anfangsgeschwindigkeit bei leicht schiefen Stößen. Dieser Effekt ist zukünftig durch Experimente zu verifizieren oder ansonsten als Artefakt der Kraftansätze einzuordnen. Die Simulationen mit verschiedenen Ansätzen für die Tangentialkräfte zeigten weiterhin, daß die Dissipation von Energie in tangentialer Richtung eine große Rolle in dichten Systemen spielt. Die Simulationen mit dem Ansatz der tangentialen gedämpften linearen Feder zeigten bessere Ergebnisse als diejenigen mit Walton-Braun-Ansatz. Der Walton-Braun-Ansatz dissipiert im Mittel weniger Energie. Nicht gezeigt wurden Ergebnisse zur tangentialen gedämpften linearen Feder, bei denen die Feder im aperiodischen Grenzfall betrieben wurde. Für diesen Fall zeigte sich im MBF-Diagramm kein Bereich mit negativem tangentialem Restitutionskoeffizient. Die Hoffnung, daß trotzdem mehr Energie dissipiert würde, trog. Die Resultate waren sogar noch schlechter als mit dem Walton-Braun-Ansatz.

Ein äußerst wichtiger Punkt im Vergleich der beiden Simulationsmethoden ist die benötigte Rechenzeit. Hier sind die Unterschiede extrem. Die analysierten drei Umdrehungen der Trommel mit 1530 Teilchen benötigten in der Molekulardynamik auf einer *IBM RS6000/250 Workstation* mit *Power2 Risc-Prozessor* ungefähr 39 Tage *CPU*-Zeit. Der BTR-Algorithmus brauchte auf derselben Maschine nur 112 *CPU*-Sekunden für dieselben drei Umdrehungen. Dies entspricht einem Faktor von $3 \cdot 10^4$ in der Geschwindigkeit der beiden Algorithmen. Es wird anschaulich klar, daß es mit der Molekulardynamik nicht möglich ist, große Systeme, lange Zeiten oder viele Systemmittel zu berechen.

Abschließend sei auf die neueste Arbeit von C. Dury und G. Ristow hingewiesen [DR97]. Sie untersuchen mit Hilfe einer zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik das Verhalten in rotierenden Trommeln und zeigen in einer Abbildung eine den Experimenten und dem BTR-Modell vergleichbare Segregation. Eine genauere Überprüfung ihrer Arbeit stellte jedoch fest, daß dieses Ergebnis mit Annahmen gewonnen wurde, die den Prinzipien und Ansprüchen der Molekulardynamik widersprechen [Dur97]. Die Kritikpunkte sind im einzelnen:

1. Die Segregation ist erst nach 9 Umdrehungen der Trommel so stark ausgeprägt, wie es ihre Abbildung zeigt. Nach einer Umdrehung ist die Segregation in Analogie zu dieser Arbeit nur sehr schwach zu erkennen.

2. Die Teilchen besitzen keinen Rotationsfreiheitsgrad. Dies widerspricht den Ansätzen und Prinzipien, die der zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik zu Grunde liegen. Insbesondere die Tangentialkräfte sind dazu entwickelt worden, ein Drehmoment auf Teilchen auszuüben. Ohne Rotation werden die Tangentialkräfte zu unrealistisch großen Haftreibungen führen.

3. Es wird ein vereinfachter normaler Kontaktkraftansatz mit einer gedämpften linearen Feder verwendet. (Für die tangentiale Kraft wird der Cundall-Strack-Ansatz verwendet.)

4. Die Parameter der Kraftansätze sind nicht realistisch. Es wurden extrem weiche, gelatineartige Kugeln simuliert. Im einzelnen wurden, den Kraftansätzen entsprechend, die folgenden Parameter verwendet:
   $k_n = 7.5 \cdot 10^4\, N/m$, $\gamma_n = 7.76 \cdot 10^2\, kg/sec$, $k_t = 10^2\, kg/sec^2$.
   Zum Vergleich seien die realistischen Parameter für Zelluloseazetat mit diesen Kraftansätzen genannt [SDW96]:
   $k_n = 7.32 \cdot 10^6\, N/m$, $\gamma_n = 2.06 kg/sec$, $k_t = 2/7 \cdot k_n$.
   Man sieht, daß Ristow und Dury ihre Parameter um zwei Größenordnungen abweichend von realistischen Werten gewählt haben. Der ebenfalls um zwei Größenordnungen gewählte Unterschied zwischen k_n und k_t ist besonders zu kritisieren. Daß diese beiden Parameter von der gleichen Größenordnung sind, wurde schon analytisch gezeigt [MBF76].

5. Als elementarer Integrationszeitschritt wurde ein Zehntel der konstanten Kollisionsdauer gewählt. Für solch große Zeitschritte ist eine Unabhängigkeit des Ergebnisses von der Größe des Zeitschrittes nicht gegeben.

Die genauen Auswirkungen dieser Kritikpunkte sind ohne weitergehende Untersuchungen nicht feststellbar. Allein die Unterdrückung des Rotationsfreiheitsgrades ist sowohl vom simulationstechnischen als auch vom physikalischen Standpunkt aus der größte Kritikpunkt. Sie ist wahrscheinlich der Grund für den in der Arbeit von Dury und Ristow erkennbaren, relativ großen Böschungswinkel. In allen anderen Molekulardynamiksimulationen wurden zuvor, selbst für nichtsphärische Teilchen kleinere Oberflächensteigungen beobachtet [PB93b]. Zusammenfassend kann demnach gesagt werden: Die Ergebnisse von Dury und Ristow widersprechen nicht der in diesem Kapitel gemachten Feststellung, daß Molekulardynamiksimulationen mit realistischen Parametern nicht in der Lage sind, die Dynamik granularer Materie in langsam rotierenden Trommelmischern genauso befriedigend wiederzugeben, wie es das BTR-Modell vermag.

Kapitel 4

Zellulare Automaten

Zellulare Automaten, die in der Hydrodynamik manchmal Gittergas-Modelle genannt werden, stellen eine besondere Klasse von Algorithmen dar. Ihre Besonderheit besteht in der engen Anlehnung an die Eigenschaften der verarbeitenden Rechner. Durch die beschränkte Darstellungsgenauigkeit von Zahlen und durch Rundungsfehler haben andere Arten von Algorithmen intrinsische Fehlerquellen. Diese Fehlerquellen können erhebliche Auswirkung auf Simulationen haben und große Probleme bereiten. Zellulare Automaten verwenden dagegen nur exakt darstellbare ganzzahlige Variablen. Zeit und Raum werden in abzählbare Abschnitte (Zellen) aufgeteilt. Auf diese Weise können die obigen Fehlerquellen vermieden werden. Weiterere Vorteile dieser Algorithmen sind ihre große Geschwindigkeit, intrinsische numerische Stabilität, problemlose Behandlung der Randbedingungen und die relativ einfachen Algorithmen, die gut auf Parallelrechnern zu implementieren sind.

Der erste hydrodynamische zellulare Automat wurden von J. Hardy und Y. Pomeau [HP72] zur Simulation einer idealisierten Flüssigkeit eingeführt. Allgemein sieht eine Simulation so aus, daß „Teilchen“ sich unter Verwendung ganz bestimmter Vorschriften auf einem räumlichen Gitter bewegen. Jede Zelle des Systems enthält einen Gitterknoten. Innerhalb eines diskreten Zeitschrittes können sich die „Teilchen“ einen Gitterknoten weiterbewegen oder auch nicht. Treffen zwei „Teilchen“ aufeinander, so werden ihre Bewegungsmuster nach bestimmten Regeln geändert. Das Entscheidende in diesen Modellen ist, daß diese Bewegungsvorschriften und das zugrundeliegende Gitter nicht beliebig sind, sondern mathematisch auf die Diskretisierung einer Differentialgleichung zurückgeführt werden können. Ein einfaches Beispiel für eine solche Diskretisierung ist die Laplace-Gleichung, die das diffusionsbedingte Wachstum von beispielsweise Schneeflocken beschreibt [Wol89]. Für komplexere Phänomene gestaltet sich die Diskretisierung ungleich schwerer. So wurde erst 14 Jahre nach Hardy und Pomeau ein Automat zur Simulation der Navier-Stokes-Gleichung von U. Frisch, B. Hasslacher und Y. Pomeau vorgestellt [FHP86]. Dieser krankte aber leider an einigen unphysikalischen Eigenschaften wie zum Beispiel einem statistischen Rauschen. Erst weitere 6 Jahre später konnten diese durch Y.H. Qian, D. d'Humières und P. Lallemand zufriedendstellend gelöst werden [QdL92].

„Die grundsätzliche Idee der zellularen Automaten ist folgende: Die Kontinuumsgleichung der Hydrodynamik, die Navier-Stokes-Gleichung drückt im wesentlichen die Impulserhaltung aus. Eine mikroskopische Dynamik, die die entsprechenden Erhaltungssätze berücksichtigt, wird deshalb auf die Navier-Stokes-Gleichung führen. Dabei ist es egal, ob die echte Dynamik der Moleküle oder die eines geeignet definierten zellularen Automaten simuliert wird“ [KK94b]. In diesem Sinne repräsentieren die „Teilchen“ eines zellularen Automaten zur Simulation von Fluiden eine sehr große Anzahl von Molekülen mit bestimmten mittleren makroskopischen Eigenschaften, wie Dichte, Druck und Temperatur.

4.1 Bisherige Ansätze und Ergebnisse

Wegen der unbestreitbaren Vorteile der zellularen Automaten bezüglich ihrer Implementation und Effizienz wurden zuerst von Baxter und Behringer [BB90, BB91] und später von Herrmann *et al.* [FH93, PH94, PH95, VH95] und Károlyi und Kertész [KK94b, KK94a, KK96] zellulare Automaten zur Simulation von granularer Materie aufgestellt. Der Ansatz dieser Automaten unterscheidet sich aber von den oben erwähnten ursprünglichen Modellen. Die „Teilchen“ des zellularen Automaten repräsentieren nun nicht mehr eine sehr große Anzahl von Molekülen, sondern sind von der gleichen Größenordnung wie die Teilchen der granularen Materie. Aus diesem Grund ist es zulässig zu behaupten, daß ein „Teilchen“ des Gittergases exakt ein Teilchen der granularen Materie modelliert. Das spezielle *Lattice-Boltzmann*-Modell von E.G. Flekkoy und H.J. Herrmann bildet in dieser Hinsicht eine Ausnahme, da dort ein „Teilchen“ expliziet eine veränderliche kontinuierliche Dichte von granularen Teilchen simuliert [FH93]. Die Diskretisierung einer Kontinuumsbeschreibung der ursprünglichen Modelle findet analog für granulare Materie nicht statt. Die Regeln zur Bewegung der Teilchen von einer Zelle des Gitters zur anderen sind üblicherweise an die des Automaten für die Navier-Stokes-Gleichung angelehnt. Allerdings hat man die Regeln mehr oder minder beliebig (im Sinne einer Diskretisierung einer Kontinuumsbeschreibung) erweitert. Der Navier-Stokes Automat erhält bei Stößen von Teilchen jeweils Impuls und Energie. Zur Simulation von Gravitation und Dissipation granulare Medien verwendet man zusätzliche Regeln, die Impuls und Energie nicht erhalten. Diese zusätzlichen Regeln treten nur mit gewissen Wahrscheinlichkeiten auf. Man impliziert, daß im Mittel die gewünschten Werte der Restitutionskoeffizienten und Gravitation erzeugt werden. Konkret sehen die zusätzlichen Regeln zum Beispiel so aus, daß ruhende Teilchen eine Wahrscheinlichkeit haben, sich plötzlich in Richtung der Gravitation zu bewegen, oder daß sich bewegende Teilchen nach einem Stoß plötzlich ruhen.

Mit den zellularen Automaten für granulare Materie sind verschiedene Phänomene simuliert worden, darunter Dichtewellen in Röhren, Ausfluß aus Trichtern und Sandhaufenaufschüttung. Vergleicht man die Ergebnisse dieser Simulationen mit bisherigen Erkenntnissen zu bestimmten physikalischen Meßgrößen, so muß man allerdings feststellen, daß die Simulationsergebnisse entweder ein falsches Verhalten zeigen oder Größen untersucht wurden, die systemspezifisch waren und keine generelle Aussagekraft besitzen. Falsche Ergebnisse sind zum Beispiel das Profil der granularen Temperatur einer Röhre in [KK94b], worin Minima und Maxima vertauscht sind, oder die Dichteabhängigkeit der granularen Temperatur in [KK96], die keine eindeutige Funktion ist, sondern von verschiedenen Flußregimen abhängt [Sch96a, Sch96b]. Kürzlich wurde experimentell das Frequenzspektrum der Dichtefluktuationen beim Rohrfluß gemessen [HIN+96]. Die daraus interpretierte Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus [PH95] ist bedenklich. Das experimentelle Spektrum gliedert sich deutlich in zwei Bereiche, jeweils mit und ohne Potenzgesetzverhalten. Dies zeigt die Simulation nicht.

4.2 Eindimensionale reibungsfreie Röhre

Um die physikalische Korrektheit eines Modells bestätigen zu können, muß dieses zunächst ein gesichertes Ergebnis qualitativ und quantitativ reproduzieren können. Als eine solche gesicherte Referenz bietet sich in diesem Fall die Simulation von Y. Du, H. Li und L.P. Kadanoff eines Ensembles von granularen Punktteilchen, das sich reibungsfrei und horizontal in einer eindimensionalen Röhre bewegt, an [DLK95]. Die Ausgangssituation ist eine gleichmäßige Verteilung der Teilchen in einer Röhre der Länge $L = 1$. Alle Teilchen ruhen, bis auf das äußerst linke, das sich ganz an der Wand befindet. Es erhält die Geschwindigkeit eine Einheitslänge pro Zeiteinheit nach rechts. Die Dynamik gestaltet sich im weiteren Verlauf deterministisch. Bei jedem Stoß zweier Teilchen bleibt der Impuls erhalten und etwas Energie wird, entsprechend einem Restitutionskoeffizienten ϵ, dissipiert:

$$
\begin{aligned}
v_1' &= \epsilon v_1 + (1-\epsilon) v_2 \\
v_2' &= (1-\epsilon) v_1 + \epsilon v_2
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

Hier sind die v_i' die Geschwindigkeiten der Teilchen nach dem Stoß und die ungestrichenen Geschwindigkeiten v_i diejenigen vor dem Stoß.

Das äußerst rechte Teilchen wird an der rechten Wand jeweils vollständig elastisch reflektiert. Das äußerst linke Teilchen erhält an der linken Wand immer die Anfangsgeschwindigkeit $v = 1$. Dies ist notwendig um Energie in das System zu pumpen, da sonst die Dynamik durch die Dissipation zum Erliegen kommen würde. Die gesamte Simulation basiert nur auf den geometrischen Systemgrößen und der Stoßgleichung (4.1) für punktförmige Teilchen. Sie wird mit einer ereignisgesteuerten Molekulardynamik durchgeführt und zeigt demzufolge das exakte Verhalten in diesem idealisierten System.

In der Simulation entwickelt sich die zeitliche Dynamik so, daß alle Teilchen, bis auf das äußerst linke, gegen die rechte Wand zusammengedrängt werden. Sie bilden dort nach einer bestimmten anfänglichen Transienten ein kompaktes *Cluster*, das sich periodisch verdünnt und verdichtet. Das linke Teilchen bewegt sich ständig und im Vergleich zum *Cluster* sehr schnell zwischen der Wand und dem *Cluster* hin und her. Mißt man den Schwerpunkt des *Clusters* als Funktion der Zeit, ergibt sich die Abbildung 4.1.

4.2.1 Herkömmliche zellulare Automaten

Will man die oben erwähnten herkömmlichen zellularen Automaten anwenden, um die Dynamik in der eindimensionalen Röhre zu reproduzieren, so muß zunächst das System geeignet prepariert werden. Es sollen ganzzahlige Orte, Zeiten und binäre Geschwindigkeiten verwendet werden. Zu diesem Zweck wird die Röhre in n gleich große Zellen der Länge $1/n$ eingeteilt. N Teilchen besetzen N Zellen. Der Rest der Zellen ist leer. Das linke Teilchen besetzt zu Beginn die erste, das heißt äußerst linke Zelle. Alle Teilchen ruhen, bis auf das linke Teilchen. Es hat die Geschwindigkeit $v = +1$ nach rechts. Geschwindigkeiten nach links werden ab jetzt negativ gezählt. Abbildung 4.2 zeigt exemplarisch die Anfangskonfiguration für ein sehr kleines System.

Betrachten wir nun in einem Gedankenexperiment die Zeitentwicklung für ein System ohne Dissipation. Im ersten Zeitschritt bewegt sich das linke Teilchen eine

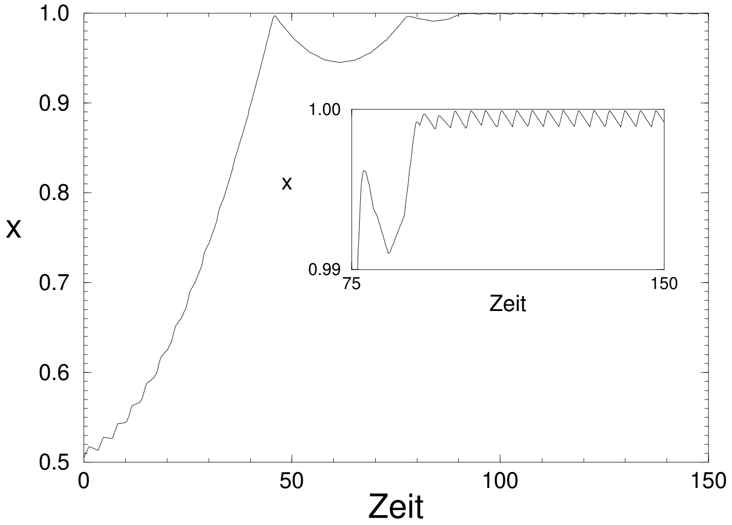

Abbildung 4.1: Schwerpunkt des *Clusters* (x) in einer eindimensionalen Röhre bestimmt mit einer ereignisgesteuerten Molekulardynamik Simulation von $N = 100$ Teilchen analog zu [DLK95]. Das eingesetzte Bild zeigt einen Ausschnitt.

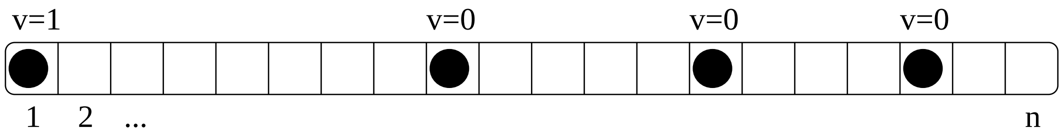

Abbildung 4.2: Exemplarisches System eines zellularen Automaten mit $n = 20$ und $N = 4$ in der Anfangskonfiguration.

Zelle weiter nach rechts. Im nächsten wieder, und so weiter. Trifft das Teilchen auf einen Nachbarn, so findet ein Stoß statt und Energie und Impuls werden ausgetauscht. Im nächsten Zeitschritt bleibt das linke Teilchen liegen und der Nachbar läuft weiter. Alle Positionen ruhender Teilchen bleiben erhalten. Es bewegt sich ein Quasiteilchen mit der Geschwindigkeit $|v| = 1$ periodisch von einer zur anderen Wand durch das System. Dieses Szenario für vollkommen elastische Stöße stimmt für die Molekulardynamiksimulation und die herkömmlichen zellularen Automaten überein.

Führt man nun jedoch Dissipation ein, so wird das Bild für die herkömmlichen zellularen Automaten unphysikalisch. Sie simulieren Dissipation, indem bei einem Stoß mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit die Energie nicht erhalten bleibt, sondern verloren geht. Zu diesem Zweck wird eine Zufallszahl gezogen. Dies bedeutet für eine Simulation, daß sich, solange kein Dissipationsereignis eintritt, die Dynamik nicht von derjenigen ohne Dissipation unterscheidet. Die Teilchen werden nicht als *Cluster* gegen die Wand gedrängt. Da nur binäre Geschwindigkeiten verwendet werden, kann desweiteren ein Dissipationsereignis nur bedeuten, daß beide Teilchen zur Ruhe kommen, wenn sich zuvor eines bewegte und das andere in Ruhe war. Tritt ein Dissipationsereignis ein, so kommt deshalb die gesamte Dynamik schlagartig zum Erliegen. Problematisch ist, daß mit einem solchen Dissipationsereignis die Impulserhaltung verletzt wird. Strenggenommen kann also Dissipation überhaupt nicht simuliert werden, oder man muß argumentieren, daß ein solcher Stoß den Impuls an die Wände abgibt.

