

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Eigenschaften granularer Materie	3
1.1 Phänomenologie	3
1.1.1 Dilatanz	3
1.1.2 Gewölbebildung	5
1.1.3 Fluidisierung und Konvektion	6
1.1.4 Inelastische Mikrostruktur	7
1.1.5 Selbstorganisation	8
1.1.6 Größensegregation	9
1.1.7 Weitere Eigenschaften	10
1.2 Makromechanik	11
1.2.1 Berechtigung der Kontinuumsbeschreibung	12
1.2.2 Klassifizierung der Flußformen	12
1.2.3 Kontinuumstheorien und kinetische Theorien	13
1.2.4 Stoffgleichungen für granulare Materialien	14
1.2.5 Diskussion	15
1.3 Mikromechanik der Teilchenkollision	16
1.3.1 Beschreibung der Stoßgeometrie	16
1.3.2 Frontale Kollisionen	17
1.3.3 Schiefe Kollisionen	20
1.3.4 Diskussion	23
2 Simulationsmethoden	25
2.1 Ereignisgesteuerte (ED-) Molekulardynamik	26
2.1.1 Der Kollisionsoperator	26
2.1.2 Die Kollisionszeit	27
2.1.3 Intrinsische Probleme: Zenon-Effekt	29
2.2 Zeitschrittgesteuerte (TD-) Molekulardynamik	30
2.2.1 Prädiktor-Korrektor-Verfahren	30
2.2.2 Kontaktkräfte	32
2.2.3 Intrinsische Probleme: <i>Detachment</i> , Bremsversagen	33
2.3 Hybridmethoden	38

3	Methodische Aspekte der TD-Simulation	39
3.1	Normalkräfte	39
3.1.1	Allgemeine dissipative Rückstellkraft	39
3.1.2	Harmonische Rückstellkraft mit Dämpfung	41
3.1.3	Hertzsche Rückstellkraft	41
3.1.4	Hertzsche Rückstellkraft mit Dämpfung	42
3.1.5	Plastische Rückstellkraft	43
3.1.6	Vergleich der Kraftgesetze und Diskussion	43
3.2	Tangentialkräfte	46
3.2.1	Gleitreibung	46
3.2.2	Viskose Reibung	47
3.2.3	Regularisierte Gleitreibung	47
3.2.4	Lineare Tangentialfeder	48
3.2.5	Variable Tangentialfeder	50
3.2.6	Sägezahnkraft	51
3.2.7	Kombinationen mit anderen Rückstellkräften	51
3.2.8	Diskussion	54
3.3	Wechselwirkung mit einer rauhen Wand	55
4	Einfache Theorie des homogenen Flusses	59
4.1	Vorbemerkungen	60
4.1.1	Zur Annahme der Homogenität	60
4.1.2	Definition des Systems	61
4.2	Herleitung der Gleichungen	62
4.2.1	Änderungsrate der mittleren Axialgeschwindigkeit	63
4.2.2	Änderungsrate der thermischen Geschwindigkeit	63
4.3	Auswertung der Gleichungen	66
4.3.1	Stationäre Zustände, Reduktion	66
4.3.2	Stabilität der stationären Zustände	67
4.3.3	Gültigkeitsbereich	67
4.3.4	Erweiterung zu höheren Dichten	68
4.3.5	Diskussion	70
4.4	Transienten	71
4.4.1	Anpassung der freien Parameter	71
4.4.2	Oszillatorische Relaxation und Fluktuationen	74
4.4.3	Abweichungen vom mittleren Systemverhalten	76
4.5	Stationäre Zustände	77
4.5.1	v_s als Funktion von W und η	80
4.5.2	σ_s als Funktion von W und η	83
4.5.3	v_s und σ_s als Funktion von e_n	84
4.5.4	v_s und σ_s als Funktion der Wandrauhigkeit	84
4.5.5	Das Verhalten realistischer Systeme	85

5 Simulationen zum nichthomogenen Fluß	89
5.1 Validität und Anwendbarkeit von Simulationen	89
5.1.1 Bistabilität durch Bremsversagen	89
5.1.2 Ein „Phasendiagramm“ zur Anwendbarkeit	92
5.2 Breite Systeme: Radiale Struktur	93
5.3 Dichte Systeme: Erzwungene Ordnung	95
5.4 Inelastische Systeme: Teilchenpaare	98
5.5 Lange Systeme: Dichtewellen	101
5.5.1 Kinematische Wellen	102
5.5.2 Stationäre und dynamische Fundamentaldiagramme	103
5.5.3 Globales Fundamentaldiagramm	106
5.5.4 Diskussion	110
Zusammenfassung und Ausblick	111
Literaturverzeichnis	113
Anhang: Vorabveröffentlichungen	129