

# INHALTSVERZEICHNIS

EINLEITUNG	1
1 EIN ÜBERBLICK ÜBER DEN STAND DER FORSCHUNG	7
1.1 Simulationsmethoden . . . . .	8
1.2 Rheologie von Schüttgütern . . . . .	13
1.2.1 Kurzes Auffrischen der Kontinuumsmechanik . . . . .	13
1.2.2 Scheren einer newtonschen Flüssigkeit . . . . .	14
1.2.3 Scherzustände . . . . .	18
1.2.4 Typische Geometrien . . . . .	19
1.2.5 Scherzonen und Scherzonenbreiten . . . . .	20
1.2.6 Das Prinzip der minimalen Dissipation . . . . .	24
1.2.7 Konstitutive Beziehungen . . . . .	25
1.2.8 Nichtlokale Agitationen . . . . .	28
1.2.9 Dynamik auf einer Landschaft aus Spannungszuständen	31
2 PRÄPARATION DES SYSTEMS	37
2.1 Simulationsaufbau . . . . .	37
2.1.1 Geometrie und mikroskopische Parameter . . . . .	37
2.1.2 Natürliche Einheiten . . . . .	39
2.1.3 Iterationszahl und Zeitschrittanpassung . . . . .	40
2.1.4 Die Vorbereitung der Packung . . . . .	42
3 PRIMÄRMESSUNGEN	45
3.1 Vorüberlegungen anhand makroskopischer Größen . . . . .	46
3.1.1 Schwerpunktgeschwindigkeit . . . . .	46

3.1.2	Scherzellenvolumen . . . . .	47
3.1.3	Kräfte und Spannungen an den Wänden . . . . .	48
3.1.4	Erste Zusammenfassung . . . . .	50
3.2	Mesoskopische Felder auf einem Gitter . . . . .	51
3.2.1	Nutzung der Geometrie . . . . .	51
3.2.2	Mittelung der Größen . . . . .	52
4	COARSE-GRAINING AN WÄNDEN . . . . .	57
4.1	CG-Theorie ohne Ränder . . . . .	58
4.1.1	Mikroskopische Felder . . . . .	60
4.1.2	Von Mikro zu Makro . . . . .	62
4.1.3	Massenerhaltung . . . . .	64
4.1.4	Impulserhaltung . . . . .	65
4.1.5	Drehimpulserhaltung . . . . .	69
4.1.6	Erhaltungssätze im Gleichgewicht . . . . .	70
4.2	Komplikationen durch Wände . . . . .	71
4.2.1	Einbruch der Messgrößen . . . . .	71
4.2.2	Kontakte mit der Wand . . . . .	72
4.2.3	Kommutation . . . . .	73
4.3	Bewertung der CG-Korrekturschemata . . . . .	74
4.4	Korrekturschemata . . . . .	75
4.4.1	Der Ansatz der Renormalisierung . . . . .	75
4.4.2	Virtuelle Systeme . . . . .	76
4.4.3	Das (über-)große Teilchen . . . . .	79
4.4.4	Die Überschussmethode . . . . .	82
4.5	Anwendung der Schemata . . . . .	84
4.5.1	Anwendung auf das Testsystem . . . . .	84
4.5.2	Vergleich der Korrekturansätze anhand der Ergebnisse im Testsystem . . . . .	88
4.6	Schlussfolgerungen . . . . .	94
5	STATIONÄRE FELDER . . . . .	99
5.1	Das Spannungsfeld . . . . .	102
5.1.1	Ein Blick zu 2D . . . . .	102
5.1.2	Typische Spannungssprofile . . . . .	103
5.1.3	Der kinetische Beitrag zum Spannungsfeld . . . . .	105
5.1.4	Das Spannungsfeld als Funktion der Wandgeschwindigkeit . . . . .	107
5.2	Das Geschwindigkeitsfeld . . . . .	108
5.2.1	Ein Blick zu 2D . . . . .	109
5.2.2	Typische Geschwindigkeitsprofile . . . . .	110