Es bleibt also festzuhalten, daß die oben vorgestellten herkömmlichen zellularen Automaten nicht in der Lage sind, die einfache Dynamik in der eindimensionalen Röhre zu reproduzieren. Sie sind nur in zwei Dimensionen in der Lage Energie unter Impulserhaltung zu dissipieren. Der Grund hierfür liegt in der extremen Diskritisierung der Teilchengeschwindigkeiten. Energie kann auf diese Weise nicht langsam, von Stoß zu Stoß dissipiert werden, sondern man spart sozusagen die dissipierte Energie auf, bis sie schlagartig vollständig dissipiert wird. Viele kleine Dissipationsereignisse werden durch ein einziges großes Ereignis simuliert. Dies führt künstlich in die simulierten Systeme sehr große Fluktuationen ein. Kleine Fluktuationen werden vernachlässigt.

Insgesamt darf deshalb bezweifelt werden, daß die herkömmlichen zellularen Automaten in der Lage sind, granulare Materie physikalisch korrekt zu simulieren. Ein deutliches Zeichen für dieses Argument ist der schon erwähnte Fehler im Profil der granularen Temperatur in einem vertikalen Rohr [KK94b]. Granulare Temperatur, also Geschwindigkeitsunterschiede, werden in einem vertikalen Rohr durch Stöße mit der Wand verursacht. Im Inneren des Rohrs haben sich die Geschwindigkeiten der Teilchen durch viele gegenseitige Stöße einander angepasst. Die granulare Temperatur hat dort ein Minimum [Sch96a]. Im herkömmlichen zellularen Automaten besitzt dagegen die granulare Temperatur in der Rohrmitte ein Maximum. Dies ist die Folge des Verlustes der Angleichmöglichkeit der Geschwindigkeiten durch allmähliche Dissipation. Tritt ein Dissipationsereignis im Automaten auf, so bleibt ein Teilchen im Strom der fallenden Teilchen liegen. Auf diese Weise verursacht es einen zusätzlichen Beitrag zur granularen Temperatur. Es handelt sich nun nicht um eine Anpassung, sondern um eine zusätzliche Fluktuation der Geschwindigkeiten.

4.3 Stochastischer Automat mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten

Um zusätzliche Fluktuationen durch Dissipationsereignisse zu vermeiden, ist es notwendig, einen neuen zellularen Automaten zu konstruieren, der kontinuierliche Geschwindigkeiten beinhaltet und deshalb Dissipation exakt behandeln kann. Mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten ist es möglich, in einem Stoß zweier Teilchen nur wenig Energie zu dissipieren. Gegenüber den herkömmlichen Automaten werden so zusätzliche Fluktuationen der Geschwindigkeiten vermieden. Nach einem Stoß ergeben sich die Geschwindigkeiten der Teilchen v_i' vollkommen analog zur Molekulardynamik aus den Gleichungen (4.1).

Für das Problem der eindimensionalen Röhre bietet es sich an, die Röhre so in n Zellen zu unterteilen, daß die Länge einer Zelle dem Durchmesser eines granularen Teilchens entspricht. Eine Zelle kann folglich nur von einem Teilchen besetzt werden. Die Anfangskonfiguration entspricht der Abbildung 4.2 und dem linken Teilchen wird an der linken Wand immer die Geschwindigkeit $v = +1$ erteilt.

In diesem neuen Modell ist die Geschwindigkeit eines Teilchens eine reelle Größe. Sie kann alle Werte aus dem Intervall $[-1 : +1]$ annehmen. Die elementare Zeiteinheit, die das linke Teilchen braucht, um mit der maximalen Geschwindigkeit $v = +1$ nach rechts, die gesamte Röhre zu durchlaufen, wird ebenfalls in n Zeitschritte unterteilt. Auf diese Weise wird der Zeitschritt dt definiert. Ein Teilchen mit der Geschwindigkeit $|v| = 1$ läuft demzufolge in einem Zeitschritt der Länge $dt = 1/n$ genau eine Zelle weiter.

In einem zellularen Automaten kann sich ein Teilchen in einem Zeitschritt immer nur eine ganzzahlige Anzahl von Zellen weiterbewegen. Um Geschwindigkeiten zu berücksichtigen, die kleiner als die maximale Geschwindigkeit $|v| = 1$ sind, ist es deshalb notwendig eine stochastische Komponente in das Modell einzuführen. Dazu wird in jedem Zeitschritt für jedes Teichen eine gleichverteilte Zufallszahl η aus dem Intervall $[0;1[$ gezogen. Das Teilchen hüpft eine Zelle weiter, wenn

$$\eta < |v| \tag{4.2}$$

erfüllt ist. Auf diese Weise wird sich ein Teilchen im Mittel in n Zeitschritten genau $|v|$ Zellen weiterbewegen.

4.3.1 Dynamik des Automaten

Ein entscheidender Faktor für zellulare Automaten ist der Ablauf der Dynamik der Teilchen innerhalb eines Zeitschrittes. Man unterscheidet grundsätzlich drei Arten von Dynamiken, parallele, sequentielle und zufällige. Die Unterscheidung basiert auf der Reihenfolge, in der sich die Teilchen bewegen. Parallel bedeutet, alle Teilchen bewegen sich gleichzeitig. Sequentiell bedeutet, sie bewegen sich nacheinander in einer bestimmten Reihenfolge. Zufällig heißt, daß in jedem Zeitschritt N-mal eines der Teilchen zufällig ausgewählt wird. Da die Bewegungen der granularen Teilchen in der Röhre vollkommen deterministisch sind und alle Teilchen sich gleichzeitig bewegen, ist es sinnvoll für den neuen stochastischen Automaten mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten eine parallele Dynamik zu verwenden. Ein weiterer Hinweis auf die Verwendung einer parallelen Dynamik sind die oftmals in der Literatur beschriebenen Ähnlichkeiten zwischen granularem Fluß in Rohren und Straßenverkehr [WSB96]. Nagel und Schreckenberg ist es erfolgreich gelungen einen zellularen Automaten zur Simulation von Verkehr zu entwickeln [NS92, SSN96]. Dieser Automat verwendet ebenfalls eine parallele Dynamik.

Ein weiterer wichtiger Punkt für die Dynamik des Automaten ist ihr zeitlicher Ablauf. Grundsätzlich läßt sich ein Zeitschritt in zwei verschiedene Teilschritte unterteilen. Ein Teilschritt ist die Neuberechnung der Geschwindigkeiten der Teilchen und der andere Teilschritt die Bewegung der Teilchen. Die Reihenfolge dieser beiden Punkte ist von wesentlicher Bedeutung und ihre jeweiligen Details hängen von dieser Reihenfolge ab.

Es ist möglich, als ersten Teilschritt eine Bewegung der Teilchen entsprechend der obigen stochastischen Hüpfvorschrift auszuführen. Alle Versuche eines Teilchens, eine schon besetzte Zelle zu okupieren, können dann als Stöße interpretiert werden. Ebenso verhält es sich mit zwei Teilchen, die gleichzeitig eine freie Zelle besetzen wollen. In solchen Fällen kann die Bewegung nicht, oder nur von einem Teilchen ausgeführt werden. Um trotzdem die mittlere Geschwindigkeit eines Teilchens zu erhalten, muß die Bewegung zu einem späteren Zeitpunkt nachgeholt werden. Zu diesem Zweck ist es sinnvoll einen ganzzahligen Zähler für jedes Teilchen mitzuführen, der angibt, wieviele Zellen ein Teilchen noch weiterhüpfen muß. Im zweiten Teilschritt der Dynamik sind für die im ersten Teilschritt ermittelten Stöße die neuen Geschwindigkeiten entsprechend der Stoßgleichung (4.1) zu berechnen. Diese Reihenfolge der parallelen Dynamik sei ab hier mit *Regel 1* bezeichnet.

Es besteht als zweite Möglichkeit einer parallelen Dynamik, die Bewegungen und Stoßberechnungen in umgekehrter Reihenfolge zu behandeln. Dies ist ähnlich im Nagel-Schreckenberg-Modell der Fall. Im ersten Teilschritt werden aus den Positionen und Geschwindigkeiten aller Teilchen-Nachbarpaare die Zeiten bis zu einer eventuellen Kollision ermittelt. Alle Kollisionszeiten, die kleiner als die Länge des Zeitschrittes dt sind, bedeuten einen Stoß im momentanen Zeitschritt. Diese Stöße werden in Reihenfolge der kürzesten Kollisionszeiten berechnet. Im zweiten Teilschritt bewegt man alle Teilchen entsprechend der stochastischen Hüpfvorschrift. Ist eine gewollte Bewegung nicht möglich, weil ein Nachbarteilchen diese verhindert, so erhöht man hier ebenfalls einen ganzzahligen Zähler des Teilchens, der besagt, daß das Teilchen im folgenden Zeitschritt weiterhüpfen soll. Diese Reihenfolge der parallelen Dynamik sei ab hier mit *Regel 2* bezeichnet.

Die Parallelität der Dynamik des Automaten läßt sich in jedem Fall nicht perfekt realisieren. Problematisch sind in dieser Hinsicht Stöße mit drei Teilchen. Diese lassen sich algorithmisch in einem zellularen Automat nur als Folge von zwei aufeinanderfolgenden Zweiteilchenstößen umsetzen. Die algorithmischen Vorteile eines zellularen Automaten basieren zum größten Teil auf der Tatsache, daß nur benachbarte Zellen wechselwirken. Zur parallelen Behandlung von Dreiteilchenstößen müßten aber übernächste Nachbarn berücksichtigt werden.

Physikalisch gesehen ist die Behandlung eines Dreiteilchenstoßes als Folge zweier Zweiteilchenstöße eine realistische Vorgehensweise. Die Wahrscheinlichkeit eines zeitgleichen Stoßes dreier Teilchen bei beliebigen kontinuierlichen Relativgeschwindigkeiten ist klein, da während der nur kurzen Kollisionsdauer zweier Teilchen, das dritte Teilchen hinzustoßen muß.

4.3.2 Simulationsergebnisse

Verwirklicht man den hier beschriebenen stochastischen zellularen Automaten mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten mit beiden zuvor geschilderten Regeln und führt eine Simulation der granularen Teilchen in der eindimensionalen Röhre durch, so erhält man als Ergebnis die Abbildung 4.3. Es werden jeweils die Zeitentwicklungen einer ereignisgesteuerten Molekulardynamik mit ausgedehnten Teilchen und des zellularen Automaten mit beiden verschiedenen Regeln dargestellt. In allen Simulationen war der Teilchendurchmesser als ein Zehntausendstel der Rohrlänge festgesetzt worden.

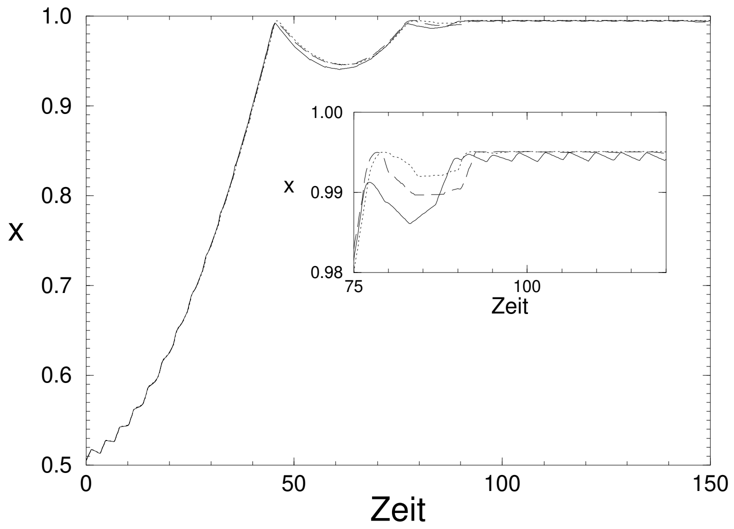

Abbildung 4.3: Schwerpunkt des *Clusters* (x) in der Simulation von $N = 100$ ausgedehnten Teilchen in der reibungsfreien Röhre für Molekulardynamik (durchgezogene Kurve) und für den neuen stochastischen zellularen Automaten mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten mit $n = 10000$ für *Regel 2* (gestrichelte Kurve) und *Regel 1* (gepunktete Kurve). Das eingesetzte Bild zeigt einen Ausschnitt.

Man erkennt zunächst, daß sich das Ergebnis der Molekulardynamik nicht wesentlich gegenüber der Simulation von Punktteilchen (Abbildung 4.1) geändert hat. Der einzige bemerkenswerte Unterschied ist der Grenzwert des Schwerpunktes x. Dieser ist nun nicht mehr die rechte Wand ($x = 1$), sondern er wurde um die Hälfte der Länge des *Clusters* bei größter Kompaktivität verkürzt [$x = 1 - (N-1)/(2n) = 0.99505$].

Vergleicht man die Kurven für die Molekulardynamik und den zellularen Automaten, so fällt sofort die hervoragende Übereinstimmung auf. Alle Kurven sind praktisch identisch bis zum ersten Maximum. Erst nach diesem Maximum bleibt die Entwicklung im zellularen Automaten leicht hinter der der Molekulardynamik zurück. Ansonsten werden ebenso zwei Überschwinger produziert, bis schließlich ein stationärer Zustand erreicht wird. Der stationäre Zustand ist in beiden Modellen unterschiedlich. Die Molekulardynamik zeigt eine Oszillation mit konstanter Periode. Der zellulare Automat einen konstanten Wert des Schwerpunktes.

Der Grund für die Unterschiede in beiden Modellen liegt in ihrem Verhalten bei sehr großen Dichten begründet. Wenn das *Cluster* nahe der Wand stark verdichtet ist, so kommt es in der ereignisgesteuerten Molekulardynamik zum bereits geschilderten Zenon-Effekt [Sch96a]. Die ereignisgesteuerte Molekulardynamik ist nicht in der Lage multiple langanhaltende Kontakte zu simulieren. Stattdessen kommt es in äußerst kurzen Zeitabständen zu einer großen Anzahl von Stößen in denen sehr viel Energie dissipiert wird. Die Teilchen des *Clusters* behalten aber immer eine Relativbewegung, so daß sie und ihr Schwerpunkt niemals eine Ruhelage einnehmen.

Im neuen zellularen Automat verhalten sich die Teilchen in Richtung des anderen Extrems. Ist das *Cluster* sehr kompakt, so ist die relativ grobe Diskretisierung des Ortes nicht mehr in der Lage, kleine Relativbewegungen aufzulösen. Erwünschte Bewegungen von einer Zelle zur anderen werden immer wieder von Nachbarteilchen verhindert. Sie müssen später erfolgen. Aus diesem Grund bleiben die Kurven des zellularen Automaten nach der ersten Verdichtung zunächst hinter der Kurve der Molekulardynamik zurück. Im weiteren Verlauf der Simulation wird das *Cluster* schließlich so dicht, daß es kompakt an der Wand liegt und eine Oszillation im stationären Zustand nicht zu sehen ist. Eine Expansion des kompakten *Clusters* wird in diesem Zustand jeweils so lange unterdrückt, bis das schnelle linke Teilchen wieder von der linken Wand zurückkommt und einen erneuten Impuls in Richtung der rechten Wand erteilt. Man kann dieses Verhalten als eine vergrößerte Trägheit des zellularen Automaten verstehen, die realen Systemen nicht zu eigen ist. Ein reales kompaktes *Cluster* mit langanhaltenden Kontakten der Teilchen überträgt einen eintreffenden Impuls mit einer Geschwindigkeit in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit vom ersten bis zum letzten Teilchen. Im zellularen Automaten kann dagegen der Impuls laut Definition in einem Zeitschritt nur jeweils ein Teilchen weitergegeben werden. Mit *Regel 1* ist diese Impulsübertragung sogar noch langsamer, da das Teilchen, das den Impuls trägt, nur entsprechend einer Zufallszahl bewegt wird. Erst eine gewünschte Bewegung bedeutet in *Regel 1* im Gegensatz zu *Regel 2* eine Impulsübertragung. Aus diesem Grund zeigt sich die Kurve des Schwerpunktes für *Regel 1* noch träger als die für *Regel 2*.

An dieser Stelle muß daran erinnert werden, daß die Molekulardynamiksimulation ein idealisiertes System repräsentiert. Das Verhalten in einem realen granularen System ist nicht eindeutig. Die Physik im Grenzbereich des Übergangs zwischen Zweiteilchenstößen, auf die eine Separation der Teilchen erfolgt, und Stößen, nach denen die Teilchen aneinander haften, ist noch vollständig unklar (siehe Kapitel 1). In diesem Grenzbereich spielen sehr viele experimentell schwer kontrollierbare Phänomene wie Adhäsion, Kohäsion oder Schmierung eine Rolle. Verdichtete reale Teilchen werden sich im allgemeinen wahrscheinlich so verhalten, daß zunächst eine Folge von Stößen ausgeführt wird, bis sie schließlich aneinander haften. Der stationäre Zustand einer realen eindimensionalen Röhre wird deshalb möglicherweise so aussehen, daß das *Cluster* in kompakte kleinere partielle *Cluster* zerfällt und diese miteinander stoßen. Ob daraus eine periodische Oszillation des Schwerpunktes entstehen kann, ist unklar.

Festzuhalten bleibt deshalb, daß die Molekulardynamiksimulation und der stochastische zellulare Automat mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten für verdünnte Systeme das gleiche Verhalten zeigen und für verdichtete Systeme zwei entgegengesetzte Grenzfälle des realen physikalischen Verhaltens simulieren. Die Schwerpunktskurve eines realen Systems wird irgendwo zwischen den Kurven in Abbildung 4.3 zu finden sein. Von diesem Gesichtspunkt aus betrachtet, ist der stationäre Zustand im zellularen Automaten genauso physikalisch wie der der Molekulardynamik, oder präziser, zumindest eine genauso gute Näherung des realen Verhaltens. Zusammenfassend darf gesagt werden, daß das neue Modell des stochastischen zellularen Automaten mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten die Physik eines Systems von granularen Teilchen sehr gut simulieren kann. Die herkömmlichen zellularen Automaten sind dazu nicht in der Lage.

An dieser Stelle möchte ich auf die, sich im Fachbereich Mathematik in Arbeit befindende, Diplomarbeit von Daniel Volk hinweisen. In ihr werden die Untersuchungen dieses neuen Modells weitergeführt. Unter anderem wird man dort zum Beispiel die Auswirkungen einer veränderten Dynamik des Automaten oder die Folgen einer Diskretisierung der Geschwindigkeiten studieren können. Letztere führt selbst für sehr viele mögliche Geschwindigkeiten unweigerlich auf eine mangelhafte Dissipation im Bereich kleiner Geschwindigkeiten.

4.3.3 Verbesserungen und Erweiterungen

Die Güte der Simulation des neuen zellularen Automaten ist stark mit der Diskretisierung verknüpft. Je grober die Diskretisierung von Zeit und Raum ist, desto ungenauer wird das Ergebnis. Verwendet man in der eindimensionalen Röhre zum Beispiel eine zehn mal grobere Diskretisierung mit zehn mal größeren Teilchen, so ist die Übereinstimmung zwischen Molekulardynamik und zellularem Automat schlechter. Das heißt, die Kurven liegen nicht mehr so gut übereinander wie in Abbildung 4.3, zeigen qualitativ aber immer noch das gleiche Verhalten.

Es liegt natürlich nahe, die Diskretisierung des Ortsraumes in der Größe der Teilchen zu wählen. Trotzdem wird prinzipiell eine feinere Diskretisierung zu genaueren Ergebnissen führen. Gleichzeitig bedeutet eine feinere Diskretisierung aber ebenfalls eine längere Rechenzeit. Beide Größen sind direkt proportional zueinander. Eine Halbierung der Zellenlänge bewirkt eine Verdoppelung der Rechenzeit, da ein Teilchen genau doppelt so viele Zeitschritte durchlaufen muß, um die gleiche Strecke zu absolvieren. Um ein möglichst genaues Ergebnis zu erhalten, sollte man die nötige Rechenzeit für eine Simulation abschätzen und anschließend eine möglichst kleine Diskretisierung wählen.

