

Ereignisdiskrete Simulation einer Hochenergie-Kugelmühle

Dissertation

zu Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Roland Reichardt

aus Jülich

eingereicht dem

Fachbereich Maschinenbau

der Universität Siegen

Referent: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang Wiechert

Korreferent: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Kolb

Tag der mündlichen Prüfung: 11.11.2005

Uniform Resource Name: [urn:nbn:de:hbz:467-1914](https://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:hbz:467-1914)

Kurzfassung

Hochenergie-Kugelmühlen sind Zerkleinerungsmaschinen, welche bereits pulverförmig vorliegendes Ausgangsmaterial in einem Trockenprozess auf eine Partikelgröße unterhalb von $1\ \mu\text{m}$ zermahlen. Hauptsächlich werden diese Maschinen jedoch nicht zur Reduzierung der Partikelgröße, sondern für einen wissenschaftlich weitaus interessanteren Aspekt eingesetzt, dem *mechanischen Legieren*. Da diese Maschinen erst seit ca. 10 Jahren existieren, sind die Mechanismen im Innern der Mühle bisher nicht verstanden. Die Betriebsparameter, wie Rotordrehzahl oder Kugelfüllung werden empirisch, wie in der mechanischen Verfahrenstechnik üblich, durch Erfahrung und Prozessbeobachtung bestimmt. Experimentelle Daten über das Verhalten der Maschine sind nur makroskopisch erhoben worden. Literaturdaten über das Kollisionsverhalten der verwendeten Materialpaarungen sind nicht vorhanden. Computersimulationen sollen helfen, die Vorgänge innerhalb der Maschine zu verstehen, um etwa Materialwissenschaftlern Informationen über die Geschwindigkeitsverteilung der kollidierenden Mahlkugeln zu liefern.

Als Simulationsmethode wurde ein ereignisdiskretes Verfahren gewählt, welches erstmals auf diese Problemstellung angewendet wurde und unter realen Prozessbedingungen anwendbar ist. Die Schwachstellen der bisher veröffentlichten ereignisdiskreten Algorithmen wurden erkannt, dokumentiert, und durch neue Verfahren behoben. Ferner wurden bisher eingesetzte Verfahren zeiteffizient und numerisch korrekt optimiert.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden eigens Versuchsaufbauten konstruiert, um das Kollisionsmodell mit experimentell gewonnenen Daten zu parametrisieren. Als Sensor wurde eine Hochgeschwindigkeitskamera eingesetzt, deren Daten durch eine für diesen speziellen Zweck erstellte Bildverarbeitungs- und Auswertungssoftware analysiert wurden.

Da keine experimentellen Daten über das Kollisionsverhalten der Mahlkugeln während des Prozesses vorliegen, wurde zur Überprüfung der Realitätstreue des Simulators ein Modell aus der statistischen Physik entwickelt. Hiermit konnte der Simulator anhand der errechneten Geschwindigkeitsverteilungen verifiziert werden.

Mit dem entwickelten Simulator wurden diverse Parameterstudien durchgeführt, die, obwohl zeitoptimiert, auf einem durchschnittlichen Computer mehrere Jahre dauernd, mit Hilfe des universitätseigenen Rechenclusters in einigen Tagen durchgeführt werden konnten. Basierend auf den Simulationsergebnissen konnten die für den Mahlprozess wichtigen Geschwindigkeitsverteilungen in Abhängigkeit von den Betriebsparametern gewonnen werden. Diese Daten wurden sowohl mit statistischen Methoden und Computeranimationen analysiert.

Bisher wurde vermutet, dass der Großteil der Kollisionen zur Zerkleinerung des Mahlguts beiträgt. Anhand von Auswertungen dieser Parametervariationen konnte jedoch durch Untersuchungen der Verteilungen der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit gezeigt werden, dass diese bei den meisten Kollisionen weit unterhalb von $0,5\ \text{m/s}$ liegen. Kollisionen mit hoher Kollisionsenergie sind relativ selten – ganz im Gegensatz zu dem, was der Name „Hochenergie“-Kugelmühle vermuten lässt und bisher der allgemeinen Auffassung entsprach. Eine wichtige und neue Erkenntnis ist, dass der Mahleffekt in der Hochenergie-Kugelmühle, da er auf Kollisionen mit hoher Relativgeschwindigkeit beruht, nur relativ selten stattfindet.

Aufgrund der neu vorliegenden Erkenntnisse, wurden grundlegende Konstruktionsänderungen der drei zentralen Baugruppen vorgeschlagen, welche mittlerweile von der Universität Siegen als Patent angemeldet wurden.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Assistent am Lehrstuhl für Simulationstechnik und Informatik im Maschinenbau, Institut für Systemtechnik, der Universität Siegen.

Ich danke meinem Betreuer Prof. Dr. Wiechert, dem Leiter des Lehrstuhls für Simulationstechnik und Informatik im Maschinenbau, für die Inspiration, während meiner Tätigkeit in der Industrie, mich mit diesem Thema zu beschäftigen. Mein Dank gilt insbesondere für das mir entgegengebrachte Vertrauen, mich von Anfang an in die Lehre, auch mit eigenen Lehrveranstaltungen, einzubinden. Vor allem danke ich ihm, für die interdisziplinäre, und für mich sehr inspirative, Zusammenstellung seines Forschungsteams.

Ich bedanke mich bei Prof. Dr. Kolb, der meine Arbeit, auch aus der Sichtweise eines Informatikers und Computergraphikers, beurteilt hat.

Allen Mitarbeitern des Lehrstuhls danke ich für freundschaftliche Hilfsbereitschaft. Herrn Dipl.-Ing. Udo Buschmann, meinem langjährigen Büro-Kollegen, danke ich dafür, von Anfang an stets ein offenes Ohr für meine „neuen“ Ideen gehabt zu haben. Herrn Dr. Clemens Stupperich danke ich für die hilfsbreite und freundschaftliche Unterstützung in physikalischen Fragen und die Durchführung der Experimente zusammen mit Herrn Dipl.-Ing. Stephan Adam. Herrn Dipl.-Ing. Michael Weitzel und Herrn Dipl.-Ing. Marc Daniel Haunschild danke ich für die immer geduldigen Beantwortungen meiner Fragen zur Informatik und des Betriebssystems Linux. Sowohl Herrn Dr.-Ing. Dipl.-math. Eric Eberhard John von Lieres und Wilkau als auch Frau Dipl.-math. Katharina Nöh danke ich für die Nachhilfestunden in Numerischer Mathematik.

Herrn Prof. Dr. Dr. Thorsten Fließbach danke ich für die verständnisvolle und bereitwillige Unterstützung in der Herleitung der Formeln für die theoretische statistische Physik.

Dem Dekan, Herrn Prof. Dr. Lohe, danke ich für die „konstruktiven“ Hinweise zu Patentfragen und die Ermunterung zur offensiven Patentformulierung.

Abschließend danke ich vor allem meiner geliebten Frau Dunja Corinna und meinen Kindern Nils Robert und Lisa Renee, die mich in der abschließenden und familiär schwierigen Zeit des Zusammenschreibens positiv abgelenkt haben und mir immer viel Freude bei der wissenschaftlichen Arbeit gespendet haben. Ohne die Unterstützung meiner Familie wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Inhaltsverzeichnis

Liste der verwendeten Abkürzungen	VII
Liste der verwendeten Symbole	IX
1. Einleitung.....	1
1.1 Zielsetzung.....	2
1.2 Gliederung.....	3
2. Kugelmühlen.....	5
2.1 Trommelmühlen	6
2.2 Rührwerks-Kugelmühlen	7
3. Hochenergie-Kugelmühlen	9
3.1 Technischer Aufbau	10
3.1.1 Mahleinheit	10
3.1.2 Rotor.....	11
3.1.3 Antrieb	12
3.2 Anwendungen	13
3.2.1 Mechanisches Legieren.....	14
3.3 Zentrale Fragestellungen	16
3.3.1 Wechsel des Mahlkugel-Materials	17
3.3.2 Änderung der Pulvermenge pro Charge	18
3.3.3 Pulverproduktion in unterschiedlichen Maschinengrößen.....	19
4. Zeitkontinuierliche Vielteilchen-Simulation.....	21
4.1 Funktionsprinzip zeitkontinuierlicher Simulationen	21
4.2 Implementierungsvarianten	22
5. Ereignisdiskrete Simulatoren	27
5.1 Ereignisdiskrete Simulation von Vielteilchensystemen.....	28
5.2 Klassisches Funktionsprinzip ereignisdiskreter Simulationen	29
5.3 Ungültige Ereignisse	31
5.4 Verbesserungen des klassischen DES Funktionsprinzips.....	33
5.5 Kollisionserkennung bei ereignisdiskreten Simulationen.....	37
5.5.1 Verbesserung der Kugel-Kugel Kollisionserkennung.....	38
5.6 Problemfälle bei ereignisdiskreten Algorithmen	39
5.6.1 Inelastischer Kollaps.....	39

5.6.2	Überlappung von Kugeln	40
6.	Kollisionsmodell	43
6.1	Normaler Restitutionskoeffizient	44
6.2	Tangentialer Restitutionskoeffizient.....	48
7.	Experimente.....	53
7.1	Transparente Mahleinheit.....	53
7.1.1	Verhalten der Kugeln in Rotornähe.....	54
7.1.2	Verhalten der Kugeln bei typischen Betriebsparametern	55
7.1.3	Bewegungsverhalten der Kugeln	56
7.2	Schussapparatur	57
7.2.1	Versuchsaufbau	58
7.2.2	Bildverarbeitung	59
7.2.3	Auswertung.....	61
8.	Implementierung der Kollisionserkennung.....	63
8.1	Generelle Vorgehensweise	63
8.2	Kugel-Kugel-Kollisionserkennung.....	65
8.2.1	Nullstellenpaar: Positiv-Positiv	65
8.2.2	Nullstellenpaar: Negativ-Negativ.....	66
8.2.3	Nullstellenpaar: Konjugiert Komplex	66
8.2.4	Nullstellenpaar: Negativ-Positiv	67
8.2.5	Reduzierung auf eine Nullstelle	67
8.2.6	Sonderfall.....	69
8.3	Kugel-Systemgrenze-Kollisionserkennung	69
8.3.1	Kugel-Trommelwand-Kollisionserkennung.....	70
8.3.2	Kugel-Zylinderwand-Kollisionserkennung	71
8.3.3	Inkontinenz – Fall 1	72
8.4	Kugel-Rotor-Kollisionserkennung	73
9.	Implementierung der Kollisionsbehandlung	79
9.1	Generelle Vorüberlegungen	79
9.2	Kugel-Kugel Kollisionsbehandlung	80
9.3	Kugel-Systemgrenze Kollisionsbehandlung	81
9.4	Kugel-Rotor Kollisionsbehandlung.....	83
10.	Ereignisverwaltung.....	85
10.1	Anforderungen an Ereignisverwaltung und Datenstrukturen	85

10.2	Globale Ereignislisten.....	87
10.3	Lokale Ereignislisten	87
10.4	Löschen von Ereignissen	89
10.4.1	Problematik des rekursiven Löschens.....	89
10.4.2	Inkontinenz – Fall 2: Konzeptfehler in Löschroutine.....	90
10.4.3	Löschen nach Speichern.....	91
11.	Partitionierung	93
11.1	Sektoren.....	93
11.2	Scheiben	94
11.3	Scheibenwechsel und –Zugehörigkeit.....	95
11.4	Virtuelle Ereignisse.....	97
11.5	Notwendige Kollisionsprüfungen	98
12.	Visualisierung	101
12.1	Visualisierung mit MATLAB.....	101
12.2	Photorealistische Darstellung.....	103
12.3	Visualisierung mit OpenGL – MillVis	104
13.	Initialisierung und Stationarität.....	107
13.1	Gleichverteilung der Kugelpositionen	107
13.2	Stationarität	110
13.3	Einfluss der Initialisierung auf die Simulationsergebnisse	112
14.	Verifikation des Simulators	115
14.1	Numerischer Fehler.....	116
14.2	Physikalische Verifikation	118
15.	Laufzeitverhalten	121
15.1	Rechenzeit in Abhängigkeit der Problemgröße	121
15.2	Einfluss der Partitionierung auf die Rechenzeit.....	124
16.	Statistische Methoden	127
16.1	Sektoren als Volumenelemente	128
16.2	Ringe als Volumenelemente	129
16.3	Statistische Kennzahlen	131
17.	Räumliche Verteilung der Geschwindigkeit und Aufenthaltshäufigkeit	135
17.1	Absolute Geschwindigkeit der Kugeln	135
17.2	Normal-Komponente der Kollisionsgeschwindigkeit.....	139

17.2.1	Kugel-Kugel Kollisionsklasse.....	141
17.2.2	Kugel-Zylinderwand Kollisionsklasse	142
17.2.3	Kugel-Trommelwand Kollisionsklasse	143
17.2.4	Kugel-Rotor Kollisionsklasse	144
17.2.5	Geschwindigkeitsverteilung pro Kollisionsklasse.....	145
18.	Parameterstudien mit dem Kollisionsmodell	147
18.1	Konstante normale Restitution.....	147
18.2	Dynamische normale und tangentiale Restitution.....	149
18.3	Einfluss der tangentialen Restitution	150
19.	Variation der Betriebsparameter	155
19.1	Absolute Geschwindigkeit	155
19.2	Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit.....	156
19.3	Abschätzung der mechanischen Motorleistung	157
20.	Vorschläge zur Konstruktionsänderung	159
20.1	Mahlbehälter	159
20.1.1	Rampen in der Mahlkammer	160
20.1.2	Epizykloide Mahlkammerwand.....	166
20.2	Rotorform	167
20.3	Doppelrotor.....	168
21.	Diskussion	171
21.1	Simulationsmethode	171
21.2	Kollisionsmodell.....	172
21.3	Parametervariationen	173
21.4	Konstruktive Veränderungen	175
22.	Ausblick	177
22.1	Simulationsalgorithmus	177
22.2	Kollisionsmodell.....	178
22.3	Skalierungsregeln.....	178
22.4	Bauteilgeometrien.....	178
23.	Literatur.....	181
Anhang	191
A	Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit.....	191
A.1	Verteilung der Relativkomponenten.....	191

A.2	Verteilung des Stoßparameter	194
A.3	Verteilung der Relativgeschwindigkeit beim Kugelstoß	196
A.4	Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit.....	196
B	Technische Daten des Rubens-Clusters	198
C	Kugelstoß Literaturgleichung.....	199

Liste der verwendeten Abkürzungen

2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
BTR	Bottom-to-Top-Restructuring
CCD	Charge Coupled Device
CMOS	Complementary Metal Oxide Semiconductor
DEM	Discrete Element Method
DES	Discrete Event Simulation
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
et al.	und andere
FQS	Fehlerquadratsumme
GEL	Globale Ereignisliste
i.d.R.	in der Regel
KF	Kleinflansch
LEL	Lokale Ereignisliste
o.g.	oben genannt
OpenGL	Open Graphics Library
POV-Ray	Persistence of Vision Raytracer
PTFE	Polytetrafluorethylen
Q	Quadrant
REM	Raster Elektronen Mikroskop
RGB	Rot-Grün-Blau
rpm	Rounds per minute
SPS	Speicherprogrammierbare Steuerung
TEM	Transmission Elektronen Mikroskop

Liste der verwendeten Symbole

A	Fläche eines Kreises
A, B, C	Konstanten
α'	Ausfallswinkel
α	Einfallswinkel
α	tatsächlicher Winkel zwischen Relativpositions- und Geschwindigkeitsvektor
α_{max}	Maximaler Winkel zwischen Relativpositions- und Geschwindigkeitsvektor
c	Konstante
d	Kugeldurchmesser
D	Trommeldurchmesser
Δ	Intervall
\vec{e}	Einheitsvektor
E	Elastizitätsmodul
ε_n	Normaler Restitutionskoeffizient
ε_t	Tangentialer Restitutionskoeffizient
floor()	Funktion zum Abrunden auf die nächstkleinere ganze Zahl
F	Kraft
\vec{g}	Gravitationsbeschleunigungsvektor
g	Konstante der Gravitationsbeschleunigung
\vec{g}_t	tangentiale Oberflächengeschwindigkeit einer rotierenden Kugel
\vec{g}'_t	tangentiale Oberflächengeschwindigkeit einer rotierenden Kugel nach dem Stoß
l	Länge der Trommel
m	Masse
m	Radius des Rotors
μ	Poissonkonstante (Querkontraktionszahl)
m_{eff}	effektive Masse
$m_{Keramik}$	Masse einer Keramikugel

m_{Stahl}	Masse einer Stahlkugel
n	Problemgröße
n	y-Verschiebung des Rotors
n_{Ind}	Rotordrehzahl einer Industriemaschine
$n_{Keramik}$	Rotordrehzahl mit Keramikugeln
n_{krit}	kritische Drehzahl einer Trommelmühle
n_{krit}	Rotordrehzahl
n_L	Anzahl der Elemente einer Liste
n_{Lab}	Rotordrehzahl einer Labormaschine
n_{Stahl}	Rotordrehzahl mit Stahlkugeln
$\vec{\omega}$	Winkelgeschwindigkeit
ω	Kreisfrequenz eines Rotors
$O()$	Funktion der Komplexitätsklasse
ϕ	Anfangswinkel eines Rotors
π	Verhältnis von Kreisumfang zu Kreisdurchmesser
R	Abstand der Kugelmittelpunkte
\vec{r}_0	Anfangspositionsvektor
\vec{r}	Positionsvektor
r	Radius eines Kreises
\vec{r}_{rel}	Relativpositionsvektor
r_{Ind}	Rotorradius einer Industriemaschine
r_{Lab}	Rotorradius einer Labormaschine
ρ	Dichte
\vec{s}	Positionsvektor
σ_Y	Yieldmodul (Streckgrenze)
σ	Standardabweichung
t	Zeit
t_c	Kollisionszeitpunkt
t_E	Ereigniszeitpunkt

$t_{Kollision}$	Kollisionszeitpunkt
t_{max}	Maximale Zeit
t_{min}	Minimale Zeit
U	Umfang eines Kreises
\vec{v}_0	Anfangsgeschwindigkeitsvektors
\vec{v}	Geschwindigkeitsvektor
\vec{v}_n	Normalkomponente des Geschwindigkeitsvektors
\vec{v}'_n	Normalkomponente des Geschwindigkeitsvektors nach dem Stoß
\vec{v}_{rel}	Relativgeschwindigkeitsvektor
\vec{v}_t	Tangentialkomponente des Geschwindigkeitsvektors
\vec{v}'_t	Tangentialkomponente des Geschwindigkeitsvektors nach dem Stoß
v_{Kugel}	Durchschnittliche Geschwindigkeit einer Kugel
v_{Rotor}	Umfangsgeschwindigkeit eines Rotors
\dot{x}	erste Ableitung von x nach der Zeit
\ddot{x}	zweite Ableitung von x nach der Zeit
x_x	x-Komponente eines Vektors \vec{x}
x_y	y-Komponente eines Vektors \vec{x}
x_z	z-Komponente eines Vektors \vec{x}
x_i	i ist eine Laufvariable von x
x_n	n ist eine Laufvariable von x

1. Einleitung

Die heutige volkswirtschaftliche Bedeutung von Zerkleinerungsmaschinen (größtenteils Kugelmühlen) geht u.a. daraus hervor, dass in Industrieländern überschlägig etwa 4 % der Elektroenergieerzeugung für Zerkleinerungsprozesse aufgewendet und etwa 1 % der Industrieproduktion durch diese hervorgebracht werden (Tomas, 2004).

Hochenergie-Kugelmühlen existieren in der hier untersuchten Bauart erst seit ca. 10 Jahren und dienen nicht nur zur Zerkleinerung von Mahlgut auf Korngrößen von unter 1 μm , sondern auch zur Herstellung neuer Werkstoffe durch *mechanisches Legieren*. Sie werden für die industrielle Produktion, vor allem aber in Forschung und Entwicklung in den Materialwissenschaften in Form von Labormaschinen, eingesetzt. Bei Hochenergie-Kugelmühlen werden die Mahlkugeln in einer horizontalen Trommel durch Rotoren angetrieben und in der Mahlkammer verwirbelt (Abbildung 1-1). Die Trommel ist maximal nur zu ca. 40 % (inkl. Kugellücke) mit Kugeln gefüllt, damit diese sich frei in der Mahlkammer bewegen können und durch gegenseitige, hochenergetische Kollisionen das Mahlgut zerkleinern. Die Rotordrehzahl einer Labormaschine mit zwei Liter Volumen beträgt bis zu 2500 rpm, der maximale Energiebedarf bei 3 kW.

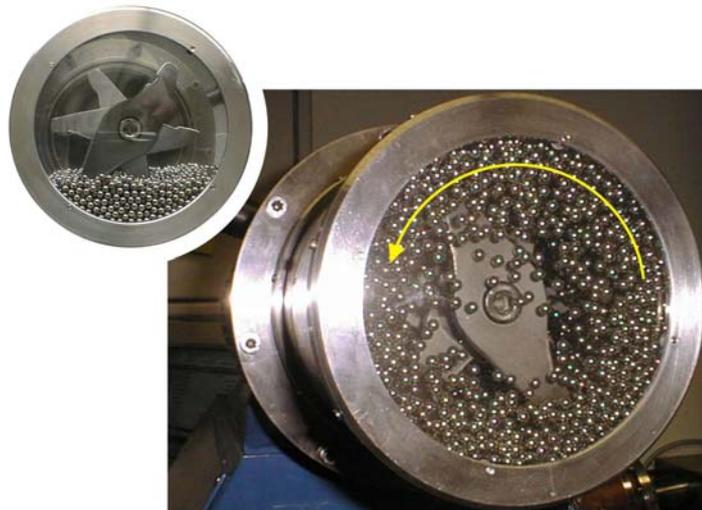


Abbildung 1-1 Labormaschine einer Hochenergiekugelmühle mit transparenter Mahleinheit zur Beobachtung der Mahlkugeln (nicht für Pulver geeignet). Links oben: Anfangszustand. Im Betrieb, hier 1500 rpm, fliegen die Kugeln durch den Rotor angetrieben durch die Mahlkammer und zerkleinern das Mahlgut zwischen sich.

Wie häufig in der mechanischen Verfahrenstechnik, werden die Betriebsparameter einer Hochenergie-Kugelmühle nach empirischen Regeln eingestellt, welche auf Beobachtung und Erfahrung basieren. Die Vorgänge innerhalb der Mahlkammer sind bisher überhaupt nicht, oder nur in Ansätzen, verstanden. Experimentell sind die Maschinen nur makroskopisch erforscht. Über die Geschwindigkeiten der Kugeln im Innern der Mahlkammer existieren bisher nur Schätzwerte. Die für den Mahlprozess maßgeblichen Kollisionsgeschwindigkeiten und -häufigkeiten sind gänzlich unerforscht.

1.1 Zielsetzung

Für experimentell und messtechnisch schwer zugängliche Systeme wie eine Hochenergie-Kugelmühle, bietet sich die Simulation als eine Methode zum Erkenntnisgewinn an. Hochenergie-Kugelmühlen sind bisher noch nicht simuliert worden. Es sind zwar zeitkontinuierliche Simulationsmodelle zur Beschreibung des Bewegungsverhaltens von Mahlkörpern in verfahrenstechnischen ähnlichen Trommelmühlen veröffentlicht, jedoch bewegen sich bei diesen die Kugeln um Größenordnungen langsamer. Zeitkontinuierliche Simulatoren sind für diesen speziellen Anwendungsfall allerdings zu rechenintensiv und daher für die Parametervariationen dieser Arbeit ungeeignet.

Ein alternativer Weg die Maschinen zu simulieren, ist die Nutzung ereignisdiskreter Simulatoren. Ein solcher Algorithmus berechnet direkt die Kollisionensereignisse und ist nicht auf die Kenntnis von Zwischenpositionen angewiesen. Für hohe Kugelgeschwindigkeiten ist ein ereignisdiskreter Algorithmus besonders gut geeignet.

Die Implementierung eines ereignisdiskreten Simulators ist, im Vergleich zu den klassischen zeitkontinuierlichen Simulatoren, ungleich komplizierter, und die Algorithmen lassen sich nur unter gewissen Bedingungen einsetzen. Dies begründet auch die spärliche Literatur zu diesem Thema. Zentraler Bestandteil dieser Arbeit wird die Entwicklung eines neuen, auf die Anwendung spezialisierten, ereignisdiskreten Algorithmus sein. Im Vordergrund der Forschungsarbeit zu diesem Simulationsverfahren stehen:

- der Nachweis der Einsetzbarkeit eines ereignisdiskreten Verfahrens zur Simulation einer Hochenergie-Kugelmühle.
- die Optimierung der Rechengeschwindigkeit zur zügigen Durchführung von Variationsstudien
- die Stabilität und Datenkonsistenz des Algorithmus
- die numerische Genauigkeit
- die physikalische Korrektheit

Die genannten Bereiche sind weniger einer konkreten Disziplin ingenieurwissenschaftlicher Forschung zuzuordnen. Sie berühren vielmehr Bereiche der Informatik, numerischen Mathematik und statistischen Physik. In der Anwendung lassen sich mit dem fertigen Simulator allerdings neue ingenieurwissenschaftliche Erkenntnisse gewinnen:

- Informationen zur mechanischen Motorleistung in Abhängigkeit von Kugel-Füllgrad, Rotor-Drehzahl, Mahlkammervolumen, etc. sind wichtig für Konstruktions-Ingenieure zur Maschinenauslegung.
- Werkstoffwissenschaftler erhalten die Geschwindigkeitsverteilungen der Mahlkugeln in Abhängigkeit bestimmter Betriebsparameter, um Rückschlüsse auf den Energieübertrag auf das Mahlgut ziehen zu können.
- Verfahrenstechniker bieten Simulationsdaten eine Hilfestellung bei der Skalierung des Prozesses.

Das Kollisionsmodell der Kugeln, verantwortlich für den Energieverlust, die Rotations- und Richtungsänderung, bestimmt maßgeblich die Realitätstreue der Simulation. In der Realität haben Kollisionen eine Kontaktzeit im Bereich von μs . Bei ereignisdiskreten Simulationen muss diese Kontaktdauer jedoch verfahrensbedingt ignoriert werden. Es gilt ein geeignetes Kollisionsmodell zu finden und zu parametrisieren, welches die Kollisionen möglichst realistisch nachbildet und zugleich auf eine infinitesimale Kontaktzeit reduziert. In der Literatur sind allerdings experimentell bestimmte Daten zum Kollisionsverhalten von Materialpaarungen nur spärlich dokumentiert, und wenn, dann nicht für die hier zu simulierenden Werkstoffpaarungen. Daher sind Messungen des Dämpfungsverhaltens der Mahlkörper unumgänglich. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Hochenergie-Kugelmühle immer ohne Pulver betrachtet, weil die Kugel-Kollisionen die Grundlage des Mahlprozesses darstellen. Die Zerkleinerung des Pulvers selbst wird hier nicht behandelt.

1.2 Gliederung

In den Kapiteln 2 und 3 werden zur allgemeinen Einordnung in den verfahrenstechnischen Kontext zunächst Trommelmühlen erläutert und dann die Funktionsweise und Einsatzgebiete der Hochenergie-Kugelmühlen. Da Kugelmühlen i.d.R. zeitkontinuierlich simuliert werden, wird in Kapitel 4 auf die Grundlagen und Nachteile dieser Simulationsmethode eingegangen. Der Stand der Forschung wird anhand von simulierten Kugelmühlen vorgestellt. In Kapitel 5 wird die hier verwendete ereignisdiskrete Simulationsmethode ausführlich erläutert. Das Kollisionsmodell der Mahlkugeln und die darin verwendeten Modellparameter werden in Kapitel 6 vorgestellt. Da sowohl das Bewegungsverhalten der Mahlkugeln genauer erforscht, als auch Materialparameter für das Kollisionsmodell experimentell bestimmt werden mussten, sind diverse Experimente durchgeführt worden, deren Versuchsaufbau und Ergebnisse in Kapitel 7 erläutert sind.

Ein Großteil der Forschungsarbeit ist für die allgemeine Weiterentwicklung und spezielle Implementierung des ereignisdiskreten Algorithmus aufgewandt worden. Die Details sind in Kapitel 8 bis 11 dargelegt. Die numerische und physikalische Verifikation des neuen Simulators wird in Kapitel 14 durchgeführt.

Zur Lokalisierung von Fehlern im Algorithmus während der Entwicklungsphase und später, zur qualitativen Validierung der Simulationsergebnisse, wurden drei verschiedene Visualisierungsmethoden der Bewegungsabläufe entwickelt, die in Kapitel 12 vorgestellt werden.

Die Simulationsergebnisse diverser Parametervariationen werden mit statistischen Methoden in den Kapiteln 15 bis 19 interpretiert. In Kapitel 20 werden schließlich, motiviert durch die neuen Erkenntnisse, Vorschläge zur konstruktiven Änderung der drei wichtigsten Baugruppen der Maschine gemacht. Mit einer dieser neuen Baugruppen werden exemplarisch vergleichende Simulationen durchgeführt.

2. Kugelmühlen

Zur Einordnung der Hochenergie-Kugelmühlen in den verfahrenstechnischen Kontext, werden in diesem Kapitel vorab zwei andere Kugelmühlentypen beschrieben. Weil Trommelmühlen (Kapitel 2.1) und Rührwerks-Kugelmühlen (Kapitel 2.2) in der Praxis häufig zu Einsatz kommen, werden deren Funktionsweise und Einsatzgebiete im Folgenden erläutert.

Für viele Prozesse wird das Ausgangsmaterial als Granulat oder in Pulverform benötigt. Sei es, weil sich die Materialien in dieser Größe gut mischen oder fördern lassen, weil sie nur in kleinen, gut dosierbaren Mengen benötigt werden, weil das Herstellungsverfahren auf dieser Form des Materials beruht, oder weil sich die Eigenschaften des Materials durch Korngrößenreduzierung ändern. Es gibt zwar Herstellungsverfahren, die sofort die Pulverform liefern, z.B. indem die flüssige Metallschmelze durch einen Inertgasstrahl zerstäubt wird. Jedoch ist ein solches Pulver bestehend aus kugelförmigen Partikeln nicht immer erwünscht, und es muss in einem nachfolgenden Prozess weiterbehandelt werden.

Beispielsweise werden hochwertigen Autolacken Aluminium-Flakes (kleine Plättchen) beigemischt, um den Licht spiegelnden Metallic-Effekt zu erreichen. Ferner dürfen die Metall-Flakes für Lacke gewisse Größen nicht überschreiten, um sprühfähig zu bleiben (Morikita und Taylor, 1998). Das zerstäubte Aluminium muss daher mechanisch zu kleinen Plättchen verformt werden. ZOZ et al. (1998; 1999a) konnten auf diese Weise Flakes aus verschiedenen duktilen Metallen herstellen, die weniger als 1 μm dick sind und ca. 40-80 μm Durchmesser haben. Maschinen der mechanischen Verfahrenstechnik, die für diesen Einsatz in Frage kommen, sind vorwiegend Kugelmühlen.

In Kugelmühlen wird das Mahlgut durch die Kugeln (Mahlkörper) verformt und zerkleinert. Die Mahlkörper zerreiben durch Scherkräfte das Mahlgut oder zerkleinern es durch Schlagbeanspruchung. Um die Kugeln in Bewegung zu setzen, wurden verschiedene Bauformen von Kugelmühlen entwickelt. Diese unterscheiden sich zumeist durch ihr Fassungsvermögen oder unterschiedliche Zerkleinerungstechnik, die Einsatzgebiete überschneiden sich jedoch häufig. Bezüglich der historischen Entwicklung und traditionelle Einsatzgebiete der wichtigsten Mühlentypen sei hier auf den Übersichtsartikel von REDEKER (2003) hingewiesen.

Nachfolgend werden exemplarisch zwei unterschiedliche Arten von Kugelmühlen vorgestellt, die in Größen vom Labormaßstab bis hin zu industriellen Dimensionen für die Massenproduktion hergestellt werden, aber beide ein unterschiedliches Zerkleinerungskonzept verfolgen.

2.1 Trommelmühlen

Eine der ältesten und robustesten Bauformen von Kugelmühlen sind die Trommelmühlen. Hierbei ist der Prozessraum eine um die Längsachse rotierende Trommel, welche mit Mahlkörpern befüllt ist. Die Zerkleinerungswirkung entsteht in Abhängigkeit von Drehzahl und Mahlguteigenschaften durch den Bewegungsablauf der Trommelfüllung. In der Praxis unterscheidet man zwischen zwei Bewegungsformen der Trommelfüllung (siehe Abbildung 2-1).

- Kaskadenwirkung: Die Oberfläche des Kugelpaketes gleitet oder rollt nach unten, wie eine Oberflächenlawine
- Kataraktwirkung: Die Kugeln beginnen gerade vom restlichen Kugelpaket abzuheben und fallen im Parabelflug unten wieder in das Kugelbett.

Der Übergang von Kaskaden- zu Kataraktwirkung wird durch Erhöhung der Trommel-drehzahl erreicht. Während des Betriebs der Trommelmühlen wird ein Zustand angestrebt, bei dem die Trommelfüllung gerade die Kataraktwirkung erreicht aber die Mahlkörper noch nicht gegen die Trommelwand fliegen, sondern wieder im Kugelbett landen.



Abbildung 2-1 Die Abbildung zeigt die transparente Mahleinheit einer Labor-Trommelmühle. Die Trommel dreht um Uhrzeigersinn. Bei der Kaskadenwirkung (links) rollen die Kugeln übereinander ab. Bei der Kataraktwirkung (rechts) beginnen die Kugeln bereits zu fliegen und landen wieder im Kugelbett (Zoz et al., 2001a).

Für Trommelmühlen ist es üblich die Drehzahl der Trommel in Prozent der *theoretischen kritischen Drehzahl* n_{krit} anzugeben, weil dieser Betriebsparameter besser zwischen unterschiedlichen Trommeldurchmessern vergleichbar ist, als die absolute Drehzahl. Ab der kritischen Drehzahl wird eine (unendlich kleine) Kugel durch die Zentrifugalkraft immer an die Trommelwand gedrückt und kann nicht mehr in die Trommel fallen. Die Zentrifugalbeschleunigung und die Gravitationsbeschleunigung heben sich am höchsten Punkt der Trommel gegenseitig auf. Für eine Trommel mit dem Durchmesser

D erhält man die Gleichung für n_{krit} in rpm durch das Kräftegleichgewicht von Zentrifugalbeschleunigung und Gravitationsbeschleunigung:

$$\left(n_{\text{krit}} \frac{2\pi}{60} \right)^2 \frac{D}{2} = g \quad \Rightarrow \quad n_{\text{krit}} = \sqrt{\frac{2 \cdot g}{D}} \cdot \frac{30}{\pi} \quad (2-1)$$

Übliche Drehzahlen für Trommelmühlen sind 60 – 80 % der kritischen Drehzahl.

2.2 Rührwerks-Kugelmühlen

Bei Trommelmühlen lässt sich die mechanische Beanspruchung und damit die Korngröße des Mahlguts nur in gewissen Grenzen beeinflussen (Durchmesser, Drehzahl, Dichte der Mahlkörper). Für feinere Pulver werden in der Praxis oft Rührwerks-Kugelmühlen eingesetzt. Im Unterschied zu Trommelmühlen dreht sich bei diesen Mühlen die Trommel nicht, sondern im Mahlbehälter befindet sich eine zumeist fliegend gelagerte rotierende Welle mit Rotorarmen. Die Rotorarme bewegen sich durch die Kugeln und setzen die Trommelfüllung in Bewegung. Der Mahlprozess beruht aufgrund des hohen Füllgrads von meist über 80 %¹ fast ausschließlich auf Reibbeanspruchung der Mahlkörper.

Rührwerks-Kugelmühlen unterscheiden sich einerseits durch die Ausrichtung der Trommel (horizontal / vertikal) andererseits durch das Mahlverfahren (Nass- oder Trockenmahlung). Nassmahlverfahren ermöglichen eine hydraulische kontinuierliche Förderung des Mahlguts durch die Trommel, welches in Form von Suspension durch die Mühle gepumpt wird (Tomas, 2004). Ferner wird das Nassmahlverfahren auch bei kleinen Partikelgrößen aus Sicherheitsgründen eingesetzt, weil feine Stäube explosiv werden können (BGV, 1981).

Rührwerks-Kugelmühlen werden vorwiegend für eine Mahlung von ca. 100 µm auf ca. 5 µm eingesetzt, wobei die Korngröße des Mahlguts in gewissen Grenzen durch die Rotordrehzahl beeinflusst werden kann, maßgeblich aber von der Mahldauer abhängt. In der Praxis wird oft so verfahren, dass das Mahlgut in Trommelmühlen vorgemahlen und dann in Rührwerks-Kugelmühlen weiterverarbeitet wird.

¹ Mit der Prozentangabe des Füllvolumens ist bei Kugelmühlen nicht der Anteil des Kugelvolumens am Gesamtvolumen gemeint, sondern das Kugelvolumen inkl. Kugellücke. In der Praxis ist dies einfacher zu messen, indem man die Strecke von der Oberfläche der Kugelschüttung bis zum Behälterrand misst.

3. Hochenergie-Kugelmühlen

Die in diesem Kapitel beschriebene Maschinenart der Hochenergie-Kugelmühlen ist der Gegenstand dieser Arbeit. Neben der mechanischen Beschreibung (Kapitel 3.1), werden spezielle Einsatzgebiete (Kapitel 3.2) vorgestellt. Ferner wird an drei Skalierungsbeispielen (Kapitel 3.3) verdeutlicht, dass die Mechanismen im Innern des Mahlbehälters bisher gänzlich unverstanden sind.

Horizontal angeordnete Rotor-Kugelmühlen mit hoher Drehzahl sind auch bekannt unter dem Markennamen *Simoloyer*[®]. Hierbei handelt es sich nicht etwa nur um eine um 90° gedrehte Bauform, sondern diese Mühlen nutzen einen Mahleffekt, der vorwiegend auf Schlagbeanspruchung beruht. Die Trommel wird nur zu ca. 20 – 40 % gefüllt (Abbildung 3-1 links). Die Rotordrehzahl beträgt etwa für eine 2 Liter Mahleinheit einer Labormaschine bis zu 2000 rpm, was einer Umfangsgeschwindigkeit der Rotoren von 15 m/s entspricht.

Durch die hohe Geschwindigkeit des Rotors und den geringen Füllgrad können die Mahlkörper nahezu frei durch die Mahltrommel fliegen. Das Mahlkonzept beruht nicht auf Reibung und Scherung, sondern auf Kollisionen der Mahlkörper (Abbildung 3-1 rechts). Die hohe kinetische Energie der Mahlkugeln gibt den Maschinen den Namen *Hochenergie-Kugelmühle*. Zerkleinerungsmaschinen dieses Typs sind ausschließlich für den Trockenmahlprozess bestimmt.



Abbildung 3-1 Die Mahltrömmel von Hochenergie-Kugelmühlen wird nur zu 20 – 40 % gefüllt (links ca. 20 %), damit die durch den hochtourig angetriebenen Rotor beschleunigten Kugeln Raum für den freien Flug haben. Der Mahleffekt beruht auf Schlagbeanspruchung des Mahlguts durch die kollidierenden Mahlkugeln (rechts). (ZOZ et al., 1999b)

Die in Abbildung 3-1 gezeigte Mahlkammer wurde zur Beobachtung der Mahlkugeln aus einem Acrylglas Rohr mit ca. 5 mm Wandstärke und einer Frontplatte des gleichen Materials angefertigt. Die inneren Abmessungen entsprechen denen einer 2 Liter Mahleinheit für die kleinsten Labormaschinen dieses Typs.

3.1 *Technischer Aufbau*

Eine Hochenergie-Kugelmühle unterscheidet sich in der Bauweise erheblich von der Bauweise der konventionellen Trommelmühlen. Während die Trommel einer Trommelmühle i.d.R. indirekt über eine Reihe von Keilriemen angetrieben wird und die Drehzahl des Motors meistens nicht verändert werden kann, ist es bei einer Hochenergiekugelmühle möglich die Drehzahlen über ein Computerprogramm vorzugeben. In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die Baugruppen und der Antriebsstrang erläutert.

3.1.1 Mahleinheit

Die Mahleinheiten für die Pulverproduktion sind doppelwandig und aus Edelstahl. Zwischen den Wänden fließt Kühlwasser. Messungen von ZOZ et al. (1999b) haben ergeben, dass ca. 60 – 70 % der vom Motor abgegebenen mechanischen Leistung in Wärme umgewandelt und vom Kühlsystem abgeführt wird. Die Basismaschine ist mit der Mahleinheit über eine Bogenzahn-Steckkupplung (zweiteilig) aus Kunststoff verbunden. Dies ermöglicht verschiedene Mahleinheiten² an die Basismaschine zu koppeln, um beispielsweise bei verschiedenen Pulvern die Mahleinheit zu wechseln. Die Wellendurchführung ist durch zwei Lippendichtungen und eine Labyrinth-Dichtung aus PTFE (auch bekannt unter dem Markennamen *Teflon*[®]) gegen Überdruck (4 bar) und technisches Vakuum (10^{-4} mbar) abgedichtet (Patent, 2000; Patent, 1998). Alle Öffnungen sind mit O-Ringen versehen und verfügen über KF-Anschlüsse zur Verbindung an handelsübliche Vakuumtechnik.

An die Mahleinheit können mehrere Rohre und Ventile angeschlossen werden, vor allem aber der Glas- oder Edelstahlbehälter für das Pulver (Abbildung 3-2). Bevor das Ausgangspulver in die Mahleinheit gefüllt wird, wird diese i.d.R. erst evakuiert (und ggf. mit Intertgas geflutet), um Reaktionen zwischen Pulver und atmosphärischem Sauerstoff während des Mahlvorgangs zu vermeiden. Zum Befüllen wird die Mahleinheit so gedreht, dass der ebenfalls evakuierte Turm (Abbildung 3-2) nach oben zeigt. Die Ventile werden geöffnet und das ungemahlene Pulver fällt in die Mahleinheit.

Nach dem Mahlvorgang wird die Mahleinheit um 180° gedreht und das Pulver fällt durch die geöffneten Ventile in den Behälter. Auf diese Weise können während der Mahlung auch kleine Proben entnommen werden, um den zeitlichen Fortschritt experimentell zu bestimmen. Da das Pulver in der ganzen Mahleinheit verteilt ist, müssen die Kugeln durch geringe Rotordrehzahl während der Pulverentnahme bewegt werden. Dieser Vorgang kann, je nach Fließfähigkeit des Pulvers, einige Minuten dauern.

² Die Mahleinheiten existieren in verschiedenen Volumen, aus verschiedenen Materialien (Keramik, Edelstahl), mit Hartmetallsitzen der Rotorblätter und elektrisch beheizbar. In dieser Arbeit wird nur die Standardversion der 2 Liter Ausführung behandelt.

Als Pulver zu Kugel Massenverhältnis wird vom Hersteller ein Bereich von 1:10 bis 1:15 angegeben. Um 200 g Pulver zu produzieren sollen also mindestens 2 kg Mahlkugeln verwendet werden. Die Mahlkugeln sind meistens 5 mm Kugellager-Kugeln aus 100Cr6 Stahl. Alternativ können z.B. auch Keramik-Kugeln aus Aluminium-Oxid (Al_2O_3) oder Yttrium-Oxid (Y_2O_3) stabilisiertem Zirkon-Oxid (ZrO_2) verwendet werden, um Kontamination des Pulvers durch den Abrieb der Kugeln zu vermeiden. Damit bei der Entnahme des Pulvers die Kugeln nicht aus dem Mahlbehälter fallen, sondern nur das Pulver, ist im ersten Kugelhahn ein Rost eingeschweißt (Patent, 1997). Der Gitterabstand des Rosts beträgt ca. 4 mm. Unter anderem aus diesem konstruktionstechnischen Grund, darf der Durchmesser der Kugeln nur unwesentlich von 5 mm abweichen.



Abbildung 3-2 Labormaschine mit 2 Liter Mahleinheit. Der Turm auf der Mahleinheit dient zum Anschluss der Vakuumtechnik und der Pulverbehälter (oben). Befüllt wird die Mahleinheit im abgebildeten Zustand. Die Kugelhähne werden geöffnet und das Pulver fällt in die Mahleinheit (auch im evakuierten Zustand). Zum Entleeren wird die Mahleinheit mit dem Turn um 180° gedreht, so dass das Pulver wieder in den Behälter fällt.

3.1.2 Rotor

Der Edelstahl-Rotor wird über eine kegelige Passfeder formschlüssig mit dem Lagerflansch verbunden und durch dessen hohle Welle mit einer Innensechskant-Schraube gesichert (siehe Schraubenkopf in Abbildung 3-1 links; Hohlwelle des Rotors in Abbildung 3-3 links). Da der Rotor ein Verschleißteil ist, kann er auf diese Weise einfach ausgetauscht werden. Ebenfalls aus Edelstahl gefertigt sind die mit der Welle verschweißten Rotorblätter (Rund-Schweißnaht Abbildung 3-3 links). Die Spitzen der Rotorblätter sind der größten tribologischen Belastung unterworfen und werden daher mit *Stellite*[®] im Schweißverfahren aufgepanzert. Neben der üblichen Abrundung der Rotorspitzen durch die Schläge gegen die Kugeln (siehe abgerundete Rotorspitzen in Abbildung 3-1 links im Vergleich zu Abbildung 3-3 links) können weiterhin chemisch begründete Verschleißerscheinungen auftreten. Bei der in Abbildung 3-3 abgebildeten

Rotorspitze ist das Bauteilversagen durch chemische Reaktionen zwischen der Co-Matrix der *Stellite*[®]-Aufpanzerung und dem gemahlene Pulver begründet. Gut zu erkennen ist, dass der Edelstahl Rotorarm jedoch fast keine Verschleißspuren zeigt, was die o.g. Begründung untermauert. Die ursprüngliche Kontur der Rotorspitze ist eingezeichnet.



Abbildung 3-3 Links: Ein fabrikneuer Rotor. Die Rotorblätter werden um 60° versetzt an die Welle geschweißt (Bildquelle: Zoz GmbH). Rechts: Detailaufnahme einer verschlissenen Rotorspitze. Der Verschleiß wurde durch chemische Reaktionen zwischen Rotor und Pulver beschleunigt. Eingezeichnet ist die ursprüngliche Kontur der Rotorspitze (Bildquelle ohne Kontur: Labor für Oberflächentechnik, Universität Siegen).

Da immer der komplette Rotor ausgetauscht werden muss, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein modulares Konzept entwickelt, das es unter anderem ermöglicht einzelne Rotorblätter an der Rotorwelle zu befestigen (Kalkuhl, 2003). Ferner ist es dadurch einfach möglich, verschiedene Materialien für die Rotorarme zu testen. Gefertigt wurde ein solcher Rotor allerdings bis jetzt noch nicht.

3.1.3 Antrieb

Angetrieben wird die Labormaschine über einen Asynchron-Drehstrommotor, der über einen vektorgeregelten 3 kW Frequenzumrichter bei 87 Hz Eckfrequenz betrieben wird. Vektorgeregelte Frequenzumrichter verfügen über ein Motormodell, das einerseits bei Inbetriebnahme parametrisiert werden muss, andererseits auf Sensordaten, wie Motortemperatur und Ist-Drehzahl, basiert. Auf diese Weise erhält der Motor eine Nennleistung von 2,7 kW und kann kurzzeitig mit 150 % des Nenn-Momentes betrieben werden.

Die Maschine wird über Software gesteuert. Diese ermöglicht dem Benutzer verschiedene Drehzahlprogramme zu fahren und Experimente unter Verwendung der gespeicherten Betriebsparameter zu wiederholen. Neben der Änderung der Soll-Drehzahl zu den programmierten Zeitpunkten, übernimmt die Software auch die Anzeige und Speicherung der Messdaten (Temperatur, Druck, Ist-Drehzahl, Drehmoment, etc.). Ferner

können auch externe Geräte gesteuert werden, z.B. Zellenradschleusen und Kühlmittelventile. Die Abschaltung der Maschine im Störfall wird sowohl von der Software als auch autark von der SPS in der Maschine veranlasst.

Die Drehzahl des Rotors wird durch Erfahrungswerte des Benutzers festgelegt. ZOZ et al. (1999b) haben Untersuchungen mit einer transparenten Mahleinheit durchgeführt und dabei festgestellt, dass sich die Kugeln oberhalb von 1500 rpm fast ausschließlich in den äußeren 60 % des Radius in Kreisbahnen bewegen (Abbildung 3-1 – rechts). Unterhalb von 600 rpm ist ein Bewegungsverhalten mit Kataraktwirkung zu beobachten, ähnlich dem einer Trommelmühle (Abbildung 2-1 – rechts). Empfohlen wird der Betrieb mit der gewünschten Schlagbeanspruchung oberhalb von 1000 rpm.

Duktile Materialien, z.B. Metalle, neigen dazu an der Trommelwand haften zu bleiben und können durch das o.g. Verfahren nicht entnommen werden. ZOZ und REICHARDT (1998b) haben jedoch ein Verfahren namens *Cycle Operation* entwickelt, dass allein durch alternierende Drehzahlen von ca. 900 rpm und ca. 1300 rpm für jeweils einige Minuten diese Pulverschicht wieder von der Trommelwand entfernt. Belegt wurde dies durch Bilder vom Mahlraum nach der Mahlung. Eine schlüssige Erklärung, wann und wie dieser reinigende Effekt des Verfahrens zustande kommt, konnte jedoch nicht gefunden werden, weil der Mahlraum während des Prozesses nicht einsehbar ist. Mehrere andere Autoren publizierten ebenfalls den erfolgreichen Einsatz dieses Verfahrens (Kaupp et al., 2003; Ren et al., 2003; Hoppe, 2004; Kern 2004).

3.2 Anwendungen

Es gibt mehrere Anwendungsgebiete für Hochenergie-Kugelmühlen, von denen hier die wichtigsten erläutert werden sollen. Da die Maschinen im Vergleich zu Trommelmühlen ein sehr kleines Volumen haben, müssen sie wesentlich produktiver arbeiten. Die Produkte müssen viel schneller die gewünschten Korngrößen oder Deformation erreichen, als mit anderen Herstellungsverfahren. Das Haupteinsatzgebiet sind jedoch diejenigen Pulver, die in anderen Maschinen gar nicht hergestellt werden können.

Nachfolgend drei Beispiele:

- Eine der Anwendungen für Hochenergie-Kugelmühlen, die eingangs schon für Trommelmühlen vorgestellt wurde, ist die Produktion von Metall-Flakes. Der Einsatz einer Hochenergie-Kugelmühle in industrieller Größe kann die Produktionszeit von einigen Stunden in einer Trommelmühle auf ca. 30 Minuten verkürzen (Zoz et al. 1999c; Zoz et al., 1999d). Auf diese Weise hergestellte Metall-Flakes dienen jedoch nicht als Farbpigmente in Lacken, weil die Oberfläche nicht glatt genug ist. Diese Materialien können in Siebdrucktechnik aufgebracht werden, z.B. als *Faradayscher Käfig* in Elektronik-Bauteilen. Eine andere Anwendung für Metall-Flakes (Silber) sind leitende Klebstoffe. Die Silber-Flakes werden in den Klebstoff gemischt und stellen die Leitfähigkeit sicher.

- In der Regel werden Hochenergie-Kugelmöhlen jedoch zur Produktion von nanokristallinen Materialien oder zum mechanischen Legieren (siehe Kapitel 3.2.1) verwendet. Nanokristalline Materialien haben andere physikalische Eigenschaften, als Ihre Ausgangspulver. Eine Eigenschaft, die nahezu alle nanokristallinen Materialien besitzen, ist ihre deutlich erhöhte Härte. KERN (2004) verwendete in der Hochenergie-Kugelmühle behandeltes Aluminium-Oxid/Silizium-Karbid ($\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC}$) als nanodisperse Spritzschicht, um das Verschleißverhalten von Metallen zu verbessern.
- Die verbesserten elektrischen Eigenschaften von nanostrukturiertem Silber-Zinndioxid (Ag-SnO_2) konnten durch HOPPE (2004) nachgewiesen werden. Er verwendete eine heizbare Mahleinheit, weil während des Mahlprozesses zusätzlich eine endotherme chemische Reaktion abläuft.

3.2.1 Mechanisches Legieren

Das mechanische Legieren ist ein besonderer Spezialfall der Anwendungen von nanokristallinen Pulvern. Feststoffreaktionen, die durch Mahlen oder Zerreiben ausgelöst werden, werden als mechanochemische Reaktionen oder mechanisches Legieren bezeichnet. Die Steuerung der Reaktivität folgt hier noch weitgehend dem Prinzip von Versuch und Irrtum, weil die Kollisionsenergien und deren Verteilung bislang völlig unbekannt sind. HERR und SAMWER (1995) haben Bildung und Stabilität intermetallischer Verbindungen unter den Bedingungen des Kugelmahlens untersucht und eine ausgeprägte Abhängigkeit von den Mahlbedingungen gefunden. Dies gilt insbesondere, wenn die Produktentstehung den Bruch und die Neubildung schwacher Wechselwirkungen zwischen Molekülen erfordert (z.B. Wasserstoffbrücken, Donor-Acceptor- und Van-der-Waals-Wirt-Gast-Wechselwirkungen) oder wenn die Ausgangsstoffe durch Packungseffekte zunächst in eine geeignete Anordnung gebracht werden müssen. Letzteres gilt bei Reaktionen, die von der Position der Reaktanden im Festkörper abhängen (Boldyrev und Tkacova, 2000).

Chemische Reaktionen zwischen Feststoffen (und häufig innerhalb von Festkörpern) sind konzeptionell nicht einfach zu definieren. Es wurde argumentiert, dass zahlreiche Feststoffsynthesen, bei denen intermediär eine flüssige Phase (z.B. eine eutektische Phase oder eine Schmelze) auftritt, nicht als echte Reaktionen zwischen Feststoffen angesehen werden können (Rothenberg et al., 2001). Das gleiche gilt, wenn die Kristalle vor Einsetzen der Reaktion zerstört werden. Dies ist etwa der Fall bei Reaktionen, die durch Mahlen ausgelöst werden, weil die beim mechanischen Legieren auftretende Wärme zu einem lokalen Schmelzen an der Grenzfläche zwischen Kristallen führen kann.

Obwohl man bei der mechanistischen Interpretation von Festkörperprozessen vorsichtig sein muss, wird in dieser Arbeit folgender pragmatische Standpunkt anderer Autoren übernommen:

„Mechanisches Legieren von Gemischen aus kristallinen Pulvern ist ein Weg zur Synthese metastabiler amorpher oder kristalliner Legierungen“ (Sell und Mehrer, 1997; Knorr et al. 1997)

Beim mechanischen Legieren in Hochenergiekugelmühlen dienen also mindestens zwei verschiedene Materialien als pulverförmige Legierungskomponenten. Nach dem Mahlvorgang liegt das Endprodukt wiederum pulverförmig vor. Die einzelnen Partikel bilden jetzt eine Legierung (Abbildung 3-4).

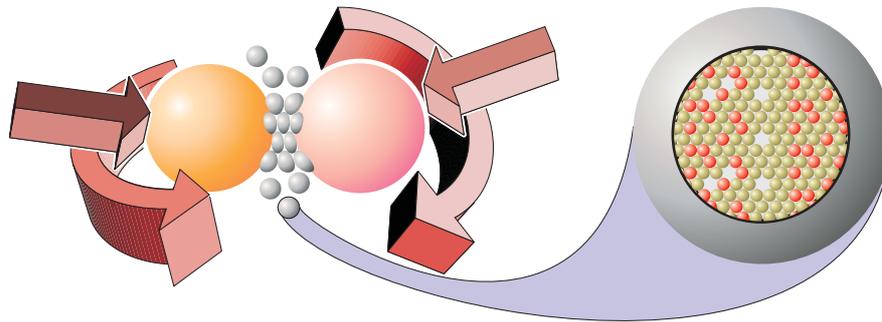


Abbildung 3-4 Links: Das Pulver befindet sich zwischen zwei kollidierenden Kugeln. Es wird zerkleinert und kalt verschweißt. Rechts: Ein mechanisch legiertes Pulverpartikel besteht aus seinen Legierungskomponenten (rot, grün) und Gitterbaufehlern, die durch die mechanische Behandlung entstehen.

HOPPE (2004) konnte auf diese Weise Silber-Zinndioxid (Ag-SnO_2) herstellen, dessen Kristallkörner nur einige 10 nm Durchmesser aufwiesen. ERNST et al. (1998) versuchten erfolglos mit diesem Verfahren selbstschmierendes Eisen herzustellen, indem sie sowohl Molybdän-Disulfid (MoS_2) als auch Graphit mit Eisen mechanisch legierte. Das gesinterte Pulver hatte allerdings einen höheren Reibungskoeffizienten als Eisen alleine. ERNST et al. (1998) konnten mit dem TEM den Effekt des mechanischen Legierens gut nachweisen (Abbildung 3-5 rechts). Graphit allein wurde nach 5 Stunden Mahldauer komplett röntgen-amorph (Ernst et al., 1998). Für industrielle Anwendungen von Hochenergie-Kugelmühlen sei auf die Publikationen von ZOZ et al. (2001e) bzw. YING und ZHANG (2000) hingewiesen.