5.2.3	Die Geschwindigkeitsfelder als Funktion der Wandgeschwindigkeit . . . . .	112
5.3	Packungsdichte . . . . .	116
5.3.1	Ein Blick zu 2D . . . . .	116
5.3.2	Typische Dichteprofile . . . . .	116
5.3.3	Das Dichtefeld als Funktion der Wandgeschwindigkeit . . . . .	120
5.4	Zusammenfassung . . . . .	120
6	VORHERSAGEN DURCH DIE NICHT-LOKALE THEORIE . . . . .	123
6.1	Das Fitten typischer Geschwindigkeitsprofile . . . . .	124
6.2	Die Störung als Funktion der Wandgeschwindigkeit . . . . .	126
6.3	Zusammenfassung und Interpretation . . . . .	129
7	KONSTITUTIVE GESETZE UND KRITISCHE GESCHWINDIGKEITEN . . . . .	131
7.0.1	Ein Blick zu 2D . . . . .	131
7.1	Die Hauptmasse . . . . .	132
7.1.1	Das Dilatanz- und das Reibungsgesetz . . . . .	133
7.1.2	Die Normaldrücke . . . . .	135
7.1.3	Die Winkelgeschwindigkeit . . . . .	136
7.2	Die Sonderrolle der Grenzschicht . . . . .	137
7.2.1	Von Kontakten und Kollisionen . . . . .	137
7.2.2	Scherung und Scherspannung . . . . .	140
7.3	Von der Wand ins Volumen . . . . .	143
7.3.1	Ortsabhängige Scherraten und Winkelgeschwindigkeiten . . . . .	144
7.3.2	Ortsabhängige Packungsdichte . . . . .	145
7.3.3	Ortsabhängige Normaldrücke . . . . .	148
7.4	Die Übergänge zwischen den Zuständen . . . . .	151
7.4.1	Von der Brechung der Symmetrie und dem Wachstum der Scherzonen . . . . .	151
7.4.2	Vom Block zum Fließen . . . . .	157
7.5	Zusammenfassung . . . . .	158
8	DER EINFLUSS DER MIKROSKOPISCHEN REIBUNG UND DER SYSTEMGRÖSSE . . . . .	163
8.0.1	Ein Blick zu 2D . . . . .	164
8.1	Der Einfluss der mikroskopischen Reibungskoeffizienten . . . . .	165
8.1.1	Das Abgleiten der Wände ohne Scherung . . . . .	165
8.1.2	Wandreibung . . . . .	169
8.1.3	Teilchenreibung . . . . .	171
8.2	Der Einfluss der Systemgröße . . . . .	174
8.2.1	Im System mit verteilter Hauptmasse . . . . .	175

8.2.2	Im System mit fließender Hauptmasse . . . . .	175
8.2.3	Zusammenfassung . . . . .	180
<b>9</b>	<b>ZEITABHÄNGIGE FELDER</b>	<b>185</b>
9.1	Zeitabhängige Felder: Ein Überblick . . . . .	185
9.1.1	Transienten in Wandnähe . . . . .	186
9.1.2	Transienten in der Hauptmasse . . . . .	187
9.2	Der fließende Block . . . . .	189
9.3	Zusammenfassung . . . . .	194
<b>10</b>	<b>LOGARITHMISCH LANGSAMES VERDICHTEN</b>	<b>195</b>
10.1	Phänomenologischer Ansatz . . . . .	196
10.2	Heuristisches Modell . . . . .	200
10.3	Zusammenfassung . . . . .	204
<b>11</b>	<b>BESTÄNDIGE RELATIONEN UND DIFFUSIVE SCHERRATEN</b>	<b>205</b>
11.1	Mittelung über die Hauptmasse . . . . .	206
11.2	Die Relaxationszeit . . . . .	208
11.3	Lokal oder nicht? . . . . .	211
11.4	Zusammenfassung . . . . .	215
	<b>FAZIT UND AUSBLICK</b>	<b>217</b>
<b>A</b>	<b>ANHANG</b>	<b>223</b>
A.1	Recheneffizienz . . . . .	223
A.1.1	Ausnutzung der Translationssymmetrie . . . . .	223
A.1.2	Cut-Off . . . . .	223
A.2	Spiegelung an Ecken und Bögen . . . . .	224
A.2.1	Ecken . . . . .	224
A.2.2	Bögen . . . . .	225
A.3	Mikroskopische Geometrien . . . . .	226
A.3.1	Die Geschwindigkeit eines haftenden Randteilchens . . . . .	226
A.3.2	Drehung eines Volumenelements . . . . .	228