Die Wahl der Zellengröße entsprechend der Teilchengröße stellt für die Diskretisierung nur eine obere Schranke dar. Größer als ein Teilchendurchmesser darf eine Zelle nicht sein, weil man die Teilchen dicht packen können soll. Eine grobere Diskritisierung mit mehreren Teilchen pro Zelle ist unbrauchbar, da man in diesem Fall die Zahl der Teilchen in den Zellen variabel halten muß. Außerdem hätte die Wechselwirkung der Teilchen innerhalb der Zelle auf irgendeine unklare Weise Berücksichtigung zu finden. Eine kleinere Zellengröße als die Teilchengröße ist dagegen denkbar. Man kann die Zellengröße so wählen, daß ein Teilchen $(1, 2, 3, \ldots l \ll n)$ Zellen einnimmt. In einem Zeitschritt kann dann ein Teilchen nur einen Bruchteil seines Durchmessers zurücklegen.

Ein weiterer Vorteil einer solchen feineren Diskretisierung ist, neben der erhöhten Genauigkeit, die Möglichkeit zur Simulation von polydispersen Systemen. Zu diesen Zweck kann man Teilchen definieren, die eine unterschiedliche Anzahl von Zellen einnehmen. Da unterschiedlich große Teilchen auch unterschiedliche Massen haben, wäre dies zusätzlich in der Stoßgleichung (4.1) zu berücksichtigen.

4.3.3.1 Zwei Dimensionen

Eine Erweiterung des Modells auf zwei Dimensionen ist durchführbar. Allerdings gibt es dabei einige Punkte zu beachten. Zunächst einmal sollte ein Dreiecksgitter verwendet werden, da Scheiben in der dichtesten Packung in dieser Form angeordnet sind. Die Teilchen befinden sich dann auf den Knoten des Gitters und haben einen Durchmesser, der dem Gitterabstand entspricht. Ihre Ausdehnung führt dazu, daß die Stöße in der Regel nicht mehr gerade sondern schief sind. Außerdem wird die Berechnungen der Kollisionszeiten für *Regel 2* und die Definition eines Stoßes in *Regel 1* komplizierter. Ersteres ist mit bekannten Methoden für ereignisgesteuerte Molekulardynamiksimulationen zu verwirklichen. Die Verwendung von *Regel 1* wird einen deutlichen Geschwindigkeitsvorteil erbringen, da eine komplizierte Berechnung aller Kollisionszeiten und deren Sortierung entfällt.

Beim Auftreten von schiefen Stößen stellt sich die Frage nach dem Rotationsfreiheitsgrad der Teilchen. Man hat zwei Möglichkeiten. Entweder man vernachlässigt wie bei anderen Methoden die Rotation, was wiederum zum Verlust wichtiger Effekte führen kann, oder man führt die Rotationsgeschwindigkeit als eine zusätzliche Variable der Teilchen ein. In diesem Fall muß man mögliche Frustrationen in dichten Packungen berücksichtigen.

Schiefe Stöße und Dissipation führen dazu, daß die Geschwindigkeitsvektoren der Teilchen nach einem Stoß nicht mehr in eine der drei Raumrichtungen des Gitters zeigen. Die Abbildung 4.4a) verdeutlicht dieses Problem. Um die Raum-

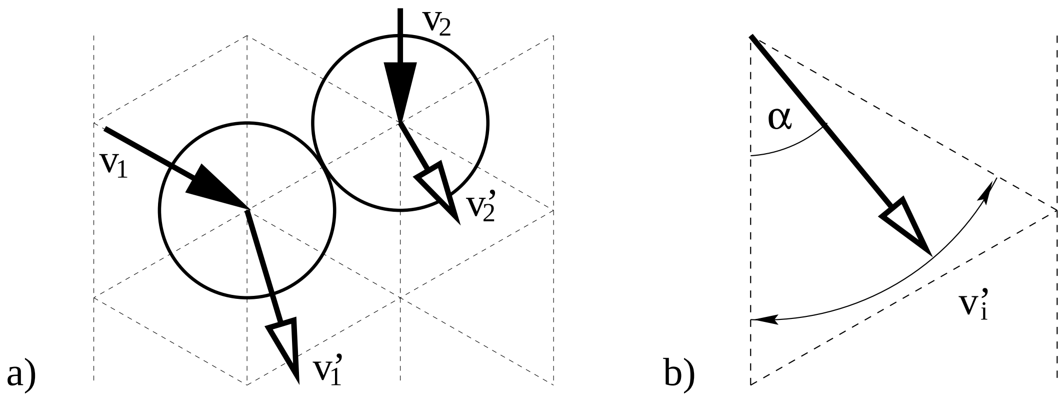

Abbildung 4.4: a) Zwei Teilchen in zwei Dimensionen stoßen schief. Die Pfeile symbolisieren die Geschwindigkeitsvektoren. b) Ein Geschwindigkeitsvektor nach dem Stoß liegt außerhalb der Raumrichtungen des Gitters.

richtungen des Gitters für die Bewegungen der Teilchen beizubehalten, ist es notwendig, eine weitere stochastische Komponente in das Modell einzuführen: Der Geschwindigkeitsvektor nach dem Stoß befindet sich um einen Winkel α gegenüber einer der beiden einschließenden Gitterrichtungen gedreht [Abbildung 4.4b)]. Man klappt nun nach jedem Stoß den Geschwindigkeitsvektor mit einer Wahrscheinlichkeit w_α auf diese Gitterrichtung und mit der Wahrscheinlichkeit $1 - w_\alpha$ auf die andere benachbarte Gitterrichtung. Die Wahrscheinlichkeit w_α ergibt sich zu:

$$w_\alpha = \frac{\pi/3 - \alpha}{\pi/3} \qquad . \tag{4.3}$$

Im Mittel bleiben so die Bewegungsrichtungen der Teilchen erhalten.

Abschließend kann festgestellt werden, daß unter Berücksichtigung der hier genannten Punkte zur Erweiterung des Modells eine effektive Simulation von zweidimensionalen Systemen durchzuführen sein wird. Insbesondere der Zenon-Effekt der ereignisgesteuerten Molekulardynamik kann vermieden werden, ohne auf die weitaus langsamere zeitschrittgetriebene Molekulardynamik zurückzugreifen. Es wird insbesondere möglich sein, Systeme mit Zonen unterschiedlichster Dichte schnell und effektiv mit allen Vorteilen eines zellularen Automatens zu simulieren.

Kapitel 5

Granularer Fluß mit interstitiellem Fluid

Granularer Fluß in Röhren ist ein häufig vorkommendes Problem in der industriellen Verarbeitung von granularer Materie. Eine Vielzahl von Granulaten, von feinstem Mehl bis zum gröbsten Erz wird nicht mit Fließbändern sondern durch Rohre transportiert. Das interstitielle Fluid, das das Granulat umgibt, kann dabei eine wichtige Rolle spielen. Stark kohäsive Pulver lassen sich zum Beispiel oft nur dadurch transportieren, daß man sie in einem starken Luftstrom verwirbelt. Diese Technik nennt man pneumatische Förderung [Kon86]. In anderen Fällen können granulare Bestandteile unerwünschte Beimengungen eines Fluids sein. Sie wirken sich auf das Fließverhalten von beispielsweise Abwässern aus. Es kommt zu Pfropfenbildungen oder Sedimentationen, die in der Regel unerwünscht sind.

Ein Spezialfall granularen Flusses ist der vertikale Fall von nicht kohäsiver granularer Materie durch ein Rohr unter Gravitationseinfluß. Dieses Problem wurde bereits mit Hilfe verschiedener Modelle untersucht [Bab92, SA92, Lee94, Pös94, PH94, Sch96a]. Es zeigten sich verschiedene Phänomene, die ebenfalls in Experimenten beobachtet wurden [NL80, RHH95].

In allen theoretischen und experimentellen Untersuchungen trat Propfenbildung auf. Dieses Phänomen beruht auf der dissipationsbedingten strukturellen Instabilität jeder Dynamik granularer Materie. Die Entstehung und Eigenschaften der Propfen beim Rohrfluß hängen dabei nicht nur von den Materialeigenschaften sondern ebenfalls weitgehend von der Geometrie und der Größe des Massenflußes ab. In ausreichend langen Rohren entstehen Dichtewellen, das heißt, daß sich Propfen mit hoher Dichte und verdünnte Regionen abwechseln. Die Propfen sind dabei stark korreliert, was zu sehr großen charakteristischen Längenskalen führen kann. Diese sind ein entscheidendes Problem bei der Verwendung von periodischen Randbedingungen in Simulationen.

In breiteren Rohren kann beobachtet werden, daß gegenüber der Propfenbildung ein anderes Phänomen dominiert, der sogenannte *Plug Flow*. Dabei wird beobachtet, daß sich durch Wandstöße ein Bereich mit großen Relativgeschwindigkeiten und niedriger Dichte neben den Wänden bildet. Zur Rohrmitte hin verdichtet sich das System durch dissipative Kühlung. Insgesamt führt das zu einem Pflock (englisch: *Plug*) in der Mitte, dessen granulare Temperatur nahezu Null ist, und der mit sehr großer Geschwindigkeit fällt [Sch96a].

Die bisherigen Simulationen, die die obigen Phänomene reproduzieren konnten, haben alle den Einfluß des interstitiellen Fluids vernachläßigt, also granulare Materie in einem evakuiertem Rohr beschrieben. Experimentelle Untersuchungen von H. Herrmann *et al.* [RHH95] zeigen aber, daß der Einfluß von Luft durchaus eine Rolle spielt. Ähnliches ist in einer Sanduhr zu beobachten, die im Besitz von Prof. Dietrich Wolf ist. Die beiden Kammern dieser Sanduhr sind mit einem zusätzlichen Rohr verbunden. Durch dieses Rohr kann Luft fliessen, um einen Druckausgleich zwischen den beiden Kammern herbeizuführen. Es läßt sich mit einem Hahn verschliessen. Im geöffneten Zustand ist ein ruhiger gleichmäßiger Fluß des Sandes aus der oberen in die untere Kammer zu beobachten. Schließt man den Hahn, so wird der Fluß des Sandes unruhig und langsamer. Er beginnt zu „flackern". Dies ist offensichtlich auf den Luftstrom zurückzuführen, der dem Sand von unten nach oben entgegenfließt. In der Literatur wurde dieses Phänomen ebenfalls schon beschrieben [WMH+93, MSHV95]. Generell gilt, daß sich der Einfluß des Fluids verstärkt, je größer die Viskosität ist.

5.1 Ergebnisse der Hydrodynamik

Von Seiten der Hydrodynamik sind im wesentlichen Probleme mit statischen Randbedingungen untersucht worden, also der Fluidfluß in einer bestimmten Geometrie, zum Beispiel um einen starren Zylinder. Allgemeinen kann für die zu diskutierenden Probleme angenommen werden, daß das Fluid inkompressibel ist und die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\left(\rho_f \vec{v}_f\right) = 0 \qquad \text{sich somit auf} \qquad \vec{\nabla}\vec{v}_f = 0 \tag{5.1}$$

reduziert. Hierbei ist $\vec{v}_f$ das Geschwindigkeitfeld und ρ_f die Dichte des Fluids. Der Fluidfluß wird durch die Navier-Stokes-Gleichung

$$\frac{\partial \vec{v}_f}{\partial t} + \left(\vec{v}_f \vec{\nabla}\right) \vec{v}_f \; = \; -\frac{1}{\rho_f}\vec{\nabla} p + \frac{\eta}{\rho_f}\nabla^2 \vec{v}_f \tag{5.2}$$

beschrieben. Dabei ist p der Druck. Die Größen Dichte ρ_f, Viskosität η, charakteristische Längenausdehnung d und charakteristische Geschwindigkeit v gehen in die Reynoldszahl $R_e = v d \rho_f / \eta$ ein, die die jeweilige Strömung charakterisiert.

Die Navier-Stokes-Gleichung kann analytisch nur in wenigen Spezialfällen gelöst werden. Deshalb werden numerische Verfahren verwendet, die entweder die Differentialgleichung bei gegebenen Randbedingungen löst [PTVF92] oder mit Hilfe von Zellular-Automat-Modellen das Problem als Gittergas behandeln [FHP86, QdL92]. Die Navier-Stokes-Gleichung (5.2) ist prinzipiell nur von der Reynoldszahl und den Randbedingungen abhängig.

Fließt granulare Materie ($d \approx 1\,mm\,;\; v \approx 1\,m/sec$) durch ein luftgefülltes Rohr ($\rho_f = 1.3\,kg/m^3\,;\, \eta = 0.0181\,kg/(m\cdot sec)$), so erhält man eine Reynoldszahl von $R_e \approx 0.072$. Für kleine Reynoldszahlen $R_e < 1$ kann die Trägheit des Fluids vernachlässigt werden und das Problem läßt sich durch die Stokes Gleichung

$$\frac{1}{\eta}\vec{\nabla} p \; = \; \nabla^2 \vec{v}_f \tag{5.3}$$

beschreiben. Man spricht von einem laminaren Fluß. Die Lösung dieser Gleichung gestaltet sich einfacher als die der Navier-Stokes-Gleichung, ist aber schon für kompliziertere Probleme, mit mehreren kugelförmigen Teilchen nicht mehr möglich. Für den einfachen Fall einer einzelnen fallenden Kugel in einem unbegrenzten Fluid ergibt sich die Kraft auf die Kugel als

$$\vec{F}_0 \; = \; -6\pi\eta r \vec{v}_p \qquad , \tag{5.4}$$

wobei r und $\vec{v}_p$ Radius und Geschwindigkeit der Kugel sind. Die Gleichung beschreibt die sogenannte Stokesche Reibung. Experimente haben dieses Ergebnis für Reynoldszahlen $R_e \leq 1$ bestätigt.

Kommen weitere Kugeln oder Begrenzungsflächen ins Spiel, so ergeben sich verschiedene problemabhängige Korrekturen zu $\vec{F}_0$. Diese Korrekturen hängen im wesentlichen von den geometrischen Faktoren wie Abständen und Längenausdehnungen ab. Die Erkenntnisse für verschiedenste Geometrien sind von J.A.C. Humphrey und H. Murata [HM92], J. Happel und H. Brenner [HB83] und S.L. Soo [Soo67] zusammengefaßt. Die qualitativen Merkmale entsprechender Systeme werden im Folgenden aufgelistet:

1. Zwei oder mehrere gleich große Kugeln, die gleichzeitig durch ein unbegrenztes Fluid fallen, erfahren eine Kraft $\vec{F} > \vec{F}_0$, daß heißt, sie fallen langsamer als ein einzelnes. Die Kugeln rotieren, wenn sie nicht alle senkrecht hintereinander fallen. Es existiert in dem Sinne keine expliziete hydrodynamische Wechselwirkung zwischen den Kugeln, als daß alle relativen Positionen erhalten bleiben und alle Kugeln senkrecht fallen. Allgemein gilt, daß solche hydrodynamische Wechselwirkungen grundsätzlich erst durch Trägheitseffekte des Fluids bei größeren Reynoldszahlen existieren.

2. Fällt eine einzelne Kugel durch ein zylindrisches Rohr wie in Abbildung (5.1), so ist die Kraft $\vec{F} > \vec{F}_0$. Außerhalb der Rohrmitte rotiert die Kugel. Die Rotations- und Fallgeschwindigkeit sind unabhängig voneinander. Die Fallgeschwindigkeit hängt von der Exzentrizität e der Kugel ab. Die Exzentrizität gibt an, wie weit die Kugel außerhalb der Rohrmitte fällt und ist definiert als
$$e = \frac{b}{R-r} \quad , \qquad 0 \leq e \leq 1 \qquad . \tag{5.5}$$
Für Kugeln nahe der Rohrwand ($e \approx 1$) ergibt sich eine größere Fallgeschwindigkeit gegenüber Kugeln in der Rohrmitte ($e = 0$). Wechselwirkungen mit der Wand werden nicht beobachetet, so daß auch diese Kugel senkrecht fällt. Die Exzentrizität bleibt also konstant. Die Rotation hat eine entgegengesetzte Richtung zu der des Rollens mit Kontakt an der Wand. Bei welchem Abstand zur Wand sich diese Rotationsrichtung umkehrt ist ein interessantes ungeklärtes Problem [HM92].

3. Fallen mehrere gleich große Kugeln in einem Rohr, so wird das Verhalten komplizierter. Analog zu unbegrenzten Fluiden fallen die Kugeln langsamer als eine einzelne Kugel, wenn sie sich senkrecht hintereinander bewegen. Besitzen die Kugeln aber verschiedene Exzentrizitäten, so fallen sie unterschiedlich schnell. Bei laminarer Strömung kann, wie gesagt, keine hydrodynamische Wechselwirkung existieren. Trotzdem scheinen die Kugeln sich gegenseitig zu beeinflußen. Es wurde zum Beispiel von Humphrey und Murata für zwei Kugeln beobachtet, daß sie sich spiralförmig um die Rohrmitte abwärts bewegten, wobei die untere Kugel manchmal gebremst wurde, so daß sie von der anderen Kugel überholt wurde [HM92].

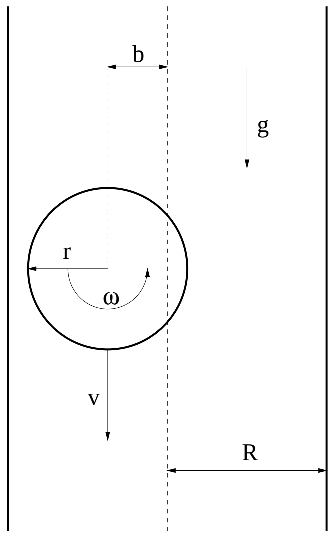

Abbildung 5.1: Definition der Geometrie für eine fallende Kugel in einem Rohr mit viskosem Fluid.

5.2 Bisherige Ansätze

Die Suche nach Lösungen der Navier-Stokes-Gleichung ist ein weites Feld, das ausführlich von Hydrodynamikern bearbeitet wird. In der Regel handelt es sich dabei um Probleme mit festen Randbedingungen. Man denke in diesem Zusammenhang an technische Anwendungen, wie Luftwiderstandsoptimierungen oder Profilberechnungen von Schiffsrümpfen. Zu solchen Zwecken werden im wesentlichen zwei verschiedene Ansätze zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung bei kleinen Reynoldszahlen verfolgt. Das ältere Verfahren ist die Methode der artifiziellen Kompressibilität. Hierbei werden herkömliche Algorithmen zur Lösung von Differentialgleichungen genutzt, um mit Hilfe einer künstlich eingeführten Kompressibilität, eine Entwicklung des Systems in einen stationären Zustand zu simulieren [Cho67]. Die neuere Methode sind zellulare Automaten, die in Kapitel 4 behandelt wurden [FHP86, QdL92].

Granularer Fluß durch ein fluidgefülltes Rohr ist, vom hydrodynamischen Standpunkt aus gesehen, nicht nur ein Problem mit variablen Randbedingungen (Ränder der sich bewegenden Teilchen), sondern es handelt sich zusätzlich um ein rückgekoppeltes Problem. Die hydrodynamischen Kräfte verändern die Bewegung der Teilchen und damit ihre eigenen Randbedingungen.

Die bisherigen Ansätze für Modelle, die sowohl den Fluß der granularen Materie als auch den des umgebenden Fluids in einem Vielteilchensystem berücksichtigen, haben in der Regel versucht, die hydrodynamischen Gleichungen für das Fluid zu lösen, und das Ergebnis an eine Beschreibung der Teilchenbewegung gekoppelt. Eine kurze Zusammenfassung und Beschreibung der verschiedenen Verfahren mit Referenzen findet sich bei S. Schwarzer [Sch95]. In dieser Arbeit schlägt er ein Modell zur Lösung dieses komplexen Problems vor und zeigt Ergebnisse aus Simulationen zur Sedimentation von Teilchen. Sein Modell verwendet für die Bewegung der Teilchen eine zeitschrittgetriebene Molekulardynamik, die in Kapitel 3 vorgestellt wurde, und der Fluß des Fluids wird in jedem Zeitschritt durch ein numerisches Verfahren zur Lösung der differentiellen Navier-Stokes-Gleichung auf einem Quadratgitter berechnet. Dieses Verfahren verwendet neben den üblichen Feldern für die Geschwindigkeit und den Druck des Fluids jeweils ein weiteres Feld für den Volumenbruchteil, den das Fluid in einer Gitterzelle einnimmt, und für die rückwirkende Kraft der Teilchen auf das Fluid. Nach eigener Aussage benötigt der von S. Schwarzer entwickelte Algorithmus gegenüber einer herkömmlichen zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik ohne Fluid eine 20-mal längere Rechenzeit.