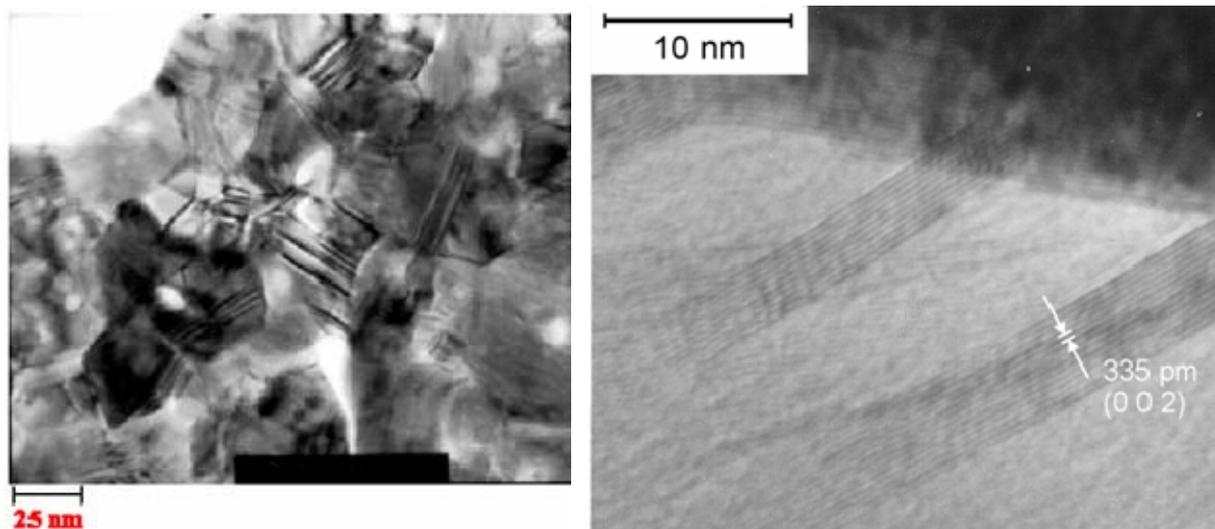


Abbildung 3-5 Links: Das TEM Bild zeigt mechanisch legiertes Silber-Zinndioxid (Ag-SnO_2). Die Korngröße beträgt nur einige zehn Nanometer (Hoppe, 2004). Rechts: Das TEM-Bild zeigt mechanisch legiertes Eisen/Grafit. Die durch Van-der-Waals Kräfte verbundenen Ebenen des Grafits mit 335pm Abstand in der (0 0 2) Ebene sind deutlich zu erkennen. (Ernst et al., 1998)

3.3 Zentrale Fragestellungen

Wie im vorherigen Kapitel erläutert, beruht das Mahlprinzip auf Kollision, aber nicht oder nur geringfügig auf Reibung. Die kinetische Energie der Kugeln bei der Kollision ist maßgebend, jedoch nicht direkt messbar. Von ZOZ et al. (1999b) wurden Experimente zu Messung der Energiebilanz durchgeführt, die indirekt Aufschluss über den Wirkungsgrad gegeben haben. HOPPE (2004) führte Messungen elektrischer Leistungsaufnahme an diesen Maschinen durch. Konkrete Aussagen zum Verständnis des Mahlprozesses lieferten beide Publikationen nicht.

Es gibt bisher keine Aussagen über die Geschwindigkeitsverteilung, die Relativgeschwindigkeit bzw. die Kollisionsgeschwindigkeit der Mahlkörper. Wichtig für die Werkstoffwissenschaftler ist aber eine Angabe zur Verteilung der Kollisionsgeschwindigkeit in Normalen-Richtung (Abbildung 3-6 links). Experimentell lässt sich die Verteilung der Kollisionsgeschwindigkeit bisher nicht bestimmen. Sie ist vermutlich abhängig von der Rotordrehzahl, Anzahl und Gewicht der Mahlkugeln, Anzahl und Form der Rotorblätter und dem Mahlkammervolumen (Abbildung 3-6 rechts). Gerade für Zerkleinerungsprozesse, bei denen ein Schwellwert für den Energieeintrag überschritten werden muss, ist eine solche Dichtefunktion hilfreich bei der Bestimmung der Betriebsparameter.

Ebenfalls wichtig sind Kenntnisse über das Kollisionsverhalten für folgende, häufig vorkommenden Aufgaben, für die in den nächsten drei Unterkapiteln Erläuterung folgt.

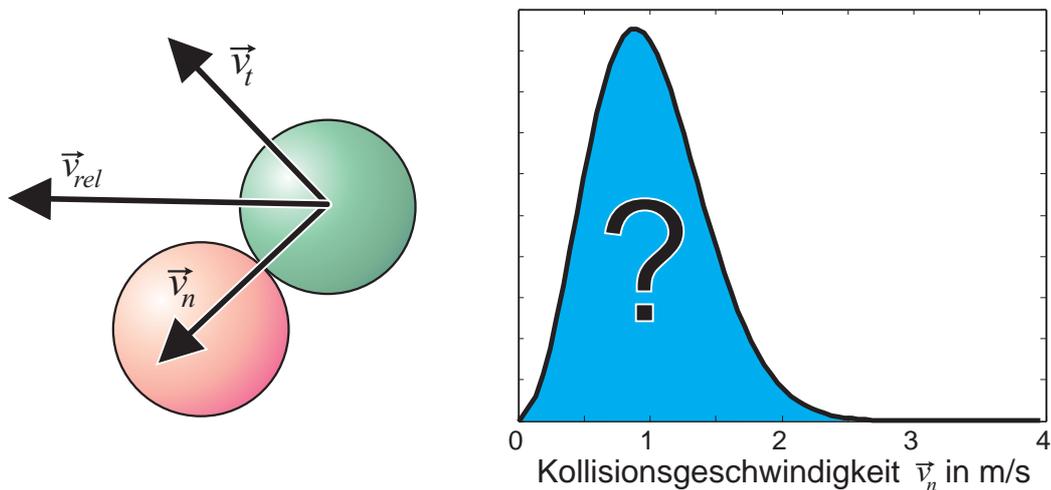


Abbildung 3-6 Die Normalkomponente \vec{v}_n der Relativgeschwindigkeit \vec{v}_{rel} bei der Kollision hat den maßgeblichen Anteil an der Mahlwirkung. Die Kenntnis der Dichtefunktion der Geschwindigkeitsverteilung in Normalen-Richtung wäre wünschenswert.

3.3.1 Wechsel des Mahlkugel-Materials

Beim Mahlprozess kann es bei abrasivem Mahlgut vorkommen, dass die Stahlkugeln abgenutzt werden. Bei der Herstellung von Glaskeramik-Pulver, einem Beschichtungswerkstoff für Metalloberflächen (emailierte Oberfläche), führt dies dazu, dass die weiße Farbe des Pulvers nach dem Einbrennvorgang vereinzelt bräunliche Färbungen aufweist. Diese Verfärbungen begründen sich durch den Eisenabrieb, der in der Oberflächenbeschichtung oxidiert (Zoz et al., 2001b, 2001c, 2001d).

KERN (2004) hat in seinen Experimenten festgestellt, dass die Stahlkugeln im ersten Mahlvorgang mit dem Keramik-Pulver (Al_2O_3) ca. 5 μm dick beschichtet werden. In nachfolgenden Mahlungen waren die Kugeln so gut beschichtet, dass keine Kontamination nachgewiesen werden konnte (Kern, 2004).

Dieser schützende Beschichtungseffekt tritt nicht bei allen Materialien auf. Folglich müssen die Mahlkugeln gegen andere, härtere Materialien ausgetauscht werden, die dann aber auch eine andere Dichte haben. Die Massenänderung ist bei gleicher Geschwindigkeit proportional zur Änderung der kinetischen Energie der Mahlkörper: Es stellt sich die Frage, wie die Betriebsparameter angepasst werden müssen, damit etwa mit Keramikugeln die gleiche Korngröße wie mit Stahlkugeln produziert wird.

Die Software für den Antrieb kann die Drehzahl des Rotors bei Änderung des Kugelmaterials anpassen, um die kinetische Energie auf das ursprüngliche Niveau zu bringen. Dabei wird angenommen, dass die Umfangsgeschwindigkeit des Rotors v_{Rotor} gleich der durchschnittlichen Geschwindigkeit der Mahlkugeln v_{Kugel} ist:

$$v_{\text{Rotor}} = r_{\text{Rotor}} \cdot \omega \quad \text{mit} \quad \omega = n_{\text{Rotor}} \frac{2\pi}{60} \quad (3-1)$$

Sei m_{Keramik} die Masse der Keramikugeln, m_{Stahl} die Masse der Stahlkugeln, sowie v_{Stahl} die Geschwindigkeit der Stahlkugel(n). Dann berechnet sich nach Tausch der Stahl-

gegen die Keramikugeln deren Geschwindigkeit v_{Keramik} und, weil zu dieser proportional, die Drehzahl des Rotors n_{Keramik} aus dem Vergleich der kinetischen Energien wie folgt (Zoz et al., 1999b):

$$\frac{1}{2} m_{\text{Keramik}} \cdot v_{\text{Keramik}}^2 = \frac{1}{2} m_{\text{Stahl}} \cdot v_{\text{Stahl}}^2 \quad \Rightarrow \quad n_{\text{Keramik}} = \sqrt{\frac{m_{\text{Stahl}}}{m_{\text{Keramik}}}} \cdot n_{\text{Stahl}} \quad (3-2)$$

Jedoch haben die Annahmen, die zu Gleichung (3-2) für Skalierung der Rotordrehzahl bei Kugelmateriale-Änderung führen, zwei Modellfehler³:

1. Die Umfangsgeschwindigkeit des Rotors ist nicht proportional zur mittleren Geschwindigkeit der Kugeln (siehe Kapitel 7.1 und 19.1).
2. Die Änderung des Kugelmateriale ändert nicht nur die Masse der Kugeln, sondern auch deren Dämpfungseigenschaften (siehe Kapitel 6)

Die Anpassung der Drehzahl nach Gleichung (3-2) ist folglich nicht korrekt. Ein Wechsel des Kugelmateriale ist ohne zusätzliche Anpassung der Betriebsparameter nicht möglich. Diese Parameteranpassung erfolgt i.d.R. durch langwierige Versuchsreihen.

3.3.2 Änderung der Pulvermenge pro Charge

Legierungen werden normalerweise schmelzmetallurgisch aus den Legierungskomponenten hergestellt. Das mechanische Legieren kommt aufgrund der hohen Produktionskosten nur für Materialien in Frage, die nicht über Standardverfahren herstellbar sind. Die Ausgangspulver sind zudem meistens relativ teuer. Einerseits, weil der Preis für die Pulver an sich schon höher ist, als für das gleiche Gewicht an Vollmaterial. Andererseits, weil das Pulver für die Entwicklung nur in geringen Mengen benötigt wird, so dass häufig Mindermengenzuschlag bezahlt werden muss.

Mit der Materialentwicklung beauftragte Werkstoffwissenschaftler produzieren in den Labormaschinen folglich nur diejenige Menge, welche für die Analyse der Materialeigenschaften nötig ist. Wenn schließlich die „Rezeptur“ und die Betriebsparameter für das Pulver gefunden wurden, werden i.d.R. größere Mengen für Probenkörper oder die Nullserie⁴ benötigt. Die Pulverproduktion pro Charge muss gesteigert werden.

Es stellt sich die Frage, wie die Betriebsparameter angepasst werden müssen, damit etwa statt der bisherigen 200 g in Zukunft 300 g Pulver produziert werden können. Ein wichtiger Parameter ist das Pulver zu Kugel Massenverhältnis. Bei Steigerung des Pul-

³ Der Autor dieser Arbeit hat seinerzeit selbst maßgeblich an der zitierten Veröffentlichung (Zoz et al., 1999b) mitgearbeitet. Die Sachverhalte für die beiden hier kritisierten Modellfehler waren damals den Autoren noch nicht bekannt.

⁴ Als *Nullserie* wird die erste Produktionsserie bezeichnet. Die geringen Stückzahlen sind für einen ausgewählten Personenkreis bestimmt.

veranteils, muss die Anzahl der Kugeln im gleichen Verhältnis steigen. Durch den Trommel-Füllgrad von 30 – 40 % sind bei der Skalierung Grenzen gesetzt.

Die übliche Annahme ist, dass die Rotordrehzahl nicht geändert werden muss, weil die Änderung der Kugelanzahl auf deren mittlere Geschwindigkeit keine Auswirkungen hat. Nach dieser Regel muss nur die Anzahl der Kugeln erhöht werden, wenn die Pulvermenge steigt. KERN (2005) hatte allerdings vergeblich versucht die Produktivität in der beschriebenen Weise zu erhöhen. Die Eigenschaften der Pulver änderten sich.

3.3.3 Pulverproduktion in unterschiedlichen Maschinengrößen

Werkstoffwissenschaftler in Forschung und Entwicklung produzieren mit Labormaschinen nur ca. 200 g Pulver. Für industrielle Anwendungen wird aber ein Vielfaches dieser Menge benötigt. Da Hochenergiekugelmöhlen in verschiedenen Größen existieren, werden Skalierungsregeln für den Wechsel von Labor- auf Industriemaschine benötigt. Gerade für die Industrie ist es wichtig, möglichst wenige Anpassungen an den Betriebsparametern vorzunehmen, denn in den Industriemaschinen werden zwischen 15–25 kg Pulver produziert. Die Materialkosten in einer Industriemaschine liegen folglich pro Charge um den Faktor 75 – 125 höher, als die einer Charge in einer Labormaschine. Der höhere Maschinenstundensatz und der entgangene Gewinn durch verspätete Markteinführung des neuen Produktes sind nicht genau zu beziffern. Gute Skalierungsregeln, die nur wenige Experimente zur Feineinstellungen der Betriebsparameter nach sich ziehen, sind verständlicher Weise ein von der Industrie dringend benötigtes Hilfsmittel.

Analog zum Ansatz, der in Kapitel 3.3.1 vorgestellt wurde, wurde von ZOZ et al. (1999b) für dieses Problem ein Lösungsvorschlag gemacht: Die Umfangsgeschwindigkeit der Rotoren soll bei Maschinenwechsel konstant bleiben. Bekannt sind für die Labormaschine deren Rotorradius r_{Lab} und die Rotordrehzahl n_{Lab} . Für die Industriemaschine ist deren Rotorradius r_{Ind} bekannt und zu bestimmen ist aus den gegebenen Daten die Rotordrehzahl n_{Ind} . Diese errechnet sich durch Gleichsetzen der Umfangsgeschwindigkeiten der Rotoren wie folgt:

$$r_{\text{Ind}} \cdot n_{\text{Ind}} = r_{\text{Lab}} \cdot n_{\text{Lab}} \quad \Rightarrow \quad n_{\text{Ind}} = \frac{r_{\text{Lab}}}{r_{\text{Ind}}} \cdot n_{\text{Lab}} \quad (3-3)$$

ZOZ et al. (1999b) haben Skalierungs-Experimente mit Zink-Oxid (ZnO) in einer Labormaschine mit 2 Liter Volumen und einer Industriemaschine mit 100 Liter Volumen durchgeführt. Die Autoren standen dem Ergebnis selbst kritisch gegenüber, weil die Kristallitgröße des gemahlen Pulvers unterhalb der Auflösung der verwendeten Analyseräte war (Zoz et al., 1999b). Der Hersteller der Hochenergie-Kugelmöhlen gibt zu diesem Problem an, „...dass Skalierung möglich, aber schwierig sei. Konkrete Skalierungsregeln existieren derzeit nicht.“ (Benz, 2005).

4. Zeitkontinuierliche Vielteilchen-Simulation

Das Verhalten des Mahlguts in Kugelmühlen lässt sich thematisch dem Gebiet der granularen Materie zuordnen. Als granulare Materie bezeichnet man im Allgemeinen eine Vielzahl von makroskopischen festen Teilchen, die nur über Kontaktkräfte wechselwirken. Sie nimmt eine Zwitterstellung bzgl. ihres Aggregatzustandes ein. Die Einzelkomponenten der granularen Materie verhalten sich zwar ausschließlich als Festkörper, ein Ensemble von Einzelkomponenten hat jedoch sowohl die Eigenschaften von Flüssigkeiten als auch von Festkörpern (Baumann, 1997). Beispiele für granulare Materie sind Gerölllavinen, Sandhaufen, die Füllung von Silos, Schüttgut. Am Beispiel einer allgemein bekannten Sanduhr ist einleuchtend zu erkennen, dass sich granulare Materie nur scheinbar wie eine Flüssigkeit verhält: Würde man statt Sand Wasser in die Uhr füllen, dann würde die Fließgeschwindigkeit mit der Füllhöhe abnehmen, weil der statische Druck der Wassersäule mit der Zeit abnimmt. Der Sand fließt jedoch immer gleich schnell

In diesem Kapitel werden zeitkontinuierliche Simulationsverfahren für die Simulation von granularer Materie vorgestellt. Der spezielle Fokus liegt hierbei auf dem Bewegungsverhalten der Kugeln von Trommelmühlen. Obwohl diese Simulationstechniken nicht in dieser Arbeit angewandt wurden, stellen sie doch das Standardverfahren für granulare Materie dar. Generell kann man diese Art von Simulationen auch auf Hochenergie-Kugelmühlen anwenden. Der zeitkontinuierliche Ansatz soll daher hier zum Vergleich mit dem ereignisdiskreten Ansatz kurz erläutert werden.

4.1 Funktionsprinzip zeitkontinuierlicher Simulationen

Die Dynamik granularer Materie und hochdisperser Pulver ist Thema vieler aktueller Forschungsvorhaben (DFG, 2003), jedoch ist noch kein einfaches, allgemein anwendbares Modell gefunden worden. Die Betriebsparameter von Kugelmühlen werden i.d.R. erst empirisch bestimmt und anschließend in aufwendigen Testläufen optimiert. Um das Betriebsverhalten dieser Maschinen besser zu verstehen, werden Granular-Dynamik-Simulationen auf der Grundlage zeitkontinuierliche Simulationsalgorithmen durchgeführt.

Ohne auf Implementierungsdetails oder zugrunde liegende Modelle genauer eingehen zu müssen, soll ein zeitkontinuierlicher Algorithmus hier am Beispiel eines auf eine Platte springenden Tischtennisballs erläutert werden: Eine zeitkontinuierliche Simulation kann mit einer Mehrfachbelichtung mittels Stroboskop verglichen werden. Zu festgelegten Zeitabständen wird die Szene entsprechend der Blitzfrequenz belichtet. Auf dem Foto ist dann für jeden Stroboskop-Blitz ein Tischtennisball zu sehen. Bei höheren Geschwindigkeiten ist der Abstand zwischen den Bällen größer und umgekehrt. Ein Belichtungszeitpunkt, bei welchem der Ball gerade die Tischtennisplatte berührt, ist sehr unwahrscheinlich (Abbildung 4-1).

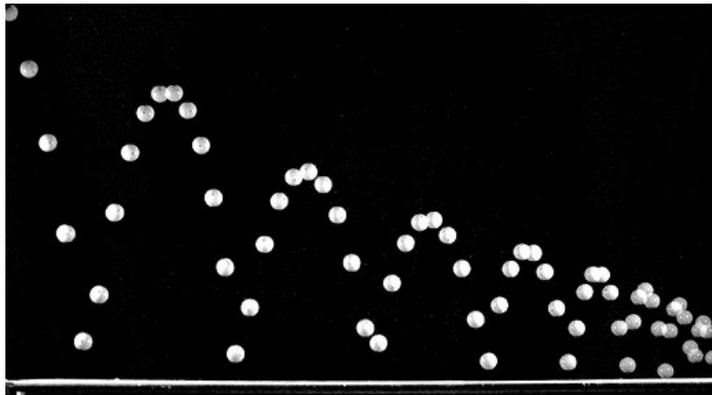


Abbildung 4-1 Mehrfachbelichtung eines springenden Tischtennisballs. Der Ball wurde in konstanten Zeitabschnitten aufgenommen.

Eine zeitkontinuierliche Simulation integriert numerisch für jeden Zeitpunkt t und für jede Kugel i die Newtonsche Bewegungsgleichung (4-1) (Buchholtz et al., 2000a). Die Zeitschrittweite des numerischen Differenzialgleichungslösers ist dabei i.d.R. konstant.

$$\ddot{x}_i m_i = F_i(x_1, \dot{x}_1, \dots, x_n, \dot{x}_n) \quad (4-1)$$

Bei Mehrkörpersystemen wird ein System aus einzelnen Körpern zusammengesetzt, die untereinander kraftbasiert wechselwirken. Die Verbindung der Körper wird durch Federn und Dämpfer modelliert, wobei die Verbindung allerdings nicht abreißen kann. Auf diese Weise können etwa ganze Fahrzeuge oder auch nur deren Baugruppen, wie eine Hinterachse, simuliert werden. Im Gegensatz zu Mehrkörpersystem sind bei Vielteilchensystemen die einzelnen Körper getrennt (Kugelmühle), können bei Kontakt trotzdem aber über Federn und Dämpfer auf Druck belastet werden. Bei Zugbeanspruchung wird die Verbindung jedoch gelöst. Dieses Prinzip wird auch *Discrete Element Methode* (DEM) genannt.

Der Großteil von Computersimulationen zu Trommelmühlen wird mit DEM durchgeführt, ein Verfahren welches schon von CUNDALL (1971) Anfang der 70er Jahre des letzten Jahrhunderts angewandt wurde. Grundlage des Verfahrens ist, die Trajektorien der Objekte schrittweise zu verfolgen und nach jedem Rechenschritt eine eventuelle Überschneidung der Objekte zu erkennen. Später wurden von verschiedenen Autoren die zu Anfang zweidimensionalen Scheiben durch kugelförmige Objekte ersetzt (Strack und Cundall, 1984; Cundall, 1988; Walton et al., 1988).

4.2 Implementierungsvarianten

In zeitkontinuierlichen Simulationen mit kraftbasiertem Ansatz, wird für jeden Zeitpunkt t und für jede Kugel die Newtonsche Bewegungsgleichung (4-1) numerisch integriert. Dieser allgemein anwendbare Ansatz hat sich bei vielen Systemen bewährt. Es existieren jedoch Systeme, bei denen der kraftbasierte Ansatz nur sehr ineffizient arbeitet. Bei stark verdünnten Vielteilchensystemen, den granularen Gasen, ist die Dauer der Wechselwirkungskräfte relativ zur Flugzeit nur kurz (Pöschel und Brilliantov, 2003). In der langen Phase der kontaktfreien Bewegung kann man die Zeitschrittweite des Differen-

zialgleichungslösers mit Hilfe adaptiver Schrittweitensteuerung anpassen (Deuffhard, 2004). Dieses Verfahren erschwert jedoch die Kollisionserkennung anhand von sich überschneidenden Objekten, weil die Wahrscheinlichkeit eine Kollision zu übersehen mit größerer Schrittweite zunimmt.

Ein zeitkontinuierliches Verfahren würde etwa folgenden Algorithmus in der Simulationsschleife anwenden (Sundram und Collins, 1996):

1. Integriere das System über eine Schrittweite Δt
2. Am Ende eines jeden Zeitschritts überprüfe, ob sich Kugeln überlappen.
3. Falls dies der Fall ist, sind alle Kugeln (nicht nur die überlappenden), so lange zurückzubewegen (Zeit rückwärts), bis sich die Oberflächen gerade berühren.

Ein besonderes Problem stellen die erkannten Kollisionen dar, denn es muss der Zeitpunkt bestimmt werden, an dem sich die Oberflächen berühren. Beim „Auseinanderziehen“ der Kugeln, müssen alle anderen Kugeln ebenfalls in der Zeit zurückgeschoben werden (siehe Punkt 3 des Algorithmus) bis sich die Oberflächen der zuerst kollidierenden Kugeln gerade berühren, weil sonst die eben behobene Überlappung eine andere auslösen könnte.

So allgemein anwendbar dieser Algorithmus ist, er hat jedoch entscheidende Nachteile bei Kugeln mit hoher Geschwindigkeit. Zwischen zwei Zeitschritten können zwei Kugeln kollidieren, durch die andere hindurch fliegen und sich wieder trennen. Tritt dieser Fall ein, dann wird folglich die Kollision übersehen. Eine Reduzierung der Schrittweite, würde die Rechenzeit in die Höhe treiben, ohne eine Garantie zu geben, dass Kollisionen nicht übersehen werden.

BAUMANN hat das Kaskadenverhalten einer Trommelfüllung bereits ausführlich modelliert und effizient simuliert (Baumann und Wolf, 1996). Die Simulation wurde dabei ausschließlich zweidimensional durchgeführt und die Kugeln (modelliert als 2D Scheiben) durften modellbedingt keinesfalls Kataraktverhalten aufweisen (Baumann et al., 1994). Das zugrunde liegende Verfahren wurde von JULLIEN (1992) vorgestellt. Bei dem von BAUMANN erweiterten *Bottom-to-Top-Restructuring* (BTR) Verfahren dreht die Trommel in jedem Zeitschritt um einen Winkel, wodurch die Kugelpackung instabil wird. Nach dem Rotationsschritt werden die Kugeln von unten nach oben in einer neuen stabilen Position angeordnet (Baumann et al., 1995). Kugeln müssen immer Kontakt mit anderen Kugeln oder der Trommelwand haben, was nur Anordnungen leicht oberhalb des Schüttwinkels zulässt (Ristow, 1998).

Das Ergebnis einer solchen Simulation ist Abbildung 4-2 (links) dargestellt und zeigt eine steilere Anordnung, als die Kugeln aus dem Experiment von ZOZ et al. (2001a) in Abbildung 2-1 (links).

BTR-Simulationen werden in der Literatur als effizient⁵ beschrieben, jedoch ist das zugrunde liegende Modell nicht unumstritten:

- Es lässt stochastische Modelansätze vermessen, welche die Vorgänge zur stabilen Positionierung der Kugeln nach der Drehung der Trommel besser beschreiben könnten (Barker et al., 1993; Jullien et al., 1993b). Zufällige Positionierungen in alternativen stabilen Lagen könnten das im Modell fehlende Abheben der Kugeln ersetzen.
- Der Schwellwert für die Segregation (Entmischung) von unterschiedlich großen Scheiben wird in Frage gestellt (Barker und Mehta, 1995; Jullien et al., 1995).
- Der Schüttwinkel dieser Simulationen wird i.d.R. zu hoch bestimmt (Ristow, 1998).
- Es kann keine reale Zeit angegeben werden, weil das stabile Anordnen der Kugeln ohne Zeitdauer modelliert ist (Baumann, 1997).

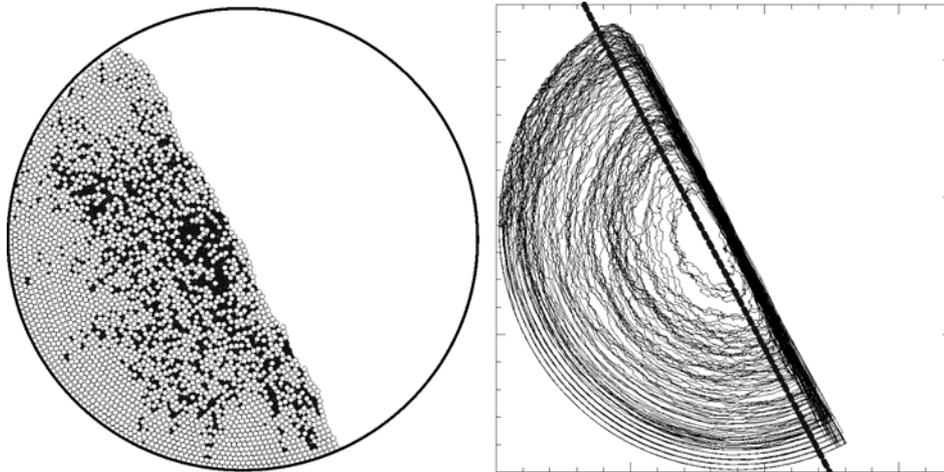


Abbildung 4-2 Links: Segregation (Entmischung) einer typischen BTR-Simulation nach 3 Umdrehungen. Rechts: Trajektorien eines markierten Teilchens nach ca. 55 Umdrehungen. Die dicke Linie separiert die Lawinenzone vom Rest der Füllung (Baumann, 1997).

Der Einsatz des Verfahrens mit akzeptabler Realitätstreue beschränkt es auf die Simulation von Entmischungsvorgängen unterschiedlicher Kugelgrößen (Abbildung 4-2 links) oder der Verfolgung von Trajektorien einzelner Teilchen (Abbildung 4-2 rechts).

BUCHHOLTZ et al. (2000a) haben in Ihrer Vielteilchensimulation den kraftbasierten Ansatz gewählt. Bei den Simulationen wird die Trommelwand ebenfalls aus kleinen Kugeln zusammengesetzt, um dem Algorithmus die Erkennung von Kugel-Wand Kollision zu vereinfachen. Abbildung 4-3 zeigt die Position der Mahlkugeln (Scheiben) exemplarisch bei zwei verschiedenen Drehzahlen. Die Striche am Rand der Trommel stellen so ge-

⁵ „Die Effizienz und Schnelligkeit des BTR-Algorithmus zeigt sich daran, dass für diese Trajektorien nur 21 Stunden Rechenzeit auf einer *IBM RS6000/355 Risc Workstation* benötigt wurden.“ (Baumann, 1997)

nannte Hubbalken dar. Hubbalken transportieren die Kugeln weiter nach oben um die Kataraktwirkung schon bei geringeren Drehzahlen einzuleiten. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass die Zone größter Kompressionsspannung in den unteren Regionen des Kugelpakets liegt (Buchholtz et al., 2000b).

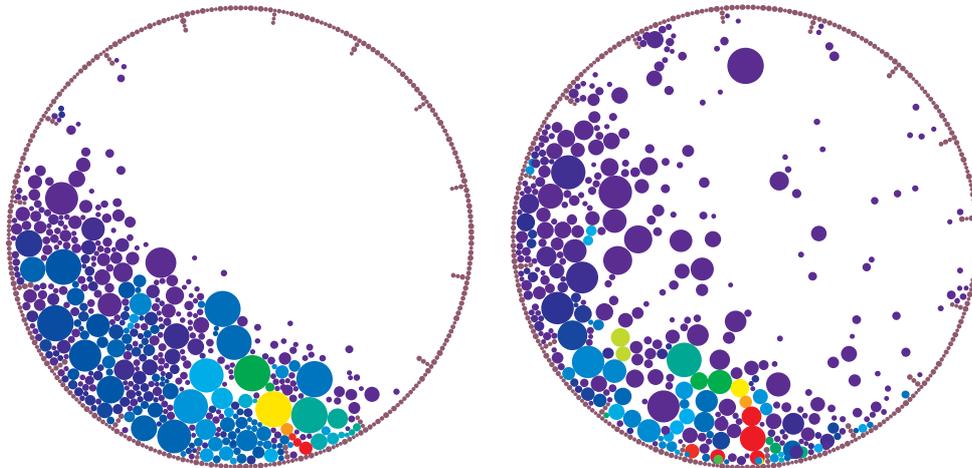


Abbildung 4-3 Zweidimensionale Simulation einer Trommelmühle mit Hubbalken bei 0,5 Hz (links) und 1,0 Hz (rechts). Die Farbe kodiert hierbei die maximale Kompressionsspannung (blau: geringe Spannung; rot: höchste Spannung). Als Ort höchster Beanspruchung lässt sich der Boden der rotierenden Trommel ausmachen (Buchholtz et al., 2000b).

Aktuellere Forschungsaktivitäten beschäftigen sich nicht nur mit dem Bewegungsverhalten der Trommelfüllung, sondern beziehen auch das Mahlgut während des Zerkleinerungsprozesses mit ein (Cleary, 2003). In seiner Habilitationsschrift gibt RISTOW (1998) einen Überblick über das Fließverhalten granularer Materie und erläutert die dazugehörigen Simulationstechniken. Er simulierte auch, wie sich die Kugeln von Trommelmühlen unter den verschiedenen Gravitationseinflüssen auf unterschiedlichen Planeten unseres Sonnensystems oder einem Asteroiden verhalten (Abbildung 4-4).

Die Rechenzeit für Simulationen von Trommelmühlen hängt stark von der Komplexität des verwendeten Modells ab. Rechenzeiten von mehreren Tagen sind keine Seltenheit.

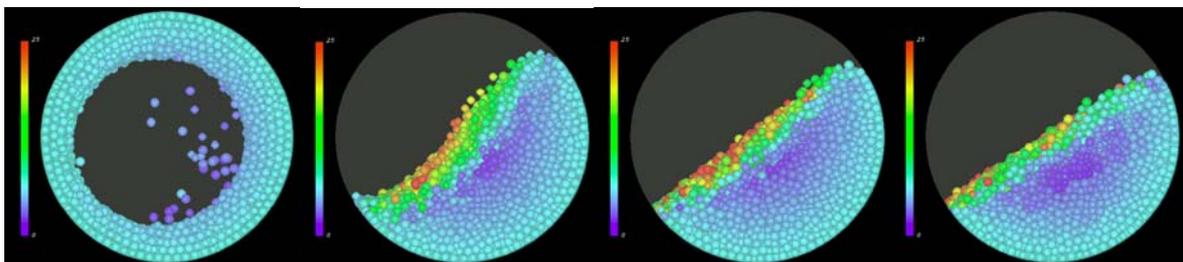


Abbildung 4-4 Farbkodierte Kugelgeschwindigkeiten bei einer Rotationsgeschwindigkeit von 0,5 Hz unter Berücksichtigung unterschiedlicher Gravitation auf Himmelskörpern unseres Sonnensystems. Von links nach rechts: Asteroid, Mars, Erde, Jupiter. (Ristow, 1998)

5. Ereignisdiskrete Simulatoren

Dieses Kapitel beschreibt die Grundlagen des in dieser Arbeit eingesetzten Simulationsverfahrens. Der Vorteil der ereignisdiskreten Simulation liegt in ihrer hohen Effizienz gegenüber den zeitkontinuierlichen Verfahren. Allerdings sind sie, im Gegensatz zu DEM, nur unter bestimmten Voraussetzungen anwendbar und algorithmisch komplexer. Weiterhin sind bei der Implementierung einige wichtige Grundlagen und Implementierungsdetails zu beachten, die in diesem Kapitel an Literaturbeispielen erläutert werden.

Bei zeitkontinuierlichen Simulationen sind die Diskretisierungspunkte die äquidistanten Zeitschritte. Die Simulationszeit „springt“ von einem Zeitpunkt zum nächsten, und alle Simulationsobjekte werden entsprechend einer Bewegungsvorschrift in ihrer Position verschoben. Bei ereignisdiskreten Simulationen werden anhand der Bewegungsvorschrift nur die Raum-Zeit Koordinaten der Richtungsänderungen durch Kollisionen berechnet, nicht die Zwischenpositionen. Der Einsatz ereignisdiskreter Simulatoren ist etwa bei der Simulation von digitalen Elektronikbauteilen, von Warteschlangen, in der Materialfluss- oder Fertigungssimulation üblich (Zeigler, 1990; Fishman, 2001).

Analog zu Kapitel 4 wird die ereignisdiskrete Simulation mit einem auf einer Platte springenden Tischtennisball erläutert: Eine ereignisdiskrete Simulation kann mit einer Mehrfachbelichtung verglichen werden, bei der immer dann geblitzt wird, wenn der Ball gerade die Tischtennisplatte berührt. Auf dem Bild wären dann nur auf der Platte liegende Bälle zu sehen und die Zwischenpositionen fehlen gänzlich. Da der Ball durch den Aufprall jedoch gedämpft wird, muss das Stroboskop mit fortschreitender Zeit immer schneller blitzen (Abbildung 5-1 – rechts). Wenn der Ball schließlich zur Ruhe gekommen ist, müsste das Licht ständig eingeschaltet bleiben.

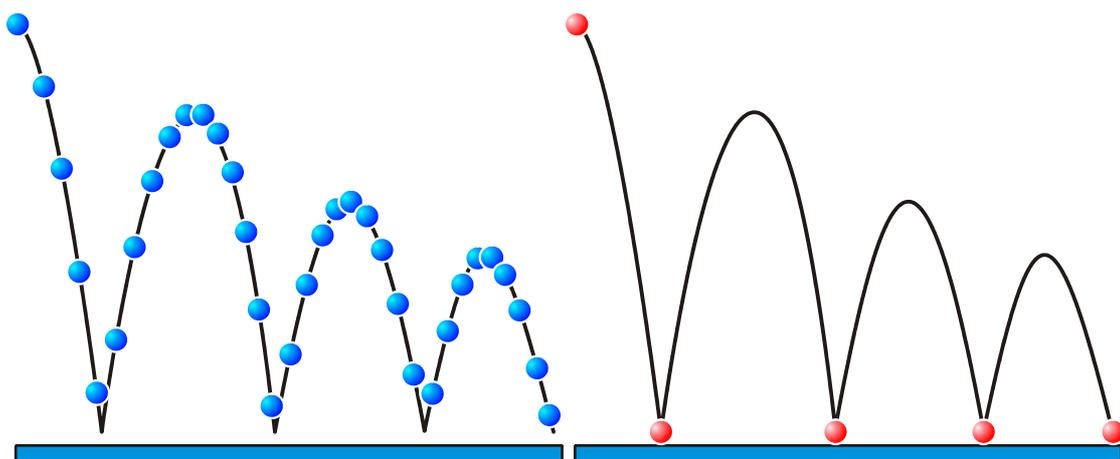


Abbildung 5-1 Links: *Zeitkontinuierliche Simulation* – Der Aufenthaltsort wird bei einer festen Bildfrequenz gezeigt. Hohe Geschwindigkeiten zeigen sich durch größere Abstände zwischen den Aufenthaltsorten. Rechts: *Ereignisdiskrete Simulation* – Der Aufenthaltsort wird nur zum Zeitpunkt des Aufpralls gezeigt. Durch die Dämpfung des Balls befinden sich gegen Ende immer mehr Aufenthaltsorte auf immer kleinerem Raum.

Ereignisse in einer ereignisdiskreten Simulation sind abstrakt definiert als die Zeitpunkte an denen sich der Systemzustand sprunghaft ändert. Daher sind sie ganz von der Anwendung abhängig. Es gibt keine allgemeingültigen ereignisdiskreten Simulatoren, sondern sie sind immer auf die jeweilige Fragestellung, z.B. die Materialflusssimulationen, zugeschnitten und in gewissen Grenzen konfigurierbar.

5.1 Ereignisdiskrete Simulation von Vielteilchensystemen

Bei der ereignisdiskreten Simulation wird der Kollisionszeitpunkt analytisch bestimmt. Die Flugbahnen der Kugeln werden dabei meistens als geradlinig und konstant angenommen, so dass der Kollisionszeitpunkt zweier Kugeln durch Nullstellensuche eines zeitabhängigen quadratischen Polynoms bestimmt werden kann. Bei Berücksichtigung der Gravitation ist die Relativgeschwindigkeit zweier Kugeln ebenfalls geradlinig und konstant, auch wenn für die einzelnen Kugeln Parabelbahnen angenommen werden (siehe Kapitel 8.2).

In der Literatur finden sich zahlreiche Beispiele für den erfolgreichen Einsatz von ereignisdiskreten Simulationen:

- WALLQUIST et al. (1987) simulierten auf diese Weise chemische Reaktionen und das Verhalten von Wassertropfen.
- Sowohl PHUL et al. (1989) als auch GIVEN und CLEMENTI (1989) simulierten das Bewegungsverhalten von kochendem Wasser.
- Das simulierte Verhalten von fließenden Flüssigkeiten auf einer Ebene publizierten HANNON et al. (1986).
- Die Stabilität von Planetenringen wurde mit diesem Verfahren von ARAKI (1991) untersucht.
- LUDING (2002) untersuchte den Übergang von Aggregatzuständen.
- YOUNG und ALDER (1979, 1977), letzterer publizierte übrigens als erster einen ereignisdiskreten Algorithmus für Vielteilchensysteme, untersuchten das ungewöhnliche Verhalten von Cerium (Ce) und Cesium (Cs).
- HERBST et al. (2004) haben das Verhalten von Partikeln zwischen oszillierenden Wänden untersucht und deren Geschwindigkeitsverteilung ausgewertet.

Ereignisdiskrete Simulationen sind, falls für das System anwendbar, wesentlich effizienter als zeitkontinuierliche Verfahren. Wenn die nachfolgend beschriebenen Voraussetzungen erfüllt sind, ist somit i.d.R. einer ereignisdiskreten Simulation der Vorzug zu geben.

Bei ereignisdiskreten Simulationen werden die Objekte, in diesem Fall selbst Mahlkugeln, durch *harte Kugeln* beschrieben. Die Reichweite der Kräfte ist dadurch auf Wechselwirkungen der Kugeloberfläche beschränkt und es existieren keine Potentiale mit

einer Reichweite, die über den Kugelradius hinausgehen. Radiusübergreifende Kraftmodelle zwischen den Kugeln, wie Gravitation, elektrostatische Kräfte, Magnetismus etc. können mit ereignisdiskreten Simulationen folglich nicht, bzw. nicht effizient, simuliert werden. Ferner müssen bei der ereignisdiskreten Simulation von granularen Gasen, deren Partikel durch harte Kugeln beschrieben werden, folgende Modellannahmen berücksichtigt werden:

- *Kollisionen finden nur paarweise statt*, etwa zwischen zwei Kugeln oder zwischen einer Kugel und der Systemgrenze. Mehrfachkontakte sind folglich ausgeschlossen. Die in Kapitel 2.1 vorgestellten Trommelmühlen, wären durch eine ereignisdiskrete Simulation folgerichtig nicht beschreibbar, denn der Großteil der Kugeln befindet sich mit mehr als einer anderen Kugel in Kontakt. Ebenfalls nicht anwendbar ist eine ereignisdiskrete Simulation auf eine Hochenergiekugelmühle mit geringer Rotordrehzahl, weil dort ebenfalls einige Kugeln Mehrfachkontakte aufweisen (siehe Kapitel 3.1.3).
- *Kollisionen haben eine infinitesimale Dauer*. Da die Dauer der kontaktfreien Bewegung der Kugeln wesentlich länger ist, als ihre paarweisen Kontakte untereinander, wird vereinfachend angenommen, dass die Kollisionsdauer unendlich kurz ist. Die Kugeln ändern im Moment der Kollision nicht die Position, sondern ausschließlich die Flugrichtung und die Rotation. Zugleich wird durch die Kollision kinetische Energie dissipiert, wodurch die Geschwindigkeit der Kugeln reduziert wird. Eine genaue Beschreibung des Kollisionsmodells findet sich in Kapitel 6. Ruhende Kugeln, selbst vereinzelt liegende, können mit ereignisdiskreten Simulationen nicht beschrieben werden. Ebenfalls nicht simulierbar sind rollende Kugeln, weil sie dabei ständigen Kontakt mit einer anderen Oberfläche haben.

Falls sich herausstellt, dass das zu simulierende System durch die beiden grundlegenden Vereinfachungen nicht beschrieben werden kann, muss auf klassische Verfahren, etwa DEM (siehe Kapitel 4), zurückgegriffen werden.

5.2 Klassisches Funktionsprinzip ereignisdiskreter Simulationen

In den späten 1950er Jahren präsentierten ALDER und WAINWRIGHT (1959) eine Simulationsmethode, um den Bewegungsablauf von harten Kugeln zu beschreiben, welche nur durch Oberflächenkräfte ihre Bewegung ändern. Deren Simulator erlaubte es ihnen ein 2D-System mit 500 Scheiben zu simulieren. Die Rechenzeit betrug 30 Minuten für 250 Stöße, was zu damaliger Zeit sehr schnell war. Neuere Algorithmen bewältigen bei gleicher Problemgröße auf heutigen Computern ca. 20.000 Stöße pro Sekunde.

Ein Algorithmus nach dem klassischen ereignisdiskreten Verfahren beruht auf folgender Schleife, die während der Simulationszeit ausgeführt wird:

1. Berechne den Zeitpunkt der nächsten Kollision zwischen zwei Objekten.

2. Berechne für diese Kollision die Geschwindigkeitsvektoren nach der Kollision
3. Setze *alle* Kugeln auf die Position zum Kollisionszeitpunkt.

Diese Schleife muss für jede Kollision während der Simulationszeit einmal ausgeführt werden. Es liegt daher in der Natur von ereignisdiskreten Simulationen, dass für dichte Systeme mit vielen Kollisionen mehr Rechenzeit gebraucht wird, als für verdünnte, kollisionsärmere Systeme. Eine Vorhersage der Rechenzeit ist folglich schwer möglich.

Um die Komplexität von Algorithmen zu bewerten wird in dieser Arbeit die Standardnotation $O(g(n))$, z.B. $O(n^2)$, für eine obere Abschätzung verwendet, wobei n , sofern nicht anders angegeben, die Zahl der Kugeln ist. Wichtig bei der Komplexitätsanalyse ist, dass für kleine n die Laufzeit des Algorithmus kürzer oder auch größer sein kann, als es die Komplexitätsklasse vermuten lässt. Für kleine n gelten die Komplexitätsklassen nur eingeschränkt.

Mit diesem Bewertungsverfahren soll nun die o.g. Schleife analysiert werden, um das Potential für Verbesserungen aufzuzeigen.

1. Um die nächste Kollision zu berechnen, muss für jedes Kugelpaar der Kollisionszeitpunkt durch Nullstellensuche der zeitlichen Abstandsfunktion bestimmt werden. Von diesen vielen Kollisionszeiten ist deren kleinster Wert der nächste Kollisionszeitpunkt im System (Krantz, 1993). Folglich ergibt sich die Anzahl der Kombinationen für die Berechnung zu:

$$\frac{n(n-1)}{2} \quad (5-1)$$

Während der Berechnung der Kollisionszeit müssen noch einige Grundrechenoperationen durchgeführt werden, deren Anzahl jedoch für alle Berechnungen konstant ist. Um die Komplexität anzugeben wird nur beachtet, wie die Bestimmung des nächsten Kollisionszeitpunktes für große n skaliert. Dementsprechend ergibt sich aus (5-1) die quadratische Komplexitätsklasse $O(n^2)$.

2. Bei der Berechnung der neuen Geschwindigkeitsvektoren sind nur die beiden betroffenen Kugeln involviert, andere Kugeln können zum selben Zeitpunkt definitiv nicht kollidieren. Die Komplexität ist für diese Operation $O(1)$.
3. Um alle Kugeln auf eine neue Position zu setzen muss für jede einzelne Kugel eine Berechnung durchgeführt werden, was einer Komplexität von $O(n)$ entspricht.

Bei den Punkten 1 und 3 ist Potential für Verbesserungen, vor allem bei Punkt 1 mit der quadratischen Komplexitätsklasse. Auch ALDER und WAINWRIGHT (1959) haben bemerkt, dass die Kollisionserkennung in ihrem Algorithmus verbesserungsbedürftig ist. Sie erkannten, dass nur Kugeln, die gerade kollidierten ihre Richtung ändern. Die Flugbahnen der restlichen Kugeln bleiben von dieser Kollision unbeeinflusst. Die Kollisions-

zeitpunkte werden, zusammen mit den ab diesem Zeitpunkt gültigen Flugbahnparametern, in einer (Ereignis-)Liste gespeichert. Somit ändert sich der Ablauf innerhalb der Schleife wie folgt:

1. Suche das zeitlich nächste Kollisionsereignis aus der Ereignisliste.
2. Berechne für diese Kollision die Geschwindigkeitsvektoren nach der Kollision
3. Berechne nur für die beiden in die Kollision involvierten Kugeln deren nächste Kollision.
4. Hänge diese beiden neuen Ereignisse in der Ereignisliste an.

Die Einführung von Ereignislisten und die alleinige Berechnung der Nachfolgeereignisse für Kollisionen bringen jedoch einige Komplikationen mit sich, die in den nachfolgenden zwei Kapiteln erläutert werden. Eine ausführliche Komplexitätsanalyse des klassischen Algorithmus mit Abschätzung der unteren und oberen Schranken hat SIGURGEURSSON (2001) durchgeführt. Er zeigte u.a., dass die Einführung der Ereignislisten in der vorgeschlagenen Version keinen Geschwindigkeitsvorteil bringt, weil die Verwaltung der Ereignislisten zu aufwendig ist.

5.3 Ungültige Ereignisse

Die Berechnung der nächsten Kollisionsereignisse für die beiden Kugeln A und B , die aufgrund ihrer paarweisen Kollision zum Zeitpunkt t_c ihre Richtung ändern (siehe Abbildung 5-2 links), erfolgt nach folgendem Schema:

- Berechne für alle anderen Kugeln die Position zum Kollisionszeitpunkt t_c .
- Berechne für Kugel A paarweise die Kollisionszeitpunkte mit den anderen $n-1$ Kugeln und wähle die kleinste Kollisionszeit $t_c + \Delta t$.
- Gleiches gilt für Kugel B .

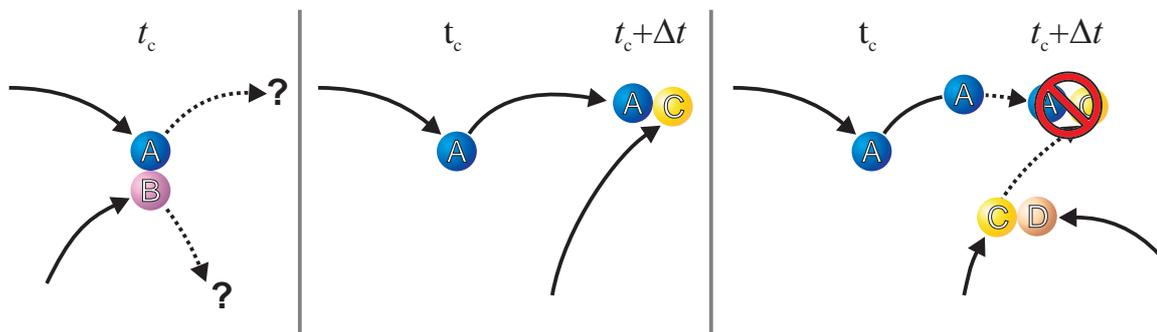


Abbildung 5-2 Links: Kugeln A und B kollidieren zum Zeitpunkt t_c . Sie ändern dadurch beide Ihre Flugbahn und für jede muss ein neuer Kollisionspartner gesucht werden. Mitte: Die Berechnung für A ergibt, dass die nächste Kollision zum Zeitpunkt $t_c + \Delta t$ mit Kugel C stattfinden soll. Rechts: Bevor die prognostizierte Kollision $A \rightarrow C$ stattfinden kann, kollidieren $D \rightarrow C$. Folglich wird die Kollision $A \rightarrow C$ ungültig.

Angenommen, nach dieser Berechnung ist für Kugel *A* der neue Kollisionspartner zum Kollisionszeitpunkt $t_c + \Delta t$ die Kugel *C* (siehe Abbildung 5-2 Mitte) – Kugel *B* interessiert in diesem Beispiel nicht mehr. Der ereignisdiskrete Algorithmus geht folglich davon aus, dass sich die Flugbahnparameter für Kugel *A* im Zeitintervall Δt nicht ändern.

Während des Zeitintervalls Δt kollidiert jedoch eine dritte Kugel *D* mit dem potentiellen Kollisionspartner von Kugel *A*. Die Kugeln *C* und *D* ändern durch die Kollision ihre Flugbahn und Kugel *C* wird zum Zeitpunkt $t_c + \Delta t$ nicht mit der Kugel *A* kollidieren (siehe Abbildung 5-2 rechts). Die Kollision *A* mit *C* zum Zeitpunkt $t_c + \Delta t$ ist demnach ungültig, muss aus der Ereignisliste gelöscht werden, und für Kugel *A* muss eine andere Kollision errechnet werden.

ERPENBACK und WOOD (1977) haben vorgeschlagen die Ereignisliste chronologisch zu sortieren, was ein üblicher Ansatz bei anderen Anwendungen von ereignisdiskreten Simulationen ist. Der Vorteil dieser Sortierung ist, dass die Simulationszeit schrittweise von einem Ereignis zum nächsten Springen kann, um für dieses wiederum ein Nachfolgeereignis zu generieren. Das neu berechnete Ereignis muss dann an der richtigen Stelle in der Liste eingefügt werden, damit die Liste sortiert bleibt. Durch Einfügen in die Liste werden alle zeitlich nachfolgenden Ereignisse der betreffenden Kugeln ungültig.

Zeit	A	B
0.98	●	
1.02	●	●
1.71	●	
1.86	●	
1.89	●	
1.91	●	●
1.99	●	
2.02	●	
2.06	●	●

Zeit	A	B
0.98	●	
1.02	●	●
1.71	●	
1.86	●	
1.89	●	
1.91	●	●
1.99	●	
2.02	●	
2.06	●	●

Zeit	A	B
0.98	●	
1.02	●	●
1.71	●	
1.86	●	
1.89	●	
1.91	●	●
1.99	●	
2.02	●	
2.06	●	●

Abbildung 5-3 Links: Das umrahmte Ereignis (1.89) wurde in die Ereignisliste eingefügt. Mitte: Durch das Einfügen werden alle nachfolgenden Ereignisse der grünen Kugel, deren Kollisionspartner (rot) und deren Kindeskinde ungültig. Rechts: Die ungültigen Ereignisse werden gelöscht (grau hinterlegt).

Das Verfahren soll an einem Beispiel erläutert werden: In Abbildung 5-3 ist die Ereignisliste als Tabelle dargestellt. In der ersten Spalte steht die Zeit des Ereignisses. In der zweiten und dritten Spalte stehen die farbkodierten Indizes der Kugeln. Keine Farbe ist in der dritten Spalte bei einer Wand-Kollision eingetragen.

- Es wurde, ausgehend von $t = 1,71$ Sekunden, ein Kugel-Wand Ereignis der grünen Kugel zum Zeitpunkt $t = 1,89$ Sekunden berechnet und chronologisch einsortiert (Abbildung 5-3 links).
- Durch das Einfügen werden alle nachfolgenden Ereignisse der grünen Kugel ungültig. Im nachfolgenden Ereignis, bei $t = 1,91$ Sekunden, sollte die grüne Kugel

mit der roten Kugel kollidieren. Dieses Ereignis wird ungültig und ebenfalls alle nachfolgenden Ereignisse der roten Kugel (Abbildung 5-3 Mitte).

- Alle ungültigen Ereignisse wurden aus der Liste entfernt (grau hinterlegt). Es existiert in diesem Beispiel nach dem aktuell bearbeiteten Ereignis bei $t = 1,71$ Sekunden kein Ereignis für die rote Kugel mehr (Abbildung 5-3 rechts). Das Fehlen von Nachfolgeereignissen hat erhebliche Konsequenzen, die später erläutert werden.

Der Nachteil dieser Vorgehensweise ist jedoch, dass der Aufwand zum Suchen der Einfügeposition in einer Liste mit n_L Einträgen eine Komplexität von $O(n_L)$ hat. Außerdem muss zum Finden der ungültigen Einträge eine weitere temporäre Liste angelegt werden, in der die Indizes der zu löschenden Kugeln stehen. Dies ist notwendig, weil auch die Kindeskinde der ungültigen Kollisionen gelöscht werden. Sind in der Liste n_{idx} Kugelindizes gespeichert, so muss jeder Eintrag in der Ereignisliste ab der Einfügeposition mit den n_{idx} Kugelindizes verglichen werden. Im ungünstigen Fall erreicht dieses Verfahren die quadratische Komplexität $O(n_{idx}^2)$ (Sigurgeursson, 2001).

Das Verfahren hat zudem einen konzeptionellen Fehler: Wenn von einer Kugel alle Ereignisse nach dem aktuellen Ereignis gelöscht werden (siehe rote Kugel), dann wird deren Bewegungsrichtung nicht mehr geändert, weil ein nachfolgendes Ereignis fehlt. Die Kugel würde für immer ihre Bewegungsrichtung beibehalten und die Systemgrenze verlassen. Falls keine Systemgrenze existiert, fällt dieser Fehler nicht auf.

Wie, oder ob überhaupt, einer der klassischen Algorithmen diesen Fehler abfängt, wurde bisher nicht dokumentiert. Einzig PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) weisen darauf hin, dass sie alle tausend Ereignisse die Positionen abspeichern und dabei zusätzlich prüfen, ob die Positionen aller Kugeln noch innerhalb des Systems liegen. Falls dies nicht der Fall ist, wird der Zustand der letzten Sicherung wieder hergestellt und die Kollisionen neu berechnet. Auf diese Weise würde auch der o.g. Fehler wieder „behooben“.

