

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	1
1.1 Um was geht es?	1
1.2 Simulation von Schüttgütern	4
2. Molekulardynamik (MD)	7
2.1 Bewegungsgleichungen	7
2.2 Wechselwirkung	8
2.2.1 Normalkomponente	9
2.2.2 Tangentialkomponente	11
2.2.3 Kohäsion	13
2.3 Lösungsalgorithmen	17
2.3.1 Verlet-Algorithmus	18
2.3.2 „leap-frog“-Algorithmus	19
2.3.3 Prädiktor-Korrektor-Algorithmus	23
2.4 Nachbarschaftstabellen	27
3. Resultate verschiedener Reibungsgesetze	33
4. Versuche in der Bodenmechanik	43
4.1 Einführung	43
4.2 Oedometer	47

4.2.1	Entlastung	52
4.2.2	Relaxation	53
4.2.3	Rotation der Kugeln	55
4.2.4	Zusammenfassung und Ausblick	57
4.3	Biaxial-Versuch	58
4.3.1	Kohäsion	64
4.3.2	Zusammenfassung und Ausblick	65
5.	Scherzelle	69
5.1	Das Experiment und die Simulation	69
5.2	Auf der Suche nach Übereinstimmung	73
5.3	Kinematische Größen	82
5.3.1	Rotation der Scheiben	82
5.3.2	Verteilungen	83
5.3.3	Einfluß der Packungsdichte	87
5.3.4	Weitere Resultate	89
5.4	Kontakte, Spannungen und Kräfte	91
5.4.1	Kontakte	91
5.4.2	Spannungen	98
5.4.3	Kräfte	105
5.5	Zusammenfassung und Ausblick	108
	Anhang	111
A.	Die Janssen-Formel	113

B. Der Zwei-Teilchen-Stoß	117
B.1 Lineare Wechselwirkungen	117
B.2 Nichtlineare Wechselwirkung	118
B.3 Bestimmung von k_n^{lin} und γ_n^{lin} für das lineare Kraftgesetz	120
C. Mikroskopische Definition des Spannungstensors	121
D. Reorganisationen im Oedometer	125
E. Eine Flüssigkeit in der Scherzellengeometrie	127