Ein weiterer Ansatz für Simulationen von Sand-Fluid-Gemischen stammt von A.J.C. Ladd [Lad93, Lad94a, Lad94b, Lad95]. Er verwendet ebenfalls für die Teilchenbewegung eine herkömmliche zeitschrittgetriebene Molekulardynamik. Die Strömung des Fluids berechnet er allerdings mit dem anderen üblichen Modell für Fluide, dem zellularen Automaten.

5.3 Kontinuitätsmodell

Als Erklärung für das im Abschnitt 5.1 beschriebene Verhalten der in einem Rohr fallenden Kugeln bietet sich folgendes Argument an. Bewegt sich ein Teilchen durch ein Fluid, so ist diese Bewegung und damit ebenfalls die Geschwindigkeit des Teilchens immer relativ zum Fluid gegeben. Eine eigenständige Bewegung des Fluids wird sich deshalb unmittelbar auf das Teilchen auswirken. Ein anschauliches Bild ist ein Flugzeug, daß sich relativ zur Luft bewegt und nicht zum Erdboden. Fliegt es mit dem Wind, so wird es sein Ziel schneller erreichen als gegen den Wind. Mit diesem Argument kann man verstehen, warum die Rohrwände offensichtlich eine entscheidende Rolle für das Verhalten der Kugeln spielen. Ohne Rohrwände befindet sich das Fluid in Ruhe. Begrenzt man aber das System, so induziert der Fluß der Kugeln einen entgegengesetzten Fluß des Fluids im Rohr. Da die Bewegung des Fluids im Rohr nicht homogen ist, läßt sich vielleicht erklären, warum trotz laminaren Flusses eine gegenseitige Beeinflussung zwischen Kugeln beobachtet werden kann, oder unterschiedliche Fallgeschwindigkeiten für verschiedene Exzentrizitäten existieren.

Die Tatsache, daß die Bewegung von Teilchen immer relativ zum umgebenen Fluid erfolgt, und daß die Reynoldszahl für die beschriebenen Probleme kleiner als Eins ist, kann unmittelbar für die Erstellung eines neuen Simulationsmodells genutzt werden. Dieses neue Modell sei Kontinuitätsmodell genannt. Die Herkunft des Namens wird im weiteren Verlauf erläutert.

Ausgangspunkt des Modells ist eine zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik der Teilchen. Die Berücksichtigung des Einflusses des Fluids auf die Dynamik der Teilchen erfolgt in Form eines zusätzlichen Terms für die auf die Teilchen wirkende Kraft, die während der Integration der Bewegungsgleichungen (3.1) berücksichtigt werden muß. Dieser Term $\vec{F}_p$ basiert aufgrund der kleinen Reynoldszahl nur auf der Stokeschen Reibung mit dem Fluid und berücksichtigt die Relativgeschwindigkeit zwischen Kugel und Strömung des Fluids. Es ergibt sich analog zu Gleichung (5.4) der Ausdruck:

$$\vec{F}_p = -6\pi\eta r \left(\vec{v}_p - \bar{\vec{v}}_f\right) \qquad . \tag{5.6}$$

Hierbei sind $\vec{v}_p$ und $\bar{\vec{v}}_f$ die Geschwindigkeit der Kugel und des Fluids relativ zur ruhenden Wand des Rohres. In Wahrheit ist die Geschwindigkeit des Fluids um die Kugel herum keine konstante Größe. Es existiert vielmehr zwischen jeder Kugel und ihren Nachbarn, beziehungsweise den Wänden ein Strömungsprofil, ähnlich dem des Hagen-Poiseuille-Flusses durch ein Rohr. Ziel des Kontinuitätsmodells ist es, eine geeignete Nährung für $\bar{\vec{v}}_f$ zu finden, das den Mittelwert der gesamten Strömung um eine Kugel darstellt.

In einer weiteren Näherung zur Lösung des Problems sei angenommen, daß es sich um ein quasi-zweidimensionales System handelt: Alle Kugeln bewegen sich innerhalb des zylindrischen Rohres in einer senkrechten Ebene. Innerhalb dieser Ebene gibt es verschiedene Strömungsprofile zwischen Kugeln und Wänden. Es läßt sich für jedes dieser Strömungsprofile eine mittlere Geschwindigkeit $\vec{v}_j$ angeben. Die Geschwindigkeit der gesamten Strömung $\bar{\vec{v}}_f$ um eine Kugel herum ergibt sich als Mittelwert aller mittleren Geschwindigkeiten der Strömungsprofile zwischen der Kugel und ihren nächsten Nachbarn (Anzahl:N_{nN}, Index j):

$$\bar{\vec{v}}_f = \frac{1}{N_{nN}} \sum_{j=1}^{N_{nN}} \vec{v}_j \qquad . \tag{5.7}$$

Hierbei sind die nächsten Nachbarn entweder andere Teilchen oder die Wände des Rohres. Kennt man die Strömungsverhältnisse zwischen allen nächsten Nachbarn, kann man die Strömungen um jedes Teilchen mit Gleichung (5.7) berechnen und bekommt über Gleichung (5.6) die Kraft, die das Fluid auf das Teilchen ausübt.

Betrachtet man das Rohr-Kugeln-Fluid System als abgeschlossen, so ist anschaulich klar, daß durch den Fluß der Kugeln $\vec{I}_p$ in Fallrichtung ein gleich großer Fluß des Fluids $\vec{I}_f$ in entgegengesetzter Richtung entsteht:

$$-\vec{I}_p = -\rho_p \pi R^2 \vec{V}_p = \vec{I}_f = \pi R^2 \vec{V}_f \quad . \tag{5.8}$$

Der Fluß der Kugeln ist das Produkt aus der mittleren Geschwindigkeit aller Kugeln $\vec{V}_p$, deren Volumenbruchteil im Rohr ρ_p und der Querschnittsfläche πR^2 des Rohres. Für den Fluß des Fluids gilt das Hagen-Poiseuillesche-Gesetz ($\vec{I}_f = \pi R^2 \vec{V}_f$) mit der mittleren Geschwindigkeit für den Gesamtfluß $\vec{V}_f$.

Das Fluid fließt zwischen den Kugeln hindurch und der Gesamtfluß $\vec{I}_f$ teilt sich in verschieden Teilflüsse $\vec{i}_j$ zwischen nächsten Nachbarn auf. Da sowohl Kugeln als auch Fluid inkompressibel sind, ist der Gesamtfluß $\vec{I}_f$ in jedem Zeitschritt der Simulation, d.h in Abhängigkeit von $\vec{V}_p$, eine Erhaltungsgröße. Es ist sinnvoll für die Ermittlung der partiellen Flüsse $\vec{i}_j$ des Fluids und deren partiellen Geschwindigkeiten $\vec{v}_j$ anzunehmen, daß sich das Fluid in idealisierter Weise auf einem Voronoi-Gitter bewegt. Die Aufstellung des Voronoi-Gitters gibt die exakte Kenntnis über die Nachbarschaftsverhältnisse und den Verlauf der partielle Flüsse. Um eine abschließende Ermittlung der Kräft, die auf die Teilchen wirken, durchzuführen, werden die partiellen Füsse und Geschwindigkeiten in dem ermittelten Nachbarschaftsnetzwerk in Analogie zu Stromflüssen in einem elektrischen Netz mit den Kirchhoffschen-Gesetzen berechnet. Die so berechneten partiellen Geschwindigkeiten werden mit Gleichung (5.7) zu den Geschwindigkeiten um die Kugeln ($\bar{\vec{v}}_f$) gemittelt, woraus sich wiederum durch Gleichung (5.6) die Kräfte des Fluids auf die Teilchen ergeben.

5.3.1 Voronoi-Diagramm

Das Voronoi-Gitter, beziehungsweise -Diagramm ist eine geometrische Aufteilung des Raumes in Zellen. Eine hervoragende Darstellung des Konzepts und einiger Anwendungen des Voronoi-Diagramms findet sich in einem Buch von A. Okabe, B. Boots und K. Sugihara [OBS92]. Analog zu ihrer Darstellung und unter Berücksichtigung der quasi-zweidimensionalen Näherung des Problems sei der Raum im Folgenden zweidimensional.

Ausgangspunkt des Voronoi-Diagramms ist eine beliebige Punktmenge mit mehr als zwei Punkten in der Ebene. Das Voronoi-Diagramm unterteilt die Ebene in Zellen, so daß jede Zelle einen Punkt der Punktmenge und alle Punkte der Ebene, deren Abstand zu diesem Punkt kleiner ist als der Abstand zu irgendeinem anderen Punkt, enthält. Das Voronoi-Diagramm selbst besteht aus allen Punkten der Ebene, die gleich weit von zwei Punkten der generierenden Punktmenge entfernt sind. Die Abbildung 5.2 zeigt ein Voronoi-Diagramm für vier Punkte.

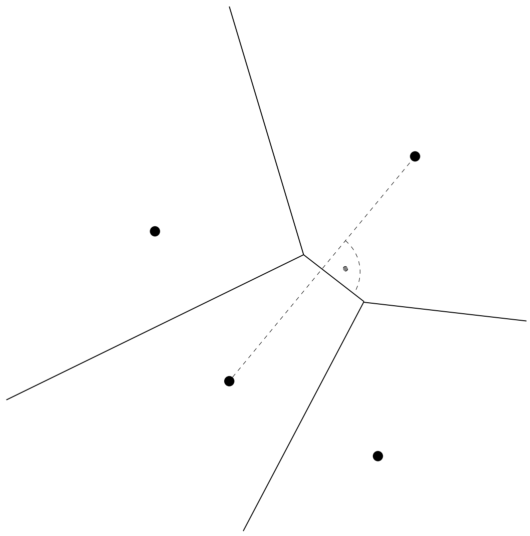

Abbildung 5.2: Ein Voronoi-Diagramm (durchgezogene Linien) mit generierender Punktmenge.

Das Konzept und die Konstuktion des Voronoi-Diagramm scheint relativ simpel. Man erkennt in Abbildung 5.2, daß die Linien des Voronoi-Diagramms aus den Mittelsenkrechten der Verbindungslinien der Punkte entstehen. Dementsprechend ist das Voronoi-Diagramm senkrecht zur Triangulation der Punkte. Man spricht davon, daß Voronoi-Diagramm und Triangulation dual zueinander sind. Es ergeben sich eine Reihe von definierten Eigenschaften, wovon einige hier aufgezählt werden.

1. Jeder Knoten des Diagramms ist Schnittpunkt dreier Linien und Mittelpunkt eines Kreises durch drei Punkte, in dem kein vierter Punkt liegt.

2. Die Anzahl der Knoten (N_K), der Linien (N_L) und der generierenden Punk-

te (N) ist verknüpft durch:

$$\begin{aligned} N_K - N_L + N &= 1 \qquad \text{und es gilt} \\ N_L &\leq 3N - 6 \qquad , \\ N_K &\leq 2N - 5 \qquad . \end{aligned}$$

3. Die mittlere Anzahl von Seiten pro Zelle ist nicht größer als sechs.

4. Das Voronoi-Diagramm ist offen, das heißt einige Linien sind Halbgeraden.

5. Liegen vier Punkte auf einem Kreis um einen Knoten, so ist das Diagramm unbestimmt, man spricht von Entartung.

Besteht die generierende Menge nicht aus Punkten sondern aus ausgedehnten Kreisen, so ist es möglich, daß Linien des Voronoi-Diagramms Kreise schneiden, wenn die Radien der Kreise unterschiedlich groß sind. Will man das vermeiden, so muß man zum sogenannten Laguerre-Diagramm übergehen [OBS92]. Dieses berücksichtigt bei der Bestimmung der Mittelsenkrechten die Radien der Kreise. Dies käme im Kontinuitätsmodell also im Falle von polydispersen Kugeln zum Tragen.

Das Kontinuitätsmodell nimmt an, daß sich die Flüsse zwischen den Teilchen auf einem Voronoi-Diagramm verteilen. Da ein Voronoi-Diagramm aber offen ist, ist es für das Modell notwendig, das Diagramm zu erweitern und zu schließen. Es müssen also zusätzliche Linien zwischen den Rohrwänden und den Kugeln, die das ursprüngliche Diagramm einhüllen erzeugt werden. Diese zusätzlichen Linien beschreiben die Flüsse zwischen den Teilchen und den Wänden. Sie müssen deshalb vertikal und in der Mitte zwischen Teilchen und Wand verlaufen. Für die Anwendung der Kirchhoffschen Gesetze ist es weiterhin notwendig, jeweils eine fiktive Quelle und Senke als Start und Endpunkt des Gesamtflusses I_f einzuführen. Es ist möglich, dies als periodische Randbedingungen zu interpretieren. Die horizontalen Verzweigungen des Gesamtflusses auf die partiellen Einzelflüsse schliessen das Voronoi-Diagramm nach oben und unten ab. Durch die Erweiterung des Diagramms können Knoten entstehen, die Schnittpunkt von mehr oder weniger als drei Linien sind. Die Flußlinien des Fluids in der Näherung eines so erweiterten Voronoi-Diagramms stellt Abbildung 5.3 dar.

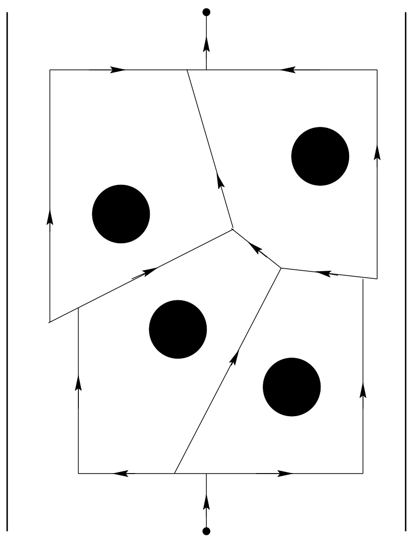

Abbildung 5.3: Der Fluß des Fluids als erweitertes Voronoi-Diagramm um die generierenden Kugeln mit Rohrwänden und fiktiver Quelle und Senke.

5.3.2 Kirchhoffsche Gesetze

Ordnet man jeder Linie des Voronoi-Diagramms eine Richtung zu, so handelt es sich, mathematisch gesehen, um einen gerichteten Graphen. Solche Graphen, die ein Netzwerk von Flüssen beschreiben, sind aus der Elektrotechnik bekannt. Dort werden die Ströme und Spannungen in komplizierten elektronischen Schaltungen mit komplexen Widerständen berechnet. Grundlage dieser Berechnungen sind die Kirchhoffschen Gesetze. Diese besagen:

I. Die Summe aller Ströme, die in einen Knoten hinein- und herausfließen, ist gleich Null. (Kontinuitätsgleichung)

II. Beim Umlaufen einer Zelle ist die Summe aller Spannungen gleich Null. (Energieerhaltung)

Desweiteren gilt für jede Linie des Netzwerkes das Ohmsche Gesetz für die partiellen Ströme (J_i), Spannungen (U_i) und Widerstände (Ω_i):

$$J_i = \frac{1}{\Omega_i} \cdot U_i \qquad . \tag{5.9}$$

Kennt man die Verzweigungen des Netzwerkes und alle N partiellen Widerstände, so läßt sich mit Hilfe der Kirchhoffschen Gesetze ein $3N$ dimensionales lineares

Gleichungssystem für die partiellen Ströme und Spannungen aufstellen. Für jeden Knoten und jede Zelle erhält man jeweils eine Gleichung. Löst man das so gefundene Gleichungssystem, so sind schließlich alle Ströme und Spannungen bekannt.

Die Kirchhoffschen Gesetze lassen sich analog auf das Kontinuitätsmodell anwenden. Die elektrischen Ströme entsprechen den Flüssen des Fluids und die elektrischen Spannungen den Geschwindigkeiten. Für die Widerstände kann man die folgende Näherung machen. In einem zylindrischen Rohr ist der Fluß eines Fluids nach Hagen und Poiseuille das Produkt aus mittlerer Geschwindigkeit $\vec{V}_f$ und der Fläche des Rohrquerschnittes mit Radius R:

$$\vec{I}_f = \pi R^2 \cdot \vec{V}_f \qquad . \tag{5.10}$$

Diese Gleichung kann in diesem Fall als Analogon zum Ohmschen Gesetz gesehen werden. Das bedeutet, daß für die partiellen Widerstände der partiellen Flüsse gilt:

$$\frac{1}{R_j} \equiv \frac{\pi}{4} d_j^2 \qquad . \tag{5.11}$$

Hierbei sind sie d_j, die kürzesten Abstände zwischen Kugeln oder zwischen einer Kugel und der Wand.

Gleichung (5.11) stellt nur eine erste Näherung dar. Eine genauere Bestimmung müßte berücksichtigen, daß sich die Kugeln in einem zylindrischen Rohr befinden. Der Querschnitt der Strömung, die rechts oder links an den Kugeln vorbeifließt, ist nicht kreisförmig, sondern hat komplexere Formen. In Abbildung 5.4 ist beispielsweise ein Schema für die partiellen Flüße um eine einzelne Kugel abgebildet. In der Querschnittsabbildung sind durch die gestrichelten Linien die Flächen dargestellt, die in der Näherung des Modells berücksichtigt werden. Man sieht, daß die Näherung der partiellen Widerstände verbessert werden kann.

Stellt man nun mit Hilfe der Gleichungen (5.10), (5.11) und den Kirchhoffschen Gesetzen das oben erwähnte lineare Gleichungssystem auf, so kommt man zu einer Matrix $\mathcal{D}$ deren Eigenwerte zu bestimmen sind:

$$\vec{V}\mathcal{D} = \vec{I} \qquad . \tag{5.12}$$

Der Vektor $\vec{V}$ enthält die partiellen Geschwindigkeiten $\vec{v}_j$ und der Vektor $\vec{I}$ die partiellen Flüsse $\vec{i}_j$. Die Zeilen der Matrix $\mathcal{D}$ enthalten bis auf drei Elemente jeweils nur Nullen. Diese drei Elemente sind entweder Einsen oder $\pi d_j^2/4$ mit verschiedenen Vorzeichen. In die Gleichungen für den ersten und den letzten Knoten des Netzwerkes geht zusätzlich der Gesamtfluß $\vec{I}_f$ aus Gleichung (5.10) ein.

Wenn man das Gleichungssystem gelöst und damit alle partiellen Geschwindigkeiten gewonnen hat, kann man für jede Kugel die Geschwindigkeit $\bar{\vec{v}}_f$ mitteln und den Zusatzterm (5.6) für die Kräfte in der Molekulardynamik berechnen. In einer Simulation ist es notwendig, in jedem Zeitschritt die partiellen Geschwindigkeiten des Fluids neu zu berechnen, da sich die Konfiguration der Kugeln ununterbrochen ändert. Auf diese Weise hat man immer die exakte Kenntnis über die die Kugeln umgebenden Geschwindigkeiten der Strömung des Fluids. Diese Kenntnis ist notwendig, da durch die Verknüpfung der partiellen Flüsse über die Kirchhoffschen Gesetze, selbst kleine Änderungen Auswirkungen auf das gesamte Flußnetzwerk haben. Durch das Netzwerk werden nicht nur die nächsten Nachbarn berücksichtigt, sondern ebenfalls Wirkungen aller anderen Teilchen.