5.4 Verbesserungen des klassischen DES Funktionsprinzips

Viele Autoren haben den klassischen Algorithmus verbessert. Einer der Nachteile des klassischen Verfahrens ist die zeitraubende Kollisionsprüfung einer Kugel gegen alle anderen. Da eine Kollision mit benachbarten Kugeln viel wahrscheinlicher ist, als die Kollision mit einer Kugel am anderen Ende des Systems, ist es sinnvoll die Nachbarschaft einzuschränken.

Ein von ERPENBACK und WOOD (1977) publiziertes Verfahren legt ein Gitter über das Simulationsgebiet. Da eine Kugel im Randbereich einer Zelle schon teilweise in die Fläche der Nachbarzelle geraten kann, werden Kugeln ebenfalls den Nachbarzellen zugeordnet. Eine Kugel gehört folglich einer Zellgruppe aus 9 Zellen im zweidimensionalen Raum an und 27 Zellen im dreidimensionalen Raum. Für eine bestimmte Kugel reduzie-

ren sich die Kollisionsprüfungen auf die Kugeln der eigenen Zelle und die der Nachbarzellen.

Abbildung 5-4 zeigt ein Simulationsgebiet mit quadratischem Gitter. Die beiden blauen Kugeln seien gerade kollidiert und es müssen Nachfolgeereignisse gefunden werden. Die Mittelpunkte der beiden blauen Kugeln befinden sich in der roten Zelle. Die gesamte Zellgruppe besteht aus 9 Zellen (8x orange, 1x rot). Für die Suche der Nachfolgeereignisse der beiden blauen Kugeln müssen die Kugeln mit einbezogen werden, deren Mittelpunkte sich in dieser Zellgruppe befinden (lila Kugeln). Die restlichen Kugeln (gelb) sind nicht in der direkten Nachbarschaft und sind daher keine potentiellen Kollisionspartner.

Da die Positionen der Kugeln sich von Ereignis zu Ereignis ändern, müssen neben den Kollisionszeitpunkten auch Zellwechsel-Ereignisse kontrolliert und protokolliert werden. Der Algorithmus für die Kollisionserkennung muss folgendermaßen ergänzt werden:

- Für die aktuelle Kugel müssen die Kollisionszeiten mit den anderen Kugeln ihrer Zellgruppe errechnet werden. Davon wird die kleinste Zeit gewählt.
- Für die aktuelle Kugel muss der Zeitpunkt errechnet werden, an dem der Kugelmittelpunkt die aktuelle Zelle verlässt (Zellwechsel-Ereignis).

Von beiden Zeiten ist die kleinere zu wählen. Zusätzlich zu den Kollisionsereignissen müssen in der Ereignisliste auch die Zellwechsel-Ereignisse verwaltet werden. Dieses Verfahren von ERPENBACK und WOOD (1977) ist von zahlreichen Autoren nahezu unverändert übernommen worden, weil es die Effizienz der Simulation drastisch verbessert (Rapaport, 1980; Rapaport, 1993; Krantz, 1993; Lubachevsky und Stillinger, 1990; Lubachevsky, 1992; Lubachevsky, 1993; Marín et al., 1993; Baeza-Yates et al., 1994).

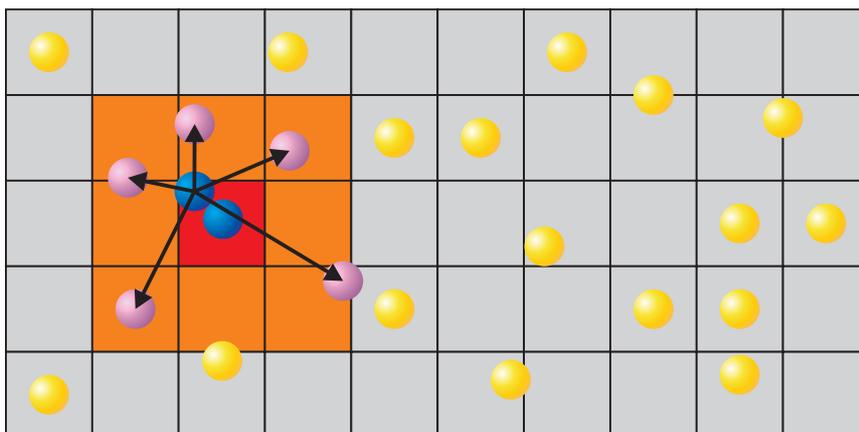


Abbildung 5-4 Das Simulationsgebiet ist in quadratische Flächen unterteilt. Bei der Suche der Nachfolgeereignisse müssen nur die Kugeln der eigenen Zelle (rot) und der 8 direkten Nachbarzellen (orange) einbezogen werden. Die gelben Kugeln in den grauen Zellen sind keine direkten Nachbarn und somit keine potentiellen Kollisionspartner.

Auf die Unterschiede der Implementierungsdetails soll hier nicht weiter eingegangen werden. KRANTZ (1993) hat die Algorithmen und Datenstrukturen analysiert, und er ist zu dem Schluss gekommen, dass die Implementierungen von RAPAPORT (1993), LUBACHEVSKY (1992) und MARÍN et al. (1993) je nach Anwendungsfall und Dichte des Systems ihre Vorzüge haben. Neben der Einteilung in verschiedenartig geformte Zellen, gibt es auch Ansätze, welche die Nachbarschaft anders beschreiben. KARAVELAS (2001) hat das zweidimensionale Simulationsgebiet durch Voroni-Diagramme beschrieben. GAVRILOVA (2002) hat die Nachbarschaften durch dynamische Delauney-Triangulierungen beschrieben. Dieser Triangulierungsansatz scheint auf den ersten Blick die ideale Lösung zu sein, weil die direkten Nachbarn nach der Triangulierung sehr einfach zu identifizieren sind. Bei der Implementierung hat sich jedoch gezeigt, dass der Berechnungsaufwand für eine dynamisch veränderliche Triangulierung dem Verfahren der festen Zellgrößen unterlegen ist. GAVRILOVA (2002) hat, analog zu den Zellwechseln, den Zeitpunkt errechnet, an dem sich die Triangulierung durch die Bewegung der Kugeln ändert (siehe Abbildung 5-5). Die Änderung der Triangulierung, und damit einhergehend die Änderung der Nachbarschaftsverhältnisse, heißt *Flip*. Da sich durch diese Änderung die Topologie des Systems ändert, heißt das entsprechende Ereignis *topological event* (Gavrilova, 2002).

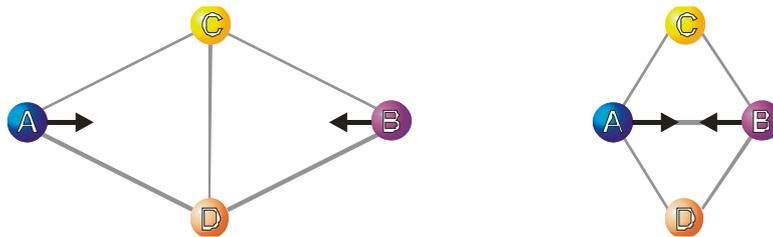


Abbildung 5-5 Bei der Delauney Triangulierung bilden die nächsten Nachbarn ein Dreieck. Durch die Bewegung der Kugeln muss die Position berechnet werden, an dem sich die Triangulierung ändert (*Flip*). Links: Die Kugeln A und B bewegen sich aufeinander zu. A-C-D und B-C-D bilden ein Dreieck. Rechts. Durch die Annäherung von Kugel A und B ändert sich die Triangulierung zu A-B-C und A-B-D. Die Kugeln A und B sind damit nächste Nachbarn geworden und sind somit potentielle Kollisionspartner (Gavrilova, 2002).

Neben der Einschränkung auf die nächsten Nachbarn wurde von einigen Autoren auch die Datenstruktur der Ereignisliste verändert. In der klassischen Version von ALDER und WAINWRIGHT (1959) wurden alle Ereignisse in eine Liste eingetragen (siehe Kapitel 5.2). In neueren Ansätzen werden den einzelnen Kugeln Ereignislisten zugeordnet. Dieses Verfahren wurde eingeführt, damit eine Kugel bei einem Zellwechsel zusammen mit ihren Ereignissen „umziehen“ kann. (Rapaport, 1993; Lubachevsky, 1993; Marín et al., 1993; Baeza-Yates et al., 1994). Um das nächste zu bearbeitende Ereignis zu finden, müssten jedoch alle Ereignislisten durchsucht werden, was einer Komplexität von $O(n)$ entspricht.

Von MARÍN et al. (1993) wurde ein interessanter Algorithmus vorgeschlagen, um das zeitlich nächste Ereignis zu finden. Die einzelnen Ereignislisten werden als doppelt ver-

kette Listen dargestellt, die chronologisch sortiert sind. Das für jede Kugel gültige Ereignis gilt als bekannt. Diese Ereignisse werden als *Lokale Minima* bezeichnet. Das kleinste dieser Lokalen Minima ist das nächste abzuarbeitende Ereignis, daher ist das Verfahren auch unter *Local Minimum Algorithm* (LMA) bekannt. Als Datenstruktur dient ein *Tournament-Tree* (Marín et al., 1993), bzw. *Heap* (Krantz, 1993). Die Blätter des Baumes stellen die aktuellen Ereigniszeitpunkte der einzelnen Kugeln (Nummer unter dem Blatt in Abbildung 5-6) dar. Die Elternknoten beinhalten das Minimum der beiden Kinderknoten. Auf diese Weise enthält die Wurzel die kleinste Ereigniszeit (siehe Abbildung 5-6 links).

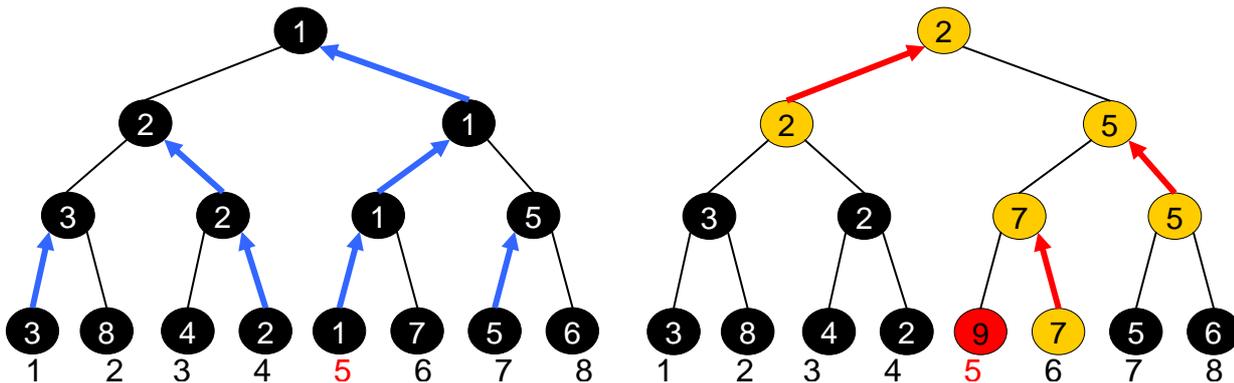


Abbildung 5-6 Finden des nächsten Ereignisses. Jeder Elternknoten enthält die Ereigniszeit des kleineren der beiden Kinderknoten. Links: Die Pfeile zeigen an, welcher Wert zum Elternknoten gegeben wurde. Die Wurzel enthält die kleinste Ereigniszeit („1“). Für dieses Ereignis muss ein Nachfolgeereignis gefunden werden. Die Ereigniszeit gehört zu Kugel Nr. 5. Rechts: Das Nachfolgeereignis für Kugel Nr. 5 hat den Wert „9“ und wurde im Blatt aktualisiert. Die Werte der beiden Kinderknoten werden verglichen und zum Elternknoten übergeben. Dieses Verfahren wird in jeder Ebene wiederholt, so dass die Wurzel wieder die kleinste Ereigniszeit („2“) hat. (Marín et al., 1993)

Für die Kugel, deren Ereigniszeit in der Wurzel des Baumes steht, muss das Nachfolgeereignis gefunden werden. In dem zur Kugel gehörigen Blatt des Baumes wird diese neue Ereigniszeit eingetragen. Im Beispiel Abbildung 5-6 wird für Kugel Nr. 5 aus der „1“ (links) eine „9“ (rechts). Ausgehend vom aktualisierten Blatt des Baumes werden die Werte paarweise verglichen und der Elternknoten mit dem kleineren der beiden Werte aktualisiert. Auf diese Weise müssen nicht alle Knoten aktualisiert werden. Durch den Einsatz der Baumstruktur wurde die Komplexitätsklasse für das Suchen des nächsten Ereignisses von $O(n)$ auf $O(\log n)$ verbessert.

Ein anderer wichtiger Punkt bei der Entwicklung von ereignisdiskreten Simulationen ist die Behandlung von ungültigen Ereignissen. LUBACHEVSKY (1993) sucht und löscht alle ungültigen Ereignisse aus der Ereignisliste, sobald diese erkannt werden. Für ungültige Ereignisse wird sofort ein Nachfolgeereignis gesucht. KRANTZ (1993) sucht die ungültigen Ereignisse und markiert diese nur als ungültig ohne sie sofort zu löschen. Während der Abarbeitung wird dann ein als gelöscht markiertes Ereignis erkannt und übersprungen. MARÍN et al. (1993) fügen alle gefundenen Ereignisse in die Ereignis-

te ein und nummerieren die Kollisionen pro Kugel. Falls während der Abarbeitung der Ereignisliste ein Ereignis auftaucht, dessen Kollisionszähler niedriger, als das aktuelle Ereignis ist, wird dieses Ereignis übersprungen. Alle drei Algorithmen verschieben das Problem der Löschung von ungültigen Ereignissen an eine andere Stelle in der Abarbeitung. Im Endeffekt werden ungültige Ereignisse nicht wirklich bearbeitet. Der Geschwindigkeitsvorteil der einzelnen Verfahren hängt meistens von der Dichte des Systems ab (Krantz, 1993).

5.5 Kollisionserkennung bei ereignisdiskreten Simulationen

Im Unterschied zu zeitkontinuierlichen Simulationen, bei denen der Kollisionsort durch Überschneidung der Objekte erkannt wird, wird bei ereignisdiskreten Simulationen die Kollisionszeit analytisch oder numerisch bestimmt. Voraussetzung für dieses Verfahren ist eine analytisch integrierbare Form der Bewegungsgleichung. Damit wird die Bewegungsform auf eine geradlinige Bewegung oder die ballistische Parabelbahn ohne Luftwiderstand eingeschränkt. Der zeitabhängige Positionsvektor $\vec{s}(t)$ wird durch die Anfangsposition \vec{r}_0 , die Anfangsgeschwindigkeit \vec{v}_0 und die Gravitationsbeschleunigung \vec{g} bestimmt (Sigurgeursson, 2001):

$$\vec{s}(t) = \vec{r}_0 + \vec{v}_0 \cdot t + \frac{1}{2} \vec{g} \cdot t^2 \quad (5-2)$$

Eines der häufigsten Kollisionereignisse ist die Kugel-Kugel Kollisionen, die bei allen Algorithmen auf dieselbe Weise erkannt wird (Rapaport, 1980; Rapaport, 1993; Krantz, 1993; Lubachevsky und Stillinger, 1990; Lubachevsky, 1992; Lubachevsky, 1993; Marín et al., 1993; Baeza-Yates et al., 1994; Sigurgeursson, 2001; Pöschel und Schwager, 2005).

Zwei Kugeln kollidieren, wenn sich deren Oberflächen berühren. Es muss der Zeitpunkt gefunden werden, an dem der Abstand der Mittelpunkte mit fortschreitender Zeit gleich der Summe der Radien ist. Die Kugeln werden immer paarweise auf Kollisionen geprüft, was bedeutet, dass diese zum gleichen Zeitpunkt „starten“ müssen. Dies erklärt auch den Ansatz von ALDER und WAINWRIGHT (1959), die Kugeln nach jedem Schritt auf die Position zum Kollisionszeitpunkt zu verschieben (siehe Kapitel 5.2). Durch gleichsetzen und auflösen der beiden zeitabhängigen Positionen aus Gleichung (5-2) erhält man die Kontaktzeitpunkte der Oberflächen. In Gleichung (5-3) errechnen sich der Relativpositionsvektor \vec{r}_{rel} aus den Differenzen der Anfangspositionsvektoren \vec{r}_0 und der Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} aus den Anfangsgeschwindigkeitsvektoren \vec{v}_0 der Kugeln (siehe Abbildung 5-7). Der Abstand der Mittelpunkte ist R .

$$t_{1/2} = \frac{-\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \pm \sqrt{\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}\right)^2 - \vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{r}_{rel} - R^2\right)}\right)}{\vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}} \quad (5-3)$$

Es ist anzumerken, dass der Gravitationsvektor \vec{g} in Gleichung (5-3) nicht mehr vorhanden ist, so dass diese Gleichung unabhängig vom Einfluss der Gravitation ist (Sigurgeirsson, 2001). Da Gleichung (5-3) die Nullstelle eines Polynoms zweiten Grades darstellt, existieren zwei Nullstellen. Mögliche konjugiert komplexe Nullstellen bedeuten keine Kollision, sondern nur positive reelle Nullstellen. Von zwei reellen Nullstellen muss die minimale positive Nullstelle gesucht werden.

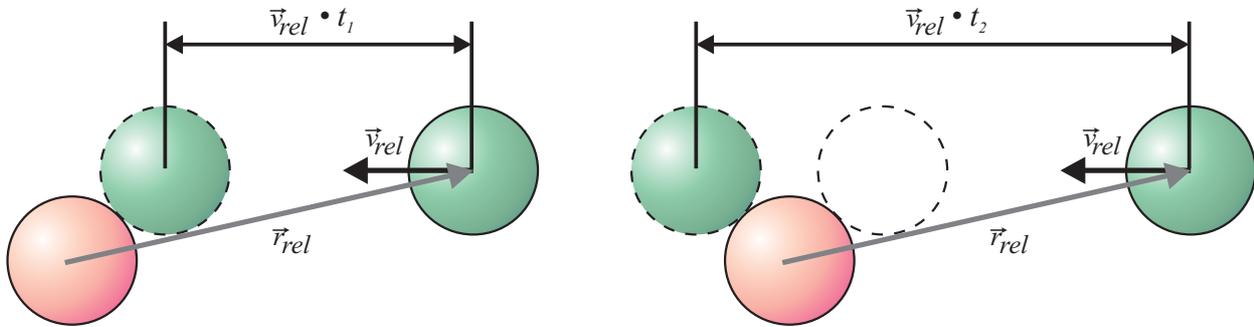


Abbildung 5-7 Bei der Kugel-Kugel Kollision existieren zwei Nullstellen für die Kollisionszeit. Die erste positive reelle Nullstelle ist die Kollisionszeit (links). Im Zeitintervall zwischen den Nullstellen fliegt die grüne Kugel durch die rosa Kugel. Am Austrittspunkt befindet sich die zweite Nullstelle (rechts).

Allgemein ist immer die minimale nichtnegative Nullstelle der Kollisionszeitpunkt. Bei den Zellwechsellern ist die Lösung trivial. Bei der Kollisionserkennung gegen andere bewegte Objekte, z.B. Rotoren, kann die Nullstellensuche nur numerisch erfolgen, wie in Kapitel 8.4 beschrieben.

5.5.1 Verbesserung der Kugel-Kugel Kollisionserkennung

Obwohl die Nullstellen eines quadratischen Polynoms schnell zu bestimmen sind, bleibt diese Berechnung zentraler Bestandteil des ereignisdiskreten Algorithmus von harten Kugeln. In jeder Simulationsschleife muss diese Berechnung ausgeführt werden. Die Kollisionserkennung für Kugel-Kugel Kollisionen erfolgt nach folgendem Schema (Rapaport, 1980; Rapaport, 1993; Krantz, 1993; Lubachevsky und Stillinger, 1990; Lubachevsky, 1992; Lubachevsky, 1993; Marín et al., 1993; Baeza-Yates et al., 1994; Sigurgeirsson, 2001; Pöschel und Schwager, 2005):

- Berechne die Kollisionszeiten t_1 und t_2
- Suche die minimale reelle positive Nullstelle der beiden Nullstellen (Kollisionszeitpunkt)
- Wenn nur negative Nullstellen oder konjugiert komplexe Nullstellen existieren, dann ist der Kollisionszeitpunkt (numerisch) unendlich.

Aus der statistischen Physik kommt ein Ansatz, um Rechenzeit bei der Kollisionserkennung einzusparen. Die meisten Kugeln kollidieren nicht. Um den Rechenaufwand einzuschränken, wird daher vor der eigentlichen Bestimmung des Kollisionszeitpunktes geprüft, ob die Kugeln überhaupt kollidieren können. Der Winkel α zwischen dem Rela-

tivpositionsvektor \vec{r}_{rel} und dem Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} muss kleiner sein, als der Winkel α_{max} bei einem „Streifschuss“ Abbildung 5-8.

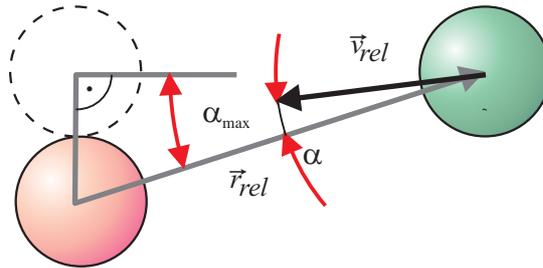


Abbildung 5-8 Der Winkel α_{max} zwischen dem Relativpositionsvektor und dem Relativgeschwindigkeitsvektor entsteht, wenn die Kugeln sich bei der Kollision gerade noch berühren. Wenn der reale Kollisionswinkel α kleiner gleich α_{max} ist, dann treffen sich die Kugeln in jedem Fall.

Die Überprüfung der Kollisionswinkels ist in der Implementierung schneller, als für jede Kugel die beiden Nullstellen des quadratischen Polynoms zu bestimmen, um dann festzustellen, dass keine reelle positive Nullstelle existiert.

5.6 Problemfälle bei ereignisdiskreten Algorithmen

Der Einsatz von ereignisdiskreten Simulatoren hat zwei Nachteile, die im Folgenden erläutert werden. Beide Nachteile stehen in Zusammenhang mit der Idee der ereignisdiskreten Simulatoren, die Simulationszeit von Ereignis zu Ereignis fortschreiten zu lassen. Wenn viele Ereignisse in einem Zeitintervall stattfinden, wird daher die ereignisdiskrete Simulation sehr ineffizient, weil die Berechnungszeit für jedes Ereignis nahezu konstant ist. Im Extremfall finden unendlich viele Ereignisse in endlicher Zeit statt, etwa dann, wenn alle Kugeln am Boden sind.

5.6.1 Inelastischer Kollaps

Bei einer inelastischen Kollision wird ein bestimmter Prozentsatz der kinetischen Energie dissipiert, so dass die Geschwindigkeit der Kugeln durch die Kollision reduziert wird. SHIDA und KAWAI (1989) haben gezeigt, dass drei Kugeln entlang einer Geraden so positioniert werden können, dass sie in endlicher Zeit unendlich viel Energie dissipieren können. Dieser Effekt, der *inelastische Kollaps*, wurde von weiteren Autoren ebenfalls in ereignisdiskreten Simulationen beobachtet (Schwager, 1998; Goldman et al., 1998; McNamara und Young 1992). GOLDMAN et al. (1998) stellten allerdings fest, dass mit steigender räumlicher Dimension dieser Effekt zunehmend bei gravitationsfreien Systemen schwieriger zu konstruieren ist, jedoch nicht völlig ausgeschlossen werden kann.

Nicht desto trotz tritt dieser Effekt bei System mit Gravitation immer auf, wenn die Kugeln nicht aktiv beschleunigt werden. Lässt man Kugeln mit einer ereignisdiskreten Simulation in einen Behälter fallen, dann wird deren Geschwindigkeit durch die Kollisionen gedämpft – sie kommen jedoch nie zur Ruhe. Bei der Hochenergie-Kugelmühle passiert dies bei geringen Rotordrehzahlen.

5.6.2 Überlappung von Kugeln

Bei Kugel-Kugel-Kollisionen wird der Zeitpunkt der Kollision errechnet. Bei der Bestimmung der Kollisionszeit kann es durch zwei numerische Fehler zu Problemen kommen:

- Wenn eine Kugel A die Kollision mit der Kugel B feststellt, dann wird im weiteren Verlauf die Kugel B ebenfalls feststellen, dass sie mit der Kugel A kollidiert, denn die Kollisionsprüfungen erfolgt gegen alle anderen Kugeln außer sich selbst. Da der Kollisionszeitpunkt von verschiedenen Ursprungszeitpunkten aus berechnet wird, können die beiden berechneten Kollisionszeiten numerisch bedingt voneinander abweichen. Der Algorithmus stellt folglich zwei unterschiedliche Ereignisse der beiden Kugeln in dichter zeitlicher Abfolge fest.
- Nachdem der Kollisionszeitpunkt festgestellt wurde, werden die beiden Kugeln auf die Position der Kollision verschoben. Durch kleine numerische Fehler können die beiden Kugeln dadurch ineinander stecken. Die Kollisionserkennung würde als Zeitpunkt der Kollision errechnen, wann die Kugeln sich wieder trennen.

Diese beiden Effekte wurden von PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) analysiert und dokumentiert. Die Autoren sind der Auffassung, dass diese Fehler nicht in jedem Fall vermieden werden können. PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) schlagen als Umgehung des Fehlers vor, bei der Bestimmung des Kollisionszeitpunktes einen Schwellwert einzuführen. Alle Ereignisse die zeitlich innerhalb der Toleranz des Schwellwertes liegen, gelten als zeitgleich. Auf diese Weise wird eine Kollision von Kugel A und B auch als Kollision von Kugel B und A erkannt, also dieselbe Kollision. Weiterhin wird von der Kollisionszeit ein anderer Schwellwert abgezogen, so dass die Kollision früher passiert. Auf diese Weise wird einerseits das zweite Problem der dichten Positionierung bzw. Überlappung behoben, andererseits werden dadurch andere Probleme verursacht. PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) lösen das Problem, wie schon in Kapitel 5.3 beschrieben, indem die Positionen der Kugeln in regelmäßigen Abständen auf Überschneidung oder Systemverlassen kontrolliert werden.

Die Folge der Überlappung von Kugeln ist für die Laufzeit der Simulation dramatisch, weil sie viele Kollisionsereignisse innerhalb in kurzen Zeitabständen verursachen. Wenn Kugeln ineinander stecken, wird deren Bewegungsrichtung umgekehrt, wie bei einer „richtigen“ Kollision (Abbildung 5-9 a). Dann wird als nächste Kollision der erneute Kontakt der Oberflächen, von innen nach außen, erkannt (Abbildung 5-9 b). Daraufhin wird die Bewegungsrichtung beider Kugeln umgekehrt (Abbildung 5-9 c). Die Kugeln stecken wieder ineinander (Abbildung 5-9 d). Von PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) wird dieser Effekt wie zwei Schlüsselringe beschrieben, die geschüttelt werden. Die Schlüsselringe kollidieren an den Innenflächen.

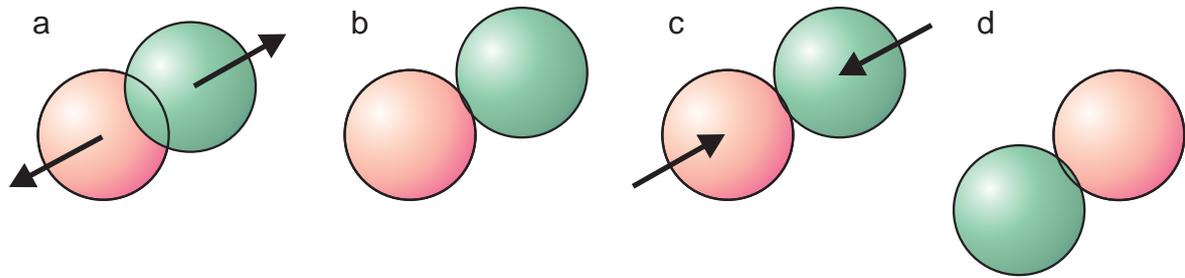


Abbildung 5-9 Durch numerische Fehler kann es vorkommen, dass Kugeln ineinander stecken. Die Bewegungsrichtung wird bei jeder Kollision der Innenflächen umgekehrt, so dass die Kugeln wie Schlüsselringe ineinander stecken bleiben. Dieser Situation verlangsamt die Simulation drastisch (Pöschel und Schwager, 2005).

Sollten zwei Kugeln durch numerische Fehler ineinander stecken, trennen sie sich i.d.R. nicht wieder. Es sei denn es geschieht diese beiden Kugeln betreffend wieder ein numerischer Fehler.

6. Kollisionsmodell

In diesem Kapitel wird das vereinfachte Kollisionsmodell von ereignisdiskreten Simulationen aus der Literatur erläutert. Trotz sehr einfacher Form beschreibt es den in der Realität komplizierten Sachverhalt realistisch. Die Bestimmung der Parameter ist jedoch aufwendig und konkrete Werte für die Parameter sind kaum vorhanden.

In ereignisdiskreten Simulationen werden die Kugeln durch unendlich harte Kugeln modelliert, welche untereinander nur durch Oberflächenkräfte wechselwirken. Eine mögliche elastische oder plastische Deformation durch die Kollision wird nicht beachtet. Problematisch an diesem grundlegenden Konzept der Zweiteilchenwechselwirkung ist, dass aufgrund der zahlreichen inneren Freiheitsgrade der Kugel-Kugel-Stoß nicht voll verstanden ist (Baumann, 1997). Eine ausführliche Darstellung des Problems haben GOLDSMITH (1960) und JOHNSON (1985) geliefert. Während eines Stoßes treten durch normale und tangentielle Kräfte zwischen den Kugeloberflächen longitudinale und transversale Schwingungsmoden auf. Diese Schwingungen werden, durch innere Reibung gedämpft, in Wärme umgewandelt (Baumann, 1997). ASPELMEIER (2000) behandelt in seiner Dissertation ausführlich die mikroskopischen Vorgänge beim Kugelstoß.

Die Kontaktzeit ist, entgegen der Modellannahme von ereignisdiskreten Simulationen, in der Realität nicht von unendlich kurzer Dauer. Die geschwindigkeitsabhängige Kontaktzeit für Kugeln wurde schon von HERTZ (1882) hergeleitet und wird in dieser Form auch noch in aktuellen Arbeiten verwendet (Weinhold, 2004). Da die Kontaktzeit in ereignisdiskreten Simulationen jedoch als unendlich kurz angenommen wird, müssen alle komplexen elastischen Deformations- und Dämpfungsvorgänge zu einem Zeitpunkt stattfinden.

Ein makroskopischer Ansatz zur Beschreibung der Dämpfung von Körpern beim Aufprall haben schon sehr früh WALLIS (1669), WREN (1669) und HUYGENS (1669) gemacht (Scott, 1938; Yoder, 1988; Pöschel, 2000). RAMAN (1918) führte zur Beschreibung der Dämpfung in Normalen-Richtung den *Restitutionskoeffizienten* ein. Der Restitutionskoeffizient ε_n beschreibt, wie viel Prozent der Geschwindigkeit in Normalen-Richtung vor dem Stoß \vec{v}_n noch nach dem Stoß (\vec{v}'_n) vorhanden ist.

$$\vec{v}'_n = -\varepsilon_n \vec{v}_n \quad \text{mit} \quad 0 \leq \varepsilon_n \leq 1 \quad (6-1)$$

Bei voll plastischen Stößen ist der Restitutionskoeffizient Null. Zwei kollidierende Kugeln würden durch die Kollision aneinander haften bleiben und sich gemeinsam mit der gleichen Geschwindigkeit weiterbewegen. Aus Energieerhaltungsgründen hat der Restitutionskoeffizient einen Maximalwert von Eins, denn die Geschwindigkeit nach dem Stoß kann nicht größer sein, als die Geschwindigkeit vor dem Stoß. Dieser Maximalwert stellt den vollelastischen Stoß dar, bei dem keine kinetische Energie in andere Energiefor-

men umgewandelt wird. Werte zwischen Null und Eins stellen teilplastische Stöße dar, wie sie bei der in dieser Arbeit beschriebenen Hochenergie-Kugelmühle auftreten.

Freie Teilchen haben neben den Translationsfreiheitsgraden auch Rotationsfreiheitsgrade. Die Rotation der Kugel ändert ihre Oberflächengeschwindigkeit in tangentialer Richtung zur Kollisionsebene. Analog zu Gleichung (6-1) errechnet sich der tangentielle Restitutionskoeffizient ε_t aus dem Verhältnis der tangentialen Geschwindigkeiten vor dem Stoß und nach dem Stoß (siehe Kapitel 6.2). Positive Werte von ε_t stellen Gleiten über die Oberfläche dar, wobei die tangentielle Geschwindigkeit gebremst wird. Negative Werte von ε_t bewirken eine Richtungsumkehr. Mit den beiden Restitutionskoeffizienten kann die Änderung der Rotation und der Energieverlust beim Kugelstoß vollständig beschrieben werden. In den nächsten beiden Abschnitten wird auf diese beiden Parameter genauer eingegangen.

6.1 Normaler Restitutionskoeffizient

In vielen ereignisdiskreten Simulationen wird der normale Restitutionskoeffizient als *konstant* angenommen (Rapaport, 1980; Rapaport, 1993; Krantz, 1993; Lubachevsky und Stillinger, 1990; Lubachevsky, 1992; Lubachevsky, 1993; Marín et al., 1993; Baeza-Yates et al., 1994; Sigurgeirsson, 2001). Für sehr kleine Kollisionsgeschwindigkeiten ist diese vereinfachte Annahme auch gerechtfertigt, da in diesem Fall fast völlig elastische Kollisionen vorliegen, bei denen ε_n gegen Eins geht (Pöschel, 2000). Ferner steht bei den in Kapitel 5 zitierten Publikationen der Algorithmus der Simulation und nicht das Kollisionsmodell im Zentrum der Arbeiten.

Schon 1835 stellte HODKINSON (1835) bei Kollisionsexperimenten fest, dass der Energieverlust bei Kollisionen mit steigender Geschwindigkeit überproportional steigt. Allein durch makroskopische Beobachtung des Impulstransports in Planetenringen hat GREENBERG (1988) auf einen mit steigender Geschwindigkeit fallenden Restitutionskoeffizienten geschlossen.

Experimentell wird der Restitutionskoeffizient ε_n beispielsweise ermittelt, indem ein Ball auf eine Platte fallen gelassen und die Höhe gemessen wird, bei der er wieder sein Maximum erreicht (Brach, 1989). Um den Restitutionskoeffizienten exakt zu messen, muss allerdings ein erheblicher messtechnischer Aufwand betrieben werden, da die Geschwindigkeit kurz vor der Kollision und kurz nach der Kollision ausschlaggebend ist. Bzgl. des Versuchsaufbaus dieser schwierigen experimentellen Aufgabe sei an dieser Stelle auf die Literatur verwiesen (Brach, 1991; Zukas et al., 1991; Kozlov und Treshchëv, 1991; Goldsmith, 1960; Rivin, 1999; Johnson, 1985; Timoshenko und Goodier, 1951; Ramírez et al., 1999; Adams, 1987; Falcon, 1998; Ivanov, 1995; Kuwabara und Kono 1987; Stronge, 1995; Young, 1989). Im Rahmen dieser Arbeit wurden mit einem

neuen experimentellen Aufbau Messungen zur Bestimmung des Restitutionskoeffizienten vorgenommen (siehe Kapitel 7.2).

PÖSCHEL (2000) hat in seiner Habilitationsschrift ausführliche theoretische Überlegungen zum Restitutionskoeffizienten in Normalen-Richtung gemacht und auf verschiedene Arten begründet, warum ε_n keine Konstante sein kann:

- Der Ansatz für die Normalkraft aus kraftbasierten Simulationen geht von einem zeitlichen Verlauf der Kontaktkraft während der Kollision aus. Würde man diesen Ansatz in einer ereignisdiskreten Simulation verwenden, bei der die Kontaktzeit unendlich kurz ist, würde aus analytischen Überlegungen auch der Restitutionskoeffizient Null sein. Folglich wären alle Kollisionen vollplastisch, was mit der Realität nicht übereinstimmt.
- Durch eine Dimensionsanalyse kommen PÖSCHEL (2000) und TAGUCHI (1992) zu der Schlussfolgerung, dass der Restitutionskoeffizient nicht unabhängig von der Kollisionsgeschwindigkeit sein kann.
- Analytische Überlegungen liefern eine Gleichung für den Restitutionskoeffizienten in Abhängigkeit der Kollisionsgeschwindigkeit. Allerdings beinhaltet diese Gleichung zwei Parameter, die experimentell ermittelt werden müssen und nicht aus den üblichen Materialparametern bestimmt werden können.

Werden die Kugeln als ideal glatt und unverformbar modelliert, dann ist keine Rotation möglich. Die Geschwindigkeit $\vec{v}'_{1/2}$ zweier gleicher Kugeln nach dem Stoß errechnet sich aus der Geschwindigkeit $\vec{v}_{1/2}$ vor dem Stoß mit Hilfe des normalen Restitutionskoeffizienten ε_n und des Einheitsvektors \vec{e} , welcher zum Zeitpunkt des Stoßes durch die beiden Kugelmittelpunkte geht (Abbildung 6-1):

$$\begin{aligned}\vec{v}_{rel} &= \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \\ \vec{v}'_{1/2} &= \vec{v}_{1/2} \pm \frac{1}{2}(\varepsilon_n + 1)(\vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{e}) \vec{e}\end{aligned}\quad (6-2)$$

Die Relativgeschwindigkeit in Normalen-Richtung errechnet sich wie folgt:

$$\vec{v}_n = (\vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{e}) \vec{e}\quad (6-3)$$

Für eine Kugel-Wand Kollision hat der Restitutionskoeffizient ε_n eine besondere Bedeutung. Da die Geschwindigkeit in tangentialer Richtung durch ε_n nicht geändert wird, sondern nur die Geschwindigkeit in Normalen-Richtung, ist der Ausfallswinkel α' nach der Kollision kleiner als der Einfallswinkel α . Bei aufeinander folgenden Kugel-Wand Kollisionen wird die Kugel zunehmend flacher gegen die Wand springen (Abbildung 6-2).

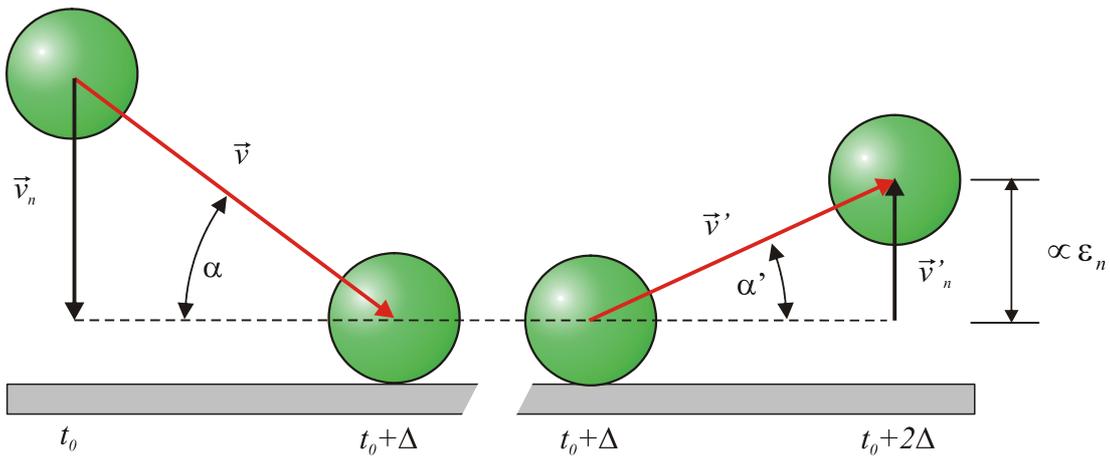


Abbildung 6-1 Der normale Restitutionskoeffizient ϵ_n gibt das Verhältnis von Relativgeschwindigkeit in Normalen-Richtung \vec{v}_n vor dem Stoß und der Relativgeschwindigkeit in Normalen-Richtung \vec{v}'_n nach dem Stoß an. Der Einheitsvektor \vec{e} geht durch die beiden Kugelmittelpunkte zum Zeitpunkt des Stoßes. Er wird für die Berechnung der Kollisionsgeschwindigkeit \vec{v}_n benötigt.

Die Geschwindigkeiten bei einer Kugel-Wand Kollision errechnen sich analog zu Gleichung (6-2), jedoch steht hier der Einheitsvektor \vec{e} senkrecht auf der Wand und geht durch den Kugelmittelpunkt:

$$\vec{v}' = \vec{v} - (\epsilon_n + 1)(\vec{v}^T \cdot \vec{e}) \vec{e} \tag{6-4}$$

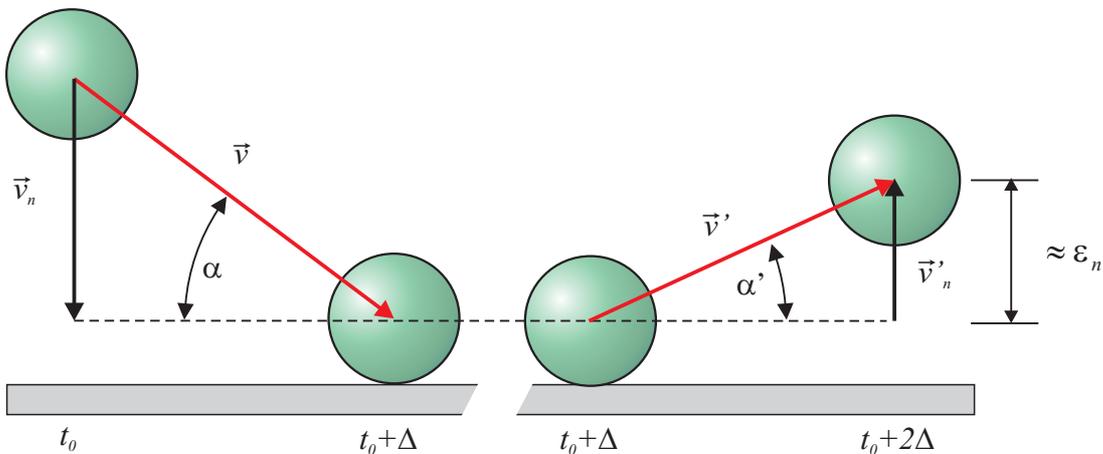


Abbildung 6-2 Durch eine geringere Geschwindigkeit in Normalen-Richtung nach dem Stoß \vec{v}'_n ist der Ausfallwinkel α' kleiner als der Einfallswinkel α . Für eine Kugel-Wand Kollision bedeutet dies, dass der Ball immer flacher an die Wand springt.

Letztendlich bleibt für eine gegebene Materialpaarung kein anderer Weg, als experimentell den Restitutionskoeffizienten zu bestimmen und in der Simulation eine, an die Messdaten angepasste Funktion, zu verwenden. Dieses Verfahren wurde von mehreren Autoren angewandt, wobei verschiedene phänomenologische Formeln eingesetzt wurden.

- Bei dem Ansatz von SALO (1987) muss die Konstante c durch die Messdaten angepasst werden:

$$\varepsilon_n = \frac{1}{1 + \frac{\|\vec{v}_n\|}{c}} \quad (6-5)$$

- ANDREWS (1930) verwendete folgende Formel, die auch Materialparameter berücksichtigt:

$$\varepsilon_n = \begin{cases} 1 & \text{für } \frac{\|\vec{v}_n\|}{c} \leq 1 \\ \sqrt{-\frac{2}{3} \left(\frac{c}{\|\vec{v}_n\|} \right)^2 + \sqrt{\frac{10}{3} \left(\frac{c}{\|\vec{v}_n\|} \right)^2 - \frac{5}{9} \left(\frac{c}{\|\vec{v}_n\|} \right)^4}} & \text{für } \frac{\|\vec{v}_n\|}{c} > 1 \end{cases} \quad \text{mit } c = \frac{\pi^2 (1-\mu)^2 \sigma_Y^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{10\rho E}} \quad (6-6)$$

In Gleichung (6-6) setzt sich die Konstante c zusammen aus dem Elastizitätsmodul E , dem Yieldmodul σ_Y (Steckgrenze), der Dichte ρ und der Poissonkonstanten μ (Querkontraktionszahl). Die Gleichung wurde ursprünglich für weiche Metalle entwickelt, später jedoch auch von BORDERIES et al. (1984) für die Simulation von Eispartikeln in den Planetenringen eingesetzt.

- SPAHN et al. (1997) publizierten folgenden Ansatz, bei dem die Konstanten A , B und C durch das Datenmaterial angepasst werden müssen:

$$\varepsilon_n = \frac{A}{(\|\vec{v}_n\| + B)^C} \quad (6-7)$$

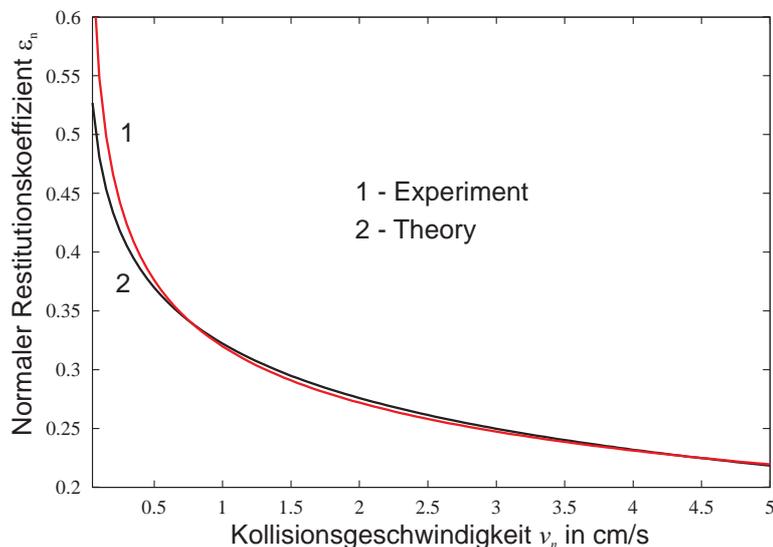


Abbildung 6-3 Rote Linie: Die experimentellen Daten stammen aus einem Eisteilchen-Eiswand Experiment. Schwarze Linie: Die Konstanten aus den theoretischen Überlegungen wurden aus den experimentellen Daten gewonnen. (Pöschel, 2000)

PÖSCHEL (2000) hat die Konstanten seiner theoretischen Herleitung aus den experimentellen Daten von BRIDGES et al. (1984) gewonnen. Die theoretischen Daten zeigen gute Übereinstimmungen mit dem Experiment (Abbildung 6-3). BRIDGES et al. (1984) haben Messungen mit gegen eine Eiswand kollidierenden Eisteilchen durchgeführt. BRILLIANTOV et al. (1996) haben ebenfalls diesen experimentellen Datensatz von

BRIDGES et al. (1984) für die Anpassung ihrer Konstanten verwendet und kommen auf ähnlich gute Übereinstimmungen.

6.2 Tangentialer Restitutionskoeffizient

Die Änderung der tangentialen Komponente der Geschwindigkeit \vec{v}_t aufgrund der Kollision wird durch den tangentialen Restitutionskoeffizienten ε_t angegeben. Durch die Rotation der Kugel ist nicht die tangentielle Komponente \vec{v}_t des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} , sondern die tangentielle Geschwindigkeit \vec{g}_t der Kugeloberfläche⁶ ausschlaggebend. Gegeben seien für zwei gleiche, kollidierende Kugeln deren Relativgeschwindigkeit \vec{v}_{rel} im Moment der Kollision, deren Radius R , der Einheitsvektor \vec{e} durch die Kugelmittelpunkte und die Rotationsvektoren der Kugeln $\vec{\omega}_1$ und $\vec{\omega}_2$. Der Rotationsvektor $\vec{\omega}$ einer Kugel stellt deren Rotationsachse dar (Abbildung 6-4). Der Betrag $\|\vec{\omega}\|$ des Rotationsvektors gibt die Rotationsgeschwindigkeit an, das Vorzeichen die Rotationsrichtung.

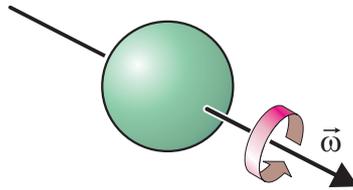


Abbildung 6-4 Der Rotationsvektor $\vec{\omega}$ stellt die Rotationsachse dar. Die Länge des Vektors gibt die Rotationsgeschwindigkeit an. Das Vorzeichen bestimmt die Rotationsrichtung.

Die tangentielle Geschwindigkeit \vec{g}_t und die normale Geschwindigkeit \vec{g}_n der Kugeloberflächen errechnet sich im Moment einer Kugel-Kugel Kollision wie folgt:

$$\begin{aligned} \vec{g}_n &= (\vec{g}^T \cdot \vec{e}) \vec{e} \quad \text{mit} \quad \vec{g} = \vec{v}_{rel} - R\vec{\omega}_1 \times \vec{e} - R\vec{\omega}_2 \times \vec{e} \\ \vec{g}_t &= \vec{g} - \vec{g}_n \end{aligned} \quad (6-8)$$

Der tangentialer Restitutionskoeffizient ist nun wie folgt definiert:

$$\vec{g}'_t = \varepsilon_t \vec{g}_t \quad (-1 \leq \varepsilon_t \leq 1) \quad (6-9)$$

Die Geschwindigkeiten $\vec{v}'_{1/2}$ nach dem Stoß für zwei Kugeln mit den Massen m_1 und m_2 errechen sich mit dem normalen und tangentialen Restitutionskoeffizienten wie folgt (Brilliantov et al., 1996):

$$m_{eff} = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad (6-10)$$

⁶ Die Geschwindigkeitskomponenten der Kugeloberfläche werden mit der Variablen g bezeichnet und dürfen nicht mit der Gravitationsbeschleunigung g verwechselt werden. In dieser Arbeit wird dieser Buchstabe als Variable doppeldeutig verwendet, damit der Vergleich mit den Formeln aus den Literaturquellen leichter fällt, wo diese Variable ebenfalls doppeldeutig verwendet wird.

$$\vec{v}'_{1/2} = \vec{v}_{1/2} \pm \frac{m_{eff}}{2m_{1/2}} \cdot ((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t - (\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n) \quad (6-11)$$

Für ideal glatte nicht deformierbare Kugeln gilt $\varepsilon_t = 1$. In diesem Fall reduziert sich Gleichung (6-11) zu Gleichung (6-2).

Es wird von PÖSCHEL (2000) und BRILLIANTOV (1996) angenommen, dass die Geschwindigkeitsreduzierung der Komponenten vollständig in Rotation umgesetzt wird. Somit errechnet sich die Rotationsgeschwindigkeit nach dem Stoß:

$$\vec{\omega}'_{1/2} = \vec{\omega}_{1/2} \pm \frac{m_{eff}}{2m_{1/2}} \mathbf{R} \vec{e} \times ((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t - (\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n) \quad (6-12)$$

In dieser Arbeit wird ein modifizierter Ansatz für die Rotationsänderung gewählt, bei dem in die Berechnung für die Rotationsänderung nicht der normale, sondern ausschließlich der tangentielle Restitutionskoeffizient eingeht (siehe Kapitel 9.2). Ferner gilt bei den Gleichungen (6-11) und (6-12) zwar Impulserhaltung jedoch keine Energieerhaltung, selbst wenn die beiden Restitutionskoeffizienten neutral gewählt werden. Ein Rechenbeispiel für einen einfachen Sonderfall findet sich im Anhang C.

Ein negativer Wert für ε_t bedeutet, dass sich die Rotationsrichtung umkehrt. Der Ball springt in die Richtung zurück, aus der er gekommen ist. Dieser Effekt kann nur bei hohen Rauigkeiten oder großen Haftungseffekten beobachtet werden, etwa bei einem Gummiball. Dieser Effekt wird als *ultra elastischer Ball* oder *Superball* bezeichnet und wurde von mehreren Autoren beschrieben (Garwin, 1969; Spradley, 1983; Stoink, 1983; Stronge, 1991).

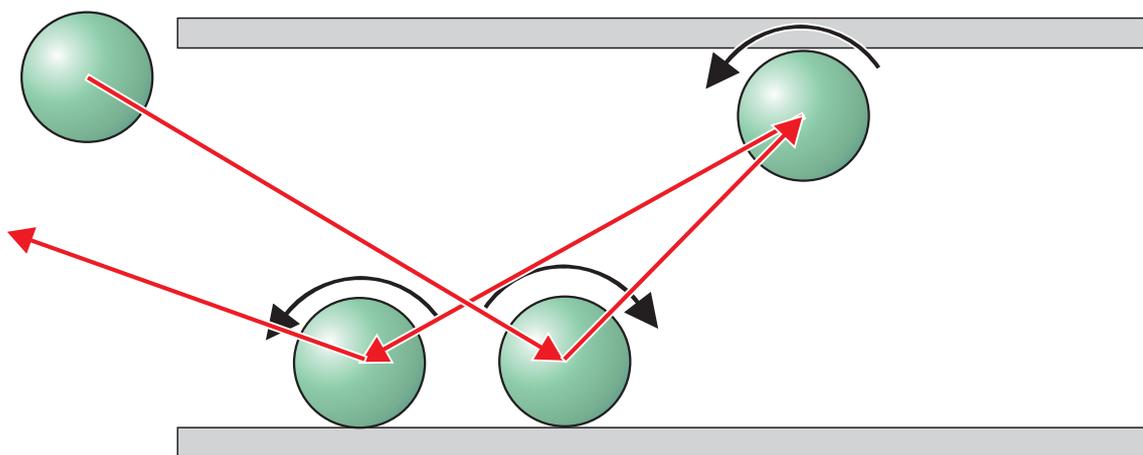


Abbildung 6-5 Gummiball Experiment: Wenn man einen Gummiball zwischen zwei parallele Platten wirft, dann kehrt er zurück.

Dieses Verhalten ist nicht sofort einleuchtend, doch einfach in einem Experiment nachzuvollziehen, indem man einen Gummiball zwischen zwei parallele Bretter, beispielsweise in ein leeres Bücherregal, wirft (Abbildung 6-5): Der Gummiball trifft erst rotationsfrei auf die untere Platte, woraufhin er aufgrund der Haftung am Untergrund in Flugrichtung rotiert. Danach trifft er auf die obere Platte und kehrt dort aufgrund seiner entge-

gen gesetzt rotierender Oberfläche sowohl seine Rotation, als auch seine Flugrichtung um. Zuletzt trifft er auf die untere Platte, und fliegt dem Werfenden wieder entgegen.

Wenn sich die Geschwindigkeit in Normalen-Richtung nur geringfügig ändert, dann bewirkt eine Reduzierung der tangentialen Geschwindigkeit bei einer Kugel-Wand Kollision einen größeren Ausfallswinkel α' nach der Kollision (Abbildung 6-6). Dieses Verhalten ist, z.B. bei den in der Hochenergie-Kugelmühle verwendeten Stahlkugeln zu beobachten. Das tangentielle Verhalten von Stahlkugeln wird ausschließlich durch gedämpfte Gleitbewegung bestimmt. Mit Stahlkugeln ist daher der „Gummiball-Effekt“ von Abbildung 6-5 nicht beobachtbar.

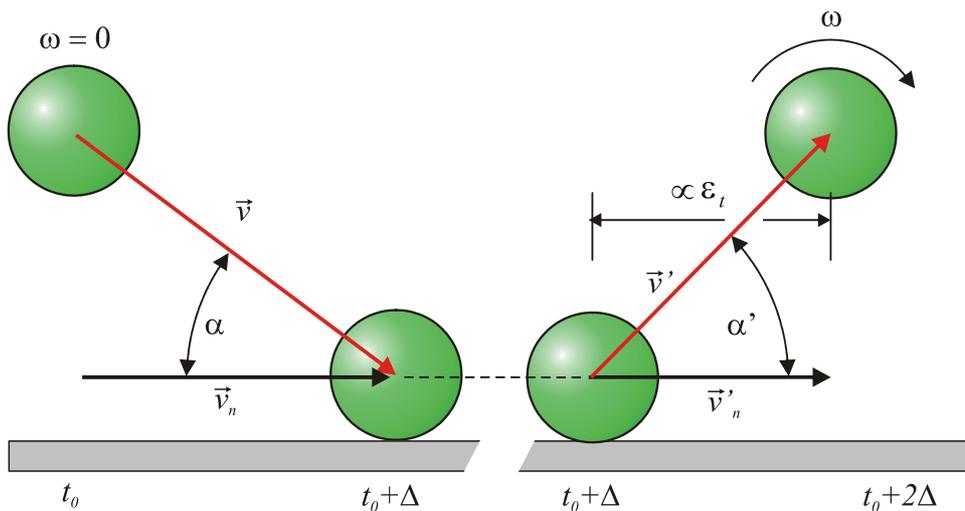


Abbildung 6-6 Der tangentialer Restitutionskoeffizient ϵ_t gibt das Verhältnis von Geschwindigkeit in tangentialer Richtung \vec{v}_t vor dem Stoß und der Geschwindigkeit in tangentialer Richtung \vec{v}'_t nach dem Stoß an. Durch eine geringere Geschwindigkeit in tangentialer Richtung nach dem Stoß ist der Ausfallswinkel α' größer als der Einfallswinkel α .