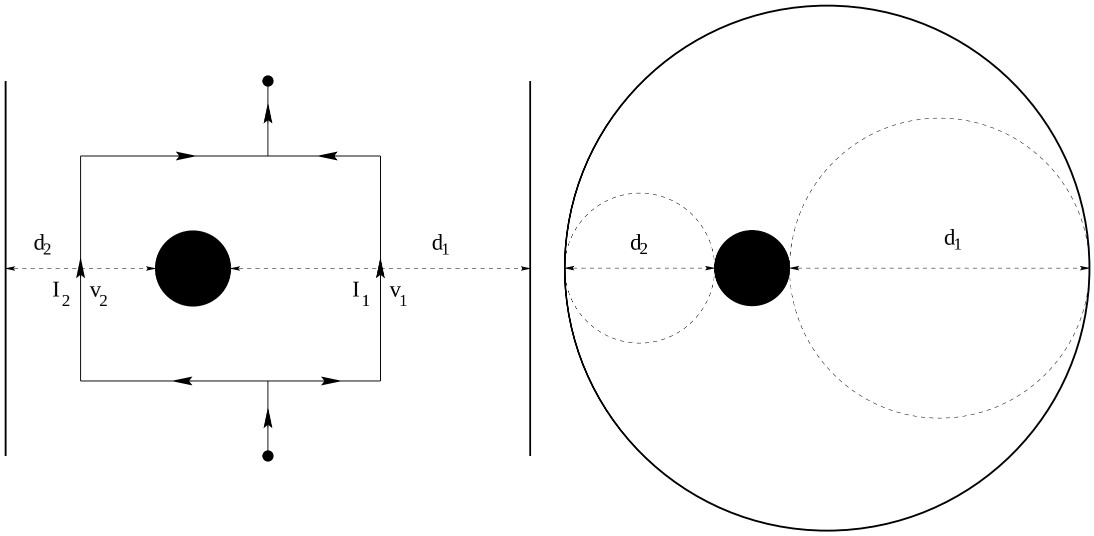

Abbildung 5.4: Rohrfluß einer einzelnen Kugel: links) Längsschnitt, rechts) Querschnitt

5.3.3 Analytische Lösung für eine Kugel

Das Ergebnis, das dieses neue Modell für ein einfaches Problem in der quasizweidimensionalen Näherung liefert, läßt sich analytisch berechnen. Wir betrachten eine einzelne Kugel in einem fluidgefüllten Rohr, die im stationären Zustand mit konstanter Geschwindigkeit fällt. Abbildung 5.4 zeigt die Geometrie des Problems mit zugehörigem Flußdiagramm für das Fluid im Längsschnitt. Der stationäre Zustand ist dadurch gekennzeichnet, daß die Reibungskraft durch das

Fluid [Gleichung (5.6)] die Gravitationskraft kompensiert:

$$m \cdot \vec{g} \;=\; 6\pi\eta r \left(\vec{v}_p - \bar{\vec{v}}_f\right) \qquad . \tag{5.13}$$

Hier ist g die Gravitationsbeschleunigung, und m die um den Auftrieb reduzierte Masse der Kugel. Für die Geschwindigkeit des Fluids gelten die Gleichungen (5.8), (5.11) und die Kirchhoffschen Gesetze. Außerdem ist aus der Symmetrie des Problems sofort ersichtlich, daß horizontale Komponenten der Geschwindigkeiten bei der Mittelwertbildung keine Rolle spielen und sich gegenseitig herausheben. Man kann deshalb zu Beträgen übergehen. Mit der Knoten-Regel und den Geichungen (5.8) und (5.11) erhält man:

$$I_f \;=\; -\rho_p \pi R^2 \cdot v_p \;=\; I_1 + I_2 \;=\; v_1 \frac{\pi}{4} d_1^2 + v_2 \frac{\pi}{4} d_2^2 \qquad . \tag{5.14}$$

Aus der Zellen-Regel ergibt sich sofort:

$$v_1 \;=\; v_2 \;=\; v_f \qquad . \tag{5.15}$$

Dies kann die Rotation der Kugel (Abbildung 5.1) nicht erklären. Sie verbleibt hier als offene Fragestellung. Setzt man Gleichung (5.15) in Gleichung (5.14) ein und löst nach v_f auf, erhält man:

$$v_f \;=\; -\frac{4\rho_p R^2 v_p}{d_1^2 + d_2^2} \qquad . \tag{5.16}$$

Setzt man v_f wiederum in Gleichungen (5.13) ein und formt zum gesuchten v_p um, folgt:

$$\begin{aligned} v_p &= \frac{mg}{6\pi\eta r} + v_f \qquad , && (5.17)\\ &= \frac{mg}{6\pi\eta r} - \frac{4\rho_p R^2 v_p}{d_1^2 + d_2^2} \qquad , && (5.18)\\ &= \frac{\frac{mg}{6\pi\eta r}}{1 + \frac{4\rho_p R^2}{d_1^2 + d_2^2}} \qquad . && (5.19) \end{aligned}$$

Ersetzt man die Abstände d_1 und d_2 durch die Exzentrizität kommt man schließlich zu:

$$\begin{aligned} v_p &= \frac{\frac{mg}{6\pi\eta r}}{1 + \frac{2\rho_p R^2}{(R-r)^2 (e^2+1)}} \qquad , && (5.20)\\ v_p &= \frac{v_\infty}{1 + \frac{2\rho_p}{\left(1 - \frac{r}{R}\right)^2 (e^2+1)}} \qquad . && (5.21) \end{aligned}$$

Hierbei ist $v_\infty = mg/6\pi\eta r$ die Fallgeschwindigkeit einer Kugel im unbegrenztem Fluid. Dieses Ergebnis zeigt physikalisch richtig [HB83] die Abhängigkeit der Korrektur zu v_∞ von der dimensionslosen Größe r/R. Allerdings gibt es eine Einschränkung, da der Volumenbruchteil der Kugeln ebenfalls von r/R abhängt:

$$\rho_p = \frac{N \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{L \cdot \pi R^2} \quad . \tag{5.22}$$

N ist die Zahl der Kugeln (hier: $N = 1$) und L die Länge des Rohres. Wählt man diese Länge sinnvoll, also wegen der periodischen Randbedingungen des Kontinuitätsmodells möglichst kurz ($L = 2r$), so findet man schließlich:

$$v_p = \frac{v_\infty}{1 + \frac{4\left(\frac{r}{R}\right)^2}{3\left(1-\frac{r}{R}\right)^2(e^2+1)}} \quad . \tag{5.23}$$

Dieses Endergebnis liefert physikalisch das qualitativ richtige Verhalten:

$$\lim_{r \to R} v_p = 0 \tag{5.24}$$

$$\lim_{r/R \to 0} v_p = v_\infty \tag{5.25}$$

$$\lim_{e \to 1} v_p > v_p(e=0) \tag{5.26}$$

Vergleicht man den Korrekturterm (v_∞/v_p) der Geschwindigkeit der Kugel gegenüber der Geschwindigkeit für den Fall in unbegrenztem Fluid mit Ergebnissen aus der Literatur (siehe Abb. 5.5), so zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung zwischen dem Ergebnis des Kontinuitätsmodells und den Literaturwerten. Die Kurve des Modells liegt im Vergleich nur ein wenig tiefer, speziell für kleine Werte von r/R.

Der Korrekturterm (v_∞/v_p) zeigt in Abhängigkeit von der Exzentrizität ebenfalls eine qualitativ gute Übereinstimmung mit theoretischen Werten aus [HM92]. Die Abbildung 5.6 zeigt die Graphen für ein festes Verhältnis von $R/r = 0.882$. Das Modellergebnis liegt um circa einen Faktor 0.3 unter den Literaturwerten. Ansonsten ist aber deutlich zu erkennen, daß eine Kugel im Zentrum des Rohres langsamer fällt als am Rand. Humphrey und Murata geben den Faktor, um den die Geschwindigkeit am Rand schneller ist, mit *„ungefähr* 2.1*"* an [HM92]. Im Kontinuitätsmodel ist dieser Faktor 1.97. Um eine bessere Übereinstimmung der Kurven in Abbildung 5.6 zu erlangen muß im Kontinuitätsmodell ein größer Wert für R/r gewählt werden. Dies entspricht einer Wahl, die den Unterschied der Kurven in Abbildung 5.5 ausgleicht.

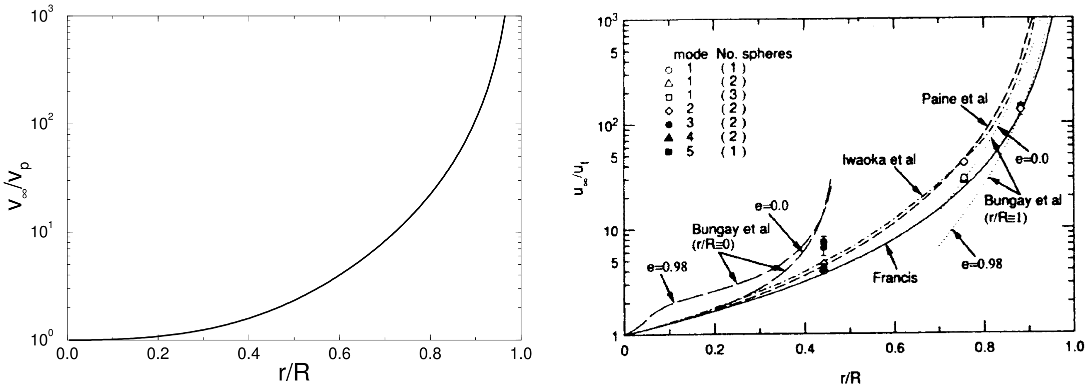

Abbildung 5.5: Korrektur der Geschwindigkeit einer einzelnen Kugel in einem Rohr gegenüber dem unbegrenzten Fall; links: Modellergebnis mit $e = 0$, rechts: experimentelle und theoretische Ergebnisse aus [HM92].

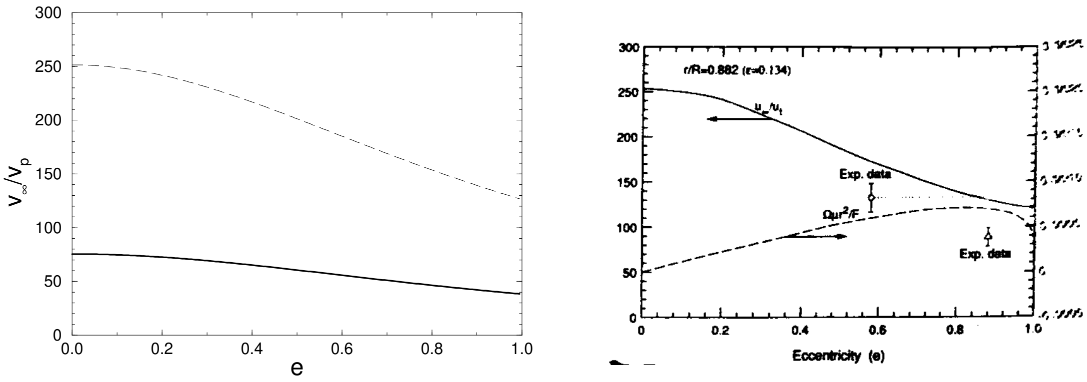

Abbildung 5.6: Korrektur der Geschwindigkeit einer einzelnen Kugel in einem Rohr in Abhängigkeit von der Exzentrizität; links: Modellergebnis mit $r/R = 0.882$ (durchgezogene Kurve) und mit $r/R = 0.932$ (gestrichelte Kurve), rechts: experimentelle und theoretische Ergebnisse aus [HM92] für $r/R = 0.882$ (obere Kurve und Datenpunkte).

5.3.4 Zusammenfassung und Anmerkungen

Betrachtet man die obigen Übereinstimmungen zwischen der Lösung des Kontinuitätsmodells für eine einzelne Kugel und den Literaturwerten, so kann man zu Recht behaupten, daß das Modell sehr befriedigende Ergebnisse liefert. Durch das Kontinuitätsmodell wird anschaulich klar, wie die Begrenzung eines Systems durch Rohrwände auf Teilchen und Fluid wirkt. Die Abhängigkeit der Fallgeschwindigkeit einer Kugel von der Größe r/R und von der Exzentrizität wurde verdeutlicht.

Die Lösung für eine einzelne Kugel im Rohr läßt sich sofort auf N gleich große Kugeln, die senkrecht hintereinander fallen, verallgemeinern. In diesem Fall sieht das Voronoi-Gitter wie eine Leiter aus. Zwischen je zwei Sprossen befindet sich eine Kugel. Die Lösung verläuft dann vollkommen analog zu derjenigen für eine einzelne Kugel. Der einzige Unterschied sind die Faktoren N und L in Gleichung (5.22). Diese Faktor gehen nun in den Korrekturterm der Geschwindigkeit ein:

$$\frac{v_\infty}{v_p} = 1 + \frac{N}{\frac{L}{r}} \frac{8\left(\frac{r}{R}\right)^2}{3\left(1-\frac{r}{R}\right)^2 (e^2+1)} \quad . \tag{5.27}$$

Mehrere Kugeln fallen daher laut Kontinuitätsmodell langsamer als eine einzelne. Die L/r-Abhängigkeit ist ein Maß für den relativen Abstand der Kugeln untereinander. Wegen der periodische Randbedingungen des Modells wird man L/r so wählen, daß gerade alle Kugeln in das System passen. Man sieht, daß mit wachsendem L, das heißt Abstand der Kugeln, die Kugeln schneller werden. Diese beide Aussagen der analytischen Lösung des Kontinuitätsmodells für mehrere Kugeln spiegeln ebenfalls das richtige, zu Beginn dieses Kapitels beschriebene Verhalten wider. Leider sind keine Literaturwerte für einen quantitativen Vergleich bekannt.

Im Kontinuitätsmodell treten mittelbare gegenseitige Beeinflußungen von Kugeln ohne trägheitsbedingte hydrodynamische Effekte auf, wenn mehrere Kugeln mit verschiedenen Exzentrizitäten in einem Rohr fallen. Obwohl die Mittelung der Fluidgeschwindigkeit über jeweils nur eine Voronoi-Zelle erfolgt und damit auf den ersten Blick nur die nächsten Nachbarn in Betracht gezogen werden, sind alle Geschwindigkeiten über die Kirchhoffschen Gesetze voneinander abhängig. Die auftretenden Kräfte sind also keine lokalen Größen, sondern analog zur Navier-Stokes-Gleichung, alle global verknüpft. Man kann deshalb erwarten, daß das Kontinuitätsmodell die in Abschnitt 5.1 unter Punkt 3. beschriebenen komplexeren Bewegungsformen von mehreren Kugeln in einem Rohr reproduzieren kann.

Eine wesentliche Verbesserung des Kontinuitätsmodells wird dadurch zu erzielen sein, daß man das dreidimensionale Voronoi-Diagramm für das volle dreidimensionale Problem einführt. Da das Voronoi-Diagramm dual zur Triangulation ist, könnte man gleichzeitig die Flächeninhalte der Triangulationszellen $\mathcal{A}^{tri}$ berechnen, durch die die Linien des Voronoi-Diagramms senkrecht stoßen. Diese Flächeninhalte müßten zusätzlich um die Flächenanteile, die die Kugeln selber einnehmen, korrigiert werden. Auf diese Weise kann man einen weitaus besseren Ansatz der partiellen Flußwiderstände als die Näherung des Hagen-Poiseuilleschen-Gesetzes [Gleichung (5.11)] erhalten:

$$\frac{1}{R_j} \equiv \mathcal{A}_j^{tri} \quad . \tag{5.28}$$

Dieser Ansatz würde zum Beispiel für den Querschnitt in Abbildung 5.4 bedeuten, daß an Stelle der Fläche der gestrichelten Kreise die gesamte Querschnittsfläche des Rohres in Betracht gezogen werden müßte.

Verwirklicht man diesen vollständigen dreidimensionalen Ansatz, so bedeutet dies, daß man den gesamten Raum um die Kugeln in ungleichmäßige Polyeder unterteilt. Die Ecken der Polyeder werden durch die Kugeln gebildet, und die Linien, das heißt Kanten, durch die Triangulation der Kugeln. Die partiellen Flüsse des Fluids entlang des Voronoi-Diagramms fließen senkrecht durch die Seitenflächen der Polyeder. Für jedes Polyeder gilt das Gesetz der Flußerhaltung. Alles was durch eine Seitenfläche hineinfließt, muß durch andere wieder hinausfließen. Die Größe eines partiellen Flußes durch eine Seitenfläche ist proportional zum Flächeninhalt der Seite. Für jedes Polyeder ergibt sich eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit und -richtung. Die mittlere Strömung um eine Kugel ergibt sich aus allen Polyedern, die die Kugel als Ecke besitzen. Bewegungen von Kugeln erfolgen immer relativ zur umgebenden Strömung des Fluids.

Auf diese Weise erweitert und veranschaulicht, erkennt man den eigentlichen Charakter des Modells. Es beruht im wesentlichen auf der Flußerhaltung. Diese wird durch die Kontinuitätsgleichung (5.1) beschrieben und deshalb wurde das Modell Kontinuitätsmodell genannt. Die guten Resultate des Kontinuitätsmodells, trotz einfacher Näherungen, zeigen deutlich, daß die Flußerhaltung der entscheidende Faktor einer laminaren Strömung ist. Spezielle hydrodynamische Effekte treten für kleine Reynoldszahlen nicht auf und offensichtlich scheint die genaue mikroskopische Verteilung der Druckgradienten im System, keine entscheidende Rolle zu spielen. Es kommt auf eine exakte Lösung der Stokes Gleichung (5.3) nicht an. Es reicht vielmehr aus, sich auf mittlere Größen zu beschränken und deren Verteilung im Sinne der Kontinuitätsgleichung in den verschiedenen Bereichen des Systems zu ermitteln.

Ein Punkt, an dem die Näherungen des Kontinuitätsmodells nicht mehr gelten, wird erreicht, wenn sich Teilchen sehr nahe kommen. Dies ist zum Beispiel kurz vor einem Stoß der Fall. Das Fluid zwischen den Teilchen muß verdrängt werden. Auf Grund der Viskosität des Fluids baut sich während der Verdrängung ein großer Druck zwischen den Teilchen auf. In einer einfachen Näherung für die Lösung der Stokes Gleichung (5.3) ist dieser Druck, laut Bowden und Tabor [BT59], proportional zur Viskosität, Annäherungsgeschwindigkeit und verdrängender Fläche und umgekehrt proportional zum Kubus des Abstandes. Der Druck divergiert also bei Annäherung der Teilchen. Auf diesem Effekt beruht die Schmierung (englisch: *Lubrication*) von Festkörpern zur Verminderung von Reibung. Da die Oberflächen der Teilchen auf mikroskopischer Skala rauh sind und die Viskosität, die Geschwindigkeit und insbesondere die verdrängende Fläche bei kugelförmigen Teilchen klein sind, kommt es in der Regel trotzdem zu einer Berührung von Teilchen. Die Divergenz spielt sich auf der Skala der Rauhigkeit ab. Nichtsdestotrotz kann dieser Schmierungs-Effekt zum Beispiel bei der Sedimentation von Teilchen [Sch95] relevante Auswirkungen haben. Für das hier behandelte Problem der Rohrströmung sind seine Auswirkungen eher marginal und können deshalb innerhalb des Kontinuitätsmodells vernachlässigt werden.

5.3.4.1 Zwei Dimensionen

Ein weiterer interessanter Aspekt des Modells ist das rein zweidimensionale Problem einer Scheibe, die zwischen zwei parallelen Wänden fällt. Dieses Problem wurde analytisch von Y. Takaisi [Tak55] gelöst und experimentell von S. Taneda [Tan64] untersucht. Für die analytische Lösung im Kontinuitätsmodell verwendet man wieder einen Ansatz für die Kraft auf eine fallende Scheibe, der auf der Lösung für das unbegrenzten Fluid [LL66] basiert, und der die Relativgeschwindigkeiten von Scheibe und Fluid berücksichtigt:

$$\vec{F}_p^{\,2d} = \frac{-4\pi\eta\left(\vec{v}_p - \vec{v}_f\right)}{\ln\left(\frac{3.70\eta}{\rho_f r \left|\vec{v}_p - \vec{v}_f\right|}\right)} \tag{5.29}$$

Wegen der bekannten Symetrie (Abbildung 5.4) kann man wieder zu den Beträgen der Geschwindigkeiten übergehen. Weiterhin sind in den Gleichungen (5.8) und (5.11) die Flächen durch die reinen Abstände zu ersetzen. Dies führt dazu, daß die Abhängigkeit der Lösung von der Exzentrizität herausfällt, weil Abstände zwischen Scheibe und Wand nur noch linear in die partiellen Flüsse eingehen.