Die Kontaktfläche einer realen Kugel bei einer Kollision ist eine Kreisfläche, deren Radius von der Kontaktkraft und der Materialpaarung abhängt. Eine idealisierte Kugel hat nur einen ideal glatten Kontaktpunkt ohne Scherkräfte und kann folglich auch keine tangentialen Kräfte übertragen. Folglich muss zur Modellierung der Kontaktkräfte und der Tribologie von einer rauen Oberfläche ausgegangen werden (Czichos, 1978; Pöschel und Herrmann 1993). Sofern die Oberflächenrauigkeit um Größenordnungen kleiner, als die Kontaktfläche der kollidierenden Objekte ist, wird die Dämpfung in Normalen-Richtung nicht beeinflusst (Pöschel, 2000). Bei den Mahlkugeln in der Hochenergiekugelmühle ist dies der Fall.

BRILLIANTOV et al. (1996) und PÖSCHEL (2000) haben theoretische Berechnungen eines dynamischen tangentialen Restitutionskoeffizienten durchgeführt. KHARAZ et al. (1999) haben ebenfalls eine Theorie aufgestellt und aus Kollisionsexperimenten auf das dynamische Verhalten von ϵ_t geschlossen. KHARAZ et al. (1999) sind in ihrem Ansatz davon ausgegangen, dass ϵ_n eine Konstante ist und nur ϵ_t ein dynamisches Verhalten aufweist. Die Graphen zum Verlauf des tangentialen Restitutionskoeffizienten von

BRILLIANTOV et al. (1996) und PÖSCHEL (2000) stimmen weder qualitativ noch quantitativ mit den Daten von KHARAZ et al. (1999) überein. Problematisch an der Herleitung aus theoretischen Überlegungen (hier nicht wiedergegeben) ist, dass viele Konstanten durch Daten angepasst werden müssen. Diese Konstanten haben keinen direkten Zusammenhang mit Materialkonstanten, die aus Tabellen abgelesen werden können. Für eine detaillierte Herleitung sei an dieser Stelle auf den Artikel von BRILLIANTOV et al. (1996) hingewiesen.

Abbildung 6-7 zeigt ein Simulationsergebnis von BRILLIANTOV et al. (1996) für eine Kugel mit ultraelastischen Eigenschaften. Der tangential Restitutionskoeffizient ε_t ist in Abhängigkeit von der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit \bar{v}_n und der Tangentialkomponente der Oberflächengeschwindigkeit \bar{g}_t aufgetragen. Für den Fall, dass die Kugel eine kleine Geschwindigkeit in Normalen-Richtung $\bar{v}_n = 0$ hat, nähert sich ε_t dem Wert Eins, wodurch die Kugel über die Oberfläche gleitet. Dies begründet sich durch die geringe Normalkraft, die keine Drehmomentänderung der Kugel verursachen kann. Mit steigender Geschwindigkeit in Normalen-Richtung fällt ε_t gegen Null und kann auch unter Null sinken, wodurch die Drehrichtung der Kugel bei der Kollision umgedreht wird.

In BRILLIANTOV et al. (1996) sind weitere dieser Diagramme für andere Oberflächeneigenschaften veröffentlicht, die wesentlich von dem Diagramm aus Abbildung 6-7 abweichen.

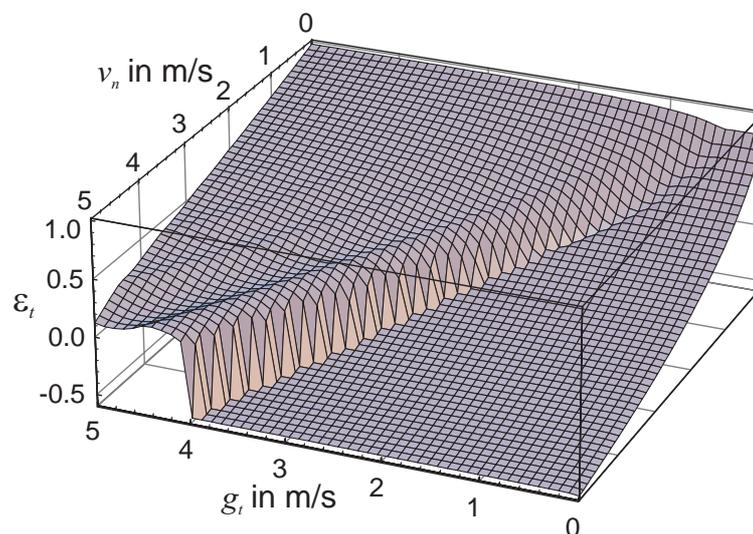


Abbildung 6-7 Der tangential Restitutionskoeffizient ε_t in Abhängigkeit von der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit \bar{v}_n und der tangentialen Geschwindigkeit der Kugeloberflächen \bar{g}_t . (Brilliantov et al., 1996)

7. Experimente

In diesem Kapitel werden zwei Experimente beschrieben, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Da das Bewegungsverhalten der Mahlkugeln in der Hochenergie-Kugelmühle mit einem ereignisdiskreten Algorithmus simuliert wird, müssen die in Kapitel 5 genannten Voraussetzungen bei dem zu simulierenden System vorliegen. Experimente zur Analyse der Trajektorien werden in Kapitel 7.1 vorgestellt. In Kapitel 7.2 werden die Experimente zur Messung des Restitutionskoeffizienten erläutert.

7.1 *Transparente Mahleinheit*

Um das Bewegungsverhalten der Mahlkugeln während des Betriebs zu analysieren, wurde eine transparente Mahleinheit (Abbildung 7-1) mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Marke OLYMPUS) gefilmt.



Abbildung 7-1: Foto der transparenten Mahleinheit bei 330 rpm. Durch die lange Belichtungszeit erscheinen die schnelleren Kugeln im oberen Bereich als Striche (Bildquelle: Zoz GmbH).

Weil die Kamera eine konstante Datenübertragungsrate (Pixel pro Sekunde) liefert, sind die Aufnahmen mit niedriger Bildfrequenz höher aufgelöst. Da bisher nur Aufnahmen einer handelsüblichen Digitalkamera von dieser Mahleinheit vorlagen, galt das Interesse dieser Untersuchung folgenden Punkten:

- Ist es möglich die Geschwindigkeitsverteilung der Kugeln anhand des Videomaterials zu messen?
- Sind bei produktionsüblichen Rotordrehzahlen oberhalb von 650 rpm noch Mehrfachkontakte vorhanden?
- Wie verhalten sich die Kugeln in der Nähe des Rotors?
- Wie bewegen sich die Kugeln in axialer Richtung?
- Hat die Gravitation bei produktionsüblichen Rotordrehzahlen noch spürbaren Einfluss auf das Bewegungsverhalten des Kugelpakets?
- Ist das Kugelpaket homogen verteilt?

7.1.1 Verhalten der Kugeln in Rotornähe

Um die Einflusszone des Rotors zu beobachten wurden bei 625 rpm Aufnahmen der oberen linken Hälfte der Mahleinheit mit 1 kHz Bildfrequenz gemacht. Bei dieser Drehzahl sind alle Kugeln aufgelockert in Bewegung. Ein Großteil des Kugelpakets befindet sich jedoch aufgrund der Gravitation noch in der unteren Hälfte. Die obere Hälfte eignet sich dafür einzelne Kugeln zu beobachten. Die eingeschränkte Beleuchtung lässt nur das vorderste Rotorblatt gut erkennen.

Mit Hilfe der Videoaufnahmen wurde festgestellt, dass der Rotor die Kugeln stark beschleunigt. Die Geschwindigkeit der durch den Rotor getroffenen Kugeln ist signifikant höher, als der Rest der Kugeln. Der Rand der Trommel ist durch den Edelstahlring nicht einsehbar, so dass keine Aussagen über das Auftreffverhalten an der Zylinderwand gemacht werden kann. Allgemein ist durch die Rotorkollision keine Ablenkung der Kugeln in axialer Richtung zu beobachten.

Weil in einer nebeneinander gedruckten Bildsequenz, wie in Abbildung 7-3, die Kugelpositionen, und somit deren Geschwindigkeitsvektoren, schlecht verfolgt werden können, wurde in dieser Arbeit ein anderes Verfahren gewählt, um die Kugelgeschwindigkeit und Flugrichtung in einem einzigen Bild festzuhalten:

- Die Aufnahmen der Hochgeschwindigkeitskamera liefern ein 8-Bit Graustufenbild.
- Drei aufeinander folgende Bilder werden als die Rot-Grün-Blau (in dieser Reihenfolge) Kanäle eines 24-Bit Farbbildes zusammengesetzt.
- Dieselben Grauwerte der drei Einzelbilder ergeben bei einem Pixel im Farbbild wieder den ursprünglichen Grauton, weil gleiche Helligkeitswerte der Grundfarben einen Grauwert darstellen.
- Die Bildunterschiede treten in dem zusammengesetzten Farbbild als die Farbfolge Rot-Grün-Blau auf.

In Abbildung 7-2 ist ein nach diesem Verfahren hergestelltes Farbbild mit 240 x 210 Pixeln zu sehen. Der Rotor dreht entgegen dem Urzeigersinn und steht gerade auf 1 Uhr Position. Die Drehzahl von 625 rpm und die Bildfrequenz von 1 kHz resultieren in einem Verdrehwinkel von $3,75^\circ$ zwischen zwei aufeinander folgenden Bildern. In Abbildung 7-2 ist dies an der rechten Kante des Rotors zu erkennen, der rechts außen rot, weiter links grün und dann grau ist. Die Kugeln auf 12 Uhr Position oben im Bild befinden sich direkt vor dem Rotor. An den deutlichen großen Abstufungen der Farben ist deren Flugrichtung und Geschwindigkeit zu erkennen, welche deutlich über der Umfangsgeschwindigkeit des Rotors liegt. Auf 9-10 Uhr Position sind ebenfalls schnelle Kugeln zu erkennen. Diese werden von dem weiter hinter liegenden, um 30° versetzten, Rotorblatt beschleunigt.

Langsame Kugeln lassen nur einen geringen Farbunterschied erkennen. Mit einer 3D-Brille, welche auf einem Auge mit einer roten Folie und dem anderen Auge mit einer grünen Folie bestückt ist, kann man geringe Geschwindigkeitsunterschiede gut erkennen. Die Kugeln treten aufgrund einer optischen Täuschung plastisch hervor, weil das Gehirn auf den beiden Augen leichte unterschiedliche Bilder erkennt und diese als Entfernungsinformation interpretiert. Dieser Effekt ist im unteren Bildbereich von Abbildung 7-2 (links) besonders gut zu erkennen.

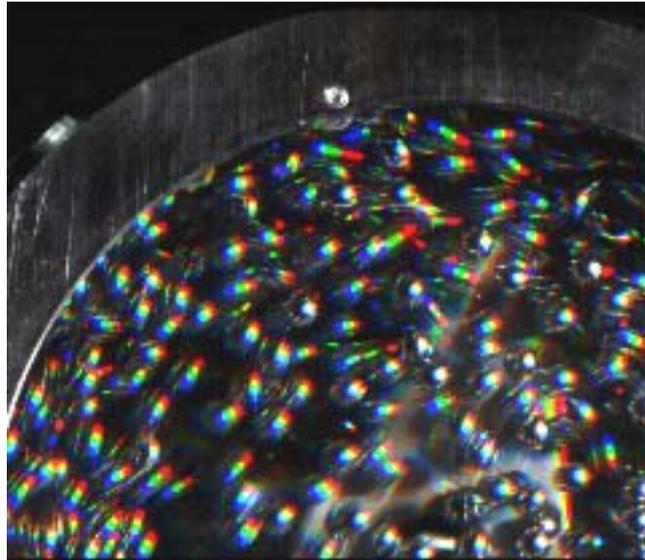


Abbildung 7-2 Fotomontage (240x210 Pixel) dreier aufeinander folgender Bilder bei 625 rpm. Die erste Position ist rot eingefärbt, die nachfolgenden Positionen sind grün und blau eingefärbt. Im oberen Bildbereich erkennt man aneinander gereihte rote, grüne und blaue Kugeln, was durch die hohe Geschwindigkeit im Bereich des Rotorblatts begründet ist. Die übrigen Kugeln zeigen weniger Versatz.

7.1.2 Verhalten der Kugeln bei typischen Betriebsparametern

Die Computersimulation soll das Bewegungsverhalten der Mahlkugeln bei typischen Betriebsparametern nachvollziehen bzw. vorhersagen. Zwei wichtige Bedingungen für den Einsatz einer ereignisdiskreten Simulation sind (siehe Kapitel 5):

- möglichst keine Mehrfachkontakte
- möglichst große freie Weglängen.

Die transparente Mahleinheit wurde bei 1500 rpm mit 2 kHz gefilmt. Die Kugeln sind deutlich aufgelockert und bewegen sich kreisförmig um die Rotationsachse. Im Zentrum der Mahleinheit befinden sich nur vereinzelt Kugeln, die sich, aufgrund ihrer hohen Geschwindigkeit, scheinbar geradlinig durch den Raum bewegen. Die Gravitation hat bei dieser Drehzahl einen vernachlässigbaren Einfluss. Kugeln befinden sich hauptsächlich am Rand der Mahleinheit. Dass nur wenige Kugeln zu sehen sind, ist bedingt durch die Sichtfeldeinschränkung des Edelstahlrings am Rand. Der Rest der Kugeln befindet sich am Rand des Mahlraums hinter dem Edelstahlring.

Abbildung 7-3 zeigt eine von links nach rechts und von oben nach unten zeitlich sortierte Folge von aufeinander folgenden Bildern einer Aufnahmesequenz der Hochgeschwindigkeitskamera. Der Rotor bewegt sich mit wesentlich größerer Geschwindigkeit als die mittlere Geschwindigkeit des kreisförmig rotierenden Kugelpakets. Im Gegensatz zur Drehung des Rotors ist eine Veränderung der Position der Kugeln nur schwer zu erkennen.

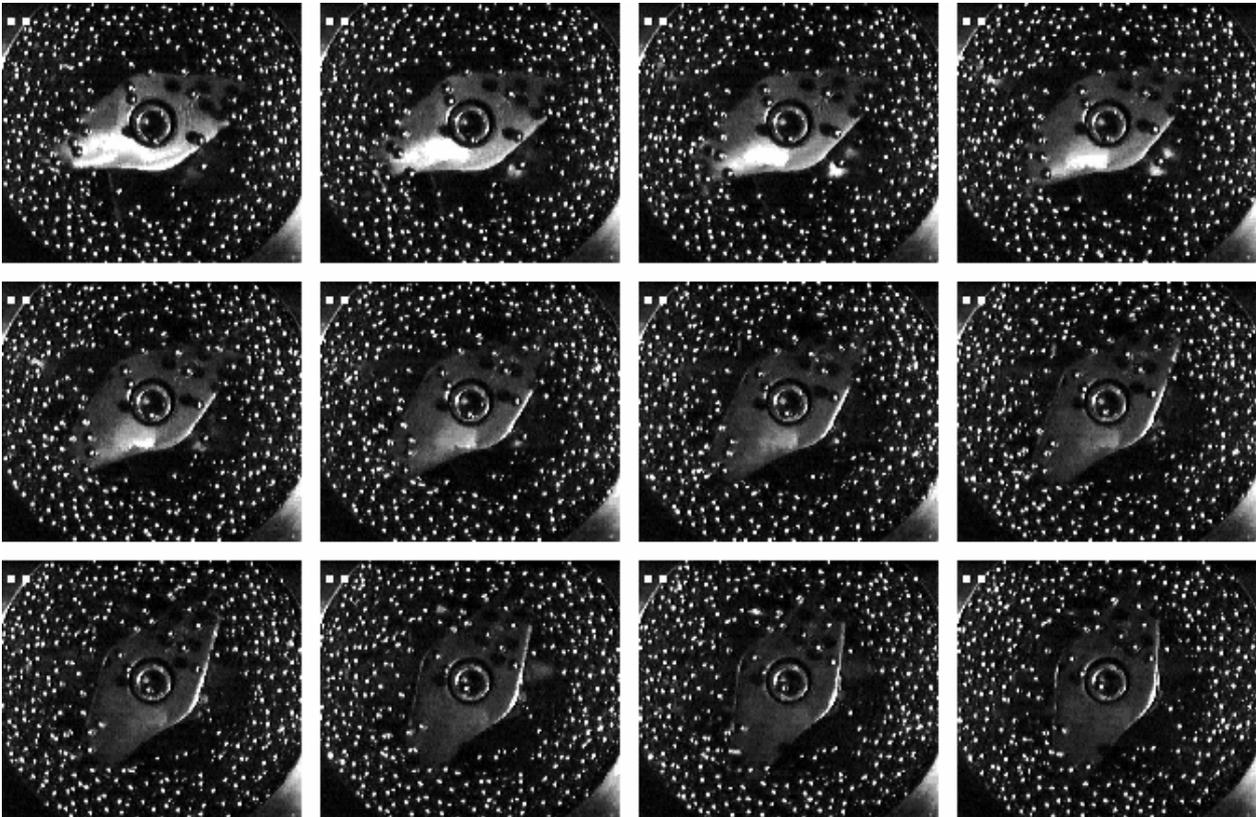


Abbildung 7-3 Bildsequenz bei 1500 rpm (links → rechts; oben → unten). Der Rotor bewegt sich entgegen dem Uhrzeigersinn. Die Umfangsgeschwindigkeit des Rotors ist deutlich höher, als die durchschnittliche Geschwindigkeit der Kugeln.

In den Videoaufnahmen sind im inneren Bereich der Trommel keine Kugeln in der Nähe der Rotorachse erkennbar, so dass die Vermutung nahe liegt, dass es sich bei den Kugeln im Frontbereich der Bildsequenz von Abbildung 7-3 um Kugeln handelt, die sich nur in der Nähe der Frontscheibe bewegen.

Die sichtbaren Kugeln sind alle vereinzelt und bewegen sich frei durch den Raum. Im Video sind deutlich Kugel-Kugel Kollisionen erkennbar. Dieses Verhalten lässt sich auch bei anderen typischen Drehzahlen beobachten.

7.1.3 Bewegungsverhalten der Kugeln

Die transparente Mahleinheit wurde nicht nur von der Frontansicht, sondern auch von der Seitenansicht gefilmt. Da in der Frontansicht der Trommelrand durch den Edelstahlring nicht einsehbar ist, und ein Großteil der Kugeln sich in diesem nicht einseharen

Bereich befindet, ist eine Analyse der Kugeln am Tommelrand von besonderem Interesse.

Die visuelle Beobachtung der Aufnahmen zeigt, dass sich die Kugeln in annähernd kreisförmigen Bahnen bewegen (Abbildung 7-4 links). Die Seitenansicht zeigt, dass die Kugeln eine geringe axiale Geschwindigkeit haben. Sie scheinen die axiale Trennung durch einen Rotor selten zu überschreiten und bewegen sich axial nur zwischen den Rotorblättern. Dies ist jedoch nur im Film gut erkennbar.

Die dichte Packung der Kugeln in der Seitenansicht lässt den Schluss zu, dass sich der Großteil der Kugeln im Außenbereich der Trommel außerhalb des direkten Einflussbereichs des Rotors befindet. Wie in Kapitel 3.1.2 beschrieben ist konstruktionsbedingt eine Lücke zwischen Rotor und Trommelwand von drei Kugeldurchmessern (ca. 15 mm). Die Kugeln am Trommelrand werden ausschließlich durch Kollisionen mit den vom Rotor getroffenen Kugeln beschleunigt und nicht vom Rotor selbst.

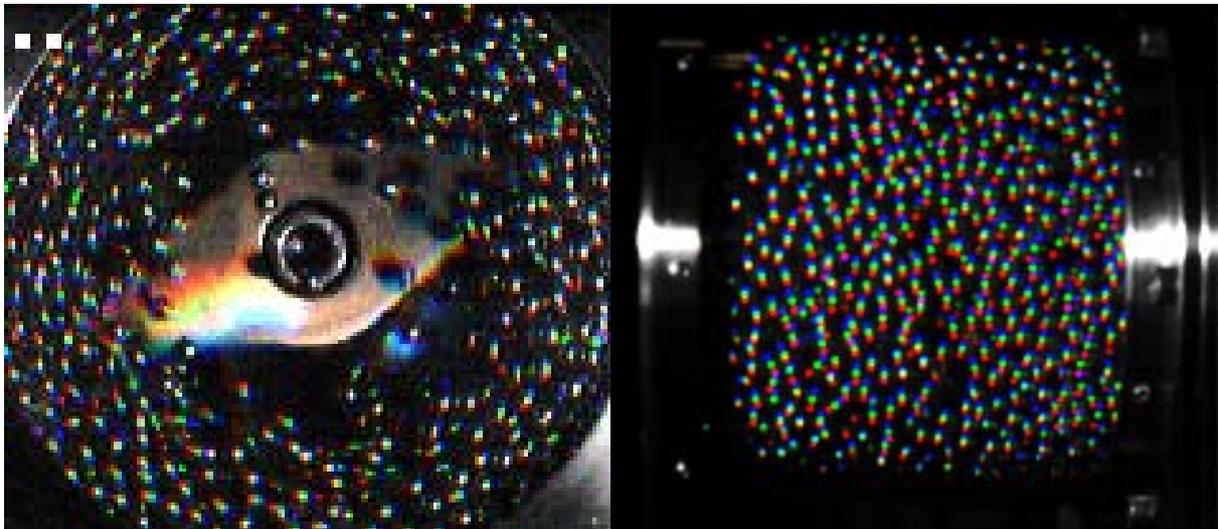


Abbildung 7-4 RGB-Bildsequenz bei 1500 rpm. Links: Die Kugeln bewegen sich entgegen dem Uhrzeigersinn und sind zumeist außen an der Trommel. Rechts: Die Kugeln bewegen sich von unten nach oben. Die RGB-Farbkodierung der Kugeln zeigt deren geringe axiale Geschwindigkeit.

7.2 Schussapparatur

Die Funktion des geschwindigkeitsabhängigen Restitutionskoeffizienten basierend auf bekannten Materialparametern, wie Elastizitätsmodul oder Querkontraktionszahl, ist nicht bekannt (vgl. Kapitel 6.1). Stattdessen müssen Kollisions-Experimente mit den Materialpaarungen durchgeführt werden, weil keine Literaturwerte vorhanden sind. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Apparatur entwickelt, mit der es möglich ist diese Kollisionsexperimente durchzuführen. Bei der Konstruktion der Maschine wurden folgende Vorgaben beachtet:

- Die Kollisionsgeschwindigkeit soll wiederholbar in einem Bereich von 0-50 m/s einstellbar sein.

- Die Kugel soll rotationsfrei kollidieren.
- Die Kollisionszone muss für den optischen Sensor gut einsehbar sein.
- Die Beleuchtung der Kollisionszone muss möglichst homogen erfolgen.
- Die Experimente müssen einfach und schnell zu handhaben sein.
- Für den Aufbau sollen möglichst wenige Sonderanfertigungen nötig sein. Der Großteil der Maschine soll aus Normbauteilen gefertigt werden.
- Aufgrund der hohen Geschwindigkeit der Kugeln müssen besondere Sicherheitsvorkehrungen getroffen werden. Die Kollisionszone muss gekapselt sein.

7.2.1 Versuchsaufbau

Der Versuchsaufbau und die Funktion der Apparatur werden im Folgenden kurz beschrieben. Im Vorfeld der Konstruktion wurden umfangreiche Simulationen zur Bauteildimensionierung und Komponentenauswahl durchgeführt, die in der Studienarbeit von ADAM (2004) ausführlich dokumentiert sind. Hier sind die wichtigsten Ergebnisse der Studienarbeit zusammengefasst.

Als Sensor dient eine Hochgeschwindigkeitskamera der Marke MOTION-PRO. Gefilmt wird im Gegenlichtbetrieb, damit bei der verwendeten hohen Bildrate und den entsprechend kurzen Belichtungszeiten von 10^{-5} Sekunden eine ausreichende Absorption von Photonen durch die CCD-Sensor-Elemente stattfinden kann. Die Kugel erscheint folglich nur als Silhouette und ist deutlich vom Hintergrund unterscheidbar.

Abbildung 7-5 zeigt schematisch den Versuchsaufbau: Ein Hartmetallstift wird in einem Edelstahlrohr mit Druckluft beschleunigt und trifft auf den Abschussbolzen. In dem Moment wird, durch eine Lichtschranke ausgelöst, der Hubmagnet, auf dem Kugel liegt, nach unten gezogen (Abbildung 7-5 unten). Die Kugel befindet sich rotationsfrei im freien Fall. Der Abschussbolzen trifft gegen die Kugel und schießt diese gegen die Prallplatte.

Für niedrige Prallgeschwindigkeiten wurde die Kugel aus einer definierten Höhe auf die Prallplatte fallen gelassen. Insgesamt wurden über 100 Versuche durchgeführt.

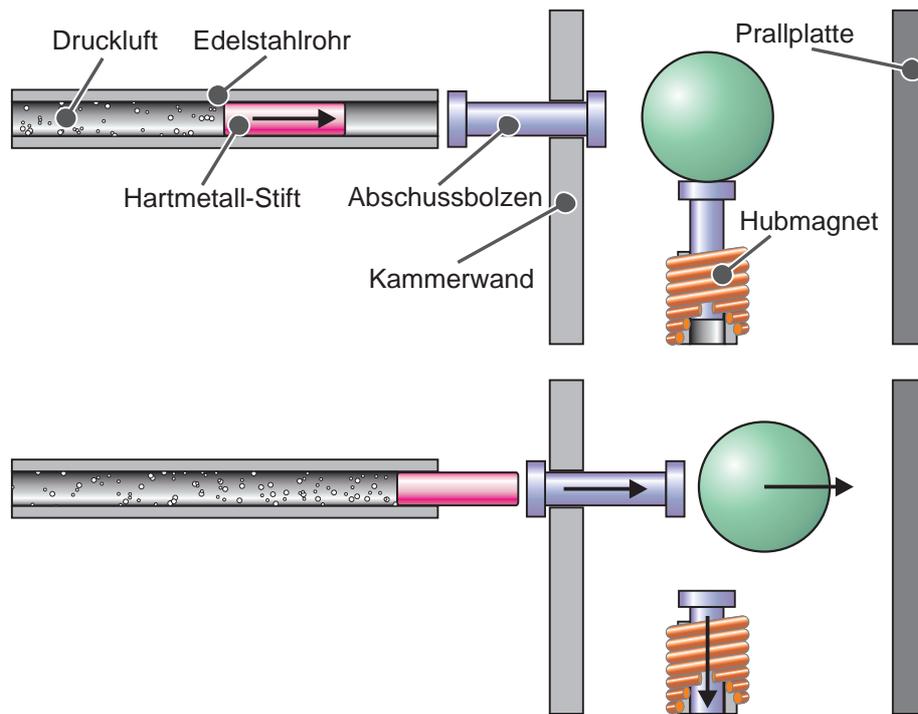


Abbildung 7-5 Versuchsaufbau. Oben: Ein Hartmetallstift wird in einem Edelstahlrohr mit Druckluft beschleunigt und trifft auf den Abschussbolzen. Unten: Der Hubmagnet wird nach unten gezogen. Der Abschussbolzen schießt die Kugel gegen die Prallplatte.

7.2.2 Bildverarbeitung

Die Auswertung der Kugelversuche erfolgte mit einer selbst entwickelten Bildverarbeitungssoftware. Die Einzelbilder der Filme wurden automatisch aufbereitet und die Position der Kugel im Bild vermessen. Die digitale Aufbereitung des Bildes ist aus folgenden Gründen erforderlich:

- Das Bild ist nicht gleichmäßig ausgeleuchtet (Abbildung 7-6 links).
- Die Helligkeit oszilliert mit 100 Hz.
- Sensorfehler verursachen vertikale Streifen
- Die Bilder zeigen CCD-typisches Pixelrauschen.
- Die Kugel im Bild hat aufgrund von Teilschatten eine unscharfe Kontur.

Um den Hintergrund aus dem Bild zu entfernen muss erst ein Nullbild aus dem vorherigen Bild erzeugt werden. Das Nullbild enthält nur den Hintergrund ohne Kugel (Abbildung 7-6 rechts). Es wird für jedes Bild aus dem vorherigen Bild erzeugt, weil die 100 Hz Oszillation der Helligkeit zwischen zwei Bildern, die mit 5 kHz aufgenommen wurden, relativ gering ist. Im Bild ist die Kontur der Kugel schon aus dem vorherigen Schritt, welcher weiter unten im Text beschrieben ist, bekannt. Die Kugel wird nach einem Dilatationsschritt der Kugelkontur (gleichmäßiges Aufwachsen in alle Richtungen) durch bilineare Grauwertinterpolation in x-y-Richtung der bekannten Randpixel entfernt.

Das Ergebnis dieser Berechnung ist in Abbildung 7-6 gezeigt. Links ist das Originalbild, rechts das gleiche Bild nach Entfernung der erkannten Kugel.

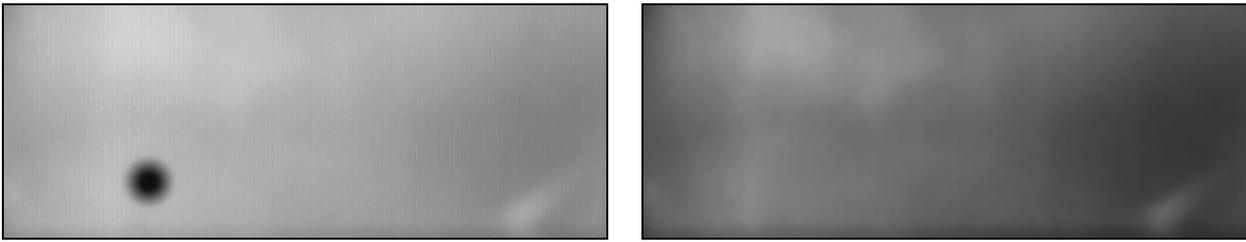


Abbildung 7-6 Links: Originalbild der Hochgeschwindigkeitskamera. Rechts: Aufbereitetes Nullbild nach Entfernung der Kugel

Die vertikalen Streifen und das Pixelrauschen werden durch einen digitalen Tiefpass-Filter (Gauß-Filter) entfernt. Anschließend werden die Grauwerte zur Kontrastverbesserung auf den vollständigen Wertebereich 0-255 gespreizt. Mit Hilfe des Nullbildes wird die ungleichmäßige Ausleuchtung (und konstante Bildfehler) des Hintergrundes korrigiert, so dass nur noch die Kugel im Bild übrig bleibt. Abbildung 7-7 zeigt links das Originalbild und rechts das gleiche Bild nach der digitalen Bearbeitung.

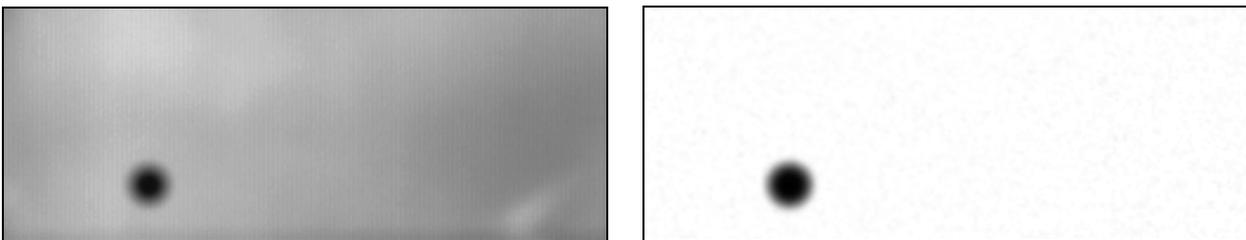


Abbildung 7-7 Links: Originalbild der Hochgeschwindigkeitskamera. Rechts: Nach Entfernen des Hintergrundes ist die Kontur der Kugel deutlich.

In dem so aufbereiteten Bild wird anschließend die Kugel im Bild gesucht, indem der Algorithmus zeilenweise nach einem Gradienten im Grauwert sucht (Freeman, 1961). Ab diesem Punkt wird das Objekt entlang des Gradienten abgetastet, auch *Chain-Codes* genannt (Freeman, 1961). Eine Kugel wird durch das Richtungshistogramm erkannt. Dieses Richtungshistogramm gibt an, wie oft und in welche Richtung der Algorithmus um das gefundene Objekt „lenken“ musste. Bei Kugeln muss immer in eine Richtung „gelenkt“ werden. Ferner wird eine Kugel eindeutig aus dem minimalen Verhältnis vom Quadrat des Umfangs zu seiner Fläche erkannt:

$$\frac{U^2}{A} = \frac{(2 \cdot \pi \cdot r)^2}{\pi \cdot r^2} = 4 \cdot \pi \quad (7-1)$$

Aus der gefundenen Kontur werden die Koordinaten des Mittelpunktes und der Radius der Kugel in Pixeln errechnet. Da der wirkliche Radius der Kugel und die Bildfrequenz bekannt sind, kann aus den Mittelpunktsinformationen die Geschwindigkeit der Kugel von einem Bild zum anderen errechnet werden. Ferner ist durch den gemessenen Radius eine Tiefeninformation verfügbar.

7.2.3 Auswertung

Die von der Bildverarbeitung erkannten Koordinaten wurden in eine Textdatei geschrieben, mit MATLAB ausgewertet und die Parameter der in Kapitel 6.1 beschriebenen Formeln für den geschwindigkeitsabhängigen Restitutionskoeffizienten, an die Messdaten angepasst. Die Kollisionsgeschwindigkeit zum Aufprallzeitpunkt wurde mit einer Parabelregression interpoliert.

Abbildung 7-8 zeigt die Messdaten als blaue Kreuze. Die drei verschiedenen Versuchsreihen sind deutlich an den Datengruppen erkennbar. In der ersten Gruppe zwischen 0-5 m/s wurden mehr Messwerte aufgenommen, weil dieser Geschwindigkeitsbereich besonders häufig bei Kollisionen vorkommt. Die Daten wurde aus den Fallexperimenten bestimmt. Die Geschwindigkeitsintervalle zwischen 15-25 m/s und 30-50 m/s stammen aus Experimenten mit der Kugel-Schuss-Apparatur.

Neben den in Kapitel 6.1 angegebenen, aus der Literatur bekannten Formeln wurden auch zwei Potenzfunktionen und ein exponentieller Ansatz zum Anpassen der Daten gewählt (Adam, 2004). In Tabelle 7-1 sind die Ergebnisse zu den Anpassungen mit deren Fehlerquadratsummen (FQS) und Standardabweichung σ aufgelistet. Für die Simulation wurde die Gleichung nach SPAHN et al. (1997) ausgewählt.

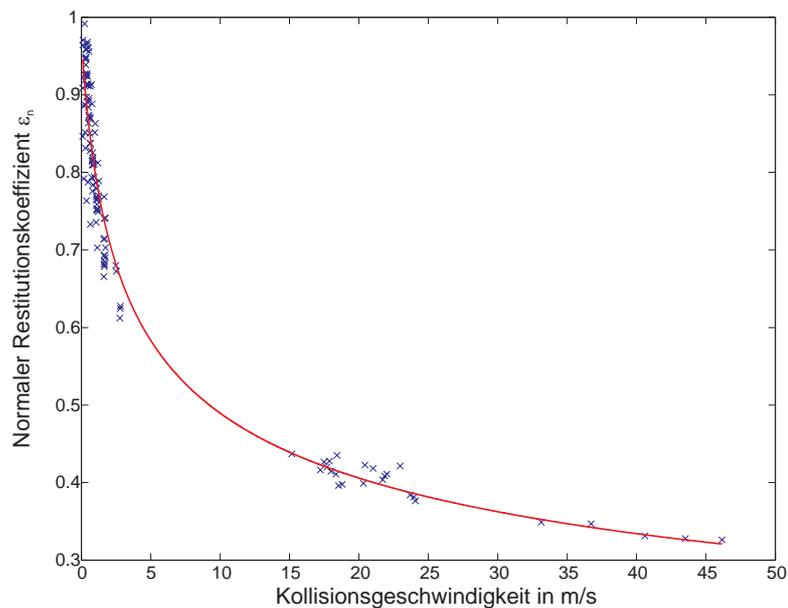


Abbildung 7-8 An die Messdaten angepasste Funktion. Die rote Linie ist die Anpassung an die phänomenologische Gleichung von SPAHN et al. (1997). Die Messwerte sind mit blauen kreuzen markiert.

Dieser Ansatz zeigt zwar die gleiche Standardabweichung und eine geringfügig höhere Fehlerquadratsumme als der exponentielle Ansatz, jedoch ist die Anzahl der Freiheitsgrade geringer. Wie gut dieser Ansatz zu den gemessenen Daten passt, zeigt Abbildung 7-8.

Ansatz	Freiheitsgrade	FQS	σ
SALO (1987)	1	1,689	0,084
Potenziell 2	2	0,568	0,068
Potentiell 4	4	0,399	0,057
SPAHN et al. (1997)	2	0,228	0,043
Exponentiell 3	3	0,227	0,043

Tabelle 7-1 Übersicht der Anpassung der verschiedenen phänomenologischen Ansätze, welche in Kapitel 6.1 vorgestellt wurden. Als beste Beschreibung der Daten hat sich der Ansatz nach SPAHN et al. (1997) herausgestellt, weil dieser Ansatz eine kleine Fehlerquadratsumme (FQS) bei geringer Anzahl an Freiheitsgraden aufweist (Adam, 2004).

Bei dem von SPAHN et al. (1997) publizierten Ansatz, müssen die Konstanten A , B und C durch das Datenmaterial angepasst werden:

$$\varepsilon_n = \frac{A}{(\|\vec{v}_n\| + B)^C} \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} A = 0,985 \\ B = 0,9494 \\ C = 0,291 \end{array} \quad (7-2)$$

Da für die Simulation mit geschwindigkeitsabhängigen Restitutionskoeffizienten ausschließlich Gleichung (7-2) verwendet wurde, sei für Details zu den anderen Ansätzen auf die Arbeit von ADAM (2004) verwiesen.

8. Implementierung der Kollisionserkennung

In diesem Kapitel werden die Implementierungsdetails für die Kollisionserkennung erläutert. Neben einem verbesserten Verfahren zur Kugel-Kugel-Kollisionserkennung werden auch die Verfahren zur Erkennung der Kugel-Systemgrenze-Ereignisse und Kugel-Rotor-Ereignisse beschrieben.

Die ersten Implementierungen, die von REICHARDT et al. (2002) publiziert wurden, erfolgten in MATLAB. Diese Programmiersprache hat den Vorzug, dass die in diesem Kapitel häufig vorkommenden Vektoroperationen bereits implementiert sind. Der Nachteil ist jedoch, dass MATLAB eine interpretierte Programmiersprache ist und komplexe Datenstrukturen nicht möglich sind. Trotz der geringen Ausführungsgeschwindigkeit hat sich MATLAB in der Entwicklungsphase als geeignetes Werkzeug für erste Tests erwiesen.

Für die späteren Implementierungen, in REICHARDT und WIECHERT (2004, 2005) publiziert, wurde C++ als Programmiersprache gewählt.

8.1 Generelle Vorgehensweise

In ereignisdiskreten Algorithmen wird der Kollisionszeitpunkt mit Hilfe einer zeitabhängigen Abstandsfunktion errechnet (siehe Kapitel 5.5). In dieser Arbeit werden zudem Kollisionsklassen eingeführt (Reichardt und Wiechert, 2005). In jeder Kollisionsklasse werden Objektpaare zusammengefasst, für die jeweils eine eigene zeitabhängige Abstandsfunktion gebildet werden muss:

- Kugel → Kugel
- Kugel → Zylinderwand
- Kugel → Trommelboden
- Kugel → Rotorblatt

Jede dieser Kollisionsklassen kann verschieden viele Objektpaare an unterschiedlichen Koordinaten mit unterschiedlichen Bewegungsvorschriften enthalten. Für jede einzelne Kollisionsklasse muss daher eine Funktion implementiert werden, welche als Übergabeparameter die eindeutigen Kennungen der Kollisionspartner enthält und als Rückgabeparameter den errechneten Kollisionszeitpunkt zurückgibt. Sollten die beiden Objekte nicht kollidieren, so wird *Unendlich* zurückgegeben. Als Unendlich wird die vom System größte darstellbare Fließkommazahl definiert.

Die Kollisionserkennung wird für jede Kollisionsklasse einzeln durchgeführt. Dabei wird die Kollisionserkennung immer paarweise für alle Objekte der Kollisionsklasse errechnet. Während der paarweisen Kollisionserkennung werden die restlichen Objekte ignoriert. Für jede Kollisionsklasse gilt als Zeitpunkt für das nächste Kollisionsereignis die kleinste positive reelle Nullstelle der zeitabhängigen Abstandsfunktion. Abbildung 8-1

verdeutlicht anhand einer fiktiven Abstandsfunktion, warum die minimale positive Nullstelle berechnet werden muss.

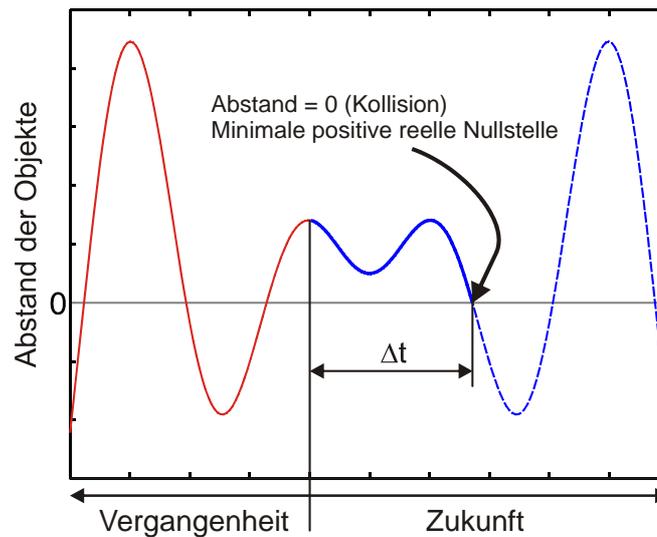


Abbildung 8-1 Zeitlicher Verlauf einer fiktiven Abstandsfunktion zweier Objekte. Die Objekte haben zum Zeitpunkt $t = 0$ einen positiven Abstand. Im Laufe der Zeit ändert sich dieser Abstand und wird nach der Zeit Δt Null, wenn sich die Oberflächen der Objekte berühren. Diese erste Nullstelle ist die zu berechnende Kollisionszeit. Negativer Anstand bedeutet Durchdringen der Objekte.

Von den Kollisionszeiten pro Kollisionsklasse wird das Minimum gebildet, weil dieses Ereignis pro Kollisionsklasse als erstes eintritt.

Beispiel: Das System soll $n_R = 5$ Rotorblätter enthalten. Folglich müssen pro Kugel fünf Kugel-Rotor Kollisionszeitpunkte berechnet werden. Die Kollisionserkennung für die Klasse liefert beispielsweise die Kollisionszeitpunkte $t_{Rotor} = \{\infty; 1,84; \infty; 2,98; \infty; \infty\}$. Das Minimum dieser Kollisionszeiten ist die Kollisionszeit mit Rotor Nr. 2 zum Zeitpunkt $t_{Rotor}^{\min} = 1,84$ Sekunden.

Für das zu simulierende System, bestehend aus Kugeln (t_{Kugel}), Rotorblättern (t_{Rotor}), einem Mahlbehälter mit einem Zylinder ($t_{Zylinder}$) und zwei Trommelböden (t_{Wand}), tritt deren kleinste Ereigniszeit als nächstes Kollisionsereignis $t_{Kollision}$ ein:

$$t_{Kollision} = \min(t_{Kugel}^{\min}, t_{Rotor}^{\min}, t_{Zylinder}^{\min}, t_{Wand}^{\min}) \quad (8-1)$$

Dieser allgemeinen Form können auch weitere Kollisionsklassen hinzugefügt werden. Durch Entfernen der Rotor-Kollisionsklasse sind unter anderem auch die Molekulardynamik-Simulationen von idealen Gasen möglich, ohne den Algorithmus ändern zu müssen.

8.2 Kugel-Kugel-Kollisionserkennung

Die Funktion für die Kugel-Kugel-Kollisionserkennung wird am häufigsten aufgerufen. Obwohl diese Kollisionserkennung schon von zahlreichen Autoren bearbeitet und verbessert wurde (siehe Kapitel 5.5.1), birgt sie trotzdem noch Potential zur Effizienzsteigerung. Die zeitabhängige Kugel-Kugel Abstandsfunktion ist ein quadratisches Polynom (Herleitung in Kapitel 5.5), dessen beide Nullstellen t_1 und t_2 bestimmt werden müssen.

$$t_{1/2} = \frac{-\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \pm \sqrt{\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}\right)^2 - \vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{r}_{rel} - R^2\right)}\right)}{\vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}} \quad (8-2)$$

Obwohl Gleichung (8-2) mathematisch gesehen völlig korrekt ist, kann es bei der Implementierung zu numerischen Ungenauigkeiten kommen. Bei geringen Relativpositionen und geringen Relativgeschwindigkeiten kommt es zu Problemen bei der systeminternen Fließkommadarstellung, so dass die Kollisionszeit leicht fehlerbehaftet berechnet wird. Die Folge sind Positionierungsfehler, die in den in Kapitel 5.6.2 beschriebenen Kugel Überlappungen resultieren. Durch Anwendung der Binomischen Gleichung kann Gleichung (8-2) umgestellt werden, um eine bessere numerische Stabilität zu erreichen (IEEE 754, 1985; Goldberg, 1991; Bronstein und Semendjajew 1989):

$$t_{1/2} = \frac{\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{r}_{rel} - R^2}{-\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}\right) \pm \sqrt{\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}\right)^2 + \vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \left(R^2 - \vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{r}_{rel}\right)}} \quad (8-3)$$

Bei einem quadratischen Polynom können vier verschiedenen Nullstellenkombinationen auftreten, die im Folgenden beschrieben werden und deren physikalische Bedeutung analysiert wird.

8.2.1 Nullstellenpaar: Positiv-Positiv

Wenn der Betrag des Relativpositionsvektors \vec{r}_{rel} größer als die Summe der Kugelradien ist und zugleich der Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} in Richtung der Kugel zeigt, existieren zwei positive reelle Nullstellen (Abbildung 8-2 links). Die kleinere der beiden Nullstellen ist der gesuchte Kollisionszeitpunkt. Die Größere der beiden Nullstellen ist physikalisch irrelevant, denn zu diesem Zeitpunkt endet die Durchdringung der Kugeln.

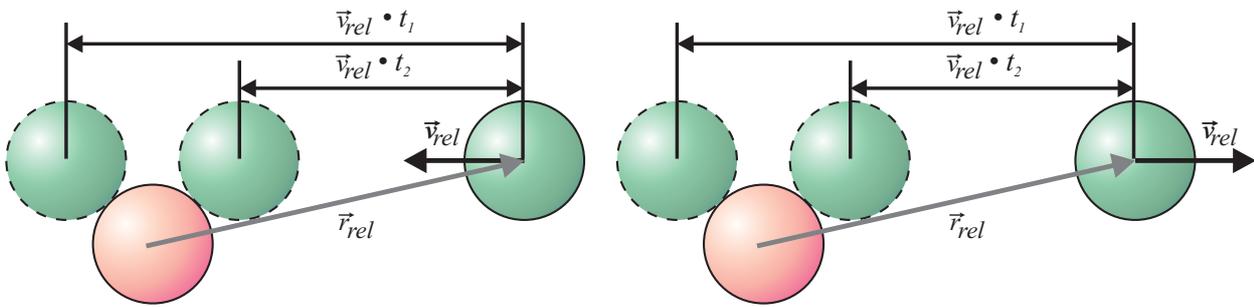


Abbildung 8-2 Links: Zwei positive reelle Nullstellen. Der Relativgeschwindigkeitsvektor zeigt von der grünen Kugel in Richtung der roten Kugel. Zum Zeitpunkt t_2 kollidieren die beiden Kugeln. Rechts: Zwei negative reelle Nullstellen. Der Relativgeschwindigkeitsvektor zeigt von der grünen Kugel weg. Die beiden Kugeln sind in der Vergangenheit kollidiert. Diese beiden Kugeln können ohne Richtungsänderung in der Zukunft nicht kollidieren.

Mathematisch gesehen können auch zwei doppelte reelle Nullstellen existieren. Dies entspräche physikalisch gesehen einem „Streifschuss“, der im strengen Sinne nicht vorkommen kann.

8.2.2 Nullstellenpaar: Negativ-Negativ

Zwei negative reelle Nullstellen können auftreten, wenn der Betrag des Relativpositionsvektors \vec{r}_{rel} größer als die Summe der Kugelradien ist und zugleich der Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} von der Kugel weg zeigt (Abbildung 8-2 rechts). Physikalisch bedeutet dies, dass die Kugeln in der Vergangenheit kollidiert sind. Ferner bedeutet dies, dass die Kugeln ohne zusätzliches Kollisionsereignis in Zukunft nicht noch einmal kollidieren können!

Diese wichtige Erkenntnis bedeutet für die Implementierung, dass Kugeln, die zuletzt Kollisionspartner waren, nicht erneut auf Kollision geprüft werden (*Negativ-Negativ-Regel*). Dieses Verfahren hat zwei Vorteile:

- Eine Kollisionsprüfung wird eingespart.
- Ein möglicher Positionierungsfehler bei der Kugel-Kugel Kollision hat nicht den in Kapitel 5.5.1 beschriebenen Effekt der *oszillierenden Schlüsselringe* zur Folge. Die ineinander positionierten Kugeln trennen sich wieder, weil die Oberflächenberührung beim Auseinanderbewegen nicht erkannt und somit nicht beachtet wird („Selbstheilung“).

8.2.3 Nullstellenpaar: Konjugiert Komplex

Zwei konjugiert komplexe Nullstellen treten auf, wenn der Betrag des Relativpositionsvektors \vec{r}_{rel} größer als die Summe der Kugelradien ist und zugleich der Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} von der Kugel weg zeigt (Abbildung 8-3 links). Die beiden Kugeln treffen sich nicht. Dies ist während der Abarbeitung der Simulationsschleife der am häufigsten auftretende Fall, weil sich Kugeln meistens nicht treffen. In der Implementie-

rung können konjugiert komplexe Nullstellen während der Abarbeitung leicht festgestellt werden, wenn die Diskriminante (Term unter der Wurzel) von Gleichung (8-3) negativ ist. In dem Fall wird die weitere Abarbeitung sofort abgebrochen und *Unendlich* als Kollisionszeitpunkt zurückgegeben.

8.2.4 Nullstellenpaar: Negativ-Positiv

Eine negative und eine positive Nullstelle existieren immer, wenn der Betrag des Relativpositionsvektors \vec{r}_{rel} kleiner als die Summe der Kugelradien ist. Physikalisch bedeutet dies, dass die Kugeln ineinander stecken. Dieser Zustand sollte eigentlich während der Simulation nicht vorkommen, kann jedoch durch numerische Fehler vereinzelt auftreten (s.o.). Eine konsequente Abarbeitung dieses Kollisionsereignisses führt unweigerlich zu dem in Kapitel 5.5.1 beschriebenen Effekt der *oszillierenden Schlüsselringe*. Konsequenterweise gibt der Algorithmus Unendlich als Kollisionszeitpunkt zurück. Somit können sich die beiden ineinander steckenden Kugeln wieder entfernen und ein konsistenter Zustand ist wieder hergestellt. Negativ-Positiv Nullstellen werden in der Implementierung erkannt, wenn der Betrag des Relativpositionsvektors \vec{r}_{rel} kleiner als die Summe der Kugelradien ist (*Negativ-Positiv-Regel*).

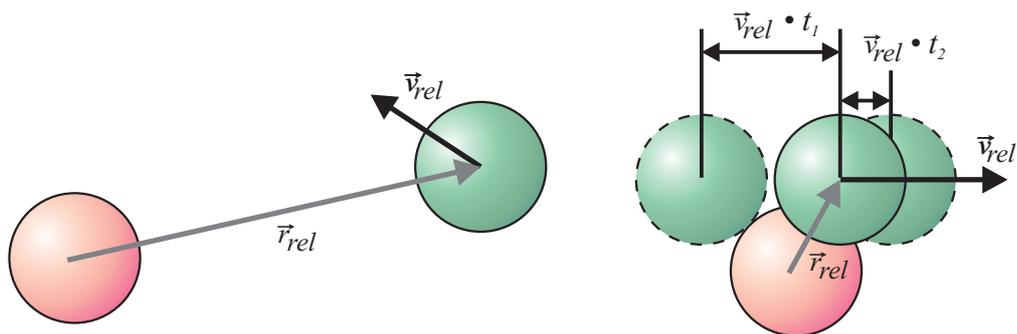


Abbildung 8-3 Links: Konjugiert komplexe Nullstellen. Die Kugeln kollidieren nicht. Rechts: Eine positive und eine negative Nullstelle. Die Kugeln stecken ineinander, was während der Simulation nicht vorkommen sollte. Die positive Nullstelle gibt den Zeitpunkt an, an dem sich die Kugeln wieder trennen würden. Dieses Kollisionsereignis ist zu ignorieren.

Sowohl die Negativ-Negativ-Regel, als auch die Negativ-Positiv-Regel verhindern den Effekt der *oszillierenden Schlüsselringe*, welcher einen drastischen Effizienzverlust der Simulation zur Folge hat.

8.2.5 Reduzierung auf eine Nullstelle

Neben den oben beschriebenen Verfahren für den Abbruch der Kollisionsprüfung, kann der Algorithmus noch in einem weiteren Fall frühzeitig beendet werden. Das Skalarprodukt von Relativpositionsvektor \vec{r}_{rel} und Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} muss in Gleichung (8-3) zur Bestimmung der beiden Nullstellen berechnet werden. Es gilt bekanntlich die Bedingung:

$$\|\vec{r}_{rel}\| \cdot \|\vec{v}_{rel}\| \cdot \cos \alpha = \vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \quad (8-4)$$

Weil die Beträge von Relativpositionsvektor \vec{r}_{rel} und Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} immer positiv sind, wird das Vorzeichen des Terms (8-4) allein durch den Kosinus bestimmt. Der Wert von $\cos \alpha$ ist positiv, wenn der Winkel α zwischen dem Relativpositionsvektor \vec{r}_{rel} und Relativgeschwindigkeitsvektor \vec{v}_{rel} im ersten oder vierten Quadranten liegt (Abbildung 8-4). In diesem Fall können die beiden Kugeln nicht kollidieren.

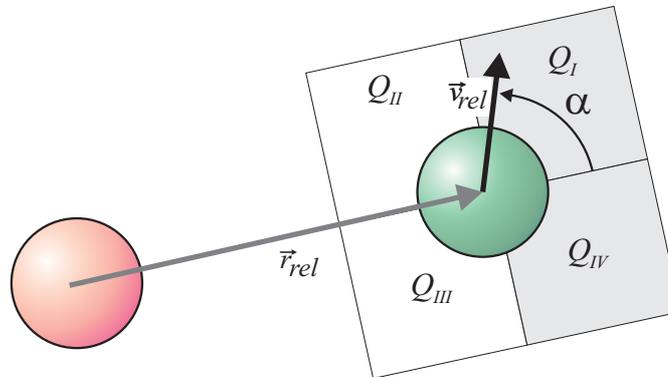


Abbildung 8-4 Ist das Skalarprodukt aus Relativpositionsvektor und Relativgeschwindigkeitsvektor positiv, dann zeigt der Relativgeschwindigkeitsvektor in den ersten oder vierten Quadranten (grau hinterlegt). In diesem Fall können die Kugeln nicht kollidieren.

Da dieses Skalarprodukt in jedem Fall für Gleichung (8-3) ausgerechnet werden muss, wird nach dessen Berechnung folgende Bedingung geprüft (*Skalarprodukt-Bedingung*):

$$\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \leq 0 \quad (8-5)$$

Ist die Skalarprodukt Bedingung (8-5) erfüllt, dann wird die Berechnung fortgesetzt, andernfalls wird unendlich als Kollisionszeitpunkt zurückgegeben. Ist weiterhin der Term unter der Wurzel von Gleichung (8-3) positiv, kann es nur noch zwei positive Nullstellen geben, weil die Kugeln sich aufeinander zu bewegen und keine konjugiert komplexen Nullstellen existieren. Der andere Fall wurde schon durch die *Negativ-Positiv-Regel* abgefangen.

Die kleinere der beiden positiven Nullstellen wird allein durch die Subtraktion in der Fallunterscheidung in Gleichung (8-3) bestimmt. Somit reduziert sich Gleichung (8-3) ohne die Fallunterscheidung auf den einzig möglichen der beiden Fälle zur Bestimmung des Kugel-Kugel Kollisionszeitpunktes t_{Kugel} :

$$t_{Kugel} = \frac{\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{r}_{rel} - R^2}{-\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}\right) - \sqrt{\left(\vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel}\right)^2 + \vec{v}_{rel}^T \cdot \vec{v}_{rel} \left(R^2 - \vec{r}_{rel}^T \cdot \vec{r}_{rel}\right)}} \quad (8-6)$$

Eine nach diesem Verfahren implementierte Kugel-Kugel Kollisionserkennung hat zwei wesentliche Vorteile:

- Der von PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) beschriebene Effekt der *oszillierenden Schlüsselringe* wird vollständig verhindert.

- Durch das frühzeitige Erkennen von Konstellationen, die unmöglich zu einer Kollision führen können und die Reduzierung auf die Berechnung einer einzigen Nullstelle, ist dieses Verfahren ca. 24 % schneller, als klassische Implementierungen (Reichardt und Wiechert, 2005)

Das hier beschriebene Verfahren zur Beschleunigung ist auch dem im Kapitel 5.5.1 erläuterten Verfahren überlegen, weil keine zusätzlichen Berechnungen durchgeführt werden müssen.

8.2.6 Sonderfall

Es kommt häufiger vor, dass ein Kollisionszeitpunkt bestimmt wird, der ungültig ist. Dies ist der Fall wenn dem Kollisionspartner auf dem Weg zum Kollisionspunkt ein anderes Ereignis widerfahren ist. Abbildung 8-5 zeigt eine solche Situation. Die grüne Kugel erkennt eine Kollision mit der roten Kugel. Die rote Kugel kollidiert jedoch vorher schon mit der blauen Kugel.

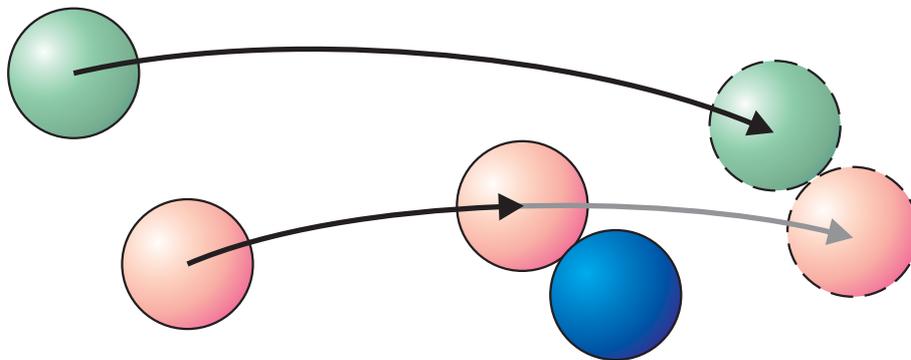


Abbildung 8-5 Für die grüne Kugel wird eine Kollision mit der roten Kugel festgestellt. Für die rote Kugel ist aber schon ein Ereignis mit der blauen Kugel bekannt. Durch dieses Ereignis ändert die rote Kugel die Richtung. Folglich ist die Kollision Grün-Rot nicht gültig.

Ein solches Ereignis in der Ereignisliste hätte zur Folge, dass die Flugbahnen der Kugeln einen un stetigen Verlauf haben. Würde das Ereignis aus dem Beispiel von Abbildung 8-5 in die Ereignisliste eingetragen werden, dann würde die rote Kugel korrekt mit der blauen Kugel kollidieren. Zum fälschlich eingetragenen Kollisionszeitpunkt „Grün-Rot“ würde die rote Kugel dann jedoch an diese Raum-Zeit-Koordinaten springen.

Der Algorithmus prüft nach der Berechnung eines Kugel-Kugel Kollisionsereignisses daher, ob bei der Partnerkugel schon ein Ereignis im Zeitraum zwischen dem aktuellen Zeitpunkt und dem eben berechneten Kollisionszeitpunkt bekannt ist. Ist dies der Fall, dann ist die eben berechnete Kollision ungültig.

8.3 Kugel-Systemgrenze-Kollisionserkennung

Eine Trommel ist eine an den Stirnflächen geschlossene Röhre. Modelliert wird die Trommel aus einem unendlich langen Zylinder mit dem Durchmesser D und zwei paral-

leben, zur Achse des Zylinders senkrecht stehenden, Ebenen. Die eine der beiden Ebenen liegt im Koordinatenursprung in der x-z-Ebene, die andere ist parallel um den Abstand l verschoben. Die Achse des Zylinders ist die y-Achse. Die Kugeln befinden sich zwischen den beiden Ebenen (Trommelwände) und innerhalb des Zylinders (Zylinderwand). Die Wandungen stellen die Systemgrenze dar.

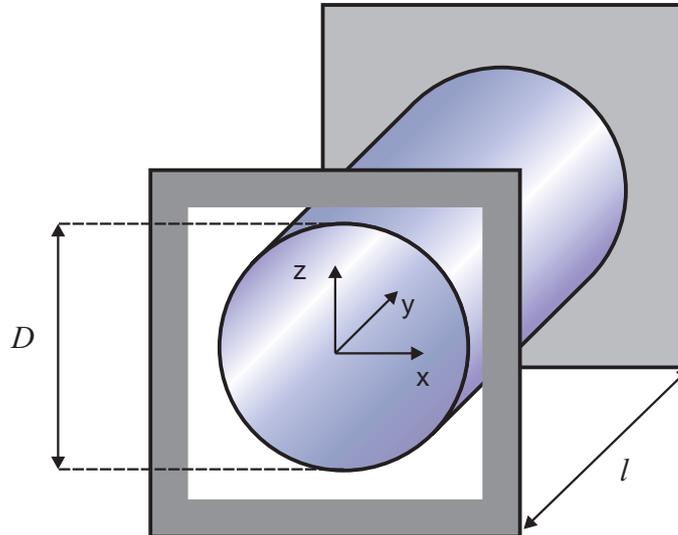


Abbildung 8-6 Die Mahltrommel wird modelliert als ein unendlich langer Zylinder und zwei parallele Ebenen. Die Kugeln bewegen sich zwischen den Ebenen und innerhalb des Zylinders. Diese Wandungen stellen die Systemgrenze der Simulation dar.

Die Simulationen dieser Arbeit verwenden die in Tabelle 8-1 aufgeführten Parameter für die Abmessungen der 2 Liter Mahleinheit.

Parameter	Wert
Länge l	0,135 m
Durchmesser D	0.146 m

Tabelle 8-1 Versuchsparameter für die Simulationen zur Bestimmung der Rechenzeit.

8.3.1 Kugel-Trommelwand-Kollisionserkennung

Die Kollisionserkennung mit den beiden Ebenen ist trivial und erfolgt durch Prüfung der y-Koordinate der Kugel. Welche der beiden Ebenen in Frage kommt, bestimmt das Vorzeichen der y-Komponente des Geschwindigkeitsvektors der Kugel v_y . Der Kollisionszeitpunkt t_{Wand} einer Kugel mit dem Durchmesser d und der y-Komponente des Positionsvektors r_y errechnet sich wie folgt:

$$t_{Wand} = \begin{cases} (0.5d - r_y) / v_y & , v_y < 0 \\ (l - 0.5d - r_y) / v_y & , v_y > 0 \\ \infty & , v_y = 0 \end{cases} \quad (8-7)$$

Gleichung (8-7) ist unabhängig von der Gravitation, weil diese in z-Richtung wirkt und die Geschwindigkeitskomponenten unabhängig voneinander sind. Der Fall, dass die

Geschwindigkeitskomponente v_y exakt Null ist, scheint von rein akademischer Natur zu sein. Wenn allerdings zweidimensionale Simulationen durchgeführt werden ist exakt dies der Fall.

8.3.2 Kugel-Zylinderwand-Kollisionserkennung

Die Kollisionserkennung der Kugel mit der Zylinderwand wird durchgeführt indem die parabolische Flugbahn der Kugel auf die x-z-Ebene projiziert wird. Folgerichtig ist diese Kollisionserkennung ein zweidimensionales Problem, bei dem der Schnittpunkt einer Parabel mit einem Kreis gesucht wird (Abbildung 8-7).

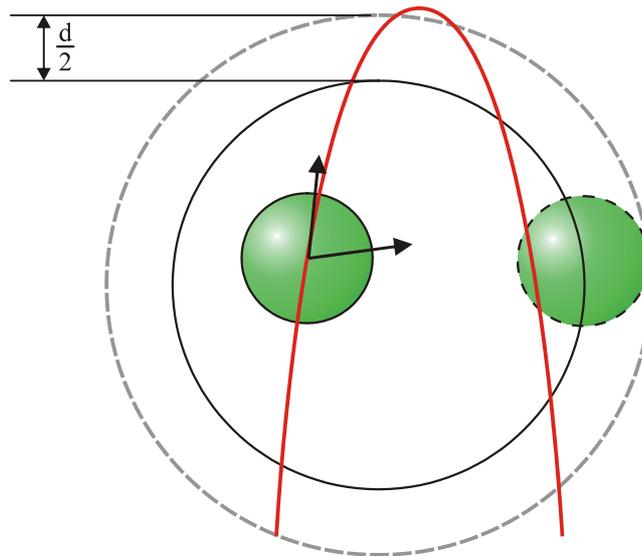


Abbildung 8-7 Bei der Kugel-Zylinderwand Kollisionserkennung wird der Schnittpunkt einer Parabel mit einem Kreis gesucht. Es existieren entweder zwei oder vier reelle Nullstellen.

Die Kugel mit dem Durchmesser d trifft von Innen den Zylinder mit dem Durchmesser D :

$$\sqrt{\bar{s}_x(t)^2 + \bar{s}_z(t)^2} = \frac{D-d}{2} \quad (8-8)$$

Gleichung (8-8) wird durch Einsetzen von Gleichung (5-2) zu einem Polynom vierten Grades. Die Indizes entsprechen den xyz-Komponenten der Vektoren:

$$\frac{1}{4} g_z^2 \cdot t^4 + v_z g_z \cdot t^3 + (v_z^2 + v_x^2 + r_z g_z) \cdot t^2 + 2(r_x v_x + r_z v_z) \cdot t + r_x^2 + r_z^2 - \left(\frac{D-d}{2}\right)^2 = 0 \quad (8-9)$$

Es existieren immer vier Nullstellen, von denen jedoch nur die reellen Nullstellen physikalische Bedeutung haben. Da sich die Kugel zum Zeitpunkt der Kollisionsprüfung innerhalb des Zylinders aufhalten muss, müssen mindesten zwei reelle Nullstellen existieren, von denen eine positiv ist. Eine positive, eine negative und zwei konjugiert komplexe Nullstellen existieren, wenn sich das Maximum der Parabel unterhalb des Maximums des Kreises befindet (siehe flache Parabel in Abbildung 8-7). Vier reelle Nullstellen existieren, wenn sich das Maximum der Parabel oberhalb des Maximums des Kreises befindet. Genauer gesagt, existieren drei negative und eine positive Nullstelle, wenn die

Kugel sich rechts vom Maximum der Parabel befindet und eine negative Nullstelle und drei positive Nullstellen, wenn sich die Kugel links vom Maximum der Parabel befindet.

Aus den physikalischen Informationen über die Anzahl der Nullstellen und der Abschätzung der Nullstellen wurde versucht einen guten Startwert für ein Newton-Verfahren zu finden, um die erste positive reelle Nullstelle des Polynoms zu finden. Dieses Verfahren hat sich jedoch als zu unzuverlässig erwiesen.

Implementiert wurde daher ein analytisches Verfahren von *Ferrari* (1522 – 1565) (Bronstein und Semendjajew, 1989; Pan, 1997). In der heutigen Zeit ist dieses analytische Verfahren relativ unbekannt, weil Anwendungen, welche gerade die reellen Nullstellen von einem Polynom vierten Grades bestimmen müssen, relativ selten sind. Nach der optimierten Implementierung hat sich jedoch herausgestellt, dass dieses Verfahren gegenüber der allgemeinen Lösung der C++ Bibliothek von MATLAB, einen Faktor von über 200 schneller ist und zugleich einen geringeren absoluten Fehler von ca. 10^{-13} aufweist. Trotz der hohen numerischen Präzision, können nach der Positionierung der Kugel zum berechneten Kollisionszeitpunkt weitere numerische Fehler auftreten. Die daraus resultierenden Probleme und Gegenmaßnahmen werden im folgenden Kapitel erläutert.

8.3.3 Inkontinenz – Fall 1

Als *Inkontinenz* der Simulation wird im Rahmen dieser Arbeit der Fall bezeichnet, wenn eine Kugel unwiederbringlich die Systemgrenze verlässt (Reichardt und Wiechert, 2005). Die simulierte Maschine ist folglich „undicht“.

Indem die kleinste positive Nullstelle des für die Kugel-Zylinderwand berechneten Kollisionsereignisses in die Gleichung (5-2) für die Positionsbestimmung eingesetzt wird, kann es vorkommen, dass die Kugel, durch numerische Fehler verursacht, leicht außerhalb der Trommel positioniert wird (Abbildung 8-8 links). Konsequenter Weise zeigt daraufhin der Geschwindigkeitsvektor der Kugel ins Innere der Trommel. Nachfolgend wird als nächstes Ereignis, fälschlicher Weise, die Kollisionszeit mit der Zylinderaußenwand bestimmt. Folglich wird der Geschwindigkeitsvektor wieder an der Zylinderwand gespiegelt und die Kugel verlässt für immer die Systemgrenze. Abbildung 8-8 illustriert diesen Vorgang.

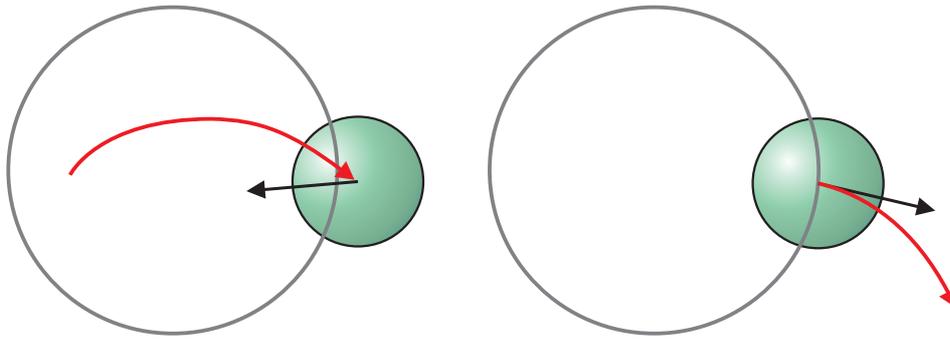


Abbildung 8-8 Inkontinenz der Simulation. Links: Numerisch bedingt kann es vorkommen, dass die Kugel leicht außerhalb der Trommel positioniert wird und wieder ins Innere fliegen soll. Rechts: Als Kollisionsereignis wird der Wiedereintritt in die Trommel erkannt. Die Kugel kollidiert an der Trommelaußenwand. Daraufhin verlässt die Kugel für immer die Systemgrenze.

Als Problemlösung für die Inkontinenz werden zwei Verfahren angewandt:

- Befindet sich die Kugel in der Nähe der Zylinderwand und hat diese eine hohe Geschwindigkeit in Richtung der Trommelwand, dann wird angenommen, dass die Gravitation eine untergeordnete Rolle spielt. Durch Ignorieren der Gravitation reduziert sich das Problem auf ein Polynom zweiten Grades, welches mit einer höheren numerischen Genauigkeit berechnet werden kann.
- Befindet sich die Kugel nach der Positionierung außerhalb der Trommel, dann wird die Kugel exakt auf die Innenseite des Trommelrandes gesetzt.

8.4 Kugel-Rotor-Kollisionserkennung

Die Kugel-Rotor Kollisionserkennung ist ungleich schwieriger, als die oben beschriebenen Verfahren, weil die Abstandfunktion eine transzendente Gleichung ist, welche nicht analytisch gelöst werden kann.

Ein Rotor wird nicht mit seiner realistischen Form anhand der CAD Daten modelliert, weil die Kollisionserkennung zu aufwendig wäre. Außerdem werden die anfangs rechtwinkligen Kanten des Rotors während des Betriebs durch Verschleiß schnell abgerundet, so dass die Fläche in Rotationsrichtung einem Halbzylinder ähnelt (siehe Abbildung 3-3). Stattdessen wird er vereinfacht als Zylinder modelliert, welcher um die y -Achse rotiert. Seine Rotationsgeschwindigkeit sei ω , sein Anfangswinkel zum Zeitpunkt $t = 0$ sei ϕ , der Durchmesser des Zylinders sei m und jeder Rotor kann um den Betrag n in y -Richtung parallel zur x - z -Ebene verschoben sein (siehe Abbildung 8-9). In der Simulation ist es somit möglich für jedes Rotorblatt diese Parameter zu ändern, etwa seine Rotationsgeschwindigkeit oder -Richtung.

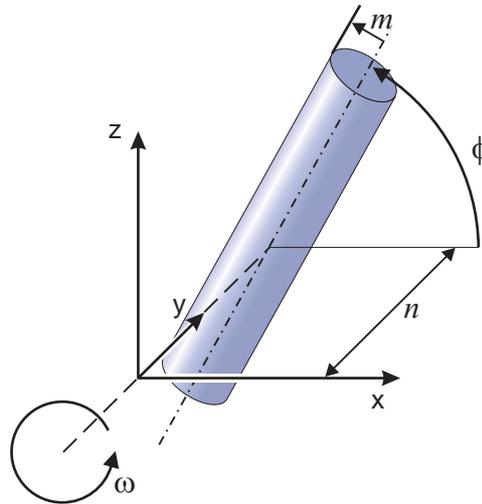


Abbildung 8-9 Ein Rotorblatt wird als Zylinder modelliert, welcher um die y-Achse rotiert und parallel zur x-z-Ebene in y-Richtung verschoben ist. Jedem einzelnen Rotorblatt werden die Parameter einzeln zugewiesen. Auf diese Weise ist es etwa möglich jedem einzelnen Rotorblatt eine eigene Rotationsgeschwindigkeit oder -Richtung zuzuweisen.

Die Simulationszeit eines aktuellen Ereignisses sei t_E . Ab diesem Zeitpunkt vergeht die Zeit t . Der Winkel α des Rotors ändert sich mit fortschreitender Zeit t somit wie folgt:

$$\alpha(t) = -\phi + \omega \cdot (t + t_E) \quad (8-10)$$

Um die Berechnung des zeitabhängigen Abstands $\vec{a}(t)$ zwischen Kugel und Rotor zu vereinfachen, wird ein rotierendes Koordinatensystem eingeführt. Mit Hilfe der Rotationsmatrix Rot_y werden die Vektoren um den Winkel β um die y-Achse rotiert.

$$Rot_y(\beta) = \begin{bmatrix} \cos(\beta) & 0 & \sin(\beta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{bmatrix} \quad (8-11)$$

Durch Subtraktion der y-Verschiebung n des Rotorblatts von der Flugparabel der Kugel und Multiplikation mit der Rotationsmatrix Rot_y wird der Rotor zu jedem Zeitpunkt t so gedreht und verschoben, dass seine Achse die x-Achse ist. Die zeitabhängige Abstandsfunktion $\vec{a}(t)$ ist somit gegeben durch

$$\vec{a}(t) = \left(\vec{s}(t) - \begin{pmatrix} 0 \\ n \\ 0 \end{pmatrix} \right) \cdot Rot_y(\alpha(t)) \quad (8-12)$$

Der Rotor ist rotationssymmetrisch zur x-Achse und hat an jedem Punkt der x-Achse den Radius m . Die Oberflächen von Kugel und Rotor berühren sich, wenn der Abstand ihrer Mittelpunkte gleich $d/2 + m$ ist (Abbildung 8-10). Da dieser Abstand unabhängig von der x-Position im rotierten Koordinatensystem ist und auch im rotierenden Koordinatensystem die Geschwindigkeitskomponenten unabhängig voneinander sind, kann diese Situation auf die y-z-Ebene projiziert werden (Abbildung 8-10). Folglich wird das Prob-

lem von 3D auf 2D reduziert. Die x-Position des Kollisionpunktes kann später wieder über die berechnete Kollisionszeit rekonstruiert werden. Für die Bestimmung des Kollisionszeitpunktes ist die x-Achse jedoch unerheblich.

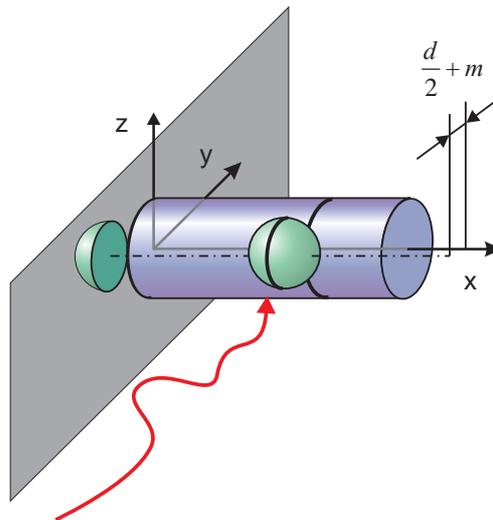


Abbildung 8-10 Im rotierenden Koordinatensystem trifft die Kugel auf den Rotor. Da nur der Abstand der Mittelpunkte in der y-z-Ebene interessiert, kann das Problem durch Projektion auf diese Ebene auf zwei Dimensionen reduziert werden.

Der Betrag der Abstandsfunktion $a(t)$ zwischen Rotor und Kugel ist daher nur abhängig von der x- und z-Koordinate der Kugel und dem Rotationswinkel α des Rotors.

$$a(t) = \sqrt{\left(r_y + v_y \cdot t - n\right)^2 + \left(\left(r_z + v_z \cdot t + \frac{1}{2} g_z\right) \cdot \cos(\alpha(t)) - \left(r_x + v_x \cdot t\right) \cdot \sin(\alpha(t))\right)^2} - \left(\frac{d}{2} + m\right) \quad (8-13)$$

Abbildung 8-11 zeigt exemplarisch den zeitlichen Verlauf der Abstandsfunktion. Die Kugel nähert sich dem Rotor, tritt bei der ersten Nullstelle in den Rotor ein, tritt bei der zweiten Nullstelle wieder aus dem Rotor aus und entfernt sich vom Rotor. Der „Knick“ in der Kurve zum Zeitpunkt $t = 0.04$ entsteht durch die Betragsfunktion. Zu diesem Zeitpunkt haben Kugelmittelpunkt und Rotorachse den geringsten Abstand. Es gilt, gezielt die erste positive Nullstelle der Abstandsfunktion $a(t)$ zu finden.

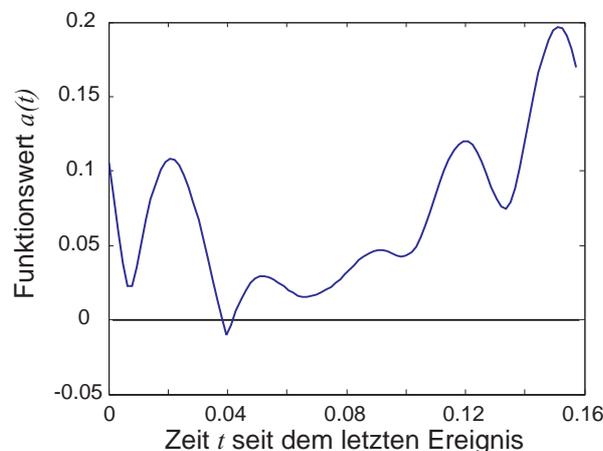


Abbildung 8-11 Exemplarischer Verlauf der Abstandsfunktion von Gleichung (8-13). Es gilt die erste positive Nullstelle zu finden.

Die Kugel kann nur vom Rotor getroffen werden, wenn sie sich in dessen Rotationsbereich befindet. Dieser Bereich wird allein durch die y-Koordinate bestimmt. Das Zeitintervall, in welchem die Kugel überhaupt getroffen werden kann, errechnet sich aus der y-Komponente der Kugelgeschwindigkeit.

$$t_{\min/\max} = \left| \left(|r_y - n| \pm \left(\frac{d}{2} + m \right) \right) / v_y \right| \quad (8-14)$$

Weil die Kollisionserkennung der anderen Kollisionsklassen vor der Kugel-Rotor Kollision durchgeführt wird, kann das Zeitintervall für eine mögliche Kollision auf die schon bekannte Kollisionszeit der anderen Kollisionsklassen reduziert werden. Im Idealfall, wenn die Kollisionszeit der anderen Kollisionsklassen kleiner als t_{\min} von Gleichung (8-14) ist, kann auf die Kugel-Rotor Kollisionserkennung komplett verzichtet werden.

Durch Auswertung der aktuellen Kugelposition und des Vorzeichens der Geschwindigkeit in y-Richtung werden Rotoren ausgeschlossen, die „hinter“ der Kugel liegen.

Der mögliche Kugel-Rotor Kollisionszeitpunkt muss zwischen den Intervallgrenzen t_{\min} und t_{\max} liegen. Falls die Kugel beim Durchfliegen des Einflussbereichs nicht getroffen wird, existiert folgerichtig auch keine Nullstelle. Da keine Standardverfahren bekannt sind, welche immer die erste positive Nullstelle finden, wurde in dieser Arbeit ein gemischter Ansatz gewählt:

- Die Funktionswerte werden schrittweise ausgewertet, bis ein Vorzeichenwechsel gefunden wird.
- Der Vorzeichenwechsel muss eine negative Steigung haben. Sollte er eine positive Steigung haben, dann wurde eine Nullstelle übersehen.
- Bei positiver Steigung und positivem Funktionswert entfernt sich die Kugel vom Rotor und die Schrittweite kann erhöht werden.
- Bei negativer Steigung verringert sich der Abstand und die Schrittweite wird reduziert.
- Wurde ein Vorzeichenwechsel vom Positiven ins Negative gefunden, dann ist der Zeitpunkt zwischen diesen beiden Werten der Startwert für ein Newton-Verfahren.
- Das Newton-Verfahren konvergiert aufgrund des guten Startwertes innerhalb von zwei oder drei Iterationen.

Durch die Projektion auf die y-z-Ebene wurde die Positionsinformation der x-Koordinate eliminiert. Da die x-Koordinate der Kollision gleich dem Radius des Rotors ist, muss abschließend noch geprüft werden, ob der kalkulierte Kollisionszeitpunkt auch einem gültigen Kollisionsort entspricht. Liegt dieser Kollisionsort außerhalb des Radius des

Rotors, also zwischen Rotor und Trommelwand, dann ist der Kollisionszeitpunkt ungültig.

Durch numerische Fehler kann es in seltenen Fällen vorkommen, dass Kugeln innerhalb des Rotors positioniert werden. Das oben beschriebene Verfahren zur Bestimmung der ersten Nullstelle wird in diesem Fall als erste Nullstelle einen Zeitpunkt finden, an dem eine positive Steigung der Abstandsfunktion vorliegt. Dieser Zeitpunkt ist gleichbedeutend mit dem Verlassen des Rotors. Der Algorithmus erkennt, dass zuvor ein Positionierungsfehler stattgefunden hat und bricht die weitere Bearbeitung ab, damit die Kugel den Rotor verlässt. Würde der Algorithmus diese Nullstelle als echtes Kollisionsereignis werten, dann würde die Kugel den Rotor nicht mehr verlassen können – es sei denn durch einen erneuten Positionierungsfehler.

9. Implementierung der Kollisionsbehandlung

Ziel einer Kollisionsbehandlungsroutine ist es, aus den Geschwindigkeitsvektoren der Kollisionspartner vor dem Stoß die Geschwindigkeitsvektoren nach dem Stoß zu errechnen. Die Kollisionsbehandlung erfolgt im Grunde, wie in Kapitel 6 beschrieben. Es gilt Impulserhaltung jedoch nicht Energieerhaltung, weil durch die Kollision kinetische Energie in andere Energieformen umgewandelt wird. Die Ergebnisse dieses Kapitels wurden teilweise in den Publikationen von REICHARDT und WIECHERT (2004, 2005b) veröffentlicht.

Für die einzelnen Kollisionsklassen existieren angepasste Kollisionsbehandlungen. Der Kollisionszeitpunkt wird von der Kollisionserkennung (siehe Kapitel 8) vorgegeben. Aus dem Kollisionszeitpunkt errechnen sich die Raum-Zeit-Koordinaten. Während der Kollision verändern sich nicht die Positionen der Objekte, sondern nur deren Geschwindigkeitsvektoren. Bei elastischen Stößen gilt: Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel. Dies ist etwa bei der Simulation von idealen Gasen der Fall. Bei der Simulation der Hochenergie-Kugelmühle wird ein Energieverlust entsprechend den Restitutionskoeffizienten (siehe Kapitel 7.2) angenommen.

9.1 Generelle Vorüberlegungen

Da in der Simulation für jede Kugel eine eigene Masse und ein eigener Durchmesser vorgegeben werden kann (siehe Kapitel 10.1), müssen die nachfolgenden Formeln für die Kollisionsbehandlung mit der effektiven Masse m_{eff} gewichtet werden. Die effektive Masse m_{eff} errechnet sich aus den Einzelmassen m_i und m_j der kollidierenden Kugeln i und j wie folgt (Pöschel, 2000).

$$m_{eff} = \frac{m_i \cdot m_j}{m_i + m_j} \quad (9-1)$$

In jedem Fall müssen die Koordinaten der Kollision, sowie die Kollisionsgeschwindigkeit bestimmt werden. Die Berechnung des Positionsvektors \vec{r} zum Zeitpunkt der Kollision erfolgt mit Hilfe von Gleichung (9-2). Von der Kugel sind aufgrund der letzten Kollision die dazugehörige Position \vec{r}_0 , die Geschwindigkeit \vec{v}_0 und der Zeitpunkt t_E dieses Kollisionsereignisses bekannt. Der neue Kollisionszeitpunkt $t_{Kollision}$ wurde von der Kollisionserkennung errechnet (siehe Gleichung (8-1)). Die Kugel fliegt folglich zwischen den Kollisionen eine Zeitdauer Δt von $t_{Kollision} - t_E$ Sekunden.

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{v}_0 \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \vec{g} \cdot (\Delta t)^2 \quad \text{mit} \quad \Delta t = t_{Kollision} - t_E \quad (9-2)$$

Die Kollisionsgeschwindigkeit \vec{v} errechnet sich aus denselben Parametern mit Hilfe der zeitlichen Ableitung von Gleichung (9-2) wie folgt:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{g} \cdot \Delta t \quad (9-3)$$

Weil der Vektor der Gravitationsbeschleunigung nur in der z-Komponente besetzt ist, wurde die Bestimmung der Kollisionsposition und der Kollisionsgeschwindigkeit nicht mit der C++ Klasse für die Vektorrechnung implementiert, sondern für jede Komponente einzeln.

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} \vec{r}_{0x} + \vec{v}_x \cdot \Delta t \\ \vec{r}_{0y} + \vec{v}_y \cdot \Delta t \\ \vec{r}_{0z} + \vec{v}_{0z} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \vec{g}_z \cdot (\Delta t)^2 \end{pmatrix} \quad \vec{v} = \begin{pmatrix} \vec{v}_{0x} \\ \vec{v}_{0y} \\ \vec{v}_{0z} + \vec{g}_z \cdot \Delta t \end{pmatrix} \quad (9-4)$$

Für zwei Kugeln i und j sind zum Zeitpunkt der Kollision deren Positionsvektoren \vec{r}_i und \vec{r}_j und deren Kollisionsgeschwindigkeiten \vec{v}_i und \vec{v}_j .

Die Kollisionsbehandlung für die Kugel-Kugel Kollision und die Kugel-Wand Kollision ist mit geringem Aufwand zu berechnen. Bei der Kugel-Rotor Kollision muss jedoch die Kollisionsbehandlung im rotierenden Koordinatensystem berechnet und anschließend wieder rücktransformiert werden. In den folgenden Kapiteln werden die einzelnen Fälle der Kollisionsbehandlung und die Anpassung an die Simulation erläutert.

9.2 Kugel-Kugel Kollisionsbehandlung

Die Kugel-Kugel Kollisionsbehandlung benötigt den Einheitsvektor \vec{e} , welcher durch die Mittelpunkte der beiden Kugeln geht. Dieser Einheitsvektor steht senkrecht auf einer gedachten Ebene, die zwischen den kollidierenden Kugeln verläuft (Hessesche Normalform). Im Relativkoordinatensystem wird die Kugel-Kugel Kollision auf eine Kugel-Wand Kollision mit dieser gedachten Ebene zurückgeführt.

$$\vec{e} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|} \quad (9-5)$$

Die Relativgeschwindigkeit der Kugeloberflächen berechnet sich unter Berücksichtigung der beiden Rotationsgeschwindigkeiten nach Vereinfachen von Gleichung (6-8) wie folgt:

$$\begin{aligned} \vec{g} &= \vec{v}_{rel} + R\vec{e} \times (\vec{\omega}_1 + \vec{\omega}_2) \\ \vec{g}_n &= (\vec{g}^T \cdot \vec{e}) \vec{e} \\ \vec{g}_t &= \vec{g} - \vec{g}_n \end{aligned} \quad (9-6)$$

Die Tangentialkomponente \vec{g}_t wird durch den tangentialen Restitutionskoeffizienten ε_t gedämpft, die Normalkomponente \vec{g}_n durch den normalen Restitutionskoeffizienten ε_n .

Die Geschwindigkeiten \vec{v}'_i und \vec{v}'_j nach dem Stoß errechnen sich, ähnlich zu Gleichung (6-11), wie folgt:

$$\vec{v}'_{i/j} = \vec{v}_{i/j} \mp \frac{m_{eff}}{m_{i/j}} \left((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t - (\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n \right) \quad (9-7)$$

In Gleichung (9-7) wurde lediglich im Nenner der Term $2m_{i/j}$ durch $m_{i/j}$ ersetzt, weil sonst keine Energieerhaltung gilt und die neuen Geschwindigkeitsvektoren falsch berechnet werden – siehe Anhang C.

Durch den Stoß ändern sich die auch die Rotationsvektoren der Kugeln i und j . Der in Kapitel 6.2 vorgestellte Ansatz von PÖSCHEL (2000) und BRILLIANTOV (1996) geht davon aus, dass die Geschwindigkeitsänderung $(\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t - (\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n$ gänzlich in Rotation umgesetzt wird. Die Gleichung (6-12) ist hier noch mal wiedergegeben.

$$\vec{\omega}'_{i/j} = \vec{\omega}_{i/j} \pm \frac{m_{eff}}{2m_{i/j}} \mathbf{R}\vec{e} \times \left((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t - (\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n \right) \quad (9-8)$$

Da jedoch \vec{g}_n immer parallel zu \vec{e} ist, siehe Gleichung (9-6), hat der Term $(\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n$ in Gleichung (9-8) keinen Einfluss auf das Kreuzprodukt und kann entfallen. Der Normale Restitutionskoeffizient hat folglich keinen Einfluss auf die Rotationsänderung. Die neuen Rotationsvektoren $\vec{\omega}'_i$ und $\vec{\omega}'_j$ errechnen sich aus den Rotationsvektoren $\vec{\omega}_i$ und $\vec{\omega}_j$ vor der Kollision zuzüglich der durch die tangentielle Dämpfung verursachte Rotationsänderung. Die Korrektur des Nenners erfolgt analog zu Gleichung (9-7).

$$\vec{\omega}'_{i/j} = \vec{\omega}_{i/j} \pm \frac{m_{eff}}{m_{i/j}} \mathbf{R}\vec{e} \times \left((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t \right) \quad (9-9)$$

9.3 Kugel-Systemgrenze Kollisionsbehandlung

Bevor bei der Kugel-Wand Kollisionsbehandlung der neue Geschwindigkeitsvektor berechnet wird, überprüft der Algorithmus, ob die Kugel zum angegebenen Kollisionszeitpunkt wirklich noch innerhalb der Mahleinheit ist. Aufgrund von numerischen Fehlern bei der Nullstellenbestimmung kann es vorkommen, dass die Position leicht abweicht. Dieser Fehler ist i.d.R. kleiner als 10^{-13} , kann jedoch zu dem in Kapitel 8.3.3 beschriebenen Problem der Inkontinenz führen. In die Bestimmung des Positionierungsfehlers gehen nur die x- und z-Koordinaten des Positionsvektors \vec{r} ein. Die Projektion des Positionsvektors \vec{r} auf die x-z-Ebene führt zu dem Vektor \vec{r}^*

$$\vec{r}^* = \begin{pmatrix} \vec{r}_x \\ 0 \\ \vec{r}_z \end{pmatrix} \quad (9-10)$$

Der Abstand A einer Kugel mit dem Durchmesser d zum zylindrischen Trommelrand mit dem Durchmesser D errechnet sich wie folgt:

$$A = \frac{D-d}{2} - \|\vec{r}^*\| \quad (9-11)$$

Ist dieser Abstand $A < 0$, dann befindet sich die Kugel außerhalb der Trommel und muss genau auf den Trommelrand gesetzt werden, indem die x- und z-Komponente des Positionsvektors \vec{r} neu zugewiesen werden.

$$\vec{r}_x = \frac{\vec{r}_x}{\|\vec{r}^*\|} \cdot \frac{(D-d)}{2} \quad \vec{r}_z = \frac{\vec{r}_z}{\|\vec{r}^*\|} \cdot \frac{(D-d)}{2} \quad (9-12)$$

Zur Berechnung der neuen Kugelgeschwindigkeit wird wiederum der Einheitsvektor \vec{e} , welcher senkrecht auf der zylindrischen Trommelwand steht und durch den Kugelmittelpunkt im Moment der Kollision und durch die y-Achse geht benötigt.

$$\vec{e} = \frac{2\vec{r}^*}{D-d} \quad (9-13)$$

Die Normal-Komponente der Geschwindigkeit ist der Anteil senkrecht zur Oberfläche, also parallel zum Einheitsvektor \vec{e} :

$$\vec{v}_n = \left(\left(\vec{v} + \left(\frac{d}{2} \vec{e} \right) \times \vec{\omega} \right)^T \cdot \vec{e} \right) \cdot \vec{e} \quad (9-14)$$

Die Tangential-Geschwindigkeit auf der Kugeloberfläche errechnet sich aus der tangentialen Geschwindigkeitskomponente der translatorischen Bewegung plus der Rotationsgeschwindigkeit der Oberfläche.

$$\vec{g}_t = \vec{v} - \vec{v}_n + \left(\frac{d}{2} \vec{e} \right) \times \vec{\omega} \quad (9-15)$$

Der Geschwindigkeitsvektor \vec{v}' nach dem Stoß und der neue Rotationsvektor $\vec{\omega}'$ errechnen sich nun analog zum Kugel-Kugel Stoß wie folgt:

$$\vec{v}' = \vec{v} - \left((\varepsilon_n + 1) \vec{v}_n + (1 - \varepsilon_t) \vec{g}_t \right) \quad (9-16)$$

$$\vec{\omega}' = \vec{\omega} + \frac{d}{2} \cdot \vec{e} \times \left((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t \right) \quad (9-17)$$

Die Kollisionsbehandlung bei der Kugel-Trommelwand Kollision erfolgt ebenfalls mit den Formeln (9-16) und (9-17), jedoch steht der Einheitsvektor \vec{e} senkrecht auf der x-z-Ebene parallel zur y-Achse.

9.4 Kugel-Rotor Kollisionsbehandlung

Die Kugel-Rotor Kollisionsbehandlung entspricht im Grunde genommen einer Kugel-Systemgrenze Kollisionsbehandlung. Der Unterschied besteht lediglich darin, dass sich die „Wand“ bewegt und folglich die Geschwindigkeit des Rotors addiert wird. Kugeln, die dem Rotor entgegenfliegen, sind folglich nach der Kollision schneller, als vorher. Für Kugeln, die vom Rotor „eingeholt“ werden, gilt dasselbe. Die Berechnung wird etwas komplizierter, weil die Kollisionsbehandlung im rotierenden Koordinatensystem berechnet werden muss.

Analog zur Kugel-Systemgrenze Kollisionsbehandlung muss sichergestellt sein, dass die Kugel, bedingt durch numerische Fehler, nicht innerhalb des Rotors positioniert wird. In Kapitel 8.4 wurde zwar ein Verfahren vorgestellt, um Kugeln, die innerhalb des Rotors positioniert wurden, sicherheitshalber zu ignorieren, jedoch würde dadurch die Kollision selbst ebenfalls ignoriert werden. Bei der Kugel-Rotor Kollisionsbehandlung wird daher ebenfalls überprüft, ob der Anstand $a(t)$ zwischen Kugel und Rotor zum Kollisionszeitpunkt $t = t_{Rotor}$ kleiner als Null ist. Der Abstand zwischen Kugel und Rotor wurde schon in Kapitel 8.4 als Gleichung (8-13) hergeleitet und wird hier identisch als Gleichung (9-18) wiedergegeben.

$$a(t) = \sqrt{\left(r_y + v_y \cdot t - n\right)^2 + \left(\left(r_z + v_z \cdot t + \frac{1}{2} g_z\right) \cdot \cos(\alpha(t)) - (r_x + v_x \cdot t) \cdot \sin(\alpha(t))\right)^2} - \left(\frac{d}{2} + m\right) \quad (9-18)$$

Sollte der Abstand $a(t) < 0$ sein, dann befindet sich die Kugel innerhalb des Rotors. Der Fehler ist proportional zum Abbruchkriterium des Newton-Nullstellenverfahrens zur Kollisionszeitpunktbestimmung aus Kapitel 8.4. Um die Kugel wieder außerhalb des Rotors zu positionieren wurde ein Verfahren gewählt, dessen neue Positionierungsungenauigkeit in etwa so groß ist, wie die falsche Positionierung innerhalb des Rotors. Die Kugel wird um dasselbe Zeitintervall außerhalb des Rotors verschoben, das der Strecke des Positionierungsfehlers entspricht. Das Verfahren kann als „*doppelter Newton-Schritt rückwärts*“ interpretiert werden (siehe Gleichung (9-20)). Für diesen Zeitschritt ist die zeitliche Ableitung $\dot{a}(t)$ des Abstands $a(t)$ nötig. Der Winkel des Rotors wird mit $\alpha(t)$ angegeben:

$$\alpha(t) = -\phi + \omega \cdot t$$

$$\dot{a}(t) = \frac{2v_y \cdot (r_y + v_y \cdot t - n) + v_z \cos(\sin(\alpha(t))) - v_x \sin(\sin(\alpha(t))^2)}{2\sqrt{\left(r_y + v_y \cdot t - n\right)^2 + \left(r_z + v_z \cdot t + \frac{1}{2} g_z\right) \cdot \cos(\sin(\alpha(t))) - (r_x + v_x \cdot t) \cdot \sin(\sin(\alpha(t))^2)}} \quad (9-19)$$

Die Korrekturzeit t_{Err} berechnet sich wie folgt:

$$t_{Err} = 2 \frac{a(t)}{\dot{a}(t)} \quad (9-20)$$

Gleichung (9-20) garantiert mit $t = t_{Rotor} - t_{Err}$ durch Einsetzen in Gleichung (9-4) für die Positionsbestimmung der Kugel eine Platzierung der Kugel außerhalb des Rotors.

Die Kollisionsbehandlung wird im rotierten Koordinatensystem durchgeführt. Der Geschwindigkeitsvektor wird im Koordinatenursprung gedreht. Der Orientierungspunkt der Rotation des Positionsvektors ist die Koordinate des Drehpunkts des Rotors.

$$\tilde{\vec{v}} = Rot_y(\alpha(t)) \cdot \left(\vec{v} + \left(\frac{d}{2} \vec{e} \right) \times \vec{\omega} \right) \quad \tilde{\vec{r}} = Rot_y(\alpha(t)) \cdot \left(\vec{r} - \begin{pmatrix} 0 \\ n \\ 0 \end{pmatrix} \right) + \begin{pmatrix} 0 \\ n \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9-21)$$

Der Rotor hat nur eine Geschwindigkeitskomponente in y-Richtung. Die Geschwindigkeit \vec{v}_{Rotor} des Rotors am Kollisionspunkt errechnet sich in Abhängigkeit der x-Koordinate im rotierenden Koordinatensystem.

$$\vec{v}_{Rotor} = \begin{pmatrix} 0 \\ \omega \tilde{r}_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9-22)$$

Der Einheitsvektor \vec{e} geht durch den Koordinatenursprung und den Mittelpunkt der Kugel. Da sich der Rotor im rotierten Koordinatensystem entlang der x-Achse befindet, wird der Einheitsvektor nur durch die y- und z-Komponente des Positionsvektors der Kugel im rotierten Koordinatensystem bestimmt.

$$\vec{e} = \frac{\vec{r}^*}{\|\vec{r}^*\|} \quad \text{mit} \quad \vec{r}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{r}_y \\ \tilde{r}_z \end{pmatrix} \quad (9-23)$$

Von der Kollisionsgeschwindigkeit $\tilde{\vec{v}}$ der Kugel im rotierten Koordinatensystem wird die Geschwindigkeit des Rotors am Kollisionspunkt subtrahiert. Die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit $\tilde{\vec{v}}_n$, mit der die Kugel auf den Rotor trifft, errechnet sich wie folgt:

$$\tilde{\vec{v}}_n = \left((\tilde{\vec{v}} - \vec{v}_{Rotor}) \cdot \vec{e} \right) \cdot \vec{e} \quad (9-24)$$

Dadurch dass das Koordinatensystem rotiert wurde, entspricht die Kugel-Rotor Kollision einer Kugel-Systemgrenze Kollision. Die Geschwindigkeitskomponenten der Kugeloberfläche beim Aufprall auf den Rotor errechnet sich mit $\vec{v} = \tilde{\vec{v}}$ und $\vec{v}_n = \tilde{\vec{v}}_n$ mit Hilfe von Gleichung (9-15) analog zur Kugel-Systemgrenze Kollisionsbehandlung. Der Geschwindigkeitsvektor nach der Kollision und der Rotationsvektor nach der Kollision werden mit Gleichung (9-16) und (9-17) berechnet.

Abschließend werden die neuen Vektoren der Kugel mit Hilfe von Gleichung (9-21) wieder zurück transformiert, jedoch mit dem negativen Vorzeichen des Rotationswinkels und der Verschiebung.

10. Ereignisverwaltung

In diesem Kapitel werden die Implementierung der Ereignisverwaltung und die Abweichung zu den klassischen Implementierungen beschrieben. Ferner wird erläutert, wie die Fallstricke der klassischen Verfahren vermieden werden können.

In den Publikationen der in Kapitel 5.2 und 5.4 zitierten Verfahren wird nicht auf Implementierungsdetails eingegangen. In der Regel wird allgemein beschrieben, welche Datenstruktur geeignet ist, um schnell auf die Ereignisdaten zuzugreifen. Üblicherweise werden in ereignisdiskreten Simulationen sehr viele Partikel ($>10^4$) simuliert. In den anwendungsorientierten Arbeiten steht dagegen der Algorithmus an sich im Hintergrund. Der Algorithmus muss stabil über mehrere Tagen laufen können. In den Arbeiten, welche ereignisdiskrete Algorithmen als interessante Herausforderung für Datenstrukturen sehen, tritt allerdings die Anwendung meist in den Hintergrund. In beiden Fällen wird häufig mit zyklischen Rändern gearbeitet. Kugeln, die auf der einen Seite die Systemgrenze verlassen, treten automatisch auf der anderen Seite wieder in das System ein.

Bei der Simulation der Laborversion der Hochenergie-Kugelmühle werden maximal 5000 Kugeln simuliert. Computer sind heutzutage mit genügend Speicher ausgestattet, um ein Vielfaches dieser Anzahl verwalten zu können. Der Speicherplatzbedarf für die Datenstruktur ist daher zweitrangig. Ziel der Simulation ist es möglichst zeiteffizient zu arbeiten, weil diese später für Parameterstudien eingesetzt werden soll.

Die in Kapitel 8 beschriebenen Kollisionserkennungen wurde daher auf günstiges Laufzeitverhalten optimiert. Ein großer Anteil der Rechenzeit wird somit für die Ereignisverwaltung und die Speicherung der Ereignisinformationen verbraucht.

10.1 Anforderungen an Ereignisverwaltung und Datenstrukturen

Bei der Simulation interessiert nicht nur das Endergebnis, wie bei den in Kapitel 5.2 und 5.4 zitierten Arbeiten, sondern vielmehr auch, wie sich das simulierte System mit fortschreitender Simulationszeit entwickelt.

Neben den üblichen Aufgaben einer Ereignisverwaltung muss die Simulation auch weitere Berechnungen durchführen, etwa diverse Histogramme der Kugelgeschwindigkeiten erstellen. Diese Unterprogramme müssen direkten Zugriff auf die Daten jeder einzelnen Kugel haben, oder deren Daten aus vorgegebenen Zeitintervallen abfragen können. Für die Visualisierung ist es wichtig die Positionen und Geschwindigkeiten zu festgelegten Zeitpunkten zur Verfügung zu stellen.

Die Ereignisverwaltung selbst muss drei wichtige Grundfunktionen effizient zu Verfügung stellen:

- Suchen des nächsten Ereignisses in der Datenstruktur
- Einfügen des neu berechneten Ereignisses in die Datenstruktur

- Löschen von ungültigen Ereignissen aus der Datenstruktur

Die Ereignisse werden in der hier vorgestellten Implementierung redundant gespeichert. Dies hat zwar Nachteile beim Speicherbedarf, ermöglicht aber schnelleren Zugriff auf die Ereignisdaten. Die Ereignisdaten werden sowohl in einer *globalen Ereignisliste*, ähnlich dem Ansatz von SIGURGEURSSON (2001), als auch in *lokalen Ereignislisten*, ähnlich dem Ansatz von RAPAPORT (1993), LUBACHEVSKY (1992) und MARÍN et al. (1993), gespeichert. Alle Ereignislisten sind untereinander vernetzt.

Um die Simulationen mit verschiedenartigen Kugeln zu ermöglichen kann jeder einzelnen Kugel eine eigene Masse und ein eigener Durchmesser zugeordnet werden.

Die Ereignisse werden in zwei unterschiedlichen Arten von chronologisch sortierten Ereignislisten verwaltet, welche in den nachfolgenden beiden Kapiteln genauer erläutert werden. Als Datenstruktur dient eine doppelt verkettete Liste, deren Einträgen zusätzlich ein Binär-Baum (Rot-Schwarz-Baum) hinterlegt ist. Die Baumstruktur garantiert die Sortierung und das schnelle Auffinden eines Elementes (Cormen et al., 2003). Die doppelt verkettete Liste ermöglicht den schnellen Zugriff auf den direkten Nachfolger bzw. Vorgänger.

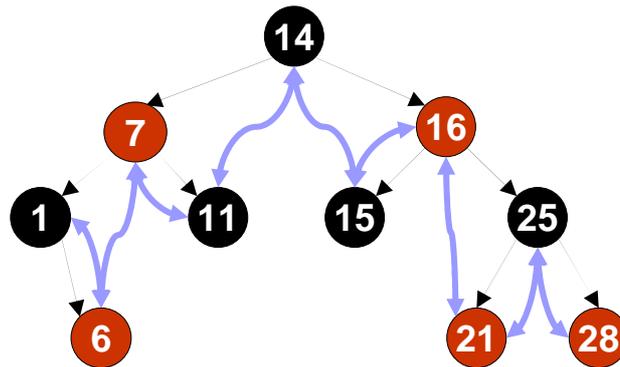


Abbildung 10-1 Datenstruktur der Ereignislisten. Der Baum wird um eine doppelt verkettete Liste erweitert. Die blauen Pfeile verbinden die zeitlich sortierten Knoten (Liste). Die schwarzen Pfeile zeigen die Hierarchie der Baumstruktur bestehend aus Eltern- und Kinderknoten.

Die Liste-Baum Datenstruktur ist nach der Ereigniszeit sortiert und beinhaltet als Datensatz strukturierte Datentypen. Tabelle 10-1 zeigt die zur Verfügung gestellten Operationen, welche von einer Liste, einem Baum und von deren Kombination zu Verfügung gestellt werden und die dazugehörige Komplexitätsklasse.

Aus Tabelle 10-1 ist ersichtlich, dass durch die Kombination aus Baumstruktur und doppelt verketteter Liste die jeweils bessere Komplexitätsklasse der beiden Grunddatenstrukturen zu Verfügung steht.

Operation	Liste	Baum	Liste-Baum
Einfügen	$O(n)$	$O(\log n)$	$O(\log n)$
Suchen	$O(n)$	$O(\log n)$	$O(\log n)$
Löschen	$O(n)$	$O(\log n)$	$O(\log n)$
Nächster	$O(1)$	$O(\log n)$	$O(1)$
Vorgänger	$O(1)$	$O(\log n)$	$O(1)$

Tabelle 10-1 Vergleich der Komplexitätsklassen der verschiedenen Datenstrukturen. Die Kombination von Baum und Liste ermöglicht als Synergieeffekt die jeweils beste Komplexitätsklasse.

10.2 Globale Ereignislisten

In einer globalen Ereignisliste (GEL) werden alle Ereigniszeitpunkte und die dazugehörigen eindeutigen Kennungen (Indizes) der Kollisionspartner gespeichert. Kugeln haben positive Indizes, die Rotoren, die Trommelwände und die Zylinderwand haben negative Indizes. Auf diese Weise sind über das Vorzeichen effizient die beweglichen Kugeln von den statischen Objekten unterscheidbar. Ein Rotor wird im folgenden Kontext auch als statisch angesehen, weil dessen Winkel unabhängig von Kollisionsereignissen anhand der Simulationszeit exakt bestimmt werden kann.

Der Sortierungsschlüssel ist die Ereigniszeit. Mehrfaches Vorkommen derselben Ereigniszeiten ist zugelassen. Dies widerspricht dem ersten Anschein nach der ereignisdiskreten Idee von paarweisen Kontakten, jedoch treten zwei Situationen auf, bei denen die Ereigniszeit (numerisch) dieselbe sein kann:

- Bei der Initialisierung ist die Ereigniszeit von allen Kugeln Null.
- Während der Simulation kann es vorkommen, dass zwei oder mehr Kugelpaare zwar zur (numerisch) selben Zeit, jedoch an unterschiedlichen Orten kollidieren.

Schlüsselkollisionen (gleiche Ereigniszeiten) in der GEL werden folglich zugelassen. Die Datensätze (zeitlich) vor der aktuellen Simulationszeit in der GEL sind als verifiziert anzusehen und stellen die tatsächlich im System kollidierten Objekte dar. Die Datensätze hinter der aktuellen Simulationszeit können noch Kollisionen enthalten, welche sich im späteren Verlauf der Simulation als ungültig herausstellen.

10.3 Lokale Ereignislisten

Eine *lokale Ereignisliste* (LEL) speichert die Ereigniszeitpunkte als Schlüssel. Die dazugehörigen Positions-, Rotations- und Geschwindigkeitsvektoren einer einzelnen Kugel werden in einem strukturierten Datentyp als Datum des Listenelementes gespeichert. In einer LEL ist folglich die Historie einer einzelnen Kugel gespeichert. Für jede Kugel wird

im System eine LEL angelegt. Im Unterschied zur GEL sind keine Zeiteinträge mit dem gleichen Wert zugelassen, weil eine Kugel zu einem Zeitpunkt nur ein einziges Ereignis haben kann.

Neben ihrer eigenen Historie muss eine einzelne Kugel auch Informationen über Ihre Kollisionspartner abrufen können. Aus diesem Grund sind die Listenelemente der LELs mit denen der GEL verknüpft (*Zeiger*). Eine Kugel kann diesem Zeiger von der LEL zur GEL folgen. Dort, in $O(1)$ angekommen, wird der Kollisionspartner festgestellt. Dessen Zeiger von der GEL zu seiner eigenen LEL kann, wiederum in $O(1)$, gefolgt werden. Da die Konstanten der Komplexitätsklasse vernachlässigt werden können, hat eine Kugel auf die Historie des Kollisionspartners, über die GEL, in $O(1)$ Zugriff.

Die Kopplung von LEL und GEL ist in Abbildung 10-2 dargestellt. Die Datenstruktur wird als Tabelle abgebildet. Jede Kugel hat ihre eigene LEL (in Abbildung 10-2 nur für grün und blau wiedergegeben). Die Zeitstempel sind redundant und dienen als Sortierschlüssel. Jeder Eintrag in der GEL hat einen entsprechenden Detailsbeitrag in der LEL.

Beispiel: Die grüne Kugel kollidiert zum Zeitpunkt 1.02 Sekunden mit der blauen Kugel. Die grüne Kugel kann ausgehend von ihrem Eintrag zum Zeitpunkt 1.02 Sekunden dem Zeiger zum Eintrag in der GEL folgen. Dort wird festgestellt, dass der Kollisionspartner die blaue Kugel ist. Auf die Kollisionsdaten der blauen Kugel kann über den Zeiger von der GEL zur LEL der blauen Kugel zugegriffen werden.