Setzt man alle Gleichungen schließlich ineinander ein und versucht sie nach v_p aufzulösen, so stellt man fest, daß dies durch die logarithmische Abhängigkeit vom Betrag der Geschwindigkeitsdifferenz im Nenner von Gleichung (5.29) nicht möglich ist. Man erhält die folgende implizite Gleichung für die Geschwindigkeit der Scheibe:

$$v_p = \frac{mg \ln\left(\frac{3.70\eta}{v_p \rho_f r \left(1+\frac{\pi}{4\left(\frac{R}{r}-1\right)}\right)}\right)}{4\pi\eta\left(1+\frac{\pi}{4\left(\frac{R}{r}-1\right)}\right)} \quad . \tag{5.30}$$

Diese Gleichung ist nur numerisch zu lösen. Aber selbst ohne Lösung läßt sich sagen, daß dies keine gute Näherung für des Verhalten der zweidimensionalen Scheibe sein kann. Wie schon erwähnt zeigt die Gleichung (5.30) keine Abhängigkeit von der Exzentrizität. Dies bedeutet, daß das Model vorhersagt, die Scheibe fällt in der Mitte des zweidimensionalen Rohres genauso schnell wie am Rand. Taneda hat aber gezeigt, daß dies falsch ist [Tan64]. Es existiert eine Abhängigkeit von der Exzentrizität und in der Nähe der Wände divergiert sogar die Kraft auf die Scheibe. Die Scheibe wird dort also erheblich langsamer. Die Gleichung (5.30) zeigt desweiteren nicht nur eine Abhängigkeit der Geschwindigkeit der Scheibe vom Koeffizienten r/R, sondern zusätzlich eine vom Absolutwert von r. Dies kann ebenfalls nicht richtig sein [Tak55, Tan64].

Es bleibt also festzuhalten, daß das Kontinuitätsmodell in zwei Dimensionen nicht anwendbar ist. Dies bedeutet, daß für zweidimensionale Probleme eine exakte Lösung der Stokes Gleichung (5.3) unumgänglich ist. Eine Näherung, die nur die Kontinuitätsgleichung berücksichtigt, ist offensichtlich unzureichend. Die beschränkte räumliche Ausdehnung führt dazu, daß die Kräfte allgemein langreichweitiger sind als in drei Dimensionen. Dies läßt sich schon am Vergleich der Kräfte für das unbegrenzte Fluid [Gleichung (5.6) und (5.29)] absehen. In diesem Sinne ist die experimentell ermittelte Divergenz der Kraft auf die Scheibe nahe der Wand ein Indiz dafür, daß Schmierung in zwei Dimensionen eine entscheidende Rolle spielt.

5.3.5 Rechenzeitaufwand

Für das Modell liegen keine Ergebnisse aus Simulationen vor, weil es sich erwies, daß eine Umsetzung des Modells in einen Algorithmus mit erheblichen Problemen verbunden ist. Die numerische Implementierung zur Erstellung eines Voronoi-Diagramms ist sehr umfangreich. Eine ausführliche Anleitung wird in [OBS92] gegeben. Hier sei nur darauf hingewiesen, daß neben der möglichen Entartung des Diagramms, Rundungsfehler des Computers zu großen Problemen führen. Für die Beschreibung des Voronoi-Diagramms als gerichteten Graphen ist eine komplexe, verkettete Datenstruktur notwendig.

Zur Abschätzung der Rechenzeit, die ein Algorithmus für das quasi-zweidimensionale Modell benötigt, gibt es folgendes zu sagen. Grundsätzlich gilt für die Rechenzeit zur Erstellung eines zweidimensionalen Voronoi-Diagramms die Beschränkung, daß bestenfalls die Rechenzeit von der Anzahl der Teilchen mit der Ordnung $\mathcal{O}(N \log N)$ abhängt. Die Lösung der Kirchhoffschen Gesetze erfordert die Invertierung einer $(3N \times 3N)$ großen Matrix. Die Rechenzeit ist in diesem Falle bestenfalls von der Ordnung $\mathcal{O}(9N^2)$.

Es wurde ein Zeitvergleich verschiedener Programme zur Abschätzung der Rechenzeit durchgeführt. Ausgangspunkt war die erforderliche Rechenzeit für einen Zeitschritt einer herkömlichen zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik granularer Materie mit 420 Teilchen. Diese sei als eine Zeiteinheit definiert. Ein sehr schnelles Programm von Cristian Moukarzel [Mou94] zur Berechnung des Voronoi-Diagramms gleich vieler Teilchen benötigte entsprechend 8 Zeiteinheiten. Die Berechnung der Eigenwerte einer zugehörigen Matrix $\mathcal{D}$ mit einer NAG-Fortran Routine, die ebenfalls als sehr schnell gilt, benötigte 62 Zeiteinheiten. Nicht berücksichtigt wurden in dieser Kalkulation die notwendigen Verknüpfungen zwischen den Programmteilen und die Berechnung der Kraft F_p. Alles in Allem wäre ein Programm also mindestens 70 mal langsamer als eine herkömliche Molekulardynamik. Für das volle dreidimensionale Problem müßte man zusätzlich mindestens einen Faktor 2 multiplizieren, da die Zahl der Linien und Knoten des Voronoi-Diagramms erheblich größer wird.

Wenn man schließlich berücksichtigt, daß ein Teilchen ungefähr 10^3 Zeitschritte braucht, um seinen eigenen Durchmessser zu durchfliegen, also mindestens 10^5 Zeitschritte für eine physikalisch sinnvolle Simulation benötigt werden, so ergibt sich eine momentan nicht mehr vertretbare Rechendauer auf herkömlichen Maschinen. Zusätzlich sollte man bedenken, daß das Modell von Schwarzer *et al.* [Sch95] nur 20 mal langsamer als eine Molekulardynamik ohne Fluid ist und sicherlich eine vergleichbar gute Lösung des Problems liefert. Unter all diesen Gesichtspunkten schien es ratsam, auf eine Implementierung zu verzichten. Nichtsdestotrotz zeigen die analytischen Ergebnisse, daß prinzipiell sehr gute Resultate vom Kontinuitätsmodell zu erwarten sind.

Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß eine viel schnellere Implementierung, als die oben abgeschätzte, möglich scheint. Ausgangspunkt ist die Tatsache, daß sich während eines Zeitschrittes die Konfiguration der Teilchen, und damit das Voronoi-Diagramm und die Flüsse, nur wenig ändern. Es ist insbesondere für die Lösung der Matrix möglich, Algorithmen zu entwickeln, die unter Zuhilfenahme der Lösung des vorangegangenen Zeitschrittes, sehr viel schneller zu einem Ergebnis kommen. Gleiches gilt für das Voronoi-Diagramm. Ein komplexerer Algorithmus, der dieses berücksichtigt, wird eine befriedigende Schnelligkeit erreichen. Aus meiner persönlichen Erfahrung mit Ansätzen zur Implementierung des Modells schätze ich allerdings die Dauer zum Schreiben des Programms mit den nötigen Vorarbeiten auf ein 3/4 bis 1 Jahr. Deshalb hätte die Implementierung des Programmes und die Rechenzeit für die nötigen Simulationen mit Systemmitteln den Rahmen dieser Dissertation gesprengt.

Kapitel 6

Andere Methoden

Bis hier wurden in dieser Arbeit geometrische Modelle, Molekulardynamikmethoden und zellulare Automaten vorgestellt. Weitere bedeutende Methoden, auf die an dieser Stelle kurz eingegangen werden soll, sind Kontinuumsansätze und die Kontaktdynamik. Darüber hinaus hat es, wie in fast allen Bereichen der Physik, eine ganze Reihe speziellerer Ansätze gegeben, die mehr oder minder erfolgreich in der Lage sind, bestimmte Phänomene granularer Materie zu modellieren [Bro61, CH91, MB91, Puh93, HI95, LH95, dG96]. Die bekanntesten Vertreter dieser Art sind die Monte-Carlo-Verfahren. Sie wurden zum Beispiel erfolgreich zur Simulation der Größensegregation durch Vibration eingesetzt [RPSS86, RSPS87, DL95, Mou94].

6.1 Kontinuumstheorien

Die ältesten Modelle zur Beschreibung granularer Materie sind Kontinuumstheorien. Sie können grob, entsprechend ihrer Anwendungsgebiete, in zwei Klassen eingeteilt werden. Die eine Klasse beinhaltet Ansätze für das quasistatische Regime granularer Materie. Dieses Regime ist durch große Dichten und langanhaltende Kontakte von Teilchen gekennzeichnet. Ein frühes Beispiel für einen solchen Ansatz ist die Arbeit von Hagen über Druckverteilungen in trockenem Sand [Hag52]. Die zweite Klasse der Kontinuumstheorien sind hydrodynamische Ansätze für das volldynamische Regime granularer Materie. Dieses Regime zeichnet sich durch geringe Dichten und Teilchenkontakte, die hauptsächlich in Form von binären Kollisionen existieren, aus. Für das Übergangsregime zwischen diesen beiden Regimen, dem die meisten granularen Systeme zuzuordnen sind [JJ87], existieren praktisch keine Kontinuumstheorien [Sch96a]. Hier soll das

Augenmerk auf die hydrodynamischen Ansätze und das Ergebnis einer wichtigen Arbeit von Y. Du, H. Li und L.P. Kadanoff gerichtet werden [DLK95]. Ausführlichere Informationen zu Kontinuumstheorien finden sich in den Übersichtsartikeln [Sav79, Haf83, Sav84, Cam90, Sav92].

Im allgemeinen werden in hydrodynamischen Ansätzen Gleichungen für makroskopische Größen aufgestellt, die bestimmten Bedingungen wie Massenerhaltung, Impulserhaltung und Energieerhaltung unter Berücksichtigung der Dissipation genügen. Typisch für solche Ansätze sind Differentialgleichungen vom Typ der Navier-Stokes-Gleichung (5.2), die um einen dissipativen Term erweitert wurden [Haf83, Sav84, Cam90]. Die Arbeit von Du *et al.* erklärt nun anschaulich, warum hydrodynamische Kontinuumsansätze grundsätzlich nicht in der Lage sind, die Dynamik granularer Materie in einem ausreichenden Maße wiederzugeben. Der Ausgangspunkt ihrer Überlegungen war folgender: Jeder hydrodynamischer Ansatz hat eine zeitliche und räumliche Verteilung bestimmter Zustandsgrößen zum Ergebnis. Solche Zustandsgrößen sind typischerweise die Dichte, granulare Temperatur oder mittlere Geschwindigkeit der granularen Materie. Auf Grund des Kontinuumcharakters der Ansätze und als Folge der mathematischen Struktur der Gleichungen müssen die ermittelten Verteilungen aus kontinuierlichen Funktionen bestehen. Du *et al.* konnten mit Hilfe der in Kapitel 4 dargestellten Referenzsimulation der Dynamik in einer eindimensionalen, reibungsfreien Röhre zeigen, daß auf Grund der mehrfach geschilderten dissipationsbedingten strukturellen Instabilität granularer Systeme die Verteilungen von Dichte, Geschwindigkeit und granularer Temperatur im Regelfall gerade keine kontinuierlichen Funktionen sind. Die Verteilung der Dichte ist zum Beispiel im stationären Zustand der reibungsfreien Röhre in annähernd allen Bereichen des Systems ungefähr gleich Null und macht durch das *Cluster* in der Nähe der reflektierenden Wand einen Sprung. Insgesamt können demnach hydrodynamische Kontinuumsansätze niemals das exakte Verhalten granularer Materie widerspiegeln. Sie sind nur in der Lage, in bestimmten Fällen eine gute Näherung der Wirklichkeit zu liefern.

6.2 Kontaktdynamik

Eine der jüngsten Entwicklungen zur Simulation granularer Materie ist die Kontaktdynamik. Sie geht auf J.J. Moreau und M. Jean, die sie erstmals 1992 vorstellten, zurück [JM92]. Wie der Name andeutet, beruht diese Methode auf der Berechnung der Kräfte, die bei langanhaltenden Kontakten zwischen Teilchen granularer Materie auftreten. Ihre Besonderheit besteht darin, daß sie nicht den üblichen Ansatz der Zweiteilchenwechselwirkungen verfolgt. Vielmehr werden alle Kräfte gleichzeitig innerhalb des Kontaktnetzwerkes der granularen Teilchen unter Berücksichtigung ihrer gegenseitigen Wechselwirkungen ermittelt. Hierbei ist die Kontaktdynamik insbesondere in der Lage, das Coulomb'sche Reibungsgesetz im Gegensatz zu anderen Methoden exakt zu implementieren [RR95, RPBR95, Rad95, RBR96, Wol96].

Ausgangspunkt der Kontaktdynamik ist ein Satz von gekoppelten Gleichungen, der als Variablen nicht nur die Orte und Geschwindigkeiten der Teilchen sondern auch die Kontaktkräfte enthält. Der Satz besteht im wesentlichen aus zwei Teilen. Der eine Teil beinhaltet je eine Bewegungsgleichung für jeden Freiheitsgrad jeden Teilchens. Der andere Teil besteht aus einem linearen Gleichungssystem, das aus je einer Bilanzgleichung für jede Komponente der Kräfte jeden Kontakts besteht. Einige Kräfte, wie die Gravitation oder äußere Anregungen gehen als Konstanten in dieses Gleichungssystem ein. Der Zustand eines granularen Systems, der hier als Kenntnis aller Orte, Geschwindigkeiten und Kräfte verstanden werden soll, wird wird mit Hilfe eines iterativen Verfahrens zur Lösung des Satzes von Gleichungen ermittelt. Die Besonderheit dieses Verfahrens liegt darin, daß es im Gegensatz zu rein mathematischen Methoden physikalisch iteriert. Dies bedeutet, daß die Auswirkungen der Änderung einer Variablen auf andere, mit ihr unmittelbar verknüpfte Variablen, physikalisch berücksichtigt wird. Beispielsweise hat das Einsetzen einer Relativgeschwindigkeit zwischen zwei sich berührenden Teilchen zwingend zur Folge, daß die Haftreibungskomponente in der Bilanzgleichung ihres Kontaktes herausfällt. Auf diese Weise läßt sich der Zustand eines Systems trotz der großen Anzahl von Variablen erstaunlich schnell iterieren. Insbesondere in Simulationen einer zeitlichen Entwicklung findet sich nach einem kleinen Zeitschritt der neue Zustand des Systems sehr schnell aus dem vorangegangenen Zustand.

Die Besonderheit der Kontaktdynamik im Vergleich zu anderen Modellen liegt in ihrem Anwendungsgebiet. Sie ist das einzige Modell, das in der Lage ist, granulare Systeme in quasistatischen Regimen mit sehr großen Dichten zu simulieren, ohne dabei beispielsweise auf die umfangreichen Näherungen eines BTR-Modells zurückgreifen zu müssen. Methodische Artefakte, wie der *Detachment*-Effekt der zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik sind nicht bekannt. Insbesondere die exakte Implementierung des Coulomb'schen Reibungsgesetzes ist einzigartig. Diese gibt im Falle von Kontakten mit Haftreibung keinen artifiziellen Wert der

Haftreibungskraft vor. Vielmehr ist die Haftreibungskraft gerade so groß, daß sie die ihr entgegenstehende Kraft kompensiert.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden die Eigenschaften und das Verhalten granulare Materie mit verschiedenen Modellen und umfangreichen Simulationen untersucht. Das erste Kapitel gab einen anfänglichen Überblick über bekannte Eigenschaften und Phänomene. Anhand des BTR-Modells folgte im zweiten Kapitel eine Untersuchung der Dynamik granularer Materie in rotierenden Trommelmischern. Die Ergebnisse dieser Untersuchung und einer vergleichenden Studie zwischen dem BTR-Modell und einer zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik aus Kapitel 3 sind im folgenden Abschnitt 7.1 aufgelistet. Der Abschnitt 7.2 faßt anschließend kurz die neu entwickelten Modelle der Kapitel 4 und 5 zusammen. Das sechste Kapitel beinhaltete eine Darstellung weiterer wichtiger Modellansätze granularer Materie.

7.1 Rotierende Trommeln

Das BTR-Modell simuliert eine langsam rotierende und zusätzlich schwach vibrierende Trommel. Ein Modellparameter, die Rotationsschrittweite $\Delta\Phi$ ist das Verhältnis aus Rotationsgeschwindigkeit und Vibrationsfrequenz. Die granulare Materie, mit der die Trommel gefüllt ist, wird in den physikalischen Grenzfällen großer Haftreibung und verschwindender Restitutionskoeffizienten, Trägheit und Gleitreibung modelliert. Dies unterstreicht die Rolle geometrischer Eigenschaften.

Es konnte gezeigt werden, daß das BTR-Modell die radiale Größensegregation bidisperser Füllungen in zweidimensionalen Trommelmischern reproduzieren kann. Die Segregation ist eine Folge unterschiedlicher Einfangwahrscheinlichkeiten für große und kleine Teilchen durch Nischen an der Oberfläche. Dieser Mechanismus konnte anhand der Verteilungen der Nischen nachgewiesen werden. Segregation existiert für jedes Radienverhältnis bidisperser Mischungen granularer Materie. Die Dynamik der Teilchen ist in dem Sinne ergodisch, daß die statistischen Eigenschaften eines Zeitmittels der Trajektorie eines einzelnen Teilchens mit dem Ensemblemittel der Eigenschaften aller Teilchen übereinstimmen.

Monodisperse Systeme zeigen ein hohes Maß an Ordnung. Diese Ordnung äußert sich in kristallinen Packungsstrukturen und Periodizitäten der Lawinengrößen, des Böschungswinkels und der Packungsstruktur. Die Einführung rauher Trommelwände oder kleiner Teilchen führt zu einer Verminderung der Ordnug. Mit zunehmender Unordnug verschwinden kristalline Packungsstrukturen und Periodizitäten.

Der Böschungswinkel, der oftmals als eine charakteristische Größe granularer Materie beschrieben wird, ist in rotierenden Trommeln im untersuchten Regime diskreter Lawinen keine Konstante. Er ist vielmehr eine Funktion des Radien- und Mischungsverhältnisses der Teilchen, der Systemgröße, der Rauhigkeit der Trommelwände, der Rotationsgeschwindigkeit und der Vibrationsfrequenz.

Selbstorganisierte Kritizität ist in rotierenden Trommel vorhanden. Allerdings muß streng darauf geachtet werden, die notwendigen Vorraussetzungen für selbstorganisierte Kritizität einzuhalten. So ist für das *Finite-Size-Scaling* eine konstante Energiezufuhr nur gewährleistet, wenn mit Hilfe einer Vibration der Unterschied zwischen Böschungswinkel und Stabilitätsgrenzwinkel proportional zum Kehrwert des Quadrates der Systemgröße *getriggert* wird. Als weitere, bisher unbekannte Voraussetzung für selbstorganisierte Kritizität wurde eine ausreichende Rauhigkeit der Oberfläche erkannt. Ohne ausreichende Rauhigkeit werden Lawinen bis zum Fuß der Oberfläche bevorzugt, was eine gestreckte Exponentialverteilung der dissipierten Energie zur Folge hat, die in vielen Experimenten beobachtet wurde.

Das BTR-Modell ist in der Lage, den experimentell nachgewiesenen Mischprozess durch Lawinen wiederzugeben. Zusätzlich wurde ein weiterer Mischprozess durch Scherung innerhalb der Füllung entdeckt, der durch Vibrationen der Trommel unterstützt wird. Es konnte ein neues Mischverfahren entwickelt werden, das schneller und effizienter als das bisherige Verfahren ist. Dieses neue Verfahren beruht auf der Wechselwirkung der beiden Mischprozesse mit der Segregation.

Ein Vergleich von Simulationsergebnisse zur Segregation bidsiperser Systeme zwischen BTR-Modell und zeitschrittgetriebener Molekulardynamik hat gezeigt, daß die Molekulardynamik wenig geeignet ist, dichte, scherende Systeme wie rotierende Trommeln zu simulieren. Selbst die realistischsten Kraftansätze waren nicht in der Lage, befriedigende Resultate zu liefern. Der Grund für die Mangelhaftigkeit der Molekulardynamik sind die bekannten Artefakte des Modells: Bremsversagen und *Detachment*-Effekt. Schließlich läßt eine um den Faktor 10^4 größerer Rechenzeit die Molekulardynamik im Vergleich zum BTR-Modell endgültig für Simulationen rotierender Trommeln ungeeignet erscheinen. Die Untersuchung der Kraftansätze der Molekulardynamik hat gezeigt, daß die Dissipation von Energie durch Tangentialkräfte gut mit einer gedämpften linearen Feder zu simulieren ist. Der Effekt der Oszillationen des tangentialen Restitutionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Anfangsgeschwindigkeit bei leicht schiefen Stößen ist für reale Systeme ein vorstellbares Szenario.