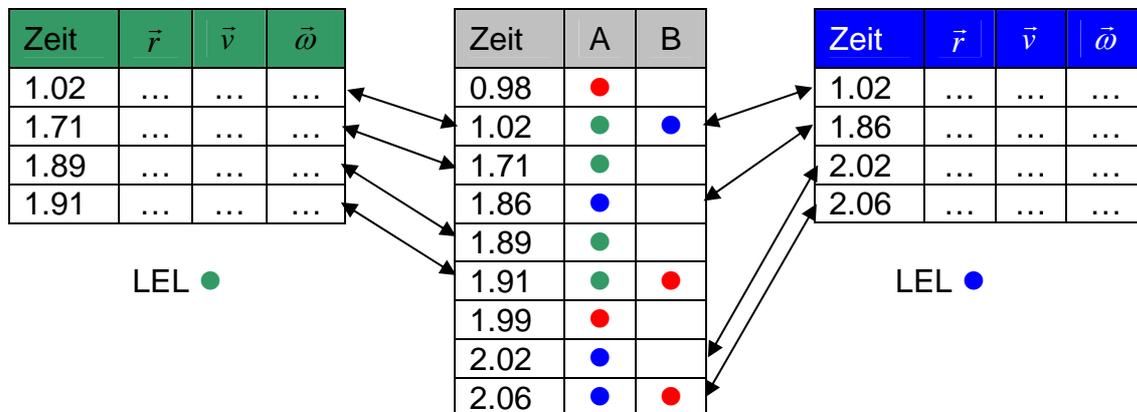


Abbildung 10-2 Kombination der verschiedenen LELs (Links, Rechts) mit der GEL (Mitte). In einer LEL sind nur die Daten einer Kugel gespeichert. In der GEL werden die Kollisionspartner zugeordnet. Die Kugel ● und Kugel ● haben einen gemeinsamen Eintrag „1.02“ in der GEL.

Die Einfügeoperation muss neue Ereignisse in die GEL und die betreffenden LELs einfügen. Der Algorithmus achtet beim Einfügen der Ereignisse darauf, dass Zeitstempel in den LELs nicht doppelt vorkommen. Nach dem Einfügen des neuen Ereignisses, muss geprüft werden, ob durch dieses Ereignis andere Ereignisse ungültig wurden.

10.4 Löschen von Ereignissen

Das Einfügen eines Ereignisses macht die nachfolgenden Ereignisse einer Kugel und des Kollisionspartners ungültig. Die zu löschenden Ereignisse sind über die LELs einfach zu finden. Wird ein Ereignis in eine LEL eingefügt, dann sind auch automatisch die Nachfolgeereignisse ungültig. Gefunden wird das nachfolgende Ereignis in $O(1)$. Die Löschoperation in der verketteten Liste hat eine Komplexität von $O(1)$. Die Löschoperation in der Baumstruktur mit n_B Elementen hat eine Komplexität von $O(\log n_B)$.

Die Löschung eines Ereignisses aus den entsprechenden Listen erfolgt in drei Schritten:

- Über die GEL wird der Kollisionspartner gefunden und der Eintrag in dessen LEL gelöscht.
- Der Eintrag aus der GEL wird gelöscht.
- Der eigene Eintrag in der LEL wird gelöscht.

Das Löschen eines Eintrags in einer LEL löst einen rekursiven Löschvorgang der Nachfolger nach dem o.g. Schema aus. Auf diese Weise wird garantiert, dass die Nachfolgeereignisse wiederum die Einträge der Kollisionspartner gelöscht werden. Bei Simulationsexperimenten mit 5000 Kugeln beträgt das Maximum der Rekursionstiefe typischer Weise 50. Eine Löschoperation hat damit folglich 50 andere Löschooperationen ausgelöst.

10.4.1 Problematik des rekursiven Löschens

Bei einem rekursiven Aufruf wird die Funktion angehalten und erst nach Terminierung der Rekursion fortgesetzt. Beim Löschen kann dies fatale Folgen haben. Über eine Dreiecksbeziehung kann es vorkommen, dass der Nachfolger, welcher noch gelöscht werden sollte, schon gelöscht worden ist. Der Zeiger auf das Nachfolgeelement verweist dann auf einen Speicherbereich, welcher vom Betriebssystem konsequenter Weise schon freigegeben wurde.

Abbildung 10-3 verdeutlicht dieses Problem an einem Beispiel mit drei LELs. Aus LEL 1 soll gelöscht werden (#1). Gemäß dem o.g. Algorithmus wird über die GEL (nicht dargestellt) der LEL-Eintrag des Kollisionspartners in LEL 2 festgestellt (#2). Dieser Eintrag hat einen Nachfolger, der folgerichtig ungültig wird (#3). Dessen Kollisionspartner wird festgestellt und muss gelöscht werden (#4). Dieser Eintrag hat ebenfalls einen Nachfolger und muss daher gelöscht werden (#5). Der Kollisionspartner von (#5) aus LEL 3 ist jedoch der Nachfolgeeintrag des Ursprungs (#1). Wenn von (#5) aus der Eintrag (#6) gelöscht wird, ist der Zeiger von (#1) auf dessen Nachfolger ungültig. Der Löschvorgang (#7) muss verhindert werden.

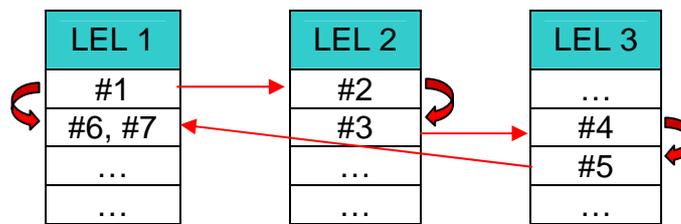


Abbildung 10-3 Problematik beim rekursiven Löschen. Durch eine Dreiecksbeziehung kann es vorkommen, dass ein Eintrag doppelt gelöscht werden soll (#6,#7). Dies führt zu einem Programmabsturz.

Der beschriebene Fall kommt äußerst selten vor. Nichts desto trotz muss der Fehler verhindert werden, weil ansonsten ein stabiler Programmablauf nicht gewährleistet werden kann. In der Implementierung wird der Fehler verhindert, indem beim Löschen eines Elementes zuvor beim vorherigen Element eine Markierung gesetzt wird, ob dessen Nachfolger schon gelöscht wurde. Vor dem Löschen eines Elementes muss geprüft werden, ob der Nachfolger noch existent ist.

10.4.2 Inkontinenz – Fall 2: Konzeptfehler in Löschroutine

Wie in Kapitel 8.3.3 beschrieben, wird die Simulation als inkontinent bezeichnet, wenn die Kugeln die Systemgrenze verlassen. In Kapitel 5.3 wurde der Löschvorgang in einer klassischen Implementierung erläutert, welches im Grund genommen das identische Ergebnis wie in dieser Implementierung liefert: Ungültige Ereignisse werden sofort gelöscht. Der Fallstrick der klassischen Implementierung aus Kapitel 5.3, soll hier kurz wiederholt werden: Es kann vorkommen, dass für eine Kugel alle Ereignisse nach dem aktuellen Ereignis gelöscht werden. In Abbildung 10-4 wurden ab dem aktuellen Ereignis, bei „1.71“, alle Ereignisse für die rote Kugel gelöscht. Da die Simulationszeit weiter voranschreiten wird und kein Ereignis für die rote Kugel mehr vorhanden ist, für welches ein Nachfolgeereignis bestimmt werden würde, wird die rote Kugel ihre Flugrichtung beibehalten und die Systemgrenze verlassen (Abbildung 10-4 links).

Die Implementierung der Löschroutine prüft, ob der Zeitstempel des letzten Eintrags in einer LEL kleiner als die aktuelle Zeit ist. Sollte dieser Fall nach dem Löschen auftreten, wird von der Löschroutine eine Neuberechnung des Nachfolgeereignisses für die entsprechende Kugel veranlasst. Das Ergebnis einer solchen Neuberechnung ist i.d.R. eine Kugel-Wand Kollision. Wie in Abbildung 10-4 links dargestellt, würde die rote Kugel mit der Wand kollidieren.

Es ist unwahrscheinlich, dass anderen Autoren dieser, zugegeben selten vorkommende, Fehler nicht aufgefallen ist. Einzig PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) erwähnen, dass ihre Implementierung in regelmäßigen Abständen die Konsistenz des System prüft, und im Fehlerfall die Simulation auf eine zuvor gespeicherten Position zurückgesetzt wird. Auf diese Weise wird wieder für jede einzelne Kugel ein Nachfolgeereignis bestimmt.

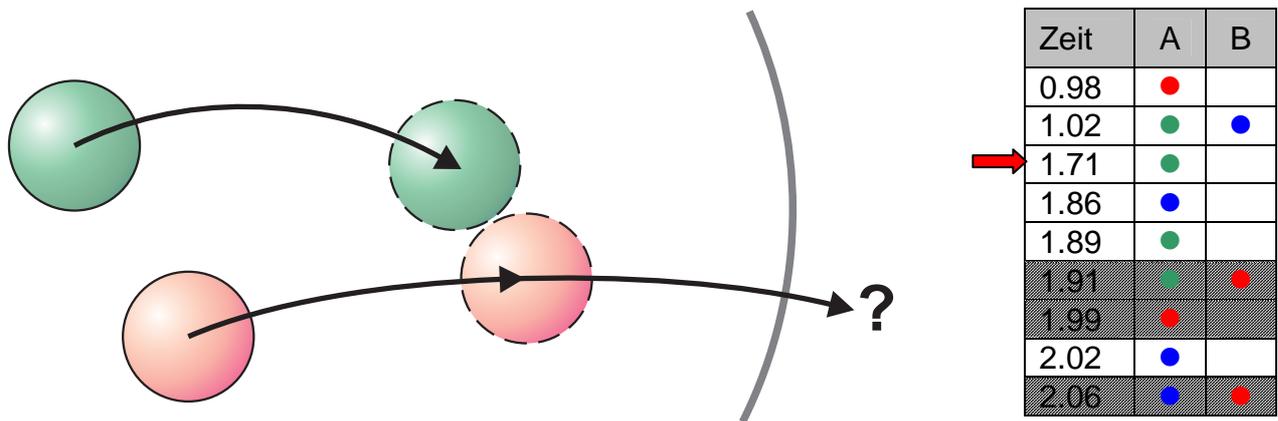


Abbildung 10-4 Die rote Kugel sollte zum Zeitpunkt „1.91“ mit der grünen Kugel kollidieren. Dieses Ereignis wurde gelöscht. Für die rote Kugel existiert kein Ereignis mehr nach dem aktuellen Ereignis (1.71; roter Pfeil). Die Simulationszeit wird von Ereignis zu Ereignis fortschreiten, doch für die rote Kugel wird kein neues Ereignis generiert. Folglich behält sie ihre Flugrichtung bei und wird das System verlassen.

Üblichen Konsistenzprüfungen, bei welchen die Summe der kinetischen und potenziellen Energien konstant sein muss, bleibt der o.g. Fehler verborgen. Bei ereignisdiskreten Simulationen, die in jeder Simulationsschleife alle Kugeln gegen alle testet, kann der o.g. Fehler nicht auftreten.

10.4.3 Löschen nach Speichern

Die Kollisionseignisse können nicht alle im Hauptspeicher gehalten werden. Folglich müssen in regelmäßigen Abständen abgearbeitete Ereignisse gespeichert werden. Alle Ereignisse vor dem aktuellen Ereignis können gespeichert und gelöscht werden. In einem solchen Fall darf allerdings nicht die „normale“ Löschroutine aufgerufen werden, da ansonsten alle nachfolgenden Ereignisse ebenfalls gelöscht werden würden.

Das Speichern und Löschen der Ereignisse hat außerdem den Vorteil, dass die Ereignislisten kurz bleiben, was der Rechenzeit zu Gute kommt, denn die Komplexität der Grundoperationen Suchen, Löschen und Einfügen ist abhängig von der Anzahl der Einträge in der Datenstruktur.

11. Partitionierung

Partitionierung bedeutet das Simulationsgebiet zu unterteilen, um die Anzahl der Berechnungen für die Kugel-Kugel-Kollisionen zu reduzieren. Üblicherweise wird das Simulationsgebiet in Würfel oder Quadrate eingeteilt. Dieses Verfahren wurde bereits von anderen Autoren entwickelt und erfolgreich eingesetzt (siehe Kapitel 5.4).

Da der Geschwindigkeitsvektor der Kugeln eine Vorzugsrichtung hat (siehe Kapitel 7.1) wurden im Rahmen dieser Arbeit spezielle Geometrien für die Zellen gewählt und außerdem das Zellenzugehörigkeitsverfahren und der dazugehörige Algorithmus verbessert. Die Einteilung in Zellen dient nicht zur Parallelisierung der Simulation, sondern nur dazu, die Nachbarschaft der Kugeln einzuschränken, um die Rechenzeiten auf einem Prozessor zu verbessern. Die Simulation dient später zu verteilten Variationsstudien auf einem Rechencluster.

11.1 Sektoren

In den Experimenten mit der transparenten Mahleinheit (siehe Kapitel 7.1) wurde das Bewegungsverhalten der Kugeln beim Betrieb mit produktionsüblichen Drehzahlen untersucht. Es wurde beobachtet, dass sich die Kugeln, aus der Frontalansicht betrachtet, auf Kreisbahnen in den äußeren Regionen der Mahleinheit bewegen. Der Schluss liegt nahe, die Form der Zellen nicht als Würfel, sondern als Sektoren zu gestalten (Abbildung 11-1).

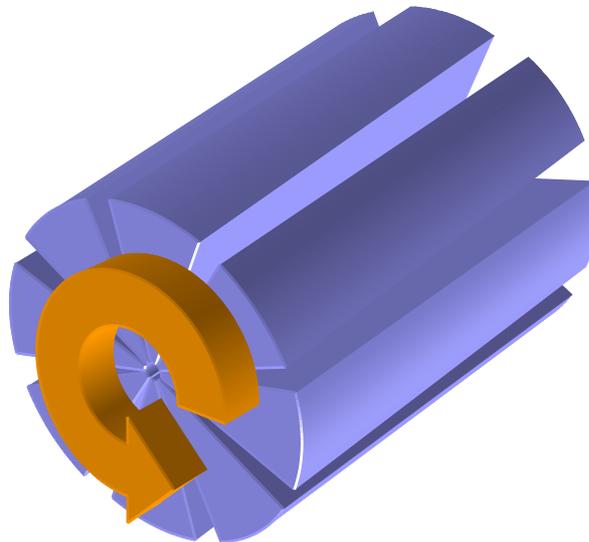


Abbildung 11-1 Einteilung der Mahleinheit in Sektoren. Die Kugeln bewegen sich kreisförmig durch die Sektoren.

Ferner wurde durch die Beobachtungen mit der Hochgeschwindigkeitskamera festgestellt, dass Kugeln sich äußerst selten in der Mitte der Mahleinheit aufhalten. Die zur Achse hin enger werdenden Grenzen der Sektoren tragen dem Rechnung. Ein Sektorwechsel wird durch die x- und z-Koordinate einer Kugel bestimmt. Die Zylinderkoordinaten einer Kugel lassen sich direkt einem Sektor zuordnen. Die Kreisbahn der Kugeln hat

jedoch viele Sektorwechsel zur Folge, welche ihrerseits wieder administrativen Aufwand bei der Umbuchung von einem Sektor in den nächsten bedeuten.

Nahe liegend ist daher, die Sektoren mitrotieren zu lassen. Folgende zwei Ansätze erscheinen logisch:

- Die Sektoren rotieren mit der gleichen Geschwindigkeit wie die Rotoren. Auf diese Weise würde eine Rotorspitze immer einem Sektor zugeordnet werden.
- Die Sektoren rotieren mit der durchschnittlichen Umfangsgeschwindigkeit der Kugeln. Auf diese Weise werden die Sektorwechsel für einen Großteil der Kugeln reduziert.

Die genaue Analyse der Hochgeschwindigkeitsaufnahmen zeigt jedoch, dass die Rotorgeschwindigkeit erheblich von der durchschnittlichen Umfangsgeschwindigkeit der Kugeln abweichen kann (siehe Kapitel 7.1.2). Außerdem sind zur Berechnung der durchschnittlichen Kugelgeschwindigkeit regelmäßige Geschwindigkeitsmessungen notwendig.

Da die beschriebenen Verfahren der Sektoreinteilung die genannten Nachteile bei der Implementierung aufweisen, wurde davon Abstand genommen Sektoren als Zellform zu wählen und ein anderes Verfahren gesucht.

11.2 Scheiben

Die Analyse des Bewegungsverhaltens von Mahlkugeln, aus Sicht in Wellenrichtung und senkrecht zur Welle, haben ergeben, dass die Kugeln sich einerseits auf Kreisbahnen bewegen, andererseits die Geschwindigkeit in axialer Richtung gering ist (siehe Kapitel 7.1.3). Für die Implementierung wurde daher die Einteilung des Systems in Scheiben gewählt (siehe Abbildung 11-2). Der Scheibenwechsel einer Kugel wird allein durch deren y-Koordinate bestimmt. Die kreisförmige Bewegung findet hauptsächlich innerhalb der Scheiben statt, so dass Scheibenwechsel, verglichen mit Kollisionen, seltene Ereignisse sind.

Außerdem bietet das Verfahren der Einteilung in Scheiben gegenüber der Einteilung in Sektoren den Vorteil, dass Kugeln maximal zwei Scheiben angehören. Bei Sektoren würde eine Kugel im Zentrum allen Sektoren gleichzeitig angehören, weil sich ihre räumliche Dimension in alle Sektoren erstreckt.

Ein weiterer Vorteil der Scheibeneinteilung ist, dass Rotoren nur vorher festgelegten Scheiben angehören. In den anderen Scheiben kann auf die Kugel-Rotor Kollisionsprüfung verzichtet werden, weil kein Rotor vorhanden ist.

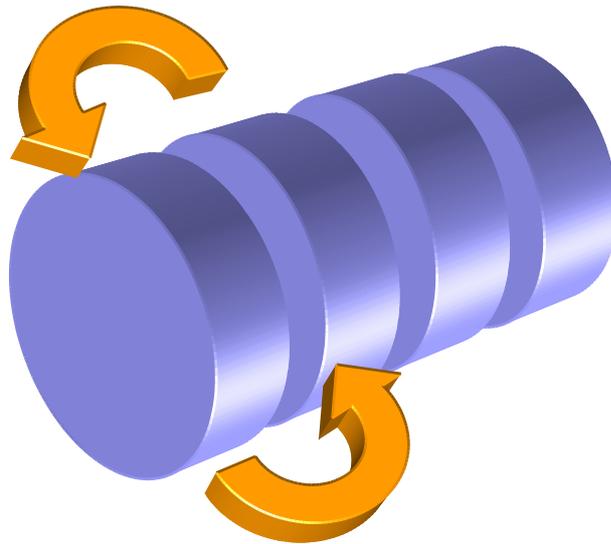


Abbildung 11-2 Einteilung der Mahleinheit in Scheiben. Die Kugeln bewegen sich hauptsächlich innerhalb der Scheiben und Wechsel sind selten. Nur die Kugeln derselben Scheibe werden auf Kollision geprüft.

11.3 Scheibenwechsel und –Zugehörigkeit

Das klassische Zellverfahren übernehmend, gehören Kugeln der eigenen Scheibe und den beiden Nachbarscheiben an, weil in der Randzone einer Scheibe der Mittelpunkt der Kugel zwar zu einer Scheibe gehört, sich ihre räumliche Dimension jedoch bis auf die Nachbarscheibe erstreckt. Im Fall von Quadraten als Zellform wurde dies bereits in Kapitel 5.4 erläutert. Abbildung 11-3 zeigt die Scheibenzugehörigkeit einer nach rechts fliegenden Kugel nach dem klassischen System. Die Kugel gehört der Zelle an, in welcher ihr Zentrum liegt und zusätzlich den beiden Nachbarzellen links und rechts. Bei einem Zellwechsel in eine der Nachbarzellen (nach rechts), wird die Zugehörigkeit geändert. Die Kugel wird aus der alten Nachbarzelle ausgebucht und die neue Nachbarzelle eingebucht. Kollisionserkennungen werden nach dem klassischen System immer in den drei Zellen durchgeführt, denen die Kugel zugeordnet ist.

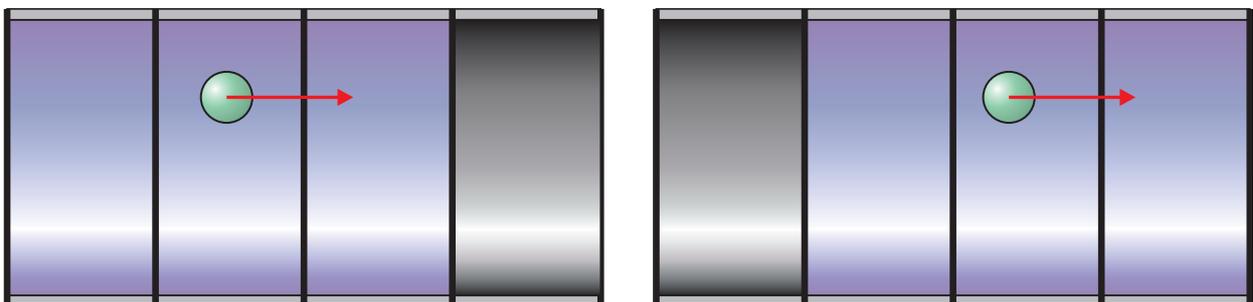


Abbildung 11-3 Bei der Einteilung der Mahleinheit in Scheiben ist eine Kugel, analog zum klassischen Verfahren, auch den beiden Nachbarscheiben zugeordnet. Beim Zellwechsel wird die Kugel aus der alten Nachbarzelle ausgebucht und in die neue Nachbarzelle eingebucht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neues Verfahren entwickelt, welches die Zellen um den Durchmesser der größten Kugel überlappen lässt. Abbildung 11-4 zeigt links die klassische Zellform mit den klar abgetrennten Zellen und rechts die neue Zellform mit

den überlappenden Zellen. Die beiden Scheiben am Rand haben ein kleineres Volumen, als die Scheiben in der Mitte, weil die Kugel nicht über die Systemgrenze links und rechts hinaus kann.

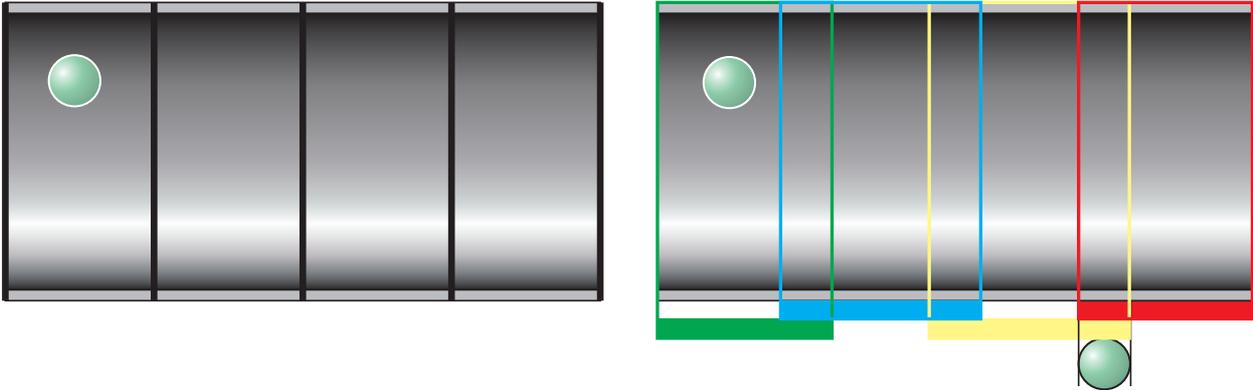


Abbildung 11-4 Links: klassisches System. Die Zellen sind klar getrennt. Rechts: Neues System. Die Zellen überlappen sich um den Durchmesser der größten Kugel.

Das neue Verfahren hat den Vorteil, dass eine Kugel meistens nur einer Zelle angehört und nur im Überlappungsbereich beider Zellen angehört. Zu welcher Zelle eine Kugel gehört, wird von deren Mittelpunkt, also deren Positionsvektor, bestimmt.

Wenn die Mahleinheit der Länge l nach dem klassischen System (Abbildung 11-4 links) in S_{max} Scheiben unterteilt wird, dann befindet sich eine Kugel mit der y -Komponente ihres Positionsvektors \vec{r} in der Scheibe S .

$$S = \text{floor}\left(\bar{r}_y \frac{S_{max}}{l}\right) + 1 \quad \text{für } 1 \leq S \leq S_{max} \quad (11-1)$$

Die axiale Position der linken (in Richtung Ursprung) Grenze G_L dieser Scheibe S und die der rechten Grenze G_R berechnen sich wie folgt:

$$G_R = S \frac{l}{S_{max}} \quad G_L = (S-1) \frac{l}{S_{max}} \quad (11-2)$$

Nach dem neuen Verfahren befindet sich die Kugel unter gleichen Bedingungen auf jeden Fall ebenfalls in der Scheibe S . In den sich um d_{max} überlappenden Randbereichen kann Sie aber ebenfalls zu einer der beiden Nachbarscheiben S_+ gehören.

$$S_+ = \begin{cases} S-1 & \text{falls } \left(\bar{r}_y \leq \left(G_L + \frac{d_{max}}{2}\right)\right) \wedge (S > 1) \\ S+1 & \text{falls } \left(\bar{r}_y \geq \left(G_R - \frac{d_{max}}{2}\right)\right) \wedge (S < S_{max}) \\ \text{sonst nicht definiert} & \end{cases} \quad (11-3)$$

Die rechten der beiden logischen UND-Verknüpfungen bei den Bedingungen in Gleichung (11-3) prüfen die Ränder der Mahleinheit, weil jenseits der Ränder keine Schei-

ben mehr existieren. Die linken der beiden logischen UND-Verknüpfungen prüfen, ob die aktuelle Position der Kugel innerhalb der Überlappungszone liegt. Zu beachten ist, dass weder die eine noch die andere Bedingung in Gleichung (11-3) erfüllt ist, wenn die Kugel sich inmitten einer Scheibe befindet. In diesem Fall ist S_+ nicht definiert, weil auch keine Nachbarscheibe berücksichtigt werden muss. Gleichung (11-3) ist wichtig bei der ersten Positionierung der Kugeln in der Trommel, um die Zugehörigkeit zu den Scheiben zu initialisieren. Während der Simulation ist außer der Position auch die Flugrichtung zu beachten. Dieses Detail wird im folgenden Abschnitt erklärt.

11.4 Virtuelle Ereignisse

Durch Einführung der Partitionierung ist es bei der Implementierung wichtig zu unterscheiden, ob eine Kugel in eine Kollision involviert ist, oder ob eine Kugel von einer Scheibe zur nächsten wechselt. Es muss zwischen den realen und virtuellen Ereignissen unterschieden werden:

- *Reales Ereignis*: Die Kollisionen einer Kugel stellen reale bzw. physikalische Ereignisse dar, z.B. Kugel-Kugel oder Kugel-Rotor (siehe Objektklassen in Kapitel 8).
- *Virtuelles Ereignis*: Die Wechsel von einer Scheibe in die nächste stellen virtuelle Ereignisse dar. Die Kugel ändert Ihre Flugrichtung nicht. Zum Kollisionszeitpunkt mit der Scheibe sind lediglich administrative Umbuchungen notwendig.

Zur Verwaltung der Kugeln in den Scheiben wird für jede Scheibe eine eigene Mitgliedsliste geführt. Die Datenstruktur dieser Mitgliedslisten ist die gleiche, wie bei den LELs (siehe Kapitel 10.3). Eine Mitgliedsliste enthält nur eindeutige Schlüssel, keine Datenelemente. Als Schlüssel dient der Index der Kugel. Eine Kugel darf in allen Mitgliedslisten maximal zweimal vorkommen, und dies auch nur bei benachbarten Scheiben.

Durch die virtuellen Ereignisse werden in der Ereignisverwaltung zwei neue Ereignisarbeiten eingeführt:

- *Check-In* bedeutet, dass eine Kugel zum Mitglied einer bestimmten Scheibe wird. Die Ereignisverwaltung muss zur angegebenen Kollisionszeit mit der virtuellen Wand der Scheibe den Index der Kugel in der Mitgliedsliste der betroffenen Scheibe hinzufügen.
- *Check-Out* bedeutet, dass eine Kugel die Scheibe verlässt und daher nicht mehr zur Gruppe der Kugeln in dieser Scheibe gehört. Die Ereignisverwaltung muss zur angegebenen Kollisionszeit mit der virtuellen Wand der Scheibe den Index der Kugel auf der Mitgliedsliste der betroffenen Scheibe entfernen.

Eine Kugel wechselt während des Flugs durch die Mahleinheit ständig zwischen Doppel- und Einzel-Mitgliedschaft. Neben der Flugrichtung ist auch die Position (Rechts, Mitte, Links) der Kugel innerhalb der Scheibe für den Wechsel einer Mitgliedschaft ent-

scheidend. Abbildung 11-5 zeigt dies an drei Beispielen. Die rote und die grüne Kugel befinden sich beide sowohl in der blauen als auch in der benachbarten gelben Scheibe. Das Vorzeichen der axialen Komponente der Geschwindigkeit bestimmt, aus welcher Scheibe die Kugeln ausgebucht werden muss. Die grüne Kugel fliegt nach rechts und muss folglich aus der linken der beiden Scheiben (blau) ausgebucht werden, wenn ihr Mittelpunkt am rechten Rand der linken Scheibe angekommen ist. Die rote Kugel fliegt nach links und muss daher aus der rechten Scheibe ausgebucht werden. Die blaue Kugel ist z.Z. nur Mitglied der blauen Scheibe, fliegt nach links und wird auch Mitglied der linken Scheibe, wenn ihr Mittelpunkt deren rechten Rand berührt.

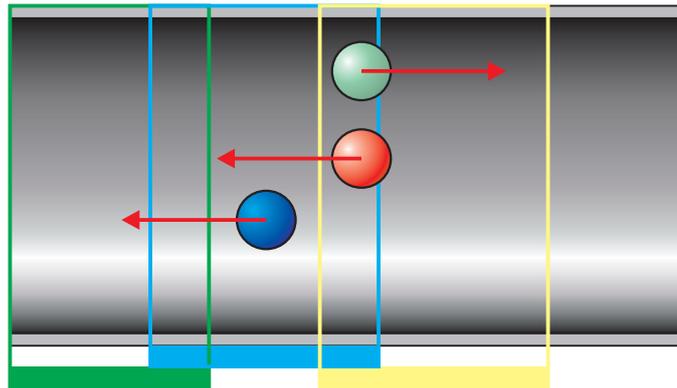


Abbildung 11-5 Die grüne und die rote Kugel haben eine Doppel-Mitgliedschaft (blau/gelb). Beide Kugeln werden in den Kernbereich einer Scheibe eintreten. Die Kugel muss dann aus der Scheibe entgegengesetzt zur Flugrichtung ausgebucht werden. Die blaue Kugel hat eine Einzel-Mitgliedschaft (blau). Die Flugrichtung bestimmt die Scheibe für die Doppel-Mitgliedschaft.

Die Randbereiche müssen gesondert abgefragt werden, weil es an der linken und rechten Wand keine Doppelmitgliedschaft geben kann.

11.5 Notwendige Kollisionsprüfungen

Durch die Partitionierung ist es nicht mehr notwendig in jedem Stadium alle Kollisionsklassen zu prüfen. Die folgende Auflistung erläutert die drei wichtigsten Stadien der Bewegung einer Kugel durch die Scheiben der Trommel. Die notwendigen Kollisionsprüfungen beschränken sich in den einzelnen Stadien auf folgende Kollisionsklassen

- Einzel-Mitgliedschaft: Die Kugel fliegt in Richtung der nächsten Scheibe, folgerichtig muss der Zeitpunkt des nächsten virtuellen Ereignisses errechnet werden. Außerdem werden die Kugel-Kugel Kollisionszeitpunkte gegen die Kugeln der eigenen Scheibe (grün) berechnet. Die Kugel-Rotor Kollisionserkennung ist nur notwendig, wenn auch ein Rotor in dieser Scheibe vorhanden ist. Die Kugel-Systemgrenze Kollision wird in jedem Fall ausgeführt und kann auch einen Kollisionszeitpunkt liefern, welcher einer Position in einer anderen Scheibe entspricht.
- Beginnende Doppel-Mitgliedschaft: Die Kugel-Kugel Kollisionserkennung gegen die Kugeln in der neuen Scheibe muss durchgeführt werden. Ebenfalls muss die

Kugel-Rotor Kollisionserkennung für Rotoren in der neuen Scheibe durchgeführt werden. Abschließend muss der Zeitpunkt des virtuellen Ereignisses bestimmt werden, an welchem die Doppel-Mitgliedschaft endet und wieder die Einzelmitgliedschaft beginnt.

- Endende Doppel-Mitgliedschaft: Es muss alleinig geprüft werden, wann die Einzel-Mitgliedschaft endet. Alle anderen Kollisionsprüfungen sind schon durchgeführt worden.

Die durchzuführenden Kollisionsprüfungen sind in Tabelle 11-1 dargestellt. Alle Kollisionsprüfungen müssen durchgeführt werden, wenn eine Kugel-Kugel Kollision im Überlappungsbereich der Scheiben stattfindet.

Mitgliedschaft	Kugel Scheibe 1	Kugel Scheibe 2	Systemgrenze	Rotor	Scheibenwechsel
Einzel	✓		✓	✓	✓
Doppel beginnend		✓		✓	✓
Doppel endend					✓

Tabelle 11-1 Übersicht zu notwendigen Kollisionsprüfungen bei den drei verschiedenen Stadien der Mitgliedschaft einer Kugel in einer Scheibe.

12. Visualisierung

Weil durch die Simulation von 5000 Kugeln bei einer Drehzahl von 1500 rpm für eine Sekunde Betriebsdauer ca. 2 GByte Daten produziert werden, ist gerade die Visualisierung der Bewegungsabläufe eine geeignete Art der Datenrepräsentation. Weiterhin ist es in einer Computeranimation möglich das Augenmerk auf bestimmte Daten zu lenken, indem etwa die Geschwindigkeit der Kugeln farbkodiert dargestellt wird.

Die Visualisierung der Simulationsergebnisse spielte sowohl bei der Entwicklung des Algorithmus als auch bei der Analyse der Parameterstudien eine wichtige Rolle. Videos der Hochgeschwindigkeitskamera von der transparenten Mahleinheit verglichen mit der Animation der Kugeln, basierend auf der Simulation, sind ein wichtiger Bestandteil der Verifizierung und Validierung des Simulators.

In der frühen Entwicklungsphase war *MATLAB*[®] sehr geeignet die Daten zu visualisieren (Kapitel 12.1). Für viele Kugeln ($n > 300$) ist das Laufzeitverhalten jedoch vollkommen unbefriedigend. Um photorealistische Darstellungen, welche auch Spiegelung und Schatten richtig wiedergeben, zu berechnen, wird das Programm *POV-Ray* eingesetzt (Kapitel 12.2). Allerdings müssen Betrachtungswinkel, Szenenbeleuchtung und materialspezifische Reflexion im Vorfeld in mehreren Iterationsstufen eingestellt werden. Die Generierung der einzelnen Bilder ist sehr rechenintensiv. Für den interaktiven Eingriff in den Betrachtungswinkel und die selektive Anzeige der Kugeln wurde im Rahmen einer Projektarbeit ein Programm entwickelt, welches die Simulationsdaten mit *OpenGL* visualisiert (Kapitel 12.3).

Der ereignisdiskrete Simulator erzeugt eine Textdatei, welche die relevanten Raum-Zeit koordinaten und die dazugehörigen Geschwindigkeitsvektoren der Kollisionsereignisse beinhaltet. Alle drei genannten Verfahren müssen die Positionen der Kugeln zu einem vorgegebenen Zeitpunkt t_{Bild} entsprechend der Bildfrequenz bestimmen, um sie anzeigen zu können. Für jede Kugel muss folglich die Position \vec{r} und die Geschwindigkeit \vec{v} zu diesem Zeitpunkt t_{Bild} , ausgehend vom letzten Kollisionsereignis t_E , berechnet werden.

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}_E + \vec{v}_E \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \vec{g} \cdot (\Delta t)^2 & \text{mit} & \quad \Delta t = t_{Bild} - t_E \\ \vec{v} &= \vec{v}_E + \vec{g} \cdot \Delta t \end{aligned} \quad (12-1)$$

12.1 Visualisierung mit MATLAB

Die ersten Versionen der ereignisdiskreten Simulation wurden in MATLAB implementiert und die Ergebnisse ebenfalls mit MATLAB visualisiert, weil die Daten nach Simulationsende schon im Hauptspeicher vorhanden waren. MATLAB bietet die Möglichkeit die Oberflächen von Körpern aus geschlossenen Polygonen zusammen zu setzen (*patches*). Die Grundkörper, wie Kugeln oder Zylinder, sind daher immer aus Flächen, wie

Dreiecken oder Rechtecken aufgebaut. Abbildung 12-1 zeigt eine Simulation mit 350 Kugeln zum Zeitpunkt $t = 2,16$ Sekunden. Die Zylinder sind aus jeweils 50 koaxialen Rechtecken aufgebaut. Die Kugeln bestehen aus jeweils 20 Dreiecken. Die dem Betrachter zugewandten Flächen des äußeren Zylinders wurden entfernt. Die Berechnungszeit eines dieser Bilder beträgt auf einem Computer mit einem Pentium 4 Prozessor mit 1.8 GHz ca. 6 Sekunden. Die Rechenzeit (ohne Visualisierung) von 350 Kugeln bei 1000 rpm beträgt für eine Sekunde Simulationszeit mit MATLAB ca. eine Stunde.

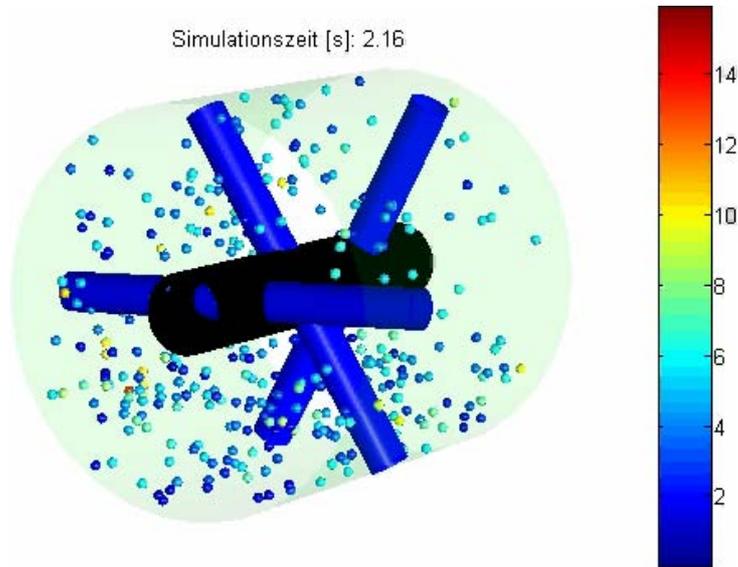


Abbildung 12-1 Visualisierung des Prozesses mit MATLAB. Es wurden 350 Kugeln mit drei Rotoren farb-kodiert dargestellt. Die Farbskala gibt die Kugelgeschwindigkeit in m/s an.

Eine weiter wichtige Visualisierung mit Hilfe von MATLAB besteht in der Animation besonderer Konstellationen von ereignisdiskreten Simulationen, um das Vorgehen des Algorithmus nachvollziehen zu können. Allein anhand der Ereignisliste ist es nicht möglich ohne weitere Hilfsmittel die augenblickliche Situation einzuschätzen. Abbildung 12-2 zeigt die Position und die Flugbahnen zweier Kugeln (Standbild einer Animation). Die durchgezogene Linie ist die Vergangenheit, die strichpunktierte Linie die Zukunft, die Länge der Linien entsprechen einer konstanten Zeitdifferenz. Die dick umrandete rote Kugel stellt das aktuelle Kugel-Wand Ereignis dar.

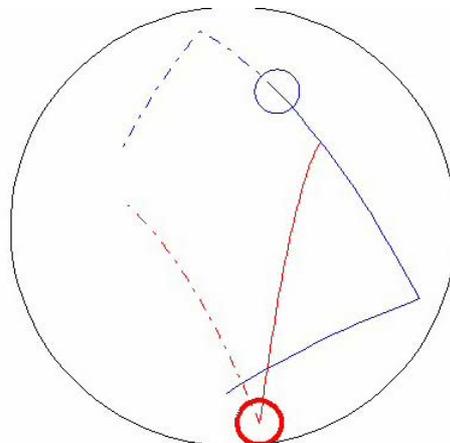


Abbildung 12-2 Visualisierung zweier Kugelflugbahnen (Standbild einer Animation). Die durchgezogenen Linie ist die Vergangenheit, die strichpunktierte Linie die Zukunft. Die rote Kugel stellt das aktuelle Ereignis dar.

12.2 Photorealistische Darstellung

Die photorealistischen Videofilme wurden mit dem Programm *POV-Ray* (Persistence of Vision Ray-Tracer) berechnet. Diese Filme wurden bei der Analyse von Simulationen häufig eingesetzt, sind jedoch nicht druckbar. *POV-Ray* berechnet dreidimensionale, photorealistische Bilder indem es eine Rechentechnik namens „Ray-Tracing“ verwendet. Beim Ray-Tracing werden die zum Betrachtungspunkt kommenden Lichtstrahlen bis zur Lichtquelle zurückverfolgt. Lichtbrechungen und -Reflexionen durch Objekte im Raum werden physikalisch korrekt berechnet.

Dem Programm *POV-Ray* muss für jedes Einzelbild eine Textdatei bereitgestellt werden, welche die Informationen über die Objekte, deren Materialeigenschaften (Farbe, Transparenz, Oberfläche), die Lichtquellen und die Kameraposition enthält.

Für die Visualisierung wurden mit Hilfe der von *POV-Ray* unterstützten Makro Programmiersprache einige Funktionen für die Darstellung der Bauteile (Trommel, Rotoren, Welle) programmiert. Den Funktionen können Parameter für die Größe, Position und Rotation im Raum übergeben werden.

Die Textdateien für die Visualisierung werden während der Simulationszeit in Abhängigkeit von der vorgegebenen Bildfrequenz erzeugt. Jede dieser Textdateien referenziert auf eine zentrale Textdatei, welche die Funktionen für die Bauteile, Informationen über den Betrachtungswinkel und die Beleuchtung der Szene enthält. Auf diese Weise können Videosequenzen aus verschiedenen Perspektiven und in unterschiedlichen Qualitätsstufen erstellt werden, ohne die Simulation neu starten zu müssen, indem in der zentralen Textdatei etwa die Position und der Blickwinkel der Kamera geändert werden.

Abbildung 12-3 links zeigt eine Mahlkammer mit fünf Rotoren ohne Kugeln. Rechts sind zusätzlich die Kugeln mit farbkodierter Geschwindigkeit dargestellt. Das Farbspektrum endet bei 110 % der Umfangsgeschwindigkeit des Rotors.

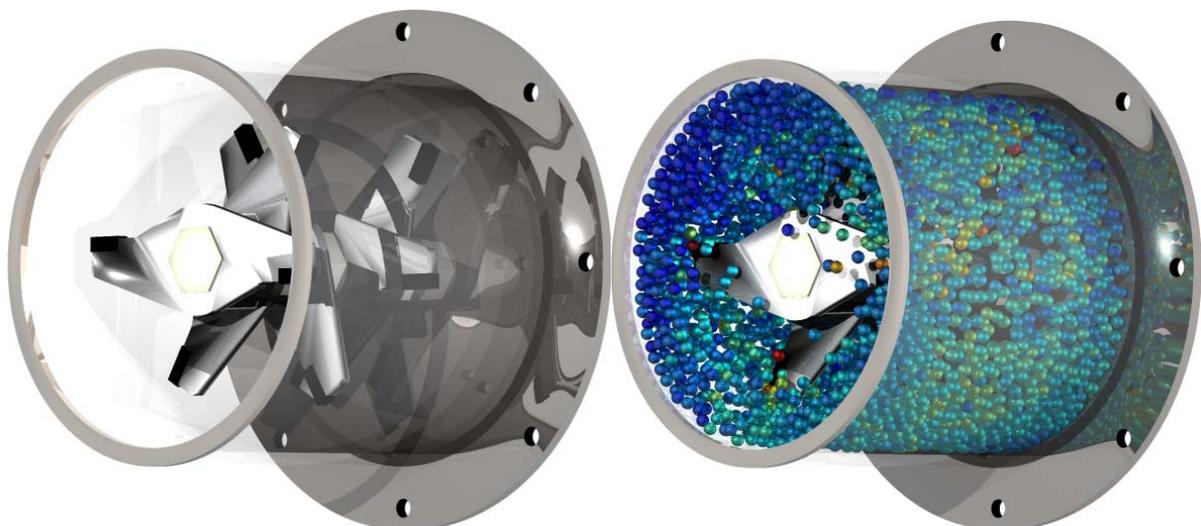


Abbildung 12-3 Photorealistische Darstellung. Die Geschwindigkeit der Kugeln ist farbkodiert.

Zusätzlich zu den Textdateien für die Bildszene wird ein Linux-Skript erzeugt, mit welchem die einzelnen Berechnungen über ein Warteschlangensystem auf die Prozessoren des Rubens-Cluster (technische Daten siehe Anhang B) verteilt werden können. Die Berechnung von 2000 Bildern würde auf einem einzigen Knoten des Clusters ca. 2,7 Tage dauern. Durch verteiltes Rechnen verkürzt sich die gesamte Rechenzeit auf ca. 20 Minuten. Nach der Berechnung der Einzelbilder werden diese zu einem komprimierten Film zusammengesetzt.

12.3 Visualisierung mit OpenGL – MillVis

Im Rahmen einer Projektarbeit wurde ein Programm *MillVis* (Ball-Mill-Visualization) zur Visualisierung der Simulationsdaten entwickelt (Droste et al., 2005). Das Programm wurde in C++ geschrieben und nutzt zur Anzeige der Mahlkammer die OpenGL Fähigkeit der Grafikkarte.

Über einen der Menüpunkte können die Simulations- und Betriebsparameter der Simulation eingestellt und die Simulation gestartet werden. Anschließend wird aus den Ereignisdaten die Kugelposition zur vorher festgelegten Bildfrequenz errechnet.

Abbildung 12-4 zeigt die Benutzeroberfläche von MillVis.

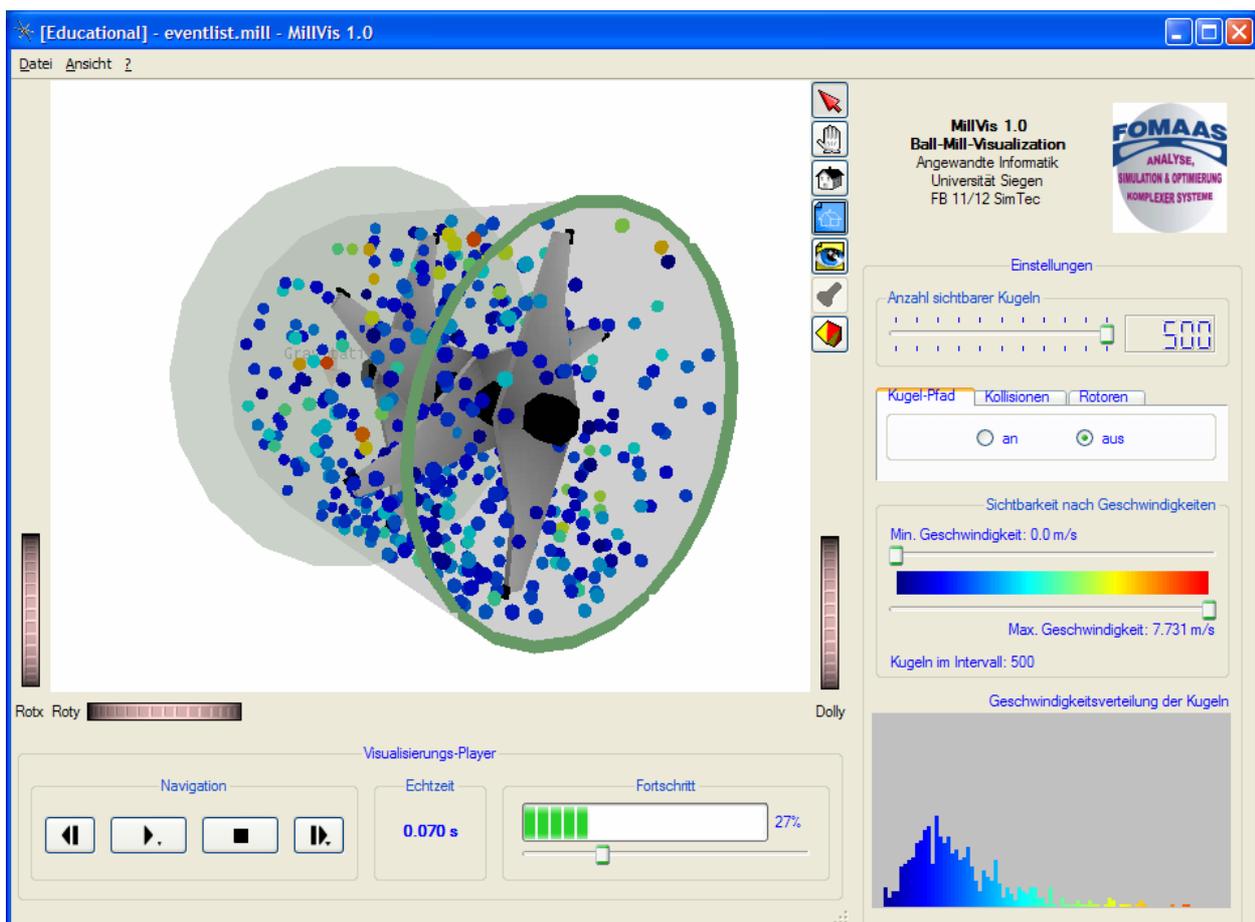


Abbildung 12-4 Screen-Shot des Programms MillVis 1.0. Die Mahlkammer kann während der Anzeige mit der Maus gedreht werden.

Neben der Möglichkeit den Betrachtungswinkel während der Animation frei einzustellen, verfügt das Programm auch über besondere Funktionen zur Analyse der Kugeln:

- Das Histogramm der Kugelgeschwindigkeiten wird während der Animation angezeigt.
- Über die Funktion „Sichtbarkeit nach Geschwindigkeit“ (Abbildung 12-4 rechts, Mitte) kann über zwei Schieberegler die Anzeige der Kugeln auf einen Teil des Geschwindigkeitsspektrums eingeschränkt werden.
- Die Anzahl der angezeigten Kugeln kann eingeschränkt werden.
- Eine Kugel kann eine „Leuchtspur“ hinter sich herziehen.
- Die Kollisionen können markiert werden.
- Die Anzeige der Rotoren kann unterdrückt werden.

Das Programm ist ein nützliches Werkzeug, verschiedene Betriebsparameter qualitativ zu analysieren.

13. Initialisierung und Stationarität

Bei allen hier durchgeführten Simulationsexperimenten müssen die Kugeln zum Zeitpunkt $t = 0$ s bereits alle im Innern der Mahlkammer überlappungsfrei positioniert sein. Außerdem muss die Geschwindigkeit jeder Kugel größer als Null sein wenn keine Gravitation vorhanden ist, weil sonst für diese Kugel der nächste Kollisionszeitpunkt nicht bestimmt werden kann. In diesem Kapitel wird das Verfahren vorgestellt, mit welchem die Kugeln unabhängig von den Parametern des Experiments initialisiert werden.

Neben der Initialisierung selbst, ist für die Auswertung der Simulationsdaten wichtig, dass die Daten erst dann verwendet werden, wenn das System seinen Anfangszustand „vergessen“ hat und seine statistischen Kenndaten sich nicht mehr ändern (*stationärer Zustand*). Die Simulationsergebnisse müssen zudem unabhängig von der Anfangssituation sein. Ein Teil der Rechenzeit wird folglich gebraucht, um den stationären Zustand zu erreichen.

In der Literatur werden einige Vorschläge für die Initialisierung von ereignisdiskreten Simulationen ähnlicher Systeme gemacht, die jedoch für diese Arbeit verworfen wurden. GAVRILOVA (2002) initialisierte die Kugeln in der dichtesten Packung mit einem parametrisierbaren Zwischenraum, indem der Radius der Kugeln für die Initialisierung vergrößert wurde. PÖSCHEL und SCHWAGER (2005) verwenden den Endzustand der letzten Simulation als Anfangszustand der nächsten. Den beiden simulierten Systemen ist gemeinsam, dass keine weiteren Hindernisse im Simulationsgebiet existierten. In der Hochenergiekugelmühle sind jedoch Rotoren, die verhindern, den Endzustand der letzten Simulation als Anfangszustand der nachfolgenden Simulation zu verwenden, bei welcher eventuell mehr Rotoren vorhanden sind, oder die Rotoren andere Durchmesser haben. Die gleichmäßige Anordnung der Kugeln in ihrer dichtesten Packung ist in einem zylindrischen Behälter mit Rotoren nicht trivial und für diese Arbeit auch nicht erforderlich, weil das Volumen der Kugeln nur einen geringen Anteil am Gesamtvolumen hat. In dieser Arbeit wurde daher ein Verfahren gewählt, welches die Kugeln im Mahlraum zufällig anordnet.

13.1 Gleichverteilung der Kugelpositionen

Eine Million gleichverteilter Zufallszahlen im Bereich zwischen Null und Eins $u_{[0,1]}$ wurden vom Zufallzahlengenerator *Mersenne Twister*, entwickelt von MATSUMOTO und NISHIMURA (2005, 1998), generiert. Aus diesen Zufallszahlen wurde sowohl der Quelltext für ein C++ Array als auch für einen MATLAB Vektor generiert, um unabhängig von der verwendeten Programmiersprache bzw. des C++ Compilers und unabhängig vom verwendeten Prozessor dieselben Zufallszahlen für die Initialisierung der Kugeln zu erhalten. Um unterschiedliche, aber wiederholbar definierte Anfangssituationen zu generieren, werden die Zufallszahlen ab einer parametrisierbaren Position innerhalb des Feldes verwendet. Die Periodenlänge der Zufallszahlen wurde größer als die Anzahl

der für die Initialisierung benötigten Zufallszahlen gewählt. Nach der Initialisierung verhält sich das System deterministisch, d.h. es werden keine weiteren Zufallszahlen benötigt.

Um die Kugeln im zylindrischen Raum gleichverteilt zu positionieren, bieten sich das *inverse Transformations-* oder das *Rejektionsverfahren* an (Ross, 1996):

- Beim Rejektionsverfahren⁷ wird für jede Kugel so lange eine im kartesischen Koordinatensystem gleichverteilte Position generiert, bis eine gültige Position innerhalb des Zylinders gefunden wurde (Abbildung 13-2 links).
- Beim inversen Transformationsverfahren⁸ wird die Gleichverteilung durch eine geeignete Funktion so umgestaltet, dass die Positionen im transformierten Koordinatensystem, hier Zylinderkoordinaten, gleichverteilt sind (Abbildung 13-2 rechts).

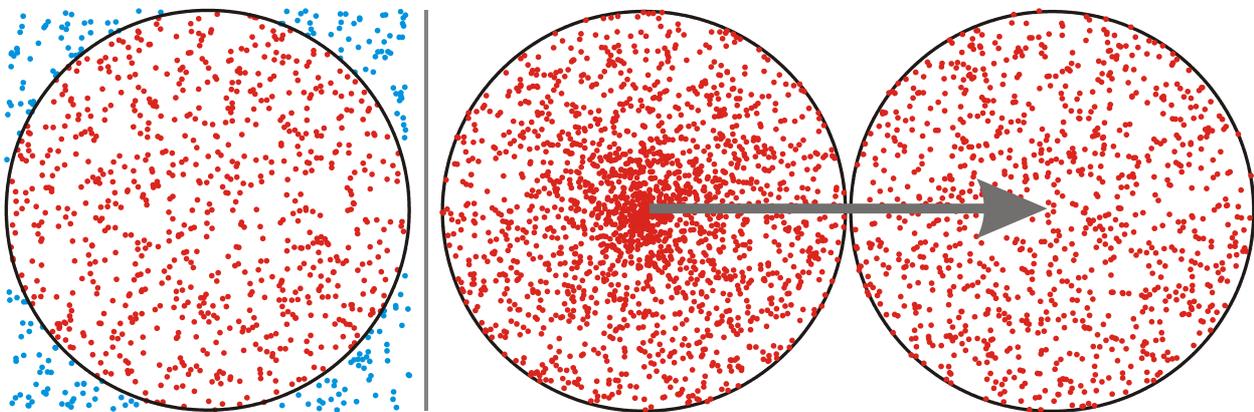


Abbildung 13-1 Jeweils 1000 Punkte. Links: Rejektionsverfahren. Die Koordinaten werden gleichverteilt bestimmt und geprüft, ob sie im Gültigkeitsbereich des Kreises liegen (rot). Rechts: Inverses Transformationsverfahren. Gleichverteilte Polarkoordinaten würden die Punkte bevorzugt innen positionieren. Durch inverse Transformation der Zufallszahlen für den Radius werden die Kugeln gleichverteilt auf der Kreisfläche positioniert.

Das inverse Transformationsverfahren hat den Vorteil gegenüber dem Rejektionsverfahren, dass nach der Generierung der zufälligen Position keine weiteren Kontrollen über die Gültigkeit der Position mehr erfolgen müssen, weil die generierte Position garantiert gültig und zugleich gleichverteilt ist.

Um (auf einer Kreisfläche) gleichverteilte Kugelpositionen in Zylinderkoordinaten zu generieren, werden zunächst drei gleichverteilte Raumkoordinaten für den Winkel $\tilde{\varphi}$, den Radius $\tilde{\rho}$ und die Länge \tilde{z} generiert:

$$\tilde{\varphi} = u_{[0,1]} \quad \tilde{\rho} = u_{[0,1]} \quad \tilde{z} = u_{[0,1]} \quad (13-1)$$

⁷ *reiectare* [lat.] = zurückwerfen

⁸ *transformare* [lat.] = umgestalten

Die Anzahl der Kugeln muss über dem Radius linear zunehmen, um die Positionen der Kugeln gleichmäßig auf der kreisförmigen Querschnittsfläche einer Trommel mit dem Durchmesser D zu verteilen. Außen sind pro Radiusintervall mehr Kugeln als Innen. Die Zufallszahlen für Radius-Koordinaten dürfen folglich nicht gleichverteilt sein, weil sich sonst eine Verteilung wie in Abbildung 13-1 Mitte ergeben würde. Stattdessen müssen die Zufallszahlen für die radiale Komponente eine linear ansteigende Wahrscheinlichkeitsdichte haben.

Die Transformation erfolgt mit Hilfe der inversen kumulierten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Ross, 1996). Zufallszahlen mit linear ansteigender Wahrscheinlichkeitsdichte werden somit generiert, indem die Quadratwurzel aus den gleichverteilten Zufallszahlen gezogen wird. Die gleichverteilten Zylinder-Koordinaten $\tilde{\varphi}$, $\tilde{\rho}$ und \tilde{z} werden für die Mahlkammer der Länge l und den Winkel φ der Zylinderkoordinate, unter Berücksichtigung des Durchmessers d der zu positionierenden Kugel, entsprechend skaliert. Somit ergeben sich die Zylinderkoordinaten für den Positionsvektor:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \rho \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \cdot 2\pi \\ \frac{1}{2}(D\sqrt{\tilde{\rho}} - d) \\ \frac{d}{2} + (\tilde{z} \cdot l - d) \end{pmatrix} \quad (13-2)$$

Nach der Positionierung einer Kugel wird kontrolliert, ob diese sich mit einer anderen, schon positionierten Kugel, oder einem der Rotoren überschneidet und ggf. das Verfahren wiederholt (Rejektionsverfahren). Auf die beschriebene Weise sind keine beliebigen Kugeldichten zu erreichen, weil die Wahrscheinlichkeit eine Lücke zu finden mit zunehmender Kugelanzahl gegen Null sinkt. Sollte der Algorithmus nach einem einstellbaren Schwellwert keine freie Position finden, wird die Simulation nach erfolgloser Initialisierung abgebrochen. Bei den hier vorkommenden Kugeldichten ist dies jedoch nie der Fall gewesen.

Für den Geschwindigkeitsvektor \vec{v} werden die beiden Winkel der Kugelkoordinaten gleichverteilt initialisiert. Der Betrag der Geschwindigkeit ist für alle Kugeln $v_{init} = 1$ m/s. Gleichung (13-3) zeigt die Generierung der gleichverteilten Winkel und die Umrechnung in kartesische Koordinaten.

$$\vec{v} = v_{init} \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cdot \cos(\varphi) \\ \cos(\theta) \cdot \sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \theta &= 2\pi \cdot u_{[0,1]} \\ \varphi &= \arcsin(1 - 2 \cdot u_{[0,1]}) \end{aligned} \quad (13-3)$$

Bei allen Simulationsexperimenten in dieser Arbeit wurden die Kugeln auf die beschriebene Art initialisiert. Abbildung 13-2 zeigt exemplarisch die gleichmäßige Anfangsverteilung von 3500 Kugeln in einer Mahlkammer mit 5 Rotoren. Die Geschwindigkeit der Ku-

geln ist farbkodiert. Entsprechend der einheitlichen Initialisierung der Geschwindigkeit mit v_{init} haben alle Kugeln dieselbe Farbe.

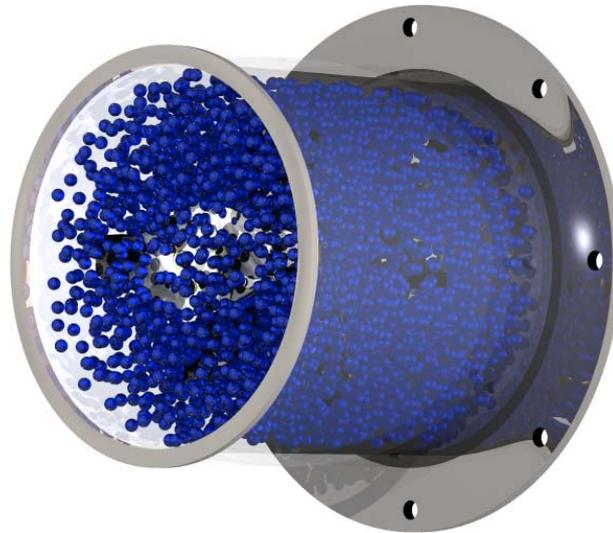


Abbildung 13-2 Die Kugeln (hier 3500 Stück) werden ohne Objektüberlappung gleichverteilt in der Mahl-einheit positioniert. Die Kugeln haben alle die gleiche absolute Geschwindigkeit, daher die gleiche Farbe.

13.2 Stationarität

Der stationäre Zustand der Simulation ist empirisch erreicht, wenn die Simulationsdaten unabhängig vom Anfangszustand sind und sich das Verhalten des Systems nicht mehr ändert. In Bezug auf die Hochenergiekugelmühle stellt sich jedoch die Frage, mit welchem Indikator dieser stationäre Zustand ermittelt werden kann. Es bieten sich verschiedene, im Endeffekt verworfene, Möglichkeiten an:

- Die vom Motor abgegebene Leistung bleibt konstant, bzw. schwankt um einen konstanten Wert. Die Motorleistung ist jedoch allein von den Kugel-Rotor Kollisionen abhängig. Würden sich alle Kugeln am Rand der Trommel befinden, träten für eine gewisse Zeit keine Kugel-Rotor Kollisionen mehr auf (siehe Kapitel 18.1). Die Leistung sinkt für diese Zeit auf konstant Null und würde fälschlicher Weise als stationärer Zustand interpretiert werden.
- Die Histogramme der Geschwindigkeitsverteilungen (Normalkomponente der Kollision, absolute Geschwindigkeit, eine der drei Geschwindigkeitskomponenten, etc.) werden in äquidistanten Zeitschritten verglichen. Als Indikator böte sich die Differenz der Fehlerquadratsumme an, welche unterhalb eines Schwellwertes liegen muss. Es hat sich jedoch gezeigt, dass bei langsamen Änderungen dieser Test nicht greift.
- Der Median (siehe Kapitel 16.3) der absoluten Geschwindigkeit dient als Indikator. Dieser Wert ist um einen zeitlich konstanten Wert verrauscht. Die zeitliche Ableitung der gefilterten Daten (Gauß- oder Medianfilter) sollte somit gegen Null konvergieren. Es hat sich jedoch gezeigt, dass die Filterparameter schwer zu

bestimmen sind und somit die Ableitung in Einzelfällen starke Schwankungen aufweisen.

- Von den Simulationen werden Animationen erstellt (siehe Kapitel 12.2) und nach visuellem Eindruck beurteilt, wann der stationäre Punkt erreicht wurde. In der Praxis hat sich dieses empirische Verfahren zwar bewährt, jedoch ist es sehr zeitintensiv. Die Simulation muss immer die POV-Ray Skripts generieren, was Rechenzeit kostet. Der komplette Rubens-Cluster wird zum Rendern der Einzelbilder in Anspruch genommen. Abschließend muss der Film angeschaut werden. Für eine Parametervariation oberhalb von etwa 10 Varianten ist dieses Prinzip nicht praktikabel. Ferner beruht die Bestimmung des stationären Punktes auf subjektiven Erfahrungswerten und ist somit wissenschaftlich gesehen „unseriös“, weil vom Betrachter abhängig und nicht in jedem Fall reproduzierbar.
- In der Literatur sind zu vergleichbaren ereignisdiskreten Simulationen Stationaritätsbedingungen formuliert. HERBST et al. (2004) haben in ihrer Simulation Partikel zwischen oszillierenden Wänden beobachtet. Der Indikator war in deren Simulation der zeitlich unabhängige Mittelwert (Mittelwert über alle Daten inkl. Initialposition) der kinetischen Energie. Dieser Mittelwert sollte sich ab dem stationären Punkt innerhalb einer Toleranzgrenze befinden, deren Wert nicht genauer spezifiziert wurde.

In der Evaluierungsphase wurden alle genannten Verfahren angewendet, um vergleichend mit der visuellen Beurteilung der Computeranimationen Rückschlüsse auf die Eignung der anderen Indikatoren zu erlangen. Es hat sich gezeigt, dass nach 0,2 Sekunden die Simulation im stationären Zustand ist. Abgesehen von einigen Ausnahmen, welche keine praktische Bedeutung haben, weil die gewählten Parameter realitätsferne Ergebnisse lieferten, hat sich dieser Wert als vertrauenswürdig erwiesen.

Die Auswahl eines allgemeingültigen Zeitpunktes für alle Simulationen hat entscheidende Vorteile:

- Bei konstanter Simulationsdauer von Parametervariationen betrachtet man immer dasselbe Zeitintervall und kann somit die Daten besser vergleichen.
- Die Rechenzeit für die Stationaritätsbestimmung entfällt.
- Die Simulationsdaten bleiben auf die für die Analyse relevanten Daten beschränkt, weil keine zusätzlichen Daten für die Stationaritätsbestimmung erhoben werden müssen.

Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen wurden folglich alle Daten erst nach 0,2 Sekunden verwendet. Als Stationaritätsvergleich dienen Diagramme der zeitlichen Entwicklung des verrauschten Medians der absoluten Geschwindigkeit, ähnlich zu dem Verfahren von HERBST et al. (2004).

13.3 Einfluss der Initialisierung auf die Simulationsergebnisse

Eine wichtige Frage bei der Initialisierung einer Simulation ist deren Einfluss auf das Erreichen der Stationarität und die Simulationsergebnisse. Im Idealfall ändert die Initialisierung nicht das Simulationsergebnis. Die Kugelpositionen werden nach dem eben beschriebenen Verfahren (Kapitel 13.1) gleichverteilt im Raum positioniert. Weder Änderungen an der zufälligen Position noch (realistische) Änderungen an der Anfangsgeschwindigkeit haben einen erkennbaren Einfluss auf den stationären Zustand des Systems.

Als „denkbar ungünstige“ Anfangskonfiguration wurden daher die Kugeln nur in einer Hälfte der Trommel positioniert. Diese Anfangskonfiguration ist speziell deswegen ungünstig, weil sich die Kugeln hauptsächlich kreisförmig um die Achse bewegen und im stationären Zustand eine geringe axiale Geschwindigkeit haben (Kapitel 7.1.3).

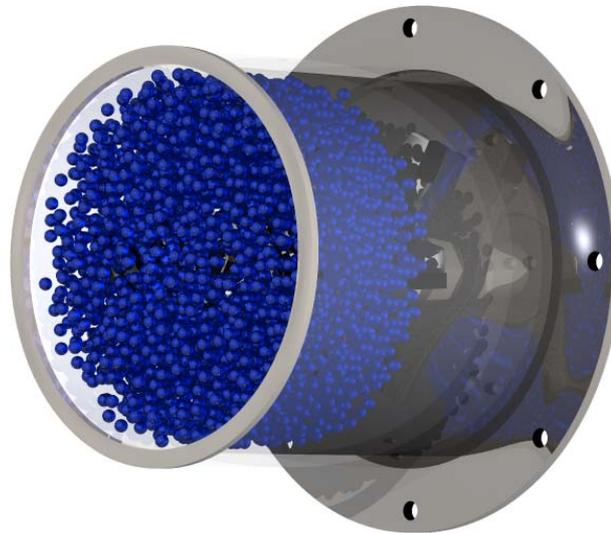


Abbildung 13-3 Nur die vordere Hälfte der Mahlkammer ist mit 3500 Kugeln gefüllt.

Es wurden diverse Simulationen durchgeführt, welche bei gleichen Parametern sich paarweise nur durch die Anfangskonfiguration der halben oder ganzen anfänglichen Füllung unterschieden. Exemplarisch werden hier die beiden Experimente mit ganzer und halbseitiger Füllung mit den Parametern gemäß Tabelle 13-1 diskutiert – die anderen Simulationen zeigen vergleichbare Ergebnisse. Ein „Steckbrief“, wie Tabelle 13-1, wird auch in den nachfolgenden Kapiteln als Übersicht über die verwendeten Parameter einer Simulation gezeigt. Der Aufbau ist bei allen Steckbriefen derselbe.

Die Abbildung 13-4 zeigt die Simulation der anfangs halbseitigen Füllung nach einer Umdrehung (links) und nach zwei Umdrehungen. Der Rotor mit einer Drehzahl von 1300 rpm braucht für eine Umdrehung 0,046 Sekunden. Bereits nach einer Umdrehung (links) befindet sich ein Großteil der Kugeln in der anfangs leeren Hälfte der Mahlkammer.

Parameter	Wert
Drehzahl	1300 rpm
Kugelanzahl	3500
Normaler Restitutionskoeffizient ε_n	$f(v_n)$
tangentialer Restitutionskoeffizient ε_t	0,95
Anzahl der Rotoren	5
Simulationszeit (reale Zeit)	10 s

Tabelle 13-1 Versuchparameter für die Simulation mit ganzer oder halbseitiger räumlich gleichverteilter Anfangsfüllung.

Trotzdem haben die Kugeln auf der dem Flansch abgewandten vorderen Seite nahezu unveränderte Dichte (vgl. Anfangskonfiguration in Abbildung 13-3 – dicht an der vorderen Scheibe). Die Kugeln in diesem Bereich wechselwirken nur durch Kugel-Kugel Kollisionen. Nach zwei Umdrehungen (rechts) hat sich auch dieser Bereich aufgelockert. Nach 0,2 Sekunden, also ca. vier Umdrehungen, stellt sich ein ähnliches Bild ein, wie bei der Simulation mit kompletter Anfangsfüllung – hier nicht dargestellt.

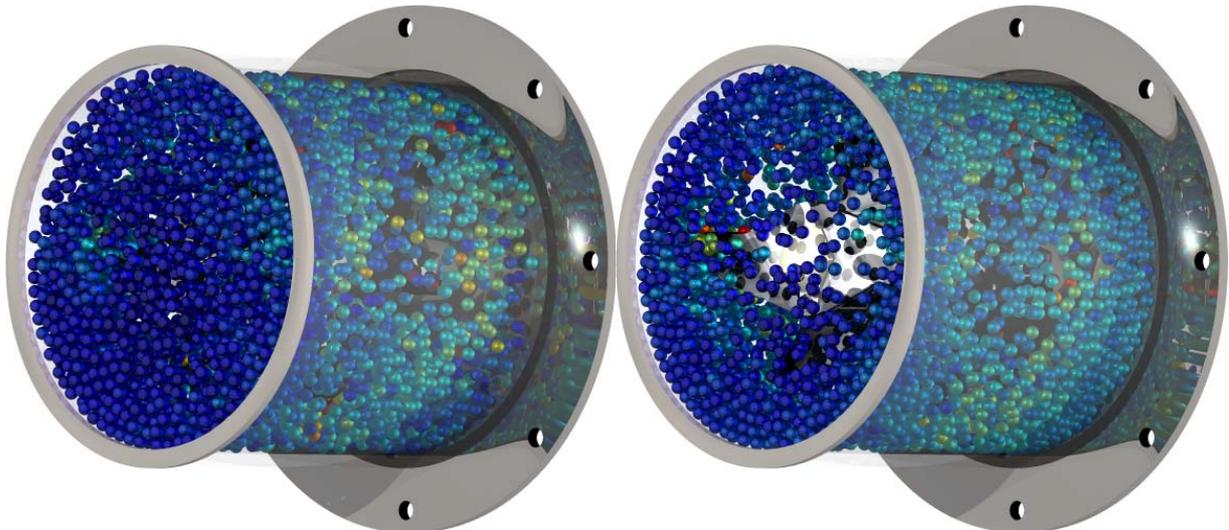


Abbildung 13-4 Eine Hälfte der Mahlkammer wurde mit 3500 Kugeln gefüllt. Links: Zustand nach einer Rotorumdrehung mit 1300 rpm, was einer Zeit von 0,046 s entspricht. Rechts: Zustand nach zwei Rotorumdrehungen.

Neben der optischen Beurteilung der Stationarität anhand der Computeranimationen, soll der Vergleich der Indikatoren auch mit Hilfe von statistischen Methoden durchgeführt werden. Als Indikator dient der Median der absoluten Geschwindigkeit. Dieser Wert der 3500 Kugeln wurde in äquidistanten Zeitschritten von 0,01 Sekunden bestimmt. Insgesamt stehen folglich jeweils 1.000 Messwerte für den Vergleich zu Verfügung.

Abbildung 13-5 zeigt beide Indikatoren in einem Diagramm. Grün eingezeichnet ist der zeitliche Verlauf des Medians der absoluten Geschwindigkeit mit kompletter Füllung, rot eingezeichnet mit halbseitiger Füllung. Anfangs steigt der Wert der halbseitigen Füllung über den Referenzwert der kompletten Füllung. Dies ist dadurch begründet, dass auf-

grund der doppelten Kugeldichte auf einer Hälfte die Kugeln durch die Rotorblätter öfter und somit insgesamt stärker beschleunigt werden, als im Referenzsystem. Nach ca. 0,2 Sekunden befinden sich beide Systeme in einem stationären Zustand und rauschen in gleicher Weise um den zeitlich konstanten Mittelwert. Eine FFT-Analyse der Daten im stationären Zustand zeigte keine Periodizität (hier daher nicht dargestellt).

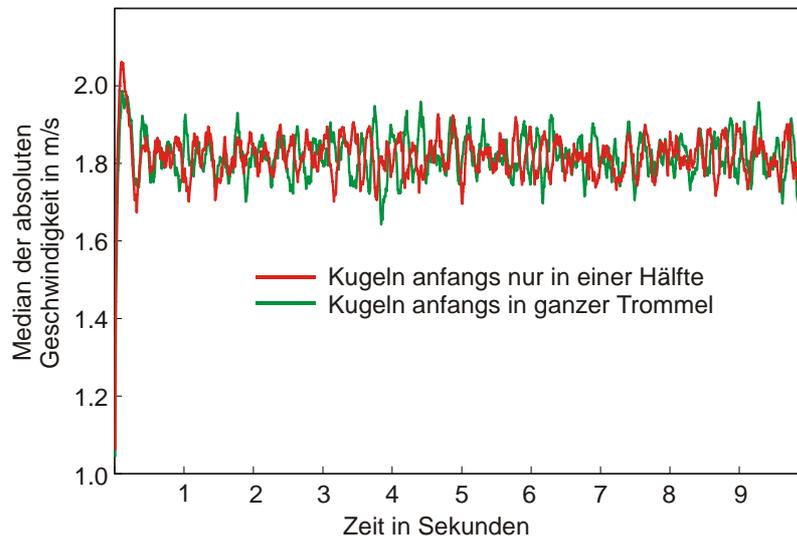


Abbildung 13-5 Zeitlicher Verlauf des Median der absoluten Geschwindigkeit. Verglichen wird der Einfluss der Initialisierung. Rot dargestellt ist der Verlauf ausgehend von der halbseitigen Initialisierung. Grün dargestellt ist der Verlauf der komplett gefüllten Mahlkammer.

Der Vergleich des Mittelwertes und der Standardabweichung der Daten (Tabelle 13-2) zeigt, dass selbst die extrem unterschiedlich gewählten Anfangskonfigurationen keinen Einfluss auf das Simulationsergebnis haben. Gerade der Vergleich der Auswertungsintervalle über die komplette Simulationszeit und der Simulationszeit ab 0,2 Sekunden zeigt, dass sich die Mittelwerte im Intervall [0,2 s, 1 s] noch stärker ähneln und nur um 0,01 % voneinander abweichen. Die Standardabweichung ist im Intervall [0,2 s, 1 s] kleiner und weicht um 16,1 % von einander ab.

Kriterium	Halbseitig	Ganz	Abweichung
Mittelwert [0 s, 1 s]	1,8193 m/s	1,8184 m/s	0,05 %
Standardabweichung [0 s, 1 s]	0,055 m/s	0,059 m/s	8,1 %
Mittelwert [0,2 s, 1 s]	1,8185 m/s	1,8187 m/s	0,01 %
Standardabweichung [0,2 s, 1 s]	0,0428 m/s	0,0510 m/s	16,1 %

Tabelle 13-2 Versuchsparemeter für die Simulation mit ganzer oder halbseitiger räumlich gleichverteilter Anfangsfüllung.

Im Folgenden wird daher davon ausgegangen, dass Initialisierung der Kugeln keinen Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat und die Daten ab 0,2 Sekunden nicht mehr durch die Initialisierung beeinflusst werden.

14. Verifikation des Simulators

Um die numerische Genauigkeit (Kapitel 14.1) und die physikalische Korrektheit (Kapitel 14.2) des Simulators zu verifizieren wurden Simulationsexperimente durchgeführt. Die Experimente simulieren ein ideales Gas in einem zylindrischen Behälter (kein Rotor), wurden jedoch nach unterschiedlichen Gesichtspunkten ausgewertet.

Abbildung 14-1 zeigt den Zusammenhang zwischen Realität und Modell. Die Reale Mühle wird im Modell-Entwurf in Abhängigkeit der Ziele und des Vereinfachungsgrades idealisiert. Aus diesem idealisierten Modell wird ein durch Gleichungen und Berechnungen gegebenes mathematisches Modell. Dieses Modell wird als Simulationsalgorithmus implementiert, um die Computersimulationen durchzuführen. An diesem Punkt stellt sich die Frage, in wie weit die Ergebnisse der Simulation mit dem realen System übereinstimmen (Validierung) und wie stark die Simulationsergebnisse vom idealisierten Modell abweichen (Verifikation).

Für die reale Hochenergie-Kugelmühle existieren keine brauchbaren Messdaten, um die Simulation etwa durch den Vergleich von gemessenen Geschwindigkeitsverteilungen zu validieren. Die Validierung konnte jedoch durch den Vergleich der Computeranimationen mit den Aufnahmen der Hochgeschwindigkeitsvideos qualitativ erfolgen, indem beide Videos nebeneinander abgespielt wurden und die Validierung empirisch durch Beobachtung erfolgte. Dieses Verfahren wurde durchgeführt, um den tangentialen Restitutionskoeffizienten zu bestimmen (Kapitel 18.2).

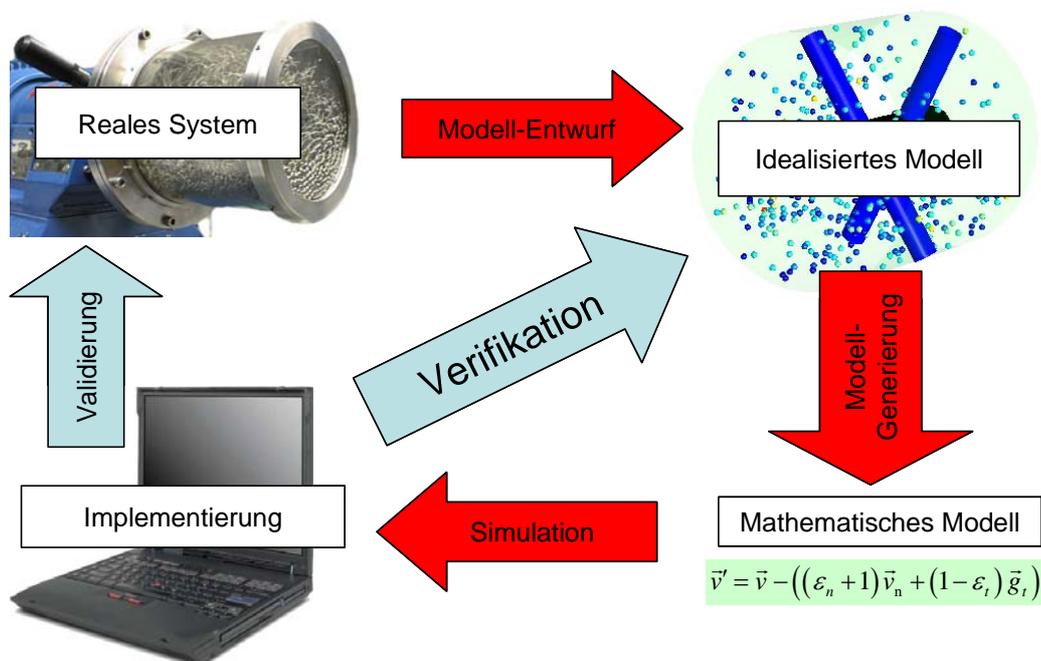


Abbildung 14-1 Beziehung zwischen Realität und Modell

Im Folgenden wird die Verifikation des Simulationsalgorithmus durchgeführt, indem Simulationen eines idealen Gases durchgeführt werden. Die Mahlkugeln repräsentieren die Atome eines idealen Gases welche voll elastisch wechselwirken. Das Kollisionsmo-

dell ist dahingehend idealisiert, dass kein Energieverlust bei der Kollision stattfindet. Die experimentell bestimmten Restitutionskoeffizienten gehen folglich nicht in die Verifikation ein. Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass die Geschwindigkeitsverteilungen und die Energiebilanz für diese idealisierten Systeme aus der statistischen Physik bekannt sind. Sollte der Simulationsalgorithmus diese Daten korrekt wiedergeben, ist davon auszugehen, dass die Implementierung korrekt ist.

14.1 Numerischer Fehler

Um den Einfluss der numerischen Verfahren, insbesondere den der verwendeten Nullstellen-Algorithmen, zu untersuchen, wurden Simulationsexperimente sowohl mit als auch ohne Gravitation mit den Parametern gemäß Tabelle 14-1 durchgeführt.

Parameter	Wert
Drehzahl	/
Kugelanzahl	2500
Normaler Restitutionskoeffizient ε_n	1,0
tangentialer Restitutionskoeffizient ε_t	1,0
Anzahl der Rotoren	0
Simulationszeiten (reale Zeit)	0,5 s 1,5 s

Tabelle 14-1 Versuchsp Parameter für die Simulation eines idealen Gases.

Als Indikator für die numerische Korrektheit dient die *Hamilton-Funktion*, sie stellt die Gesamtenergie des Systems dar. Bei diesen Experimenten muss die Summe aus den potentiellen und kinetischen Energien $E(t)$ aller N Kugeln zu jedem Zeitpunkt t denselben konstanten Wert beibehalten:

$$E(t) = \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{(v_i(t))^2}{2} + g \cdot h_i \right) \quad (14-1)$$

Gemessen wurde die Abweichung der Energie über die Zeit relativ zur Anfangsenergie $E(0)$. Dies ergibt den relativen Fehler:

$$Err(t) = \frac{E(t) - E(0)}{E(0)} \quad (14-2)$$

Der Algorithmus für die Kugel-Zylinderwand Kollisionserkennung schaltet automatisch bei Simulationen ohne Gravitationseinfluss den Nullstellensucher für Polynome vierten Grades zu einem für Polynome zweiten Grades um. Dies liegt an der Tatsache, dass die Kugeln ohne Gravitation nicht auf einer Parabelbahn, sondern geradlinig fliegen, und somit das Problem auf ein Polynom zweiten Grades reduziert wird. Die ersten beiden Polynomkoeffizienten von Gleichung (8-9) werden mit der Gravitationsbeschleunigung multipliziert und entfallen somit. Außerdem existiert keine potentielle Energie ohne

Gravitation, so dass sich Gleichung (14-1) auf die Summe der kinetischen Energien beschränkt.

Obwohl Simulationsexperimente für verschiedene Kugelanzen durchgeföhrt wurden, werden an dieser Stelle exemplarisch nur die Resultate der Experimente mit 2500 Kugeln gezeigt. Die Ergebnisse der anderen Experimente zeigen die gleichen Effekte.

Abbildung 14-2 zeigt den relativen Fehler für das Experiment ohne Gravitation für einen Zeitraum von 0,5 Sekunden. In dieser Zeit wurden 375 Messwerte zu äquidistanten Zeitpunkten aufgenommen. Der Fehler schwankt um Null im Rahmen der Rechengenauigkeit von Fließkommazahlen mit doppelter Genauigkeit (IEEE 754, 1985; Goldberg, 1991).

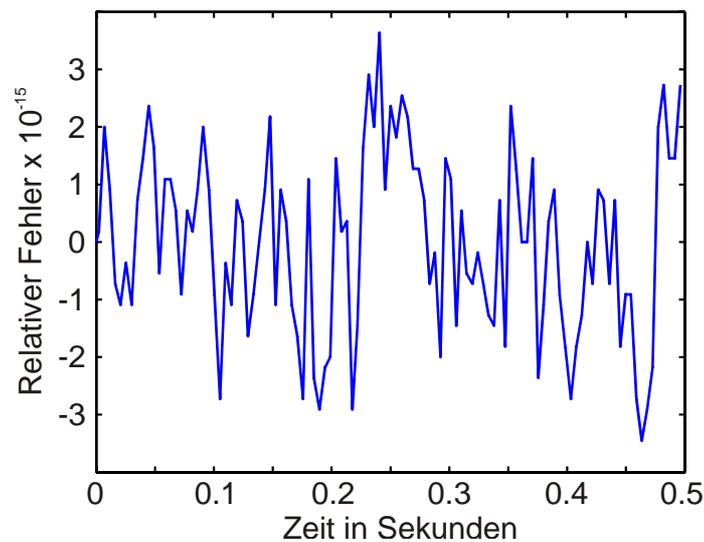


Abbildung 14-2 Experiment ohne Gravitation. Der relative Fehler schwankt um Null im Rahmen der Rechengenauigkeit.

Abbildung 14-3 links zeigt den relativen Fehler für das Experiment mit Gravitation für einen Zeitraum von 1,5 Sekunden. In dieser Zeit wurden 1123 Messwerte zu äquidistanten Zeitpunkten aufgenommen. Der Fehler zeigt im zeitlichen Verlauf Sprünge. Diese sprunghaften Abweichungen werden durch Positionskorrekturen bei den Kugel-Zylinderwandereignissen verursacht – siehe Gleichung (9-12).

Die Positionskorrekturen ändern die potentielle Energie der betroffenen Kugel und verursachen einen Fehler, der proportional zur vertikalen Komponente der Positionskorrektur ist. Auf den konstanten Abschnitten bewegt sich der Fehler im Rahmen der Rechengenauigkeit, ähnlich Abbildung 14-2.

Abbildung 14-3 rechts zeigt den Verlauf der potentiellen Energie basierend auf den Simulationsdaten von Abbildung 14-3 links relativ zur potentiellen Energie zum Zeitpunkt $t = 0$. Die Kurve entspricht dem vertikalen Schwerpunkt des Kugelpakets. Die gedämpfte Schwingung begründet sich durch das Einschwingverhalten der Kugeln, die zu Anfang von ihrer Initialposition durch die Gravitation nach unten beschleunigt werden und an der unteren Mahlkammerwand reflektiert werden.

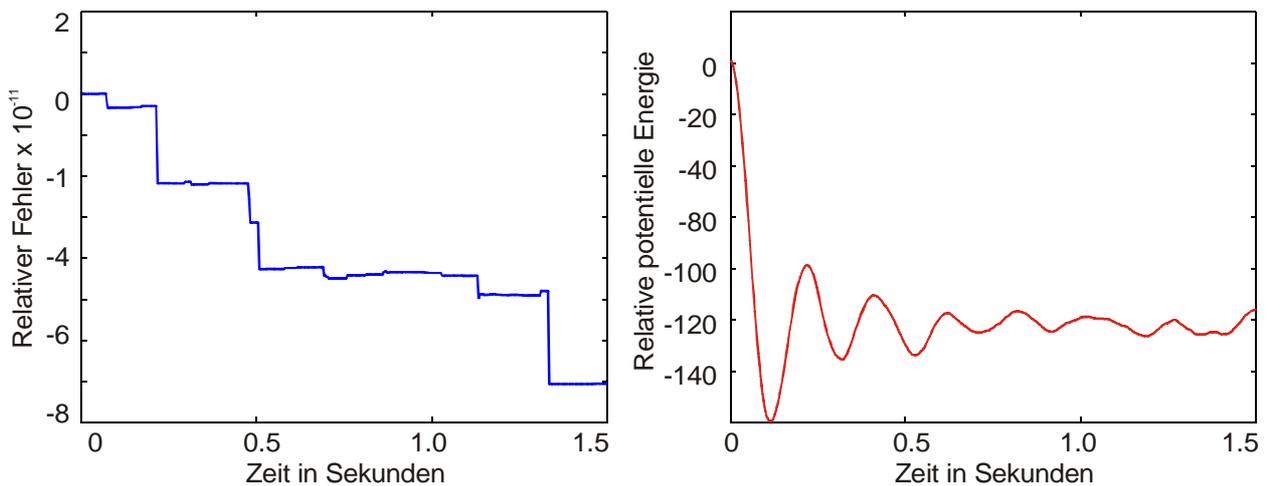


Abbildung 14-3 Links: Experiment mit Gravitation. Der relative Fehler springt durch Positionskorrekturen bei der Kugel-Wand-Kollision. Rechts: Verlauf der potentiellen Energie relativ zum Anfangszeitpunkt.

Die Kugeldichte im unteren Bereich wird dadurch mit fortschreitender Zeit erhöht und konvergiert asymptotisch gegen einen Grenzwert. Die Frequenz der Schwingung ist nicht konstant.

14.2 Physikalische Verifikation

Neben der numerischen Korrektheit ist sicherzustellen, dass der Simulator auch physikalisch korrekte Ergebnisse liefert. Da keine experimentellen Daten zum Vergleich mit Simulationsexperimenten zu Verfügung stehen, wurde auf theoretisch gesicherte Verfahren der statistischen Physik zurückgegriffen. Für den Mahlprozess ist die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit bestimmend. Der Simulator muss diese Verteilung korrekt berechnen. Um die Realitätstreue zu verifizieren wurden daher Experimente durchgeführt, die ein ideales Gas simulieren. Durch die Übereinstimmung mit den Ergebnissen der statistischen Physik wird nachgewiesen, dass der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte ereignisdiskrete Algorithmus physikalisch korrekt funktioniert.

Die nach dem in Kapitel 12 beschriebenen Verfahren initialisierten Kugeln verhalten sich wie ein ideales Gas. Die Kugeln müssen im stationären Zustand die Dichteverteilungen laut Tabelle 14-2 aufweisen. Die Herleitung der einzelnen Dichteverteilung, speziell der Dichteverteilung für die Normalkomponente der Kugel-Kugel-Kollisionsgeschwindigkeit, erfolgte in Zusammenarbeit mit dem Institut für theoretische Physik der Universität Siegen (Fließbach, 2004a und 2004b). Die entsprechende Herleitung befindet sich im Anhang A.

Eigenschaft	Form der Dichteverteilung
Absolute Geschwindigkeit jeder Kugel	3D-Maxwell Verteilung
Geschwindigkeitskomponente jeder Kugel	Normalverteilung
Position der Kugeln im Raum	Gleichverteilung
Kollisionspositionen auf der Kugeloberfläche	Gleichverteilung
Absolute Relativgeschwindigkeit bei Kugel-Kugel Kollisionen	4D-Maxwell Verteilung
Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit bei Kugel-Kugel Kollisionen	Rayleigh-Verteilung

Tabelle 14-2 Übersicht der Verteilungen, die sich im stationären Zustand eines idealen Gases einstellen müssen.

Die Häufigkeitsverteilungen der experimentellen Daten wurden mit einem χ^2 -Test mit den dazugehörigen Dichteverteilungen verglichen und haben wiederholt den strengen Test mit einer Wahrscheinlichkeit⁹ von $p = 0,85$ bestanden. Abbildung 14-4 zeigt exemplarisch die experimentellen Daten und die Maxwell-Verteilung. Die Häufigkeitsverteilung der Kugelgeschwindigkeiten muss mit der Maxwell-Verteilung übereinstimmen, was auch der Fall ist.

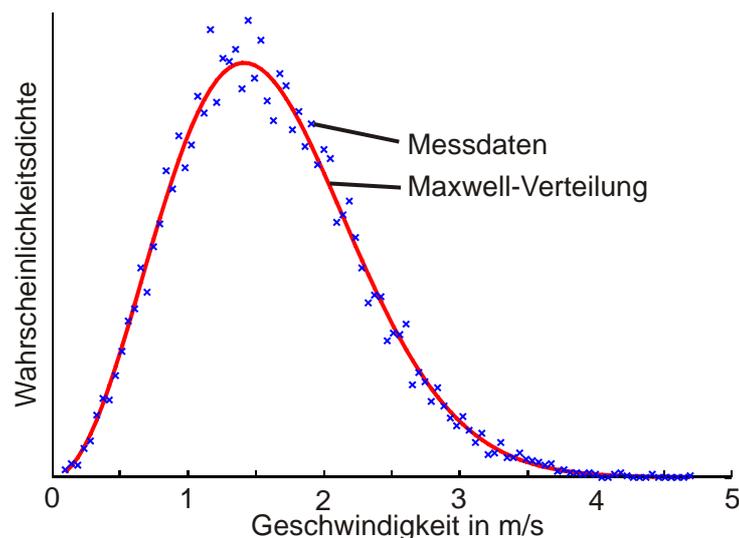


Abbildung 14-4 Vergleich der Maxwell-Verteilung mit den Simulationsergebnissen.

Damit wurde gezeigt, dass der Simulator realitätstreue Ergebnisse für ideale Gase liefert. Die physikalische Unsicherheit beschränkt sich lediglich auf die Restitutionskoeffizienten (siehe Kapitel 7.2) und die Modellierung des Rotors (siehe Kapitel 8.4).

⁹ Je kleiner der Parameter p beim χ^2 -Test gewählt wird, desto strenger ist der Test. Üblicherweise werden diese Tests mit $p = 0,9$ oder $0,95$ durchgeführt.

15. Laufzeitverhalten

In diesem Kapitel werden Studien beschrieben, die den Einfluss der Simulations- und Betriebsparameter auf das Laufzeitverhalten widerspiegeln. Unter Simulationsparametern werden dabei die Parameter des Simulators verstanden, die nur den Algorithmus, jedoch nicht die Maschine betreffen. Im Fall der hier verwendeten ereignisdiskreten Simulation ist dies lediglich die Anzahl der Scheiben bei der Partitionierung (Kapitel 15.1). Betriebsparameter oder Prozessparameter sind diejenigen, welche auch in physikalischen Experimenten durch Veränderung der Rotordrehzahl oder der Kugelanzahl variiert werden könnten (siehe Kapitel 19). In diesem Kapitel wird jedoch nur deren Auswirkung auf die Rechenzeit untersucht.

Alle Experimente wurden, soweit nicht anders angegeben, pro Simulationsexperiment auf einem der Knoten des Rubens-Clusters (technische Daten siehe Anhang B) durchgeführt.

15.1 Rechenzeit in Abhängigkeit der Problemgröße

Eine der wichtigen Fragen bei einem Simulationsalgorithmus ist das Verhalten der Rechenzeit in Abhängigkeit von der Problemgröße, hier die Kugelanzahl. Für die Untersuchung der Rechenzeit wurden verschiedene Simulationsexperimente mit den Parametern laut Tabelle 15-1 durchgeführt.

Parameter	Wert
Drehzahl	1300
Kugelanzahl	2500...4500
Normaler Restitutionskoeffizient ε_n	$f(v_n)$
Tangentialer Restitutionskoeffizient ε_t	0,9
Anzahl der Rotoren	5
Partitionierung in Scheiben	23

Tabelle 15-1 Versuchparameter für die Simulationen zur Bestimmung der Rechenzeit.

Die Rechenleistung von ereignisdiskreten Algorithmen wird i.d.R. in Ereignissen pro Sekunde angegeben, wobei alle berechneten Ereignisse gemeint sind. Diese Rechenleistung wird hier als Brutto-Rechenleistung bezeichnet und versteht sich inkl. aller Ereignisse die später als ungültig identifiziert wurden und inkl. der virtuellen Ereignisse für die Scheibenwechsel. Bei der Netto-Rechenleistung werden nur die Ereignisse gezählt, die eine gültige Kollision darstellen.

Abbildung 15-1 zeigt die Brutto- und Netto-Rechenleistung in Kollisionsereignissen pro Sekunde. Bei den Experimenten wurde die Anzahl der Kugeln schrittweise von 2500 auf 4500 Kugeln erhöht. Die Netto-Rechenleistung nimmt nahezu linear von ca. 7000 Kollisionen pro Sekunde auf ca. 3000 Kollisionen pro Sekunde ab. Die Brutto-Rechenleistung zeigt ein ähnliches Verhältnis in der Reduzierung der Effizienz.

Das lineare Absinken der Rechenleistung stimmt mit der linearen Zunahme an Kugeln pro Scheibe überein. Dieses Verhalten ist zu erwarten, weil pro Ereignis eine Kugel gegen alle anderen Kugeln der Scheibe zur Kollisionserkennung getestet werden muss (siehe Kapitel 8.2).

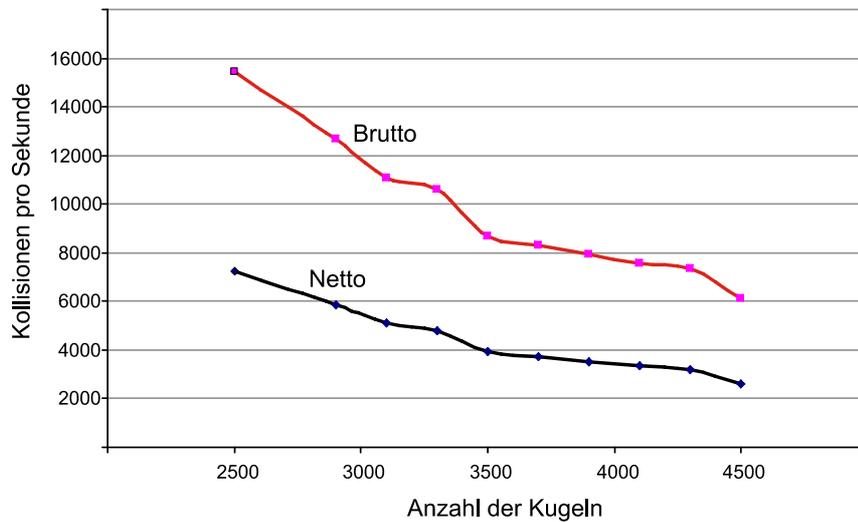


Abbildung 15-1 Rechenleistung in Kollisionsberechnungen pro Sekunde in Abhängigkeit von der Kugelanzahl bei einer Rotordrehzahl von 1300 rpm. Die Rechenleistung nimmt mit zunehmender Anzahl der Kugeln nahezu linear ab. Brutto: Alle Kollisionsereignisse inkl. der ungültigen und der virtuellen Ereignisse. Netto: nur reale Kollisionsereignisse.

Für die Praxis relevanter ist jedoch das Verhältnis von Rechenzeit zu realer Zeit, also wie viel Sekunden Rechenzeit für eine Sekunde reale Zeit benötigt werden. Die Daten desselben Experiments wurden dahingehend ausgewertet und in Abbildung 15-2 dargestellt. Der Verlauf zeigt ein überproportionales Verhalten. Dies liegt zum einen daran, dass die Rechenzeit pro Kollisionsereignis linear zunimmt (vgl. Abbildung 15-1) zum anderen, dass mehr Kugeln in Mahlkammer im gleichen Zeitraum öfter kollidieren. In Summe hat der Algorithmus ein empirisches Laufzeitverhalten der Komplexitätsklasse $O(n^2)$.

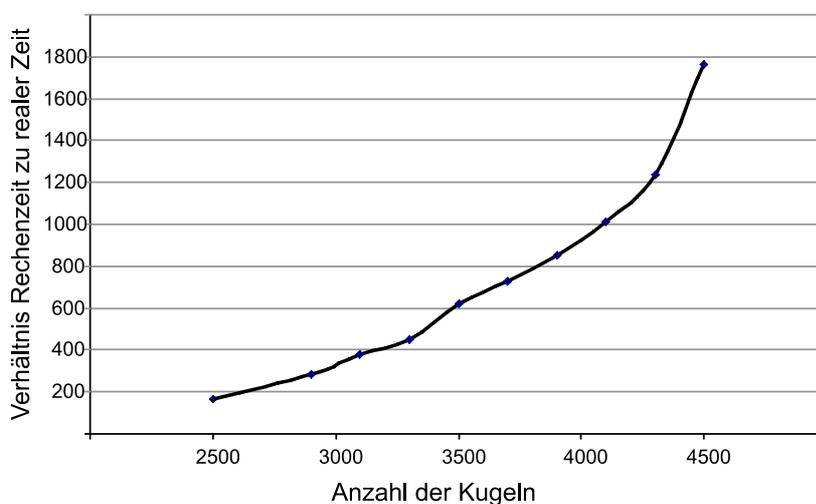


Abbildung 15-2 Verhältnis von Rechenzeit zu realer Zeit. Die Rechenzeit steigt mit der Anzahl der Kugeln überproportional an.

Typisch für ereignisdiskrete Algorithmen sind prognostizierte Ereignisse, die sich später als ungültig herausstellen (siehe Kapitel 5.3). Für das Verhältnis von Brutto- zu Netto-Rechenzeit spielt neben dem Anteil der virtuellen Ereignisse der Anteil an ungültigen Ereignissen eine wichtige Rolle, weil diese sofort aus der Ereignisliste gelöscht werden müssen (siehe Kapitel 10.4).

Abbildung 15-3 zeigt basierend auf den Ergebnissen der in diesem Kapitel verwendeten Simulationen den Anteil der ungültigen Ereignisse an der Gesamtzahl der Ereignisse ohne die virtuellen Ereignisse. Rund die Hälfte aller berechneten Kollisionereignisse ist ungültig und muss aus der Ereignisliste gelöscht werden. Der Anteil der ungültigen Ereignisse nimmt proportional zur Kugeldichte zu.

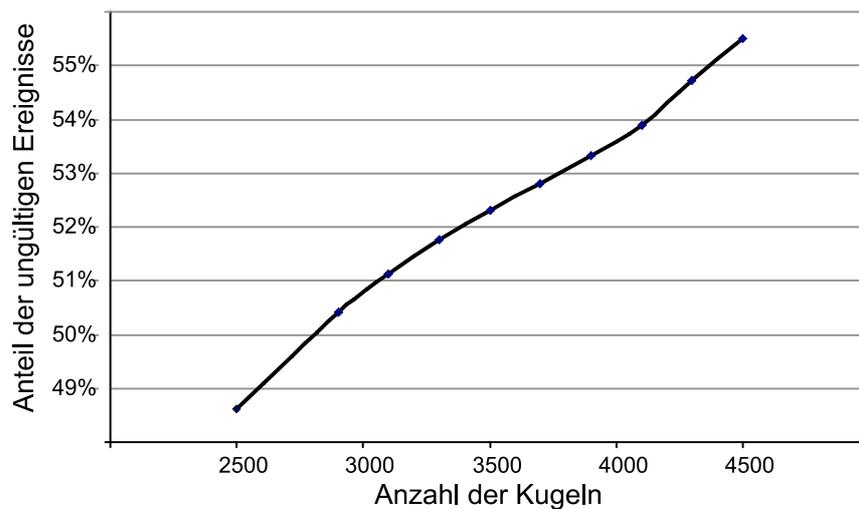


Abbildung 15-3 Anteil der ungültigen Ereignisse in Abhängigkeit von der Kugelanzahl. Die ungültigen Ereignisse nehmen linear zu.

Bei dieser Simulation wurde die Mahleinheit in 23 Scheiben unterteilt. Den Anteil der virtuellen Ereignisse (Check-In & Check-Out beim Scheibenwechsel) an der Gesamtzahl aller Ereignisse in Abhängigkeit der Kugelanzahl zeigt Abbildung 15-4. Der Anteil der virtuellen Ereignisse nimmt mit zunehmender Kugelanzahl (linear) ab.

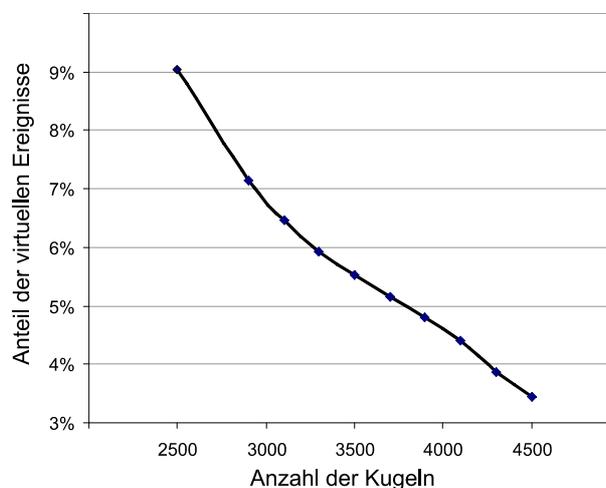


Abbildung 15-4 Anteil der virtuellen Ereignisse (Scheibenwechsel) an der Gesamtzahl der Ereignisse. Mit zunehmender Kugelanzahl nimmt der Anteil der Scheibenwechsel ab.

15.2 Einfluss der Partitionierung auf die Rechenzeit

In Kapitel 11.2 wurde die Einteilung der Mahlkammer in Scheiben erläutert. Diese Partitionierung hat als Ziel die Anzahl der Kugel-Kugel Kollisionsprüfungen, und somit die Rechenzeit zu reduzieren. Zugleich wird jedoch der administrative Aufwand erhöht, weil die Scheibenwechsel zusätzlich als virtuelle Ereignisse verwaltet werden müssen (Kapitel 11.4)

Als Referenz wurde eine Simulation ohne Partitionierung verwendet. Dies entspräche einer einzigen Scheibe, jedoch werden in diesem Fall keine Scheibenwechsel-Ereignisse überprüft. Die Simulationen mit den Parametern laut Tabelle 15-2 wurden mit Rotor und ohne Rotor (ideales Gas) durchgeführt. Die Simulationen ohne Partitionierung haben jeweils die einheitslose Referenzzeit 1,0.

Parameter	Wert mit Rotor	Wert ohne Rotor (Gas)
Drehzahl	1500	/
Kugelanzahl	4000	
Normaler Restitutionskoeffizient ε_n	$f(v_n)$	1,0
tangentialer Restitutionskoeffizient ε_t	0,9	1,0
Anzahl der Rotoren	5	0
Partitionierung in Scheiben	1; 2...26	

Tabelle 15-2 Versuchsp Parameter für die Simulationen zur Bestimmung des Einflusses der Partitionierung auf die Rechenzeit.

Die Mahleinheit wurde schrittweise in 2 bis 26 Scheiben unterteilt. Es wurden jeweils die Rechenzeiten für die Simulationen gemessen und relativ zur Rechenzeit ohne Scheibeneinteilung angegeben. Abbildung 15-5 zeigt die Ergebnisse der Simulation. Sowohl mit als auch ohne Rotoren sinkt die Rechenzeit relativ zur Simulation ohne Partitionierung stetig ab. Nur bei der Einteilung in zwei Hälften ist die Rechenzeit höher als die Referenzzeit. Ab drei Scheiben steigt die Effizienz.

Die Rechenzeit kann durch die Scheibeneinteilung bei Simulationen mit Rotoren auf ca. 20 % der Referenzzeit reduziert werden. Bei Simulationen eines idealen Gases immerhin noch auf ca. 25 % der Referenzzeit. Dass die Simulation mit Rotoren besser abschneidet, als die Simulation ohne Rotoren liegt an der Vorzugsrichtung der Kugeln. Bei Simulationen eines idealen Gases weisen die drei Geschwindigkeitskomponenten die gleiche Verteilung auf (siehe Anhang A). Bei der Verwendung von Rotoren bewegen sich die Kugeln hauptsächlich auf Kreisbahnen um die Rotorachse und haben eine geringe axiale Geschwindigkeit (siehe Kapitel 7.1.3). Somit sind die virtuellen Ereignisse der Scheibenwechsel seltener, als bei einer Simulation ohne Rotoren.

Bemerkenswert ist, dass die Rechenzeit mit zunehmender Anzahl von Scheiben nicht wieder ansteigt, wie es zu erwarten wäre. Dies liegt zum einen an der effizienten Art der reduzierten Kollisionsprüfungen (siehe Kapitel 11.5) zum anderen daran, dass die An-

zahl der Scheiben durch eine Scheibenbreite beschränkt ist, die größer als ein Kugeldurchmesser ist.

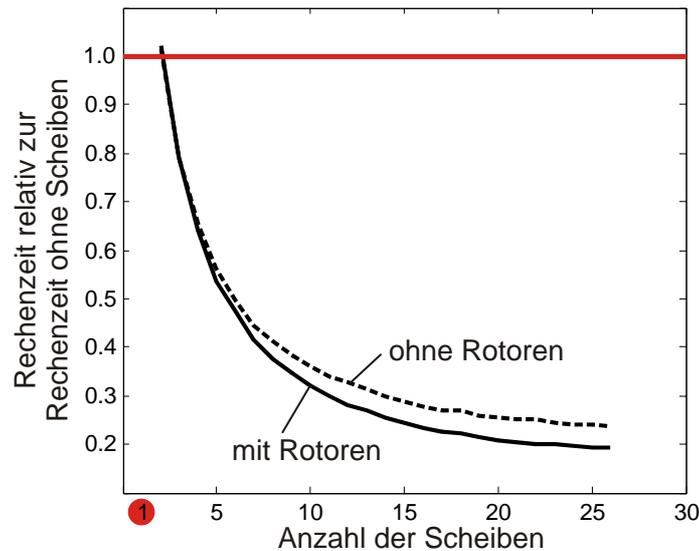


Abbildung 15-5 Einfluss der Partitionierung der Mahlkammer in Scheiben relativ zur Rechenzeit ohne Partitionierung (= eine Scheibe). Die Rechenzeit nimmt mit steigender Anzahl der Scheiben stetig ab. Bei Berechnungen mit Rotoren nimmt die Rechenzeit stärker ab, als bei Berechnungen ohne Rotoren.

Das o.g. Verhalten der Rechenzeit ist auch bei anderen üblichen Kugelanzahlen zu beobachten.

Bei Simulationen von idealen Gasen (ohne Rotoren) ist bei geringen Kugelanzahlen auch ein Minimum der Rechenzeit in Abhängigkeit von der Anzahl der Kugeln zu beobachten. Ab einer Anzahl von ca. 700 Kugeln ist die Rechenzeit jedoch streng monoton fallend. Kugelanzahlen unterhalb von 700 Kugeln haben unter Verwendung von Rotoren keine Bedeutung, weil dann der Rotor die Kugeln in Ruhelage aufgrund seines Abstands zur Mahlkammerwand nicht mehr erreichen kann (siehe Kapitel 3.1.2).

Abbildung 15-6 zeigt die Rechenzeit für Simulationen eines idealen Gases. Es wurde die Anzahl der Scheiben und die Anzahl der Kugeln variiert. Simuliert wurde nicht auf dem Rubens-Cluster, sondern auf einem Computer mit einem Pentium 4 Prozessor mit 1,8 GHz Taktfrequenz. Die Simulationen ab 700 Kugeln zeigen einen Rechenzeitverlauf analog zu Abbildung 15-5.