7.2 Neue Modelle

Es wurden zwei neue Modelle zur Simulation granularer Materie entwickelt. Das erste ist der stochastische zellulare Automat mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten. Dieser ist in der Lage, im Gegensatz zu bisherigen Ansätzen mit diskreten Geschwindigkeiten das Verhalten eines eindimensionalen exemplarischen Systems physikalisch richtig abzubilden. Dies beinhaltet insbesondere die Energiedissipation durch Stöße, die für sehr viele granulare Systeme das bestimmende Element ist. Die Erweiterung des Modells auf zweidimensionale Systeme wurde bereits dargestellt und wird sich relativ einfach verwirklichen lassen. Gegenüber anderen Modellen wie Molekulardynamikmethoden bietet der Algorithmus erhebliche Vorteile in Bezug auf seine intrinsische Schnelligkeit und Stabilität.

Das zweite vorgestellte neue Modell ist das Kontinuitätsmodell. Es ist in der Lage den Einfluß eines interstitiellen Fluids auf die Dynamik granularer Teilchen für kleine Reynoldszahlen zu simulieren. Analytische Lösungen des Modells zu einfachen Problemen haben gezeigt, daß hervoragende Übereinstimmungen mit experimentellen und theoretischen Ergebnissen existieren. Das Kontinuitätsmodell basiert auf der Flußerhaltung der laminaren Strömung des die Teilchen umgebenden Fluids. Diese Flußerhaltung wird in der Hydrodynamik durch die Kontinuitätsgleichung beschrieben. Die Wechselwirkung eines Teilchens mit dem Fluid läßt sich in einer offensichtlich guten Näherung als Stokesche Reibung mit einer das Teilchen umgebenden mittleren Strömung beschreiben. Diese mittlere Strömung ergibt sich aus den partiellen Flüssen zwischen nächsten Nachbarn, die mit Hilfe der Kirchhoffschen-Gesetze auf einem Voronoi-Diagramm ermittelt werden. Leider stellte sich die Umsetzung des Modells in einen ausreichend schnellen

Algorithmus als eine äußerst komplexe Aufgabe heraus, für die im Rahmen dieser Dissertation keine Zeit blieb.

7.3 Fazit

Die wichtigsten wissenschaftlichen Erkenntnisse dieser Arbeit sind sicherlich die Entdeckung des neuen effizienten Mischverfahrens und die Erklärung der Tatsache, daß sehr viele Experimente gestreckte Exponentialverteilungen der dissipierten Energie zeigen, obwohl das typische Potenzgesetz der selbstorganisierten Kritizität zu erwarten war. Zu den bisher bekannten notwendigen Bedingungen für selbstorganisierte Kritizität gesellt sich eine weitere: ausreichende Rauhigkeit der Oberfläche. Darüber hinaus wurden zwei neue Modelle eingeführt, wovon zumindest der zellulare Automat mit kontinuierlichen Geschwindigkeiten auf Grund seines schnellen Algorithmus ein äußerst vielversprechender Ansatz ist. Die Effizienz und Güte von Anwendungen des Kontinuitätsmodells werden sich endgültig, erst nach einer Implementierung des komplexen Algorithmus herausstellen. Die schon jetzt hervorragenden Ergebnisse mit einfachen Näherungen lassen jedoch erwarten, daß die vollständige dreidimensionale Umsetzung des Modells in jeder Hinsicht befriedigende Resultate liefern wird.

Das BTR-Modell rotierender Trommeln in zwei Dimensionen wurde mit dieser Arbeit vollständig untersucht. Für die Zukunft steht deshalb die Erweiterung des Modells auf drei Dimensionen an. Wie das Kapitel 3 gezeigt hat, ist das BTR-Modell nicht nur um Größenordnungen schneller, sondern auch realistischer als zeitschrittgetriebene Molekulardynamiksimulationen für rotierende Trommeln. Es wird deshalb in der Lage sein, dreidimensionale Systeme ausreichender Größe über lange Zeiträume zu simulieren. Auf diese Weise kann die Ursache der axialen Bändersegregation ermittelt werden. Beispielsweise wird eine Simulation unter Verwendung periodischer Randbedingungen an Stelle von Stirnwänden der Trommel zeigen, ob die Stirnwände zur Induzierung der Bändersegregation notwendig sind oder nicht.

Welche der verschiedenen Modelle sich in Zukunft durchsetzen werden, ist heute noch nicht abzusehen. Alle haben ihre speziellen Vor- und Nachteile. Steigende Rechenleistungen und bessere Algorithmen werden jedoch mit Sicherheit den Simulationen granularer Materie einen weltweiten Auftrieb geben. Schon heute bietet die Firma Itasca von P. Cundall ein kommerzielles Softwarepaket für Kurzzeitsimulationen an. Es verwendet die Methoden der zeitschrittgetriebenen Molekulardynamik [CKP96]. Angesichts der industriellen Bedeutung ist es deshalb absehbar, daß zukünftig die meisten Produktionsanlagen, die granulare Materialien verwenden, mit Hilfe von Simulationen geplant, erstellt und betrieben werden. Letztendlich wäre es nicht verwunderlich, wenn die im ersten Kapitel angesprochene, gesuchte einheitliche Theorie der granularen Materie eines Tages in Form eines Simulationsmodells vorliegt.

Literaturverzeichnis

[AH96] J.J. Alonso und H.J. Herrmann, “Shape of the Tail of a Two-Dimensional Sandpile”, *Phys. Rev. Lett.*, **76** (26), 4911, (1996).

[AL96a] L.A.N. Amaral und K.B. Lauritsen, “Energy avalanches in a rice pile model”, *Physica A*, **231**, 608, (1996).

[AL96b] L.A.N. Amaral und K.B. Lauritsen, “Self-organized criticality in a rice pile model”, *Phys. Rev. E*, **54** (5), R4512, (1996).

[AS73] K. Ahmad und I.J. Smalley, “Observation of Particle Segregation in Vibrated Granular Systems”, *Powder Technology*, **8**, 69, (1973).

[AT87] M.P. Allen und D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, London, (1987).

[AW57] B.J. Alder und T.E. Wainwright, “Phase Transition for a Hard Sphere System”, *J. Chem. Phys.*, **27**, 1208, (1957).

[Bab92] M. Babić, in , H.H. Sheen et al.: Herausgeber, *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, Seite 291, Elsevier Science Publisher, (1992).

[Bag41] R.A. Bagnold, *The Physics of Blown Sand and Dessert Dunes*, Chappman & Hall, (1941).

[Bag54] R.A. Bagnold, “Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a Newtonian fluid under shear”, *Proc. Roy. Soc. A*, **225**, 49, (1954).

[Bag66] R.A. Bagnold, “The shearing and dilatation of dry sand and the ’singing’ mechanism”, *Proc. Roy. Soc. A*, **295**, 219, (1966).

[Bau93] G. Baumann, "Computersimulationen granularer Materie in Trommelmischern", Diplomarbeit, Universität Duisburg, (1993).

[BB90] G.W. Baxter und R.P. Behringer, "Cellular automata models of granular flow", *Phys. Rev. A*, **42**, 1017, (1990).

[BB91] G.W. Baxter und R.P. Behringer, "Cellular automata models for flow of granular materials", *Physica D*, **51**, 465, (1991).

[BC91] P. Bak und K. Chen, "Selbstorganisierte Kritizität", *Spektrum der Wissenschaft*, März (1991).

[BCKN92] M. Bretz, J.B. Cunningham, P.L. Kurczynski und F. Nori, "Imaging of avalanches in granular materials", *Phys. Rev. Lett.*, **69** (16), 2431, (1992).

[BG89] J. Biarez und R. Gourvès: Herausgeber, *Powders and Grains*, Balkema, (1989).

[BGT85] N. Borderies, P. Goldreich und S. Tremaine, "A granular flow model for dense planetary rings", *Icarus*, **63**, 406, (1985).

[BH93] D. Bideau und A. Hansen: Herausgeber, *Disorder and Granular Media*, North-Holland, (1993).

[BHH+71] H. Bochers, H. Hansen, K.H. Hellwege, K. Schäfer und E. Schmidt, *Landolt-Börnstein*, Springer, (1971).

[BJW93] G. Baumann, E. Jobs und D.E. Wolf, "Granular cocktail rotated and shaken", *Fractals*, **1** (4), 767, (1993).

[BJW94] G. Baumann, I. Jánosi und D.E. Wolf, "Particle trajectories and segregation in a two-dimensional rotating drum", *Europhys. Lett.*, **27** (3), 203, (1994).

[BJW95] G. Baumann, I. Jánosi und D.E. Wolf, "Surface properties and flow of granular material in a two-dimensional rotating drum model", *Phys. Rev. E*, **51** (3), 1879, (1995).

[BR70] R.L. Brown und J.C. Richards, *Principles of powder mechanics*, Pergamon Press, (1970).

[Bro61] R.L. Brown, “Minimum energy theorem for flow of dry granules through apertures”, *Nature*, **191**, 458, (1961).

[BSHP96] N.V. Brilliantov, F. Spahn, J.M. Hertzsch und T. Pöschel, “Model for collisions in granular gases”, *Phys. Rev. E*, **53**, 5382, (1996).

[BSJW96] G. Baumann, T. Scheffler, I.M. Jánosi und D.E. Wolf, in , D.E. Wolf, M. Schreckenberg und A. Bachem: Herausgeber, *Traffic and Granular Flow*, Seite 347, Singapore, (1996), World Scientific.

[BT59] F.P. Bowden und D. Tabor, *Reibung und Schmierung fester Körper*, Springer, (1959).

[BTW87] P. Bak, C. Tang und K. Wiesenfeld, “Self-organized criticality: An Explanation of 1/f Noise”, *Phys. Rev. Lett.*, **59** (4), 381, (1987).

[BTW88] P. Bak, C. Tang und K. Wiesenfeld, “Self-organized criticality”, *Phys. Rev. A*, **38** (1), 364, (1988).

[BW96] G. Baumann und D.E. Wolf, “Self-organized criticality in a two-dimensional rotating drum model”, *Phys. Rev. E*, **54** (5), R 4504, (1996).

[Cam90] C.S. Campbell, “Rapid Granular Flows”, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **22**, 57, (1990).

[Can95] F. Cantelaube, *Ecoulements granulaires dans un tambour à deux dimensions, Ségrégation*, Dissertation, Université de Rennes I, (1995).

[CB95] F. Cantelaube und D. Bideau, “Radial Segregation in a 2d Drum: Experimental Analysis.”, *Europhys. Lett.*, **30**, 133, (1995).

[CCF+96] K. Christensen, A. Corral, V. Frette, J. Feder und T. Jøssang, “Tracer Dispersion in a Self-Organized Critical System”, *Preprint*, (1996).

[CDFL92] M. Caponeri, S. Douady, S. Fauve und C. Laroche, , “Spatiotemporal dynamics of avalanches in a rotating cylinder”, National Science Foundation, (1992), NSF-ITP-92-140.

[CDR92] E. Clément, J. Duran und J. Rajchenbach, “Experimental Study of Heaping in a Two-Dimensional ”Sandpile””, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (8), 1189, (1992).

[CDR93] E. Clement, J. Duran und J. Rajchenbach, in , Thorton: Herausgeber, *Congress of the french society for mechanics*, Lille, (1993).

[CH91] H.S. Caram und D.C. Hong, “Random-Walk Approach to Granular Flow”, *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 828, (1991).

[Cho67] A.J. Chorin, “A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems”, *J. Comp. Phys.*, **2**, 12, (1967).

[CKP96] P.A. Cundall, H. Konietzky und D.O. Potyondy, “PFC - ein neues Werkzeug für numerische Modellierungen”, *Bautechnik*, **73**, 492, (1996).

[CLDBR95] F. Cantelaube, Y. Limon-Duparcmeur, D. Bideau und G.H. Ristow, “Geometrical Analysis in a 2D Drum”, *J. de Phys. I*, **5**, 581, (1995).

[Cou73] M. Coulomb, “Sur une application des règles de Maximis & Minimis à quelques Problèmes de Statique relatifs à l‘Achitecture”, *Mémoires présentés à l‘Académie des Sciences*, Seite 343, (1773), Royal Academy, Paris.

[CRD95] E. Clement, J. Rajchenbach und J. Duran, “Mixing of a granular material in a bidimensional rotating drum”, *Europhys. Lett.*, **30**, 7, (1995).

[CS79] P.A. Cundall und O.D.L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies”, *Géotechnique*, **29**, 47, (1979).

[DBW96] S. Dippel, G.G. Batrouni und D.E. Wolf, “Collision-induced Friction in the Motion of a Single Particle on a Bumpy Inclined Line”, *Phys. Rev. E*, **54**, 6845, (1996).

[dG96] P.G. de Gennes, "Static compression of a granular medium: the "soft shell" model", *Europhys. Lett.*, **35** (2), 145, (1996).

[DHL87] F. Dinkelacker, A. Hübler und E. Lüscher, "Pattern Formation of Powder on a Vibrating Disc", *Biol. Cybern.*, **56**, 51, (1987).

[Dil93] J.P. Dilley, "Energy loss in collisions of icy spheres: Mechanism and size-mass dependence", *Icarus*, **105**, 225, (1993).

[DL95] S. Dippel und S. Luding, "Simulations on Size Segregation: Geometrical Effects in the Absence of Convection", *J. de Phys. I*, **5**, 1527, (1995).

[DLK95] Y. Du, H. Li und L.P. Kadanoff, "Breakdown of Hydrodynamics in a One-Dimensional System of Inelastic Particles", *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 1268, (1995).

[DMCR93] J. Duran, T. Mazozi, E. Clement und J. Rajchenbach, "Size segregation in a 2dim sandpile: convection and arching effects", *Preprint*, (1993).

[DR62] M.B. Donald und B. Roseman, "Mixing and De-mixing of solid particles; Part I, II, III", *Brit. Chem. Eng.*, **7** (10), 749, 823, 922, (1962).

[DR97] C.M. Dury und G.H. Ristow, in , P. Grassberger und D.E. Wolf: Herausgeber, *Friction, Arching, Contact Dynamics*, World Scientific, Singapore, (1997).

[DRC93] J. Duran, J. Rajchenbach und E. Clément, "Arching Effect Model for Particle Size Segregation", *Phys. Rev. Lett.*, **70** (16), 2431, (1993).

[Dur97] C.M. Dury, "Private Korrespondenz", (1997).

[EGD94] B.J. Ennis, J. Green und R. Davies, "The Legacy of Neglect in the U.S.", *Chem. Eng. Progress*, **90** (4), 32, (1994).

[Eib84] J. Eibl, "Design of silos - pressures and explosions", *The Structural Engineer*, **62A**, 169, (1984).

[ER89] P. Evesque und J. Rajchenbach, in , Biarez und Gourvés: Herausgeber, *Powders and Grains*, Seite 217, Balkema, Rotterdam, (1989).

[ESD90] P. Evesque, E. Szmatula und J.P. Denis, “Surface Fluidization of a Sand Pile”, *Europhys. Lett.*, **12** (7), 623, (1990).

[Eve91] P. Evesque, “Analysis of the statistics of sandpile avalanches using soil-mechanics results and concepts”, *Phys. Rev. A*, **43** (6), 2720, (1991).

[FCMS+96] V. Frette, K. Christensen, A. Malthe-Sørenssen, J. Feder, T. Jøssang und P. Meakin, “Avalanche dynamics in a pile of rice”, *Nature*, **379**, 49, (1996).

[Fed95] J. Feder, “The evidence for self-organized criticality in sandpile dynamics”, *Fractals*, **3** (3), 431, (1995).

[FH93] E.G. Flekkoy und H.J. Herrmann, “Lattice Boltzmann models for complex fluids”, *Physica A*, **199**, 1, (1993).

[FHP86] U. Frisch, B. Hasslacher und Y. Pomeau, “Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation”, *Phys. Rev. Lett.*, **56** (14), 1505, (1986).

[FLCA94] S.F. Foerster, M.Y. Louge, H. Chang und K. Allia, “Measurements of the collision properties of small spheres”, *Phys. Fluids*, **6** (3), 1108, (1994).

[FLS63] R.P. Feynman, R.B. Leighton und M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, (1963).

[GHS92] J.A.C. Gallas, H.J. Herrmann und S. Sokolowski, “Convection Cells in Vibrating Granular Media”, *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 1371, (1992).

[Gla95] J. Glanz, “Grown-Up Physicists Play Serious Games in the Sandbox”, *Science*, **268**, 1277, (1995).

[GMH+93] S.K. Grumbacher, K.M. McEwan, D.A. Halverson, D.T. Jacobs und J. Lindner, “Self-organized criticality: An experiment with sandpiles”, *Am. J. Phys.*, **61** (4), 329, (1993).

[GO95] J. Grindlay und A.H. Opie, "Contact force distribution in a pile of rigid disks", *Phys. Rev. E*, **51**, 718, (1995).

[Gol60] W. Goldsmith, *Impact*, Edward Arnold, London, (1960).

[GZ93] I. Goldhirsch und G. Zanetti, "Clustering instability in dissipative gases", *Phys. Rev. Lett.*, **70** (11), 1619, (1993).

[Haf83] P.K. Haff, "Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon", *J. Fluid Mech.*, **134**, 401, (1983).

[Hag52] Hagen, "Über den Druck und die Bewegung des trockenen Sandes", *Monatsberichte der königlich, preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, Seite 35, 19. Januar (1852).

[HB83] J. Happel und H. Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics*, Martinus Nijhoff Publishers, den-Haag, Holland, (1983).

[HBP+94] F. Heslot, T. Baumberger, B. Perrin, B. Caroli und C. Caroli, "Creep, stick-slip, and dry-friction dynamics: Experiments and a heuristic model", *Phys. Rev. E*, **49** (6), 4973, (1994).

[HCHF66] R. Hogg, D.S. Cahn, T.W. Healy und D.W. Fuerstenau, "Diffusional mixing in an ideal system", *Chem. Eng. Sc.*, **21**, 1025, (1966).

[Hem96] J. Hemmingsson, "A sandpile model with dip", *Physica A*, **230**, 329, (1996).

[Her82] H. Hertz, "Über die Berührung fester elastischer Körper", *Journal f. reine u. angew. Math.*, **92**, 156, (1882).

[Her95] H.J. Herrmann, "Die wunderbare Welt der Schüttgüter", *Phys. Bl.*, **51** (11), 1083, (1995).

[HI95] H. Hayakawa und K. Ichiki, "Statistical theory of sedimentation of disorderd suspensions", *Phys. Rev. E*, **51** (5), R3815, (1995).

[HIN+96] S. Horikawa, T. Isoda, T. Nakayama, A. Nakahara und M. Matsushita, "Self-organized critical density waves of granular particles flowing through a pipe", *Physica A*, **233**, 699, (1996).

[HK94] K.M. Hill und J. Kakalios, "Reversible axial segregation of binary mixtures of granular materials", *Phys. Rev. E*, **49** (5), R3610, (1994).

[HK95] K.M. Hill und J. Kakalios, "Reversible axial segregation of rotating granular media", *Phys. Rev. E*, **52** (4), 4393, (1995).

[HKC96] K.M. Hill, J. Kakalios und A. Caprihan, "Magnetic Resonance Imaging of Granular Media Segregated in a Rotating Drum", *Preprint*, (1996).

[HM92] J.A.C. Humphrey und H. Murata, "On the Motion of Solid Spheres Falling Through Viscous Fluids in Vertical and Inclined Tubes", *J. Fluids Eng.*, **114**, 2, (1992).

[HP72] J. Hardy und Y. Pomeau, "Thermodynamics and Hydrodynamics for a modeled fluid", *J. Math. Phys.*, **13**, 1042, (1972).

[HSB95] J.M. Hertzsch, F. Spahn und N.V. Brilliantov, "On Low-Velocity Collisions of Viscoelastic Particles", *J. de Phys. II*, **5**, 1725, (1995).

[HSK+90] G.A. Held, D.H. Solina, D.T. Keane, W.J. Haag, P.M. Horn und G. Grinstein, "Experimental study of critical-mass fluctuations in an evolving sandpile", *Phys. Rev. Lett.*, **65** (9), 1120, (1990).

[Ján91] I.M. Jánosi, *Self-organized criticality*, Dissertation, Eötvös Universty, Budapest, (1991).

[JB93] Jullien *et al.* und Barker *et al.*, "Comment and Reply on: Three-Dimensional Model for Particle-Size Segregation by Shaking", In *Phys. Rev. Lett.* [JMP92], Seite 2194.