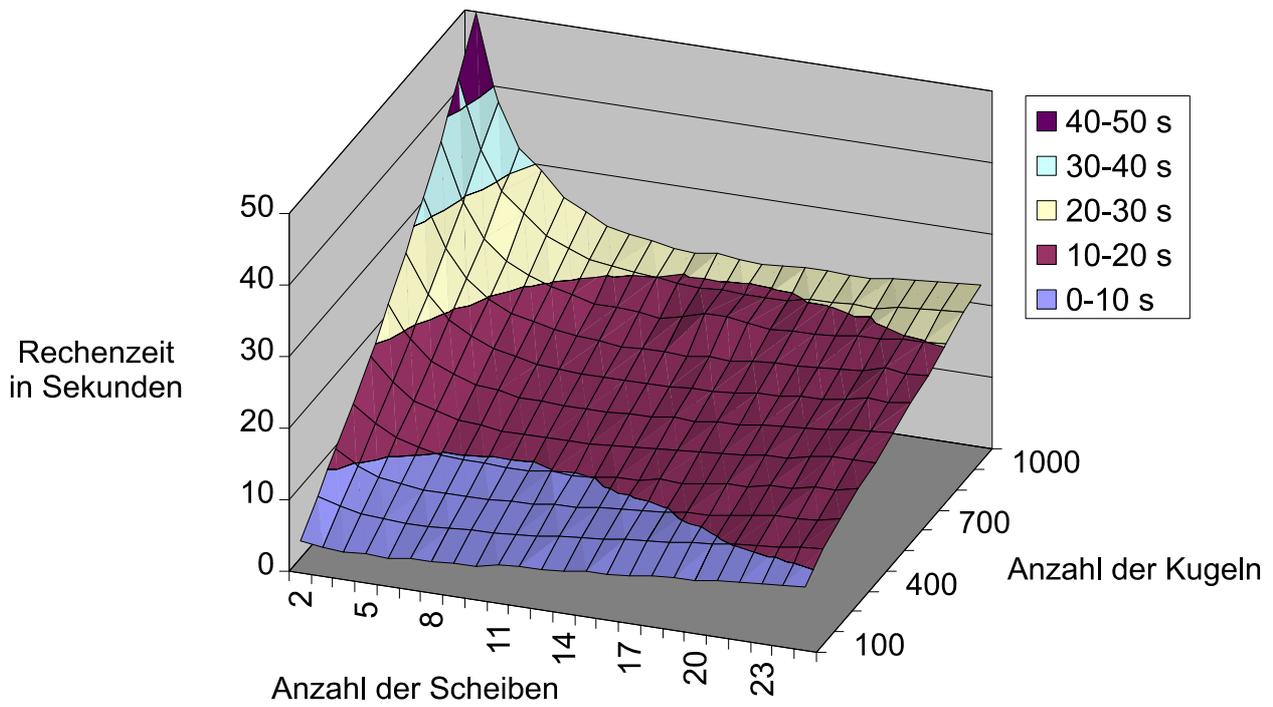


Abbildung 15-6 Einfluss der Partitionierung der Mahlkammer in Scheiben. Es wurde ein ideales Gas simuliert, wobei sowohl die Anzahl der Kugeln als auch die Anzahl der Scheiben variiert wurde. (Reichardt und Wiechert, 2003a)

16. Statistische Methoden

In diesem Kapitel werden die Geschwindigkeitsverteilungen der Kugeln mit statistischen Methoden bewertet. Neben der üblichen Darstellung durch Histogramme werden auch farbkodierte Visualisierungen verwendet, um die Aussagekraft der Daten (Standardabweichung und Vertrauensbereich des Mittelwertes) in der räumlichen Verteilung zu zeigen.

Die von MATLAB standardmäßig zur Verfügung gestellte Volumenvisualisierung von skalaren Größen konnte in dieser Arbeit nicht verwendet werden, da MATLAB eine Unterteilung in rechteckige Volumen voraussetzt. Es hat sich gezeigt, dass die zylindrische Mahlkammer damit nicht zufriedenstellend unterteilt werden kann. Stattdessen werden konzentrische Ringe und koaxiale Sektoren verwendet (Abbildung 16-1). Ziel dieser beiden Unterteilungen ist es, vergleichbare Volumenelemente zu schaffen.

Bei der Einteilung in Sektoren – in Abbildung 16-1 ist ein einzelner Sektor grün dargestellt – wird die Mahleinheit in gleichvolumige Elemente eingeteilt. Diese Volumenelemente haben gleiche Querschnittsflächen und sind achsenparallel angeordnet. Bei der Einteilung in Ringe – in Abbildung 16-1 ist ein einzelner Ring rot dargestellt – wird die Mahleinheit in Ringe mit gleicher Querschnittsfläche und -form eingeteilt. Die inneren Ringe haben folglich ein kleineres Volumen als die äußeren Ringe.

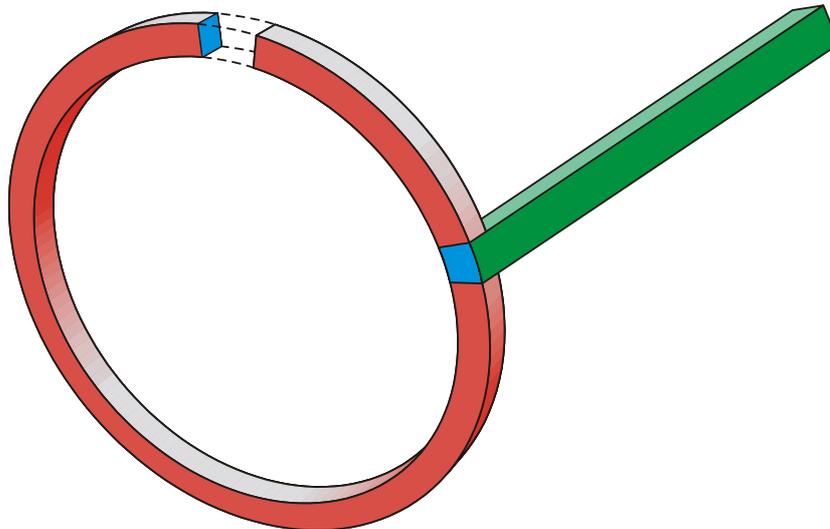


Abbildung 16-1 Volumenelemente für die statistische Auswertung. Rot: Die Mahleinheit wird in konzentrische Ringe gleichen Querschnitts und minimaler Kantenlänge unterteilt. Die Daten werden pro Ring erfasst. Grün: Die Mahleinheit wird in koaxiale Sektoren gleichen Querschnitts und damit gleichen Volumens unterteilt. Die Daten werden pro Sektor erfasst.

Die Datenauswertung erfolgt pro Volumenelement (Ring oder Sektor), beispielsweise werden pro Sektor die Anzahl der Kollisionen gezählt oder die durchschnittliche Geschwindigkeit der Kugeln in einem Sektor ermittelt. In den nachfolgenden beiden Unterkapiteln werden die zugrunde liegenden Algorithmen zur Erstellung der Volumenelemente erläutert.

16.1 Sektoren als Volumenelemente

Bei der Einteilung in Sektoren wird maßgeblich die kreisförmige Querschnittsfläche des zylinderförmigen Mahlbehälters betrachtet. Zunächst wird diese Querschnittsfläche in eine parametrisierbare Anzahl von konzentrischen Kreisen mit äquidistanten Radien unterteilt. Die so entstehenden Volumina, im Querschnitt begrenzt durch zwei benachbarte konzentrische Kreise, entsprechen Röhren mit der Wandstärke der Radiendifferenz der Kreise. In Abbildung 16-2 sind diese konzentrischen Röhren abwechselnd eingefärbt.

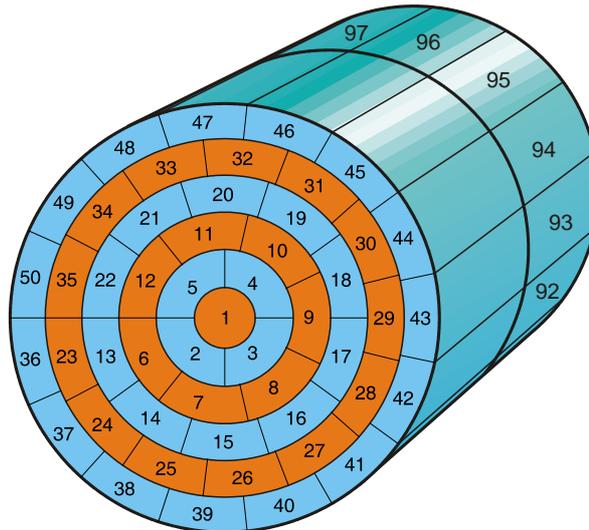


Abbildung 16-2 Numerierung der Sektoren. Die Numerierung erfolgt entgegen dem Uhrzeigersinn und von innen nach außen. Dieses Beispiel hat 6 Röhren und 2 x 50 Sektoren. Wenn die Mahleinheit zusätzlich in Scheiben unterteilt ist, wird die Numerierung bei den nachfolgenden Scheiben in der gleichen Art fortgesetzt.

Außer der Anzahl der Kreise (bzw. Röhren in 3D) wird die Gesamtzahl der Sektorflächen (bzw. Sektorvolumen in 3D) vorgegeben, wodurch sich der Sollwert für die Fläche (bzw. das Volumen) eines Sektors ergibt. Da nur ganzzahlige Werte für die Unterteilung einer Röhre in Sektorvolumen möglich sind, wird der innere Radius jeder Röhre so angepasst, dass das Volumen pro Sektor der Vorgabe entspricht. Dies geschieht von außen nach innen, so dass alle Sektoren, abgesehen von denen bei der Achse, dasselbe Volumen und dieselbe Querschnittsfläche haben. Die Volumenabweichung der innersten Sektoren spielt jedoch keine Rolle, da sich in diesem Bereich bei produktionsüblichen Drehzahlen keine Kugeln aufhalten. Zusätzlich können die Sektoren noch axial unterteilt werden.

Die Sektoren werden nummeriert (Abbildung 16-2), so dass die statistischen Daten in einem Vektor gespeichert werden können. Die Numerierung erfolgt entgegen dem Uhrzeigersinn von innen nach außen. Sollte die Mahleinheit zusätzlich in Scheiben unterteilt sein, wird die Numerierung bei den nachfolgenden Scheiben fortgesetzt. Abbildung 16-2 zeigt ein Beispiel mit 6 Röhren, 2 Scheiben und insgesamt 100 Sekto-

ren. Um die Kugelposition den Sektornummern zuzuordnen werden die Positionen in Zylinderkoordinaten umgerechnet.

In den Abbildungen der nachfolgenden Kapitel werden 2500 Sektoren in 25 Röhren verwendet. Sofern nicht anders angegeben, wurde von der Möglichkeit der weiteren Unterteilungen in Scheiben kein Gebrauch gemacht. Die Darstellung der Sektoren entspricht der Sicht auf die Mahleinheit von vorne, entlang der Achse des Rotors. Der Rotor dreht bei allen Sektordarstellungen im Uhrzeigersinn.

Zum besseren Verständnis der Sektoreinteilung wird in Abbildung 16-3 die photorealistische Darstellung den farbkodierten Sektoren gegenübergestellt. Die Daten wurden pro Sektor für einen bestimmten Zeitpunkt erhoben. Die Darstellung entspricht einer Projektion auf die Kreisfläche. In Abbildung 16-3 links wurden die Kugeln pro Sektor gezählt (Häufigkeitsverteilung) und farbkodiert dargestellt. In blau eingefärbten Sektoren halten sich wenige Kugeln (Kugelmittelpunkte) auf, in rot eingefärbten viele. Wo keine Sektoren eingezeichnet sind, waren auch keine Kugeln zum betrachteten Zeitpunkt vorhanden – vgl. photorealistische Darstellung rechts. In Abbildung 16-3 Mitte wurde die durchschnittliche Geschwindigkeit ermittelt. An den Rotorspitzen treten höhere Geschwindigkeiten auf, gekennzeichnet durch die roten Sektoren. In Abständen von 60° ist diese Sektorfärbung zu beobachten, was dem Winkelversatz der Rotoren entspricht – vgl. photorealistische Darstellung rechts.

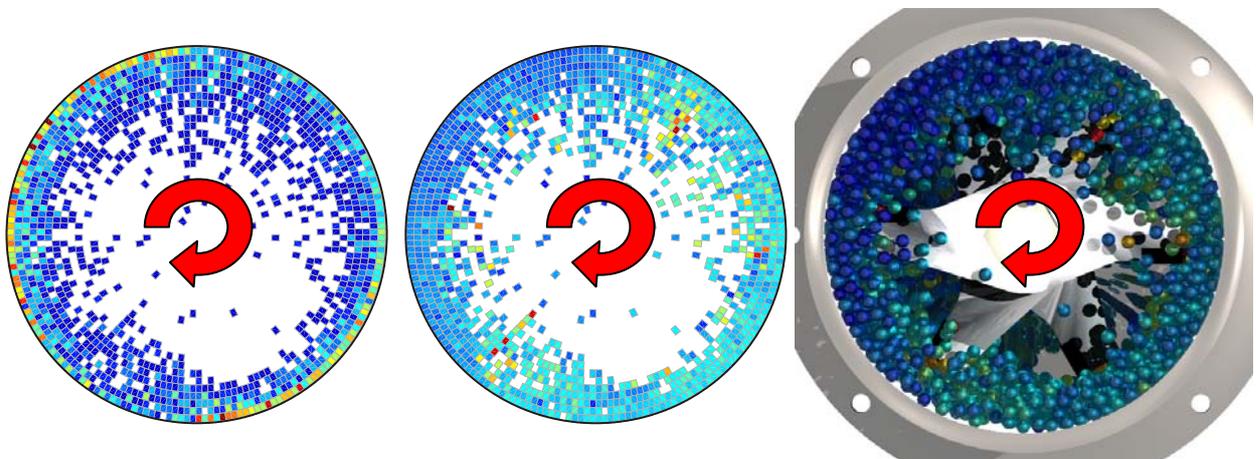


Abbildung 16-3 Vergleich farbkodierte Statistik vs. photorealistische Darstellung bei 900 rpm zum Zeitpunkt $t = 1.0$ s. Links: Aufenthaltshäufigkeit, Mitte: durchschnittliche Geschwindigkeit, Rechts: photorealistische Darstellung.

16.2 Ringe als Volumenelemente

Die Einteilung der Mahleinheit in Ringe gleicher Querschnittsfläche dient der Analyse der Mahlkammer in axialer Richtung. Alternativ sind auch axiale Schnittebenen, etwa durch die Achse, für eine solche Analyse denkbar, jedoch wurde dieser Ansatz nach der Implementierung wieder verworfen. Bei der Auswertung wurden alle geschnittenen Kugeln als Datenbasis verwendet, wodurch die Ebene in der Nähe der Achse mehr Kugeln

schneidet als außen. Außerdem reduziert ein solches Verfahren die Anzahl der Daten erheblich.

Bei der Einteilung in Ringe mit gleicher Querschnittsfläche, haben die äußeren Ringe ein größeres Volumen als die inneren Ringe. Werden mit diesem Verfahren beispielsweise im Raum gleichverteilte Kugeln analysiert, dann werden in den äußeren Ringen mehr Kugeln gezählt als in den inneren Ringen. Bei der Auswertung müssen die Daten folgerichtig auf das Volumen eines Rings bezogen werden, um die Daten vergleichbar zu machen.

Dem Algorithmus zur Erstellung der Ringe wird zunächst die Mindestanzahl der Flächen vorgegeben. Die Querschnittsflächen der Ringe sollen möglichst quadratisch sein. Folglich berechnet der Algorithmus zunächst die Kantenlänge eines Quadrates einer der Einzelflächen. Da nur ganzzahlige Werte für die Unterteilung in axialer und radialer Richtung möglich sind, wird die vorgegebene Anzahl der Flächen automatisch auf die nächst mögliche Anzahl hoch gesetzt. Anschließend werden die beiden Kantenlängen der Flächen entsprechend angepasst.

Die statistischen Daten werden in einer Matrix der Größe $nl \times nr$ gespeichert. Die Fläche dieser Matrix entspricht einem axialen Schnitt durch die Mahlkammer von der Mitte bis nach außen, also einem Schnitt durch die Ringe. Um den axialen Schnitt besser zu verdeutlichen werden in den Abbildungen die Daten an der Achse vertikal gespiegelt (siehe Abbildung 16-4 links). Dieser gespiegelte Schnitt durch die Ringe ist nicht mit den anfangs angesprochenen Schnittebenen zu verwechseln, obwohl diese Abbildungen den Anschein erwecken (siehe Abbildung 16-4 rechts).

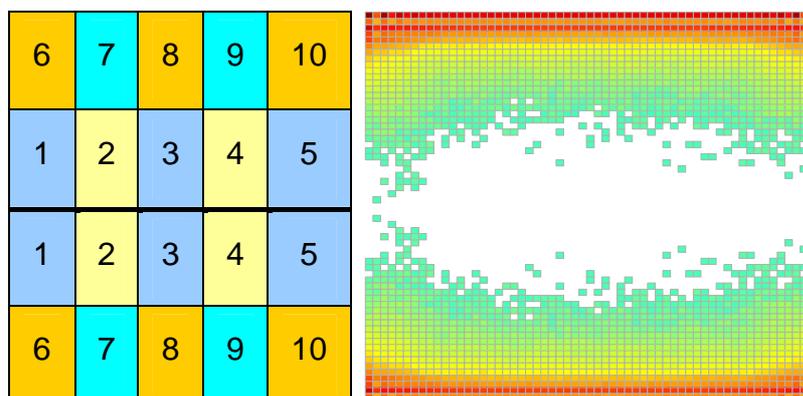


Abbildung 16-4 Links: Nummerierung der Ringe. Die Nummerierung erfolgt von links nach rechts und von innen nach außen. Die Zellen werden an der Achse vertikal gespiegelt um den Schnitt durch die Mahleinheit zu verdeutlichen. Rechts: Beispiel einer Häufigkeitsauswertung mit 2013 Zellen

Die Häufigkeitsverteilungen in dieser Art der Darstellungen sind auf das Volumen bezogen. Generell werden Häufigkeitsverteilungen logarithmisch (Basis 10) dargestellt, um einen besseren Farbverlauf zu erzielen. Bei allen in dieser Arbeit verwendeten Abbildungen der Schnitte durch die Ringe werden 61 axiale und 33 radiale Unterteilungen

der Mahleinheit verwendet (insgesamt 2013, dem Algorithmus vorgegeben waren 2000).

16.3 Statistische Kennzahlen

Die beiden verschiedenen Arten von Volumenelementen wurden entwickelt, um die Simulationsdaten mit statistischen Methoden pro Volumenelement auszuwerten. Generell haben statistische Daten eine Toleranz bzw. Vertrauensbereich. Allgemein gilt, je höher die Anzahl der zugrunde liegenden Daten (Grundgesamtheit) ist, desto genauer sind die statistischen Angaben.

In diesem Kapitel werden anhand eines exemplarischen Simulationsexperiments mit den Parametern laut Tabelle 16-1 diese Vertrauensbereiche bestimmt und in Diagrammen farbkodiert dargestellt. Es wurde die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit im stationären Zustand analysiert. Insgesamt stehen die Daten von 1.889.793 Kollisionen zu Verfügung.

Die Ergebnisse dieser Analyse gelten in ähnlicher Weise auch für andere Simulations-, Modell- und Betriebsparameter. Daher wird in diesem Kapitel zunächst auf die Details der statistischen Auswertungen eingegangen. Die nachfolgend erläuterten statistischen Kennzahlen wurden pro Volumenelement (Sektor, Ring) ermittelt.

Parameter	Wert
Drehzahl	1700 rpm
Kugelanzahl	3500
Normaler Restitutionskoeffizient ε_n	$f(v_n)$
tangentialer Restitutionskoeffizient ε_t	0,9
Anzahl der Rotoren	5
Simulationszeiten (reale Zeit)	1 s

Tabelle 16-1 Versuchparameter für die Simulation. Anhand der Simulationsdaten werden die Vertrauensbereiche bestimmt.

Für die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit werden die arithmetischen Mittel für jedes Volumenelement berechnet. Der arithmetische Mittelwert \bar{x} aus einer Grundgesamtheit von N Werten dient als Schätzwert für den Erwartungswert einer Dichteverteilung und ist definiert als

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (16-1)$$

Als Kennwert für die Abweichung der Daten vom Mittelwert dient der Schätzwert für die Standardabweichung. Die Standardabweichung σ ist nur für Verteilungen exakt bestimmbar. Deren Schätzwert, auf Basis von einer Grundgesamtheit von N Werten, wird

in dieser Arbeit relativ zum Mittelwert betrachtet („relative Standardabweichung“), ebenfalls mit σ bezeichnet und wird pro Volumenelement definiert als:

$$\sigma = \frac{\sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}}{\bar{x}} \quad (16-2)$$

Abbildung 16-5 zeigt farbkodiert die relative Standardabweichung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit im radialen Schnitt. In den rot gefärbten Bereichen in der Nähe des linken Trommelrandes ist die Standardabweichung am höchsten. Dies bedeutet, dass in diesen Bereich pro Volumenelement die Kollisionsgeschwindigkeiten unterschiedlicher sind, als in den anderen Bereichen.

Der in Gleichung (16-1) definierte Mittelwert hat einen Vertrauensbereich und liegt mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit innerhalb dieses Vertrauensbereichs. Zu dessen Berechnung wird außer der relativen Standardabweichung noch der Mittelwert selbst, die Grundgesamtheit N und die Dichte der Student-Verteilung t benötigt.

Dieser Verteilung muss die Wahrscheinlichkeit P mit welcher der Mittelwert im Vertrauensbereich liegen soll und die Anzahl der Freiheitsgrade mitgeteilt werden. Die Anzahl der Freiheitsgrade ist die Anzahl der Daten, die zum Informationsgewinn beitragen. In den hier vorliegenden Fällen ist dies immer eins weniger als die Größe der Grundgesamtheit.

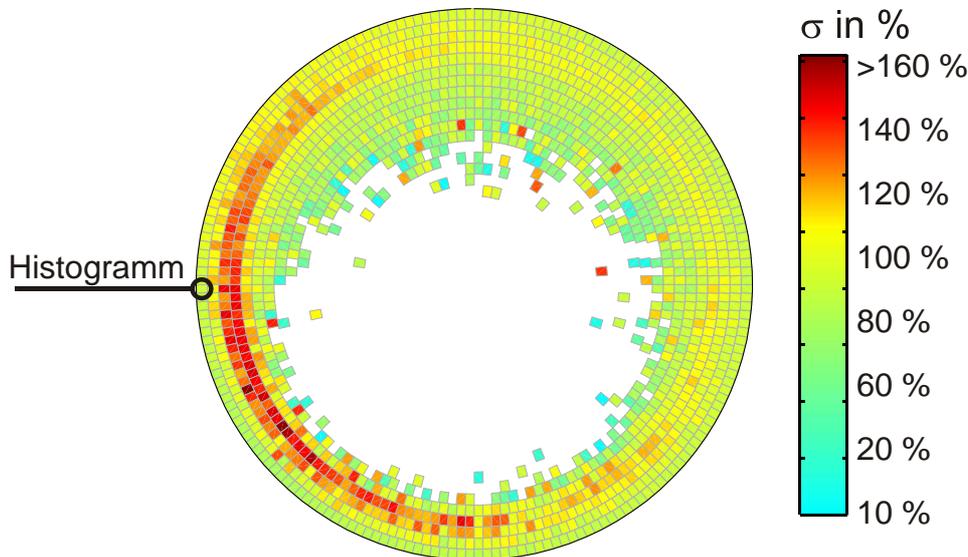


Abbildung 16-5 Relative Standardabweichung in Prozent.

Allgemein gilt, dass der Vertrauensbereich mit Grundgesamtheit enger und damit der Mittelwert zuverlässiger wird. Der Vertrauensbereich T pro Volumenelement wird in dieser Arbeit immer relativ zum Mittelwert betrachtet und ist definiert als:

$$T = t(P, N-1) \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (16-3)$$

Abbildung 16-6 zeigt in beiden Diagrammen farbkodiert den relativen Vertrauensbereich bezogen auf die Mittelwerte. Außen ist der Vertrauensbereich wesentlich enger als Innen.

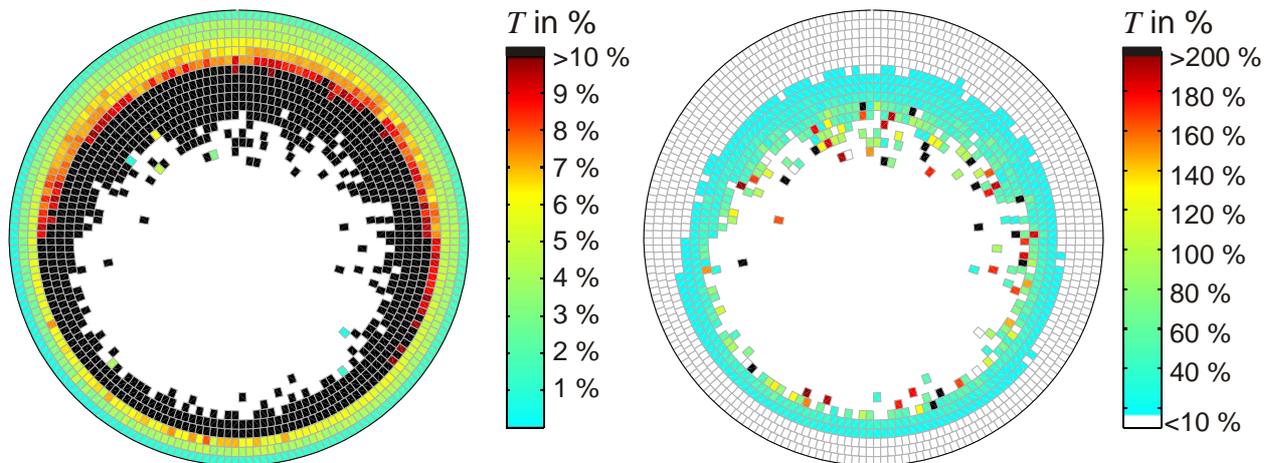


Abbildung 16-6 Vertrauensbereich des Mittelwertes in Prozent. Links: Farbkodierung bis 10 %. Die Werte über 10 % sind schwarz. Rechts: Farbkodierung ab 10 %. Die Werte unter 10 % sind weiß. Der farbige Bereich der linken Abbildung ist in der rechten weiß.

Die Visualisierung derselben Daten in zwei Diagrammen war notwendig, weil sich die Wertebereiche der Sektoren stark unterscheiden. Abbildung 16-3 links zeigt nur den relativen Vertrauensbereich bis 10 %, Werte über 10 % sind schwarz eingefärbt. Auf der rechten Seite sind nur die Daten ab 10 % eingefärbt. Die weißen Sektoren des rechten Diagramms entsprechen den farbigen Sektoren des linken Diagramms. Generell gilt, dass der Vertrauensbereich des Mittelwertes in den äußeren Regionen der Mahlkammer wesentlich enger ist, als im inneren Bereich. Dies ist vor allem durch die Anzahl der Daten pro Sektor begründet, denn in den äußeren Bereichen kollidieren die Kugeln häufiger.

Von den Geschwindigkeitsdaten werden in den nachfolgenden Kapiteln Histogramme für Geschwindigkeitsverteilungen dargestellt. Für die Erstellung der Histogramme werden, ausgehend vom Maximalwert der Daten, n gleichgroße Intervalle gebildet und pro Intervall gezählt wie viele Daten in den jeweiligen Wertebereich fallen. Für die Anzahl n der Intervalle (Balken des Histogramms) wird immer die Quadratwurzel der Grundgesamtheit $n = \sqrt{N}$ verwendet. Die Fläche der Histogramme wird generell auf Eins normiert, so dass sich eine Skalierung der y-Achse erübrigt und die Verteilungen besser vergleichbar sind. Obwohl Histogramme üblicherweise als Balkendiagramme dargestellt werden, wurde in dieser Arbeit von dieser Art der Darstellung Abstand genommen, weil die Anzahl der Balken zu hoch ist. Stattdessen werden die Linien oder Flächen dargestellt, wie es sonst für kontinuierliche Verteilungen üblich ist. Abbildung 16-7 zeigt ein Histogramm der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit. Die Daten stammen aus dem in Abbildung 16-5 markierten Sektor.

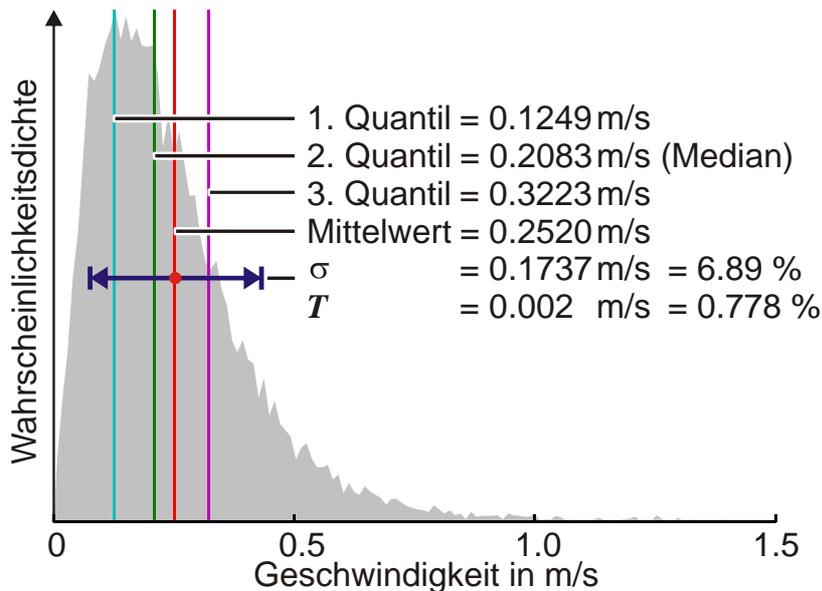


Abbildung 16-7 Histogramm aus Markierung von Abbildung 16-5.

Wenn mehrere Verteilungen (Histogramme) in einem Diagramm dargestellt sind, werden dieselben Intervallgrößen für die Zählung verwendet, da sonst die Verteilungen nicht vergleichbar sind.

Als Repräsentant für eine Verteilung dienen die ersten drei Quartile der Verteilung (eingezeichnet in Abbildung 16-7). Das zweite Quartil ist der Median und wird in den nachfolgenden Kapiteln häufig statt des Histogramms angegeben. Für eine sortierte Grundgesamtheit ist der mittlere von N Werten der Median Q_{50} bzw. das zweite Quartil. Als Rohdaten dienen i.d.R. die Geschwindigkeiten der Kugeln.

$$Q_{50} = \begin{cases} \frac{x_{N+1}}{2} & \text{für gerade } N \\ \frac{1}{2} \left(x_{\frac{N}{2}} + x_{\frac{N}{2}+1} \right) & \text{für ungerade } N \end{cases} \quad (16-4)$$

Das erste Q_{25} und dritte Quartil Q_{75} der Grundgesamtheit sind analog definiert, wie der Median, jedoch stellen diese beiden Quartile den 25 % Wert und den 75 % Wert dar.

17. Räumliche Verteilung der Geschwindigkeit und Aufenthaltshäufigkeit

Als Datenbasis dient das Simulationsexperiment des Kapitels 16.3 mit den Parametern laut Tabelle 16-1. Die Simulationsdaten wurden sowohl für die absolute Geschwindigkeit der Kugeln ausgewertet, weil diese mit den Filmen der Hochgeschwindigkeitskamera besser vergleichbar sind, als auch die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit, weil diese für die mechanische Beanspruchung des Mahlguts entscheidend ist.

17.1 Absolute Geschwindigkeit der Kugeln

Die Positionsvektoren der Kugeln und die Beträge der Geschwindigkeiten wurden im Abstand von $4 \mu\text{s}$ aufgezeichnet. Insgesamt stehen folglich 441.000 (3500 Kugeln x 126 Messungen) Datensätze zur Verfügung.

Abbildung 17-1 zeigt die logarithmische Aufenthaltshäufigkeit der Kugel im angegebenen Zeitraum. Die Kugeln halten sich hauptsächlich am radialen Rand der Trommel auf, was auch mit den Beobachtungen durch die Hochgeschwindigkeitskamera übereinstimmt (siehe Kapitel 7.1.3). Die beiden dunkelroten Streifen werden durch die beiden Kugellagen verursacht, die am Rand der Trommel entlang rollen.

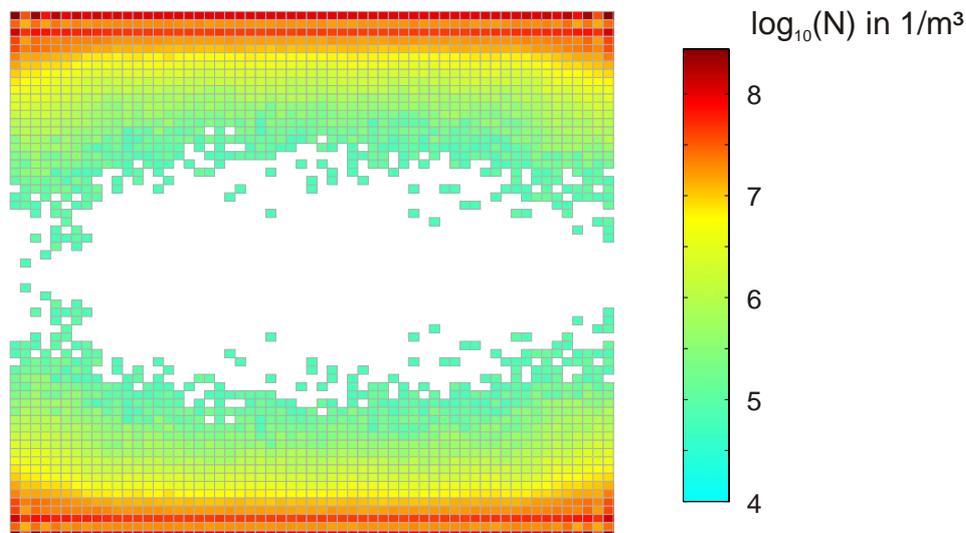


Abbildung 17-1 Logarithmische Darstellung der Aufenthaltshäufigkeit der Kugeln im axialen Schnitt. Die Kugeln befinden sich hauptsächlich an der radial äußeren Seite der Trommel.

Abbildung 17-2 zeigt den radialen Schnitt derselben Daten. Die Kugeln befinden sich am häufigsten in der Gegend des Trommelrandes. In den äußersten Sektoren, die einem Volumen von 7,8 % der Mahlkammer entsprechen, halten sich 49,6 % der Kugeln auf.

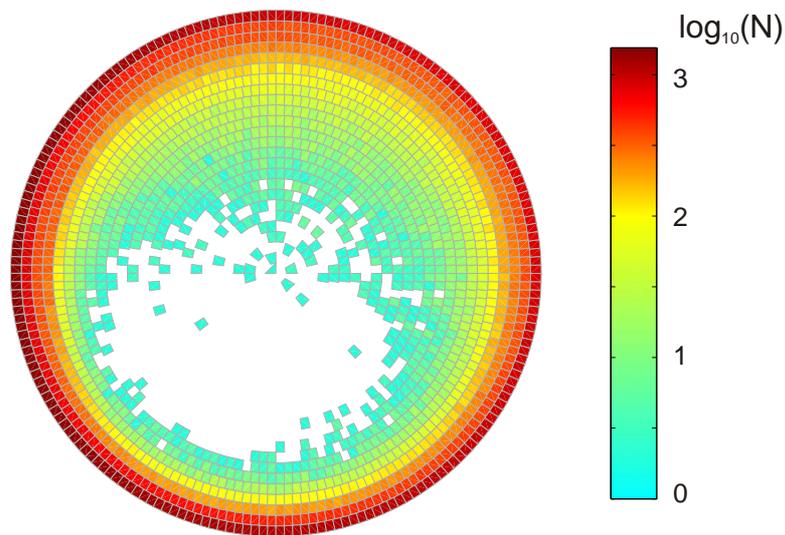


Abbildung 17-2 Logarithmische Aufenthaltshäufigkeit der Kugeln im radialen Schnitt. 49,6 % der Kugeln befinden sich in den äußersten Sektoren der Trommel, wie auch schon im vorherigen Bild zu erkennen.

Abbildung 17-3 zeigt im axialen Schnitt durch die Mahlkammer farbkodiert die durchschnittliche Geschwindigkeit. Im Bereich der Rotorblätter sind die Kugeln am schnellsten. In den Randbereichen treffen die vom Rotor beschleunigten Kugeln auf das dichtere Kugelpaket und werden dort abgebremst. In den Randbereichen ist die Geschwindigkeit nahezu homogen verteilt.

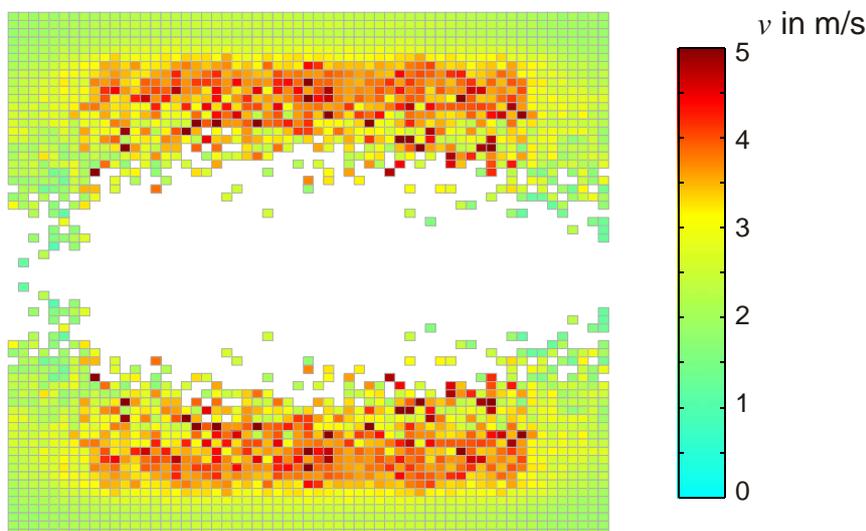


Abbildung 17-3 Durchschnittliche Geschwindigkeit der Kugeln im axialen Schnitt. Die schnellsten Kugeln befinden sich im Bereich der fünf Rotorarme. In den Randzonen ist die Geschwindigkeit nahezu konstant.

Der axiale Schnitt in Abbildung 17-4 zeigt eine auffällig inhomogene Verteilung der Geschwindigkeit. Die hohen Geschwindigkeiten häufen sich im Einflussbereich des Rotors im rechten und unteren Bereich. Vor allem unten, wo die Kugeldichte geringer ist, bewegen sich die Kugeln im Schnitt schneller.

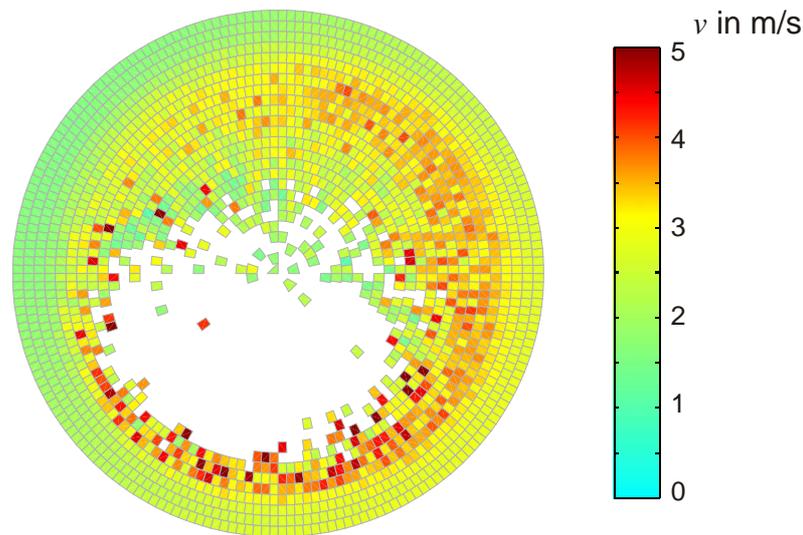


Abbildung 17-4 Durchschnittliche Geschwindigkeit der Kugeln im radialen Schnitt. Die schnellsten Kugeln befinden sich vor allem links und rechts im Bereich der Rotorarme. Auffällig ist die inhomogene Verteilung der absoluten Geschwindigkeit.

Beim Vergleich der Geschwindigkeitsdarstellungen von Abbildung 17-4 und Abbildung 17-3 sei nochmals darauf hingewiesen, dass es sich bei Abbildung 17-3 um einen vertikal gespiegelten Schnitt durch die Auswertungsringe handelt und nicht um eine Schnittebene durch die Mahleinheit (siehe Kapitel 16.2). Die Information der räumlichen Inhomogenität der Geschwindigkeit geht durch die Mittelung innerhalb der Ringe verloren.

Die Verteilung der Geschwindigkeiten zeigt Abbildung 17-5 (links). Das Maximum liegt bei 1,69 m/s, der Median bei 2,61 m/s. Abbildung 17-5 (rechts) zeigt die kumulierte normierte Häufigkeit. Nur 10 % der Kugeln sind schneller als 3,2 m/s, was etwa einem Drittel der Umfangsgeschwindigkeit des Rotors entspricht.

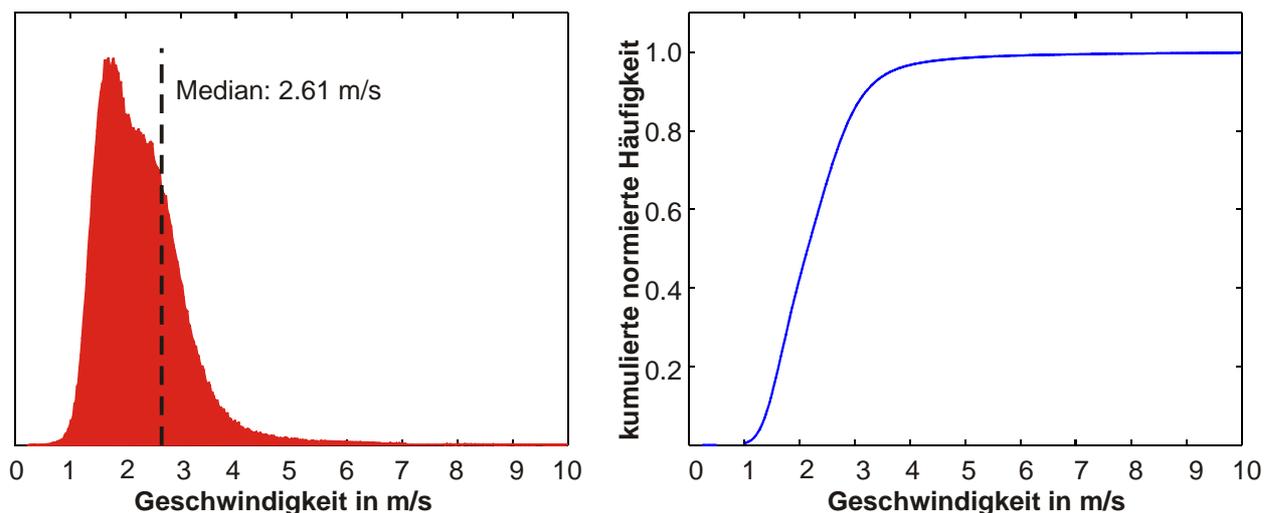


Abbildung 17-5 Links: Häufigkeitsverteilung der Geschwindigkeit. Die Fläche ist auf Eins normiert. Rechts: Kumulierte normierte Häufigkeitsverteilung der Geschwindigkeit.

Auffällig an der Geschwindigkeitsverteilung in Abbildung 17-5 (links) ist, dass sich Ansätze einer bi-modalen Verteilung zeigen. Die Vermutung liegt nahe, dass sich die Ge-

schwindigkeitsverteilung aus zwei oder mehreren Einzelverteilung zusammengesetzt ist, die jeweils nur ein Maximum haben.

Wider Erwarten hat sich die Vermutung nicht bestätigt, dass sich die Geschwindigkeitsverteilung aus zwei Schichten von Kugeln ergibt, die sich aufeinander an der Trommelwand bewegen. Der Grund ist vielmehr in Geschwindigkeitsunterschieden der Kugeln am Trommelrand zu suchen. Abbildung 17-6 zeigt nur die äußeren Sektoren. Die Farbkodierung wurde auf den Bereich der Geschwindigkeiten skaliert. Es zeigt sich, dass es eine langsamere und eine schnelle Zone gibt, die fließend ineinander übergehen und fast um 180° versetzt sind. Die beiden Zonen sind ca. 45° in Drehrichtung des Rotors gegenüber der vertikalen Achse verdreht. Die minimale Geschwindigkeit in der unteren Zone entspricht in etwa dem Maximum der Geschwindigkeitsverteilung aus Abbildung 17-5 (links). Die maximale Geschwindigkeit der oberen Zone entspricht dem Wendepunkt rechts vom Median in Abbildung 17-5 (links). Dieser Effekt zeigt den Einfluss der Gravitation auf den Mahlprozess.

Aus den Geschwindigkeitsdaten der Kugeln, die sich im oberen und unteren Bereich der dargestellten Sektoren bewegen, wurden zwei Histogramme erstellt (Abbildung 17-6). Die rote Linie ist die Geschwindigkeitsverteilung der oberen Hälfte, die grüne Linie die der unteren Hälfte. Wie eingangs vermutet, besitzen diese Einzelverteilungen nur ein Maximum, welche die bi-modale Gesamtverteilung verursachen.

Die schwarze Linie ist die Geschwindigkeitsverteilung aller restlichen Kugeln innerhalb des weißen Bereichs. Diese setzt sich wiederum aus zwei Verteilungen der Kugeln zusammen, welche sich in der zweitäußeren Schicht befinden.

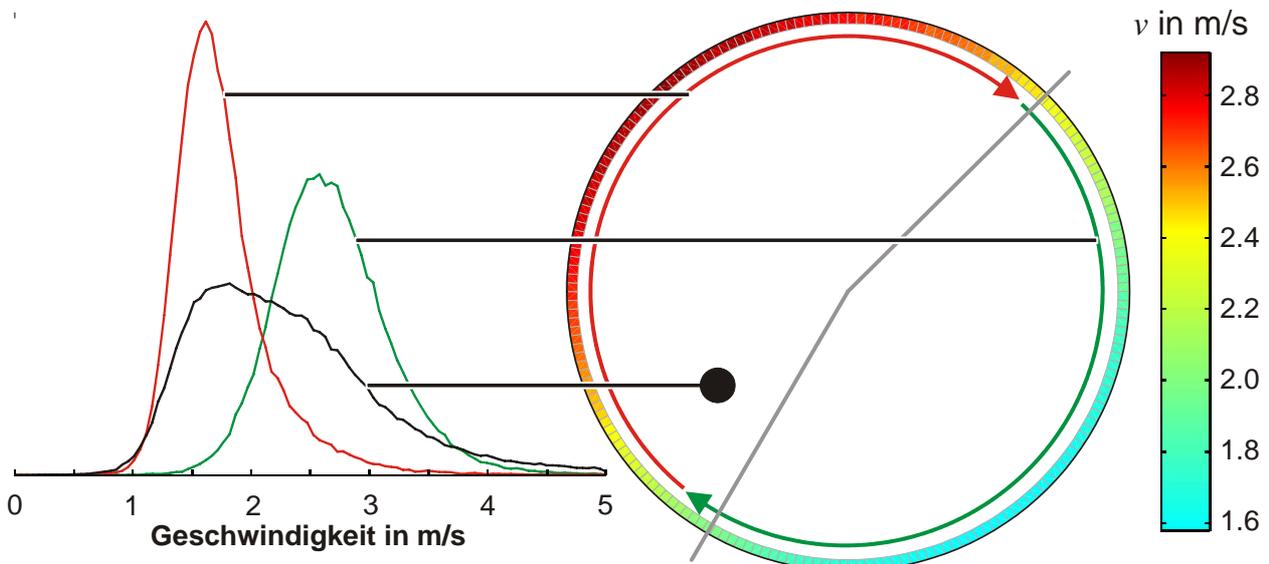


Abbildung 17-6 Geschwindigkeitsverteilung der Kugeln in den äußeren Sektoren. Die rote Linie entspricht der Geschwindigkeitsverteilung aus dem oberen Bereich, die grüne Linie die des unteren Bereichs. Die schwarze Linie ist die Verteilung aller anderen Kugeln innerhalb des weißen Bereichs.

17.2 Normal-Komponente der Kollisionsgeschwindigkeit

Für die Mahlwirkung in einer Hochenergie-Kugelmühle ist die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit maßgeblich. Daher werden diese aus der o.g. Simulation in diesem Kapitel analysiert. Im betrachteten Zeitraum [0,2 s, 1,0 s] haben 1.889.793 Kollisionen stattgefunden. In den Abbildungen dieses Kapitels werden links die Kollisionshäufigkeiten und rechts die pro Volumenelement gemittelte Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit dargestellt.

Abbildung 17-7 zeigt die Kollisionen aus allen Kollisionsklassen zusammen (Kugel-Kugel, Kugel-Rotor, Kugel-Zylinderwand, Kugel-Trommelwand) im radialen Schnitt. In den äußeren Bereichen finden überproportional viele Kollisionen statt. Die höchsten Kollisionsgeschwindigkeiten treten im radialen Bereich des Rotors auf, wo die Kugeln auch beschleunigt werden.

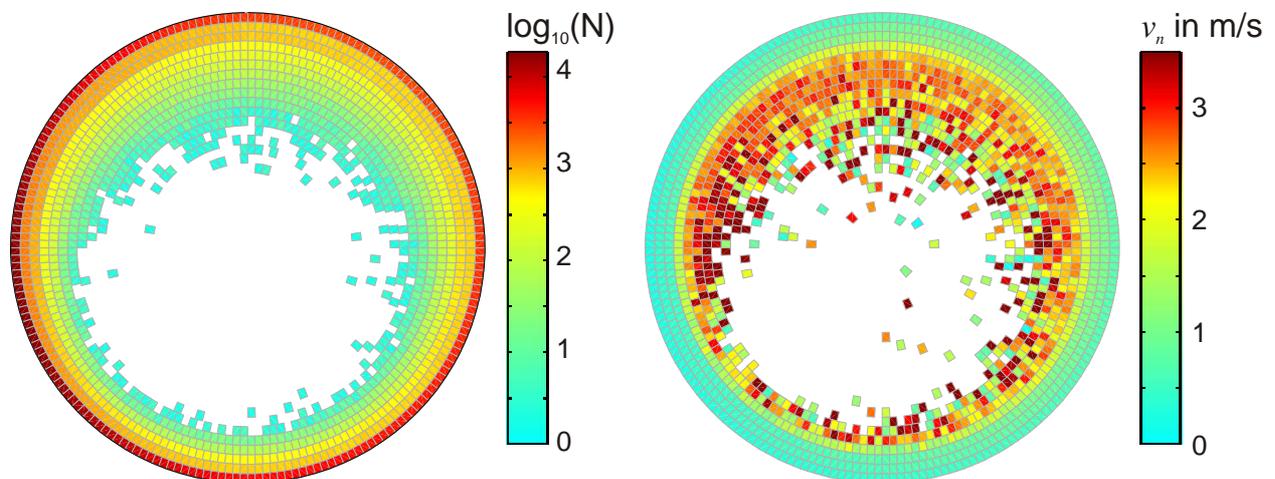


Abbildung 17-7 Normal-Komponente der Kollisionen im radialen Schnitt. Links: Häufigkeit der Kollisionen. Rechts: Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit.

Abbildung 17-8 zeigt im axialen Schnitt die Kollisionen aller Kollisionsklassen. Es ist zu erkennen, dass sich die Kugelkollisionen an den Trommelwänden links und rechts häufen. Die fünf Rotoren und deren Einflussbereiche sind an den dunkelrot gefärbten Volumenelementen deutlich zu erkennen.

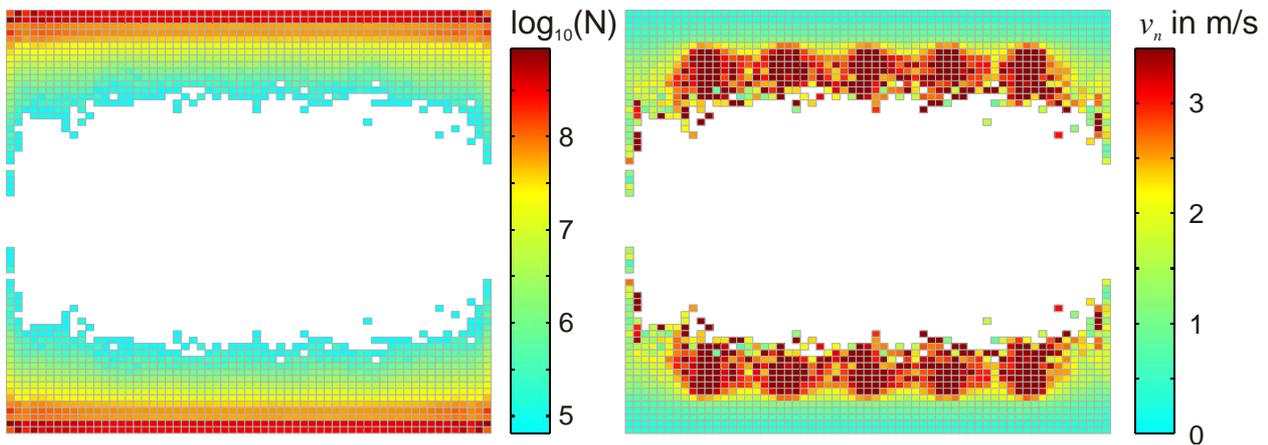


Abbildung 17-8 Normal-Komponente der Kollisionen im axialen Schnitt. Links: Häufigkeit der Kollisionen. Rechts: Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit.

Tabelle 17-1 zeigt die absteigend sortiert den prozentualen Anteil der Kollisionsklassen an der Gesamtzahl der Kollisionen. Mehr als $\frac{3}{4}$ der Kollisionen geschehen zwischen Kugeln. 20 % der Kollisionen entfallen auf die Zylinderwand, 2,5 % auf die Trommelwand. Der geringste Anteil von 0,3 % aller Kollisionen entfällt auf die Kugel-Rotor Kollisionen, aus denen das System seine Energie bezieht. In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die einzelnen Kollisionsklassen analysiert.

Kollisionsklasse	Anteil an Gesamtanzahl	Absolut
Kugel-Kugel	77,0 %	1.454.868
Kugel-Zylinderwand	20,1 %	378.992
Kugel-Trommelwand	2,6 %	49.687
Kugel-Rotor	0,3 %	6246
		Σ 1.889.793

Tabelle 17-1 Anteil der Kollisionsklassen an der Gesamtzahl der Kollisionen im betrachteten Zeitraum.

17.2.1 Kugel-Kugel Kollisionsklasse

Die Auswertung der Kugel-Kugel Kollisionsklasse in Abbildung 17-9 und Abbildung 17-10 zeigt ein ähnliches Bild, wie die Gesamtdarstellung in Abbildung 17-7 und Abbildung 17-8. Die Ähnlichkeit beruht auf der Tatsache, dass der überwiegende Anteil (77 %) an Kollisionen dieser Kollisionsklasse zuzuordnen ist. Im Einflussbereich des Rotors treten die höchsten Kollisionsgeschwindigkeiten auf. Hier wird die kinetische Energie der vom Rotor getroffenen Kugeln an andere Kugeln weitergegeben.

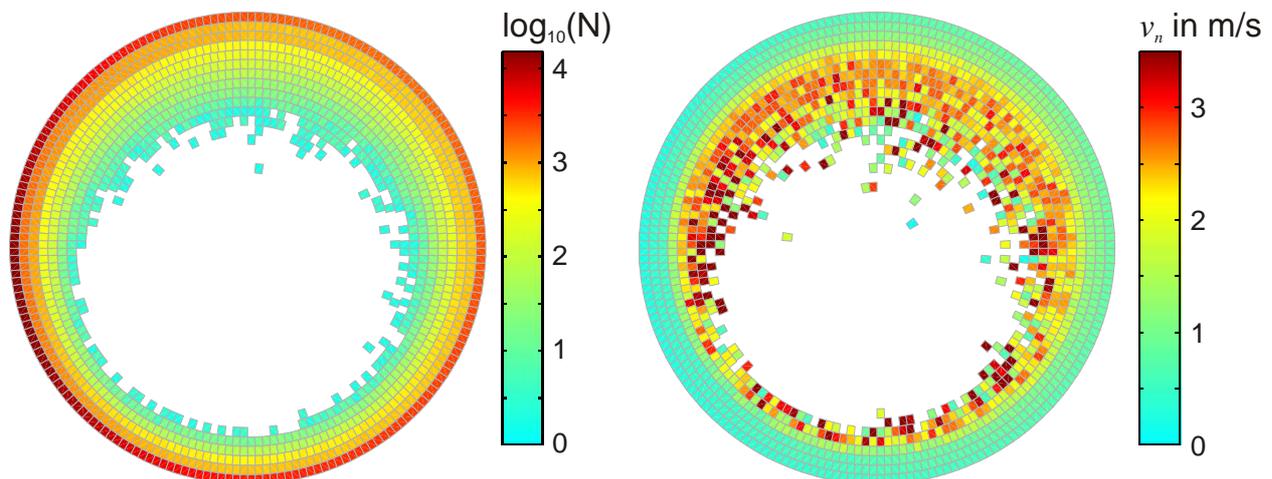


Abbildung 17-9 Normal-Komponente der Kugel-Kugel Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen
Rechts: Normalkomponente im radialen Schnitt.

In Abbildung 17-10 (links) ist zu erkennen, dass die häufigsten Kugel-Kugel Kollisionen nicht ganz am Rand, sondern kurz davor stattfinden (zweite Reihe von oben, dunkelrot). Dies sind Kugeln, die an den Rand getrieben werden und mit den Kugeln kollidieren, die sich schon am Trommelrand befinden. Kugeln, welche sich schon am Rand befinden, kollidieren bevorzugt mit den benachbarten Kugeln in axialer Richtung. In Abbildung 17-10 (rechts) treten die Kugel-Kugel Kollisionen in der Umgebung der Spitzen der fünf Rotoren deutlich durch ihre hohe Kollisionsgeschwindigkeit hervor. Der Farbverlauf entspricht der Ausbreitung der vom Rotor induzierten kinetischen Energie.