[JJ87] P.C. Johnson und R. Jackson, "Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing", *J. Fluid Mech.*, **176**, 67, (1987).

[JLN89] H.M. Jaeger, C.h. Liu und S.R. Nagel, "Relaxation at the angle of repose", *Phys. Rev. Lett.*, **62** (1), 40, (1989).

[JLNW90] H.M. Jaeger, C.h. Liu, S.R. Nagel und T.A. Witten, "Friction in granular flows", *Europhys. Lett.*, **11** (7), 619, (1990).

[JM90] R. Jullien und P. Meakin, “A mechanism for particle size segregation in three dimensions”, *Nature*, **344**, 425, (1990).

[JM92] M. Jean und J.J. Moreau, in , A. Curnier: Herausgeber, *Contact Mechanics*, Seite 31, Presses Université Romandes, Lausanne, (1992).

[JMP92] R. Jullien, P. Meakin und A. Pavlovitch, “Three-Dimensional Model for Particle-Size Segregation by Shaking”, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (4), 640, (1992).

[JMP93] R. Jullien, P. Meakin und A. Pavlovitch, “Particle Size Segregation by Shaking in two-dimensional disc packings”, *Europhys. Lett.*, **22**, 523, (1993).

[JN92] H.M. Jaeger und S.R. Nagel, “Physics of the Granular State”, *Science*, **255**, 1523, (1992).

[JNB96] H.M. Jaeger, S.R. Nagel und R.P. Behringer, “The Physics of the Granular Materials”, *Physics Today*, **49** (4), 32, (1996).

[Job93] E. Jobs, “Computersimulationen geschüttelter granularer Materie”, Diplomarbeit, Universität Duisburg, (1993).

[Joh85] K.L. Johnson, *Contact Mechanics*, Cambridge University Press, (1985).

[KEK+96] J.B. Knight, E.E. Ehrichs, V.Y. Kupermann, J.K. Flint, H.M. Jaeger und S.R. Nagel, “Experimental study of granular convection”, *Phys. Rev. E*, **54** (5), 5726, (1996).

[KFA89] *Computersimulation in der Physik*, Kernforschungsanlage Jülich, (1989), 20. IFF Ferienkurs.

[KJN93] J.B. Knight, H.M. Jaeger und S.R. Nagel, “Vibration-induced size separation in granular media: the convection connection”, *Phys. Rev. Lett.*, **70** (24), 3728, (1993).

[KK87] G. Kuwabara und K. Kono, “Restitution coefficient in a collision between two spheres”, *Japan J. Appl. Phys.*, **26**, 1230, (1987).

[KK94a] A. Károlyi und J. Kertész, “Granular Media Lattice Gas”, *Braz. J. of Phys.*, **24** (4), 922, (1994).

[KK94b] A. Károlyi und J. Kertész, "Hydrodynamic cellular automata for granular media", in *Proceedings of the 6th EPS-APS International Conference on Physics Computing*, Lugano, (1994), CSCS.

[KK96] A. Károlyi und J. Kertész, in , D.E. Wolf, M. Schreckenberg und A. Bachem: Herausgeber, *Traffic and Granular Flow*, Seite 359, World Scientific, Singapore, (1996).

[KNWZ89] L.P. Kadanoff, S.R. Nagel, L. Wu und S.m. Zhou, "Scaling and universality in avalanches", *Phys. Rev. A*, **39** (12), 6524, (1989).

[Kon86] K. Konrad, "Dense-Phase Pneumatic Conveying: A Review", *Powder Technol.*, **49**, 1, (1986).

[Lac54] P.M.C. Lacey, "Developments in the theory of particle mixing", *J. Appl. Chem.*, **4**, 257, (1954).

[Lad93] A.J.C. Ladd, "Short-Time Motion of Colloidal Particles: Numerical Simulation via a Fluctuating Lattice-Boltzmann Equation", *Phys. Rev. Lett.*, **70** (9), 1339, (1993).

[Lad94a] A.J.C. Ladd, "Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation", *J. Fluid Mech.*, **271**, 285, (1994).

[Lad94b] A.J.C. Ladd, "Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Numerical results", *J. Fluid Mech.*, **271**, 311, (1994).

[Lad95] A.J.C. Ladd, "Time-Dependent Collective Diffusion of Colloidal Particles", *Phys. Rev. Lett.*, **74** (2), 318, (1995).

[LCB+94a] S. Luding, E. Clement, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran, "Anomalous energy dissipation in molecular dynamics simulations of grains: the „detachment“ effect", *Phys. Rev. E*, **49**, 4113, (1994).

[LCB+94b] S. Luding, E. Clement, A. Blumen, J. Rajchenbach und J. Duran, "Onset of convection in molecular dynamics simulations of grains", *Phys. Rev. E*, **50**, R1762, (1994).

[LCRD96] S. Luding, E. Clement, J. Rajchenbach und J. Duran, "Simulations of Pattern Formation in Vibrated Granular Media", *Preprint*, (1996).

[LDF89] C. Laroche, D. Douady und S. Fauve, "Convective Flow of Granular Masses under Vertical Vibrations", *J. Phys. (France)*, **50**, 699, (1989).

[Lee94] J. Lee, "Density waves in flows of granular media", *Phys. Rev. E*, **49** (1), 281, (1994).

[LH95] S.J. Linz und P. Hänggi, "A minimal model for avalanches in granular systems", *Phys. Rev. E*, **51**, 2538, (1995).

[LHB94] S. Luding, H.J. Herrmann und A. Blumen, "Simulations of two-dimensional arrays of beads under external vibrations: Scaling behaviour", *Phys. Rev. E*, **50**, 3100, (1994).

[Lid96] D.R. Lide, *Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, 77. Ausgabe, (1996).

[LL66] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Akademie-Verlag, (1966).

[LN92] C.h. Liu und S.R. Nagel, "Sound in sand", *Phys. Rev. Lett.*, **68** (15), 2301, (1992).

[LNS+95] C.h. Liu, S.R. Nagel, D.A. Schecter, S.N. Coppersmith, S. Majumdar, O. Narayan und T.A. Witten, "Force Fluctuations in Bead Packs", *Science*, **269**, 513, (1995).

[Luo93] M.P. Luong, "Flow characteristics of granular materials", *Part. Part. Syst. Charact.*, **10**, 79, (1993).

[MB91] A. Mehta und G.C. Barker, "Vibrated Powders: A microscopic approach", *Phys. Rev. Lett.*, **67** (3), 394, (1991).

[MBF76] N. Maw, J.R. Barber und J.N. Fawcett, "The oblique impact of elastic spheres", *Wear*, **38**, 101, (1976).

[MD53] R.D. Mindlin und H. Deresiewicz, "Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces", *J. Appl. Mech.*, **20**, 327, (1953).

[Meh94] A. Mehta, *Granular Matter*, Springer, (1994).

[Mel96] S. Melin, *Schallausbreitung in granularen Medien*, Dissertation, Universität Marburg, (1996).

[MGLARR+93] E. Morales-Gamboa, J. Lomnitz-Adler, V. Romero-Rochin, R. Chicharro-Serra und R. Peralta-Fabi, "Two-dimensional avalanches as stochastic Markov processes", *Phys. Rev. E*, **47** (4), R2229, (1993).

[MHKS97] H.A. Makse, S. Havlin, P.R. King und H.E. Stanley, "Stratification and Size Segregation in Sandstone", *Preprint*, (1997).

[Mou94] C. Moukarzel, "Size segregation under unbaised excitations", *Preprint*, (1994).

[MS96] G. Metcalfe und M. Shattuck, "Pattern formation during mixing and segregation of flowing granular materials", *Physica A*, **233**, 709, (1996).

[MSHV95] E. Manger, T. Solberg, B.H. Hjertager und D. Vareide, "Numerical simulation of the ticking hourglass", *Int. J. of Multiphase Flow*, **21** (4), 561, (1995).

[MSMO95] G. Metcalfe, T. Shinbrot, J.J. McCarthy und J.M. Ottino, "Avalanche mixing of granular solids", *Nature*, **374**, 39, (1995), mit einer Einführung von R.P. Behringer auf Seite 15.

[MUS94] F. Melo, P.B. Umbanhowar und H.L. Swinney, "Transition to Parametric Wave Patterns in a Vertically Oscillated Granular Layer", *Phys. Rev. Lett.*, **72** (1), 172, (1994).

[MUS95] F. Melo, P.B. Umbanhowar und H.L. Swinney, "Hexagons, Kinks, and Disorder in Oscillated Granular Layers", *Phys. Rev. Lett.*, **75** (21), 3838, (1995).

[MY92] S. McNamara und W.R. Young, "Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium", *Phys. Fluids A*, **4** (3), 496, (1992).

[MY94] S. McNamara und W.R. Young, "Inelastic collapse in two dimensions", *Phys. Rev. E*, **50** (1), R28, (1994).

[NACF97] M. Nakagawa, S.A. Altobelli, A. Caprihan und E. Fukushima, “NMRI Study: Axial migration of radially segregated core of granular mixtures in a horizontal rotating cylinder”, *Preprint*, (1997).

[Nak94] M. Nakagawa, “Axial Segregation of granular flows in a horizontal rotating cylinder”, *Chem. Eng. Sc.*, **49** (15), 2540, (1994).

[NL80] R.M. Nedderman und C. Laohakul, “The thickness of the shear zone of flowing granular material”, *Powder Technol.*, **25**, 91, (1980).

[NO93] H. Nishimori und N. Ouchi, “Formation of ripple patterns and dunes by wind-blown sand”, *Phys. Rev. Lett.*, **71** (1), 197, (1993).

[Noe93] D.A. Noever, “Himalayan sandpiles”, *Phys. Rev. E*, **47** (1), 724, (1993).

[NS92] K. Nagel und M. Schreckenberg, “A cellular automaton model for freeway traffic”, *J. de Phys. I*, **2**, 2221, (1992).

[OBS92] A. Okabe, B. Boots und K. Sugihara, *Spatial Tesselations, Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*, Wiley series in probability and mathematical statistics, John Wiley & Sons, Chichester, England, (1992).

[OE94] R.B.S. Oakeshott und S.F. Edwards, “Perturbative theory of the packing of mixtures and of non-spherical particles”, *Physica A*, **202**, 482, (1994).

[Oga78] S. Ogawa, in , S.C. Cowin und M. Satake: Herausgeber, *Proceedings of the US-Japan Seminar on Continuum-Mechanical and Statistical Approaches in the Mechanics of Granular Materials*, Tokyo, (1978).

[Oya39] Y. Oyama, “(Titel und Text in Japanisch)”, *Bull. Inst. Phys. Chem. Res., Tokyo*, **18**, 600, (1939).

[PB93a] H.K. Pak und R.P. Behringer, “Surface Waves in Vertically Vibrated Granular Materials”, *Phys. Rev. Lett.*, **71** (12), 1832, (1993).

[PB93b] T. Pöschel und V. Buchholtz, "Static Friction Phenomena in Granular Materials: Coulomb Law versus Particle Geometry", *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 3963, (1993).

[PB95] T. Pöschel und V. Buchholtz, "Complex flow of granular material in a rotating cylinder", *Chaos, Solitons & Fractals*, **5** (10), 1901, (1995).

[PH94] G. Peng und H.J. Herrmann, "Density waves of granular flow in a pipe using lattice-gas automata", *Phys. Rev. E*, **49** (3), R1796, (1994).

[PH95] G. Peng und H.J. Herrmann, "Density waves and 1/f density fluctuations in granular flow", *Phys. Rev. E*, **51** (3), 1745, (1995).

[Pös94] T. Pöschel, "Recurrent Clogging and Density Waves in Granular Material Flowing trough a Narrow Pipe", *J. de Phys. I*, **4**, 499, (1994).

[PTVF92] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling und B.P. Flanery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, 2nd Ausgabe, (1992).

[Puh93] H. Puhl, "Sandpiles on random lattices", *Physica A*, **197**, 14, (1993).

[PY96] B.A. Peratt und J.A. Yorke, "Continuous avalanche mixing of granular solids in a rotating drum", *Europhys. Lett.*, **35** (1), 31, (1996).

[QdL92] Y.H. Qian, D. d'Humières und P. Lallemand, "Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation", *Europhys. Lett.*, **17** (6), 479, (1992).

[Rad95] F. Radjai, *Dynamique des rotations et frottement collectif dans les systèmes granulaires*, Dissertation, Université de Paris-Sud XI, Orsay, (1995).

[Raj90] J. Rajchenbach, "Flow in Powders: From discrete avalanches to continuous regime", *Phys. Rev. Lett.*, **65** (18), 2221, (1990).

[Raj91] J. Rajchenbach, "Dilatant Process for Convective Motion in a Sand Heap", *Europhys. Lett.*, **16** (2), 149, (1991).

[RBR96] F. Radjai, L. Brendel und S. Roux, "Nonsmoothness, indeterminancy, and friction in two-dimensional arrays of rigid particles", *Phys. Rev. E*, **54** (1), 861, (1996).

[RC71] A.R. Rogers und J.A. Clements, "The examination of segregation of granular materials in a tumbling mixer", *Powder Technol.*, **5**, 167, (1971).

[RCD93] J. Rajchenbach, E. Clement und J. Duran, in , Thorton: Herausgeber, *Powder and grains*, Brimingham, July (1993), Conference on micromechanics of granular media.

[Rey85] O. Reynolds, "On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact", *Philos. Mag. Ser. 5*, **20**, 469, (1885).

[RHH95] T. Raafat, J.P. Hulin und H.J. Herrmann, "Density waves in dry granular media falling down in a pipe", *Preprint*, (1995).

[RPBR95] F. Radjai, P.Evesque, D. Bideau und S. Roux, "Stick-slip dynamics of a one-dimensional array of particles", *Phys. Rev. E*, **52** (5), 5555, (1995).

[RPSS86] A. Rosato, F. Prinz, K.J. Strandburg und R. Swendsen, "Monte Carlo Simulation of Particulate Matter Segregation", *Powder Technology*, **49**, 59, (1986).

[RR95] F. Radjai und S. Roux, "Friction-induced self-organization of a one-dimensional array of particles", *Phys. Rev. E*, **51** (6), 6177, (1995).

[RSPS87] A. Rosato, K.J. Strandburg, F. Prinz und R.H. Swendsen, "Why the Brazil Nuts are on Top: Size Segregation of Particulate Matter by Shaking", *Phys. Rev. Lett.*, **58** (10), 1038, (1987).

[RVK93] J. Rosendahl, M. Vekić und J. Kelley, "Persitent self-organization of sandpiles", *Phys. Rev. E*, **47** (2), 1401, (1993).

[SA92] B.E. Sanders und N.L. Ackermann, in , H.H. Sheen et al.: Herausgeber, *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, Seite 281, Elsevier Science Publisher, (1992).

[Sav79] S.B. Savage, "Gravity flow of cohesionless granular materials in chutes and vertical channels", *J. Fluid. Mech.*, **92**, 53, (1979).

[Sav84] S.B. Savage, "The mechanics of rapid granular flows", *Advances in applied mechanics*, **24**, 289, (1984).

[Sav92] S.B. Savage, "Instability of unbounded uniform granular shear flow", *J. Fluid Mech.*, **241**, 109, (1992).

[Sch95] S. Schwarzer, "Sedimentation and Flow Through Porous Media: Simulating Dynamically Coupled Discrete and Continuum Phases", *Phys. Rev. E*, **52** (6), 6461, (1995).

[Sch96a] J. Schäfer, *Rohrfluß granularer Materie: Theorie und Simulation*, Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität, Duisburg, (1996).

[Sch96b] T. Scheffler, "Granulare Materie: Trommelmischer und Fluss durch eine Röhre in Theorie und Simulation", Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität, Duisburg, (1996).

[SDW96] J. Schäfer, S. Dippel und D.E. Wolf, "Force schemes in simulations of granular materials", *J. de Phys. I*, **6** (1), 5, (1996).

[SHB95] F. Spahn, J.M. Hertzsch und N.V. Brilliantov, "The Role of Particle Collisions for the Dynamics in Planetary Rings", *Chaos, Solitons & Fractals*, **5** (10), 1945, (1995).

[SKB91] S. Das Gupta, D.V. Khakhar und S.K. Bhatia, "Axial segregation of particles in a horizontal rotating cylinder", *Chemical Engineering Science*, **46** (5/6), 1513, (1991).

[SL88] S.B. Savage und C.K.K. Lun, "Particle size segregation in inclined chute flow of dry cohesionless granular solids", *J. Fluid Mech.*, **189**, 311, (1988).

[SL92] C.E. Smith und P.P. Liu, "Coefficients of Restitution", *J. Appl. Mech.*, **59**, 963, (1992).

[Soo67] S.L. Soo, *Fluid Dynamics of Multiphase Flow*, Blaisdell Publishing Company, Waltham, Massachusetts, (1967).

[SS89] A. Sornette und D. Sornette, "Self-Organized Criticality and Earthquakes", *Europhys. Lett.*, **9** (3), 197, (1989).

[SSN96] M. Schreckenberg, A. Schadschneider und K. Nagel, "Zellularautomaten simulieren Straßenverkehr", *Phys. Bl.*, **52** (5), 460, (1996).

[SW95] J. Schäfer und D.E. Wolf, "Bistability in granular flow along corrugated walls", *Phys. Rev. E*, **51**, 6154, (1995).

[Tak55] Y. Takaisi, "The Drag on a Circular Cylinder moving with Low Speeds in a Viscous Liquid between Two Parallel Walls", *J. Phys. Soc. Jap.*, **10** (8), 685, (1955).

[Tan64] S. Taneda, "Experimental Investigation of the Wall-Effect on a Cylindrical Obstacle Moving in a Viscous Fluid at Low Reynolds Numbers", *J. Phys. Soc. Jap.*, **19** (6), 1024, (1964).

[Tho93] C. Thornton: Herausgeber, *Powders and Grains 93*, Balkema, (1993).

[UMS96] P.B. Umbanhowar, F. Melo und H.L. Swinney, "Localized excitations in a vertically vibrated granular layer", *Nature*, **382**, 793, (1996).

[VB72] W.M. Visscher und M. Bolsterli, "Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions", *Nature*, **239**, 504, (1972).

[VH95] S. Vollmar und H. Herrmann, "Settling of particles studied by a hydrodynamic cellular automaton for granular media", *Physica A*, **215**, 411, (1995).

[Wal88] O.R. Walton, , "Granular Solids Flow Projekt, Quarterly Report", Lawrence Livermore Nat. Lab., Jan.-März (1988), UCID 20297-88-1.

[WB86] O.R. Walton und R.L. Braun, "Viscosity, Granular-Temperature, and Stress Calculations for Shearing Assemblies of Inelastic, Frictional Disks", *J. of Rheology*, **30**, 949, (1986).

[WD88] H.A. Weaver und L. Dany: Herausgeber, *The formation and evolution of planetary systems*, (1988).

[Wei58] S.S. Weidenbaum, "Mixing of solids", in *Adv. Chem. Eng.*, Band II, Seite 209, Acad. Press New York, (1958).

[Wie87] W. Wiesel, "Inelastic Collisions in Narrow Planetary Rings", *Icarus*, **71**, 78, (1987).

[Wil76] J.C. Williams, "The Segregation of Particulate Materials. A Review", *Powder Technology*, **15**, 245, (1976).

[WMH+93] X.I. Wu, K.J. Maloy, A. Hansen, M. Ammi und D. Bideau, "Why hour glasses tick", *Phys. Rev. Lett.*, **71** (9), 1363, (1993).

[Wol89] D.E. Wolf, *Computersimulation in der Physik*, Kapitel: Fraktales Wachstum, Seite 16.1, Kernforschungsanlage Jülich, (1989), 20. IFF Ferienkurs.

[Wol96] D.E. Wolf, in , K.H. Hoffmann und M. Schreiber: Herausgeber, *Computational Physics*, Seite 64, Springer, Heidelberg, (1996).

[WSB96] D.E. Wolf, M. Schreckenberg und A. Bachem: Herausgeber, *Traffic and Granular Flow*, World Scientific, Singapore, (1996), Proceedings der Konferenz vom 9.-11. Oktober, 1995.

[ZLL+94] O. Zik, D. Levine, S.G. Lipson, S. Shtrikman und J. Stavans, "Rotationally induced Segregation of granular Materials", *Phys. Rev. Lett.*, **73** (5), 644, (1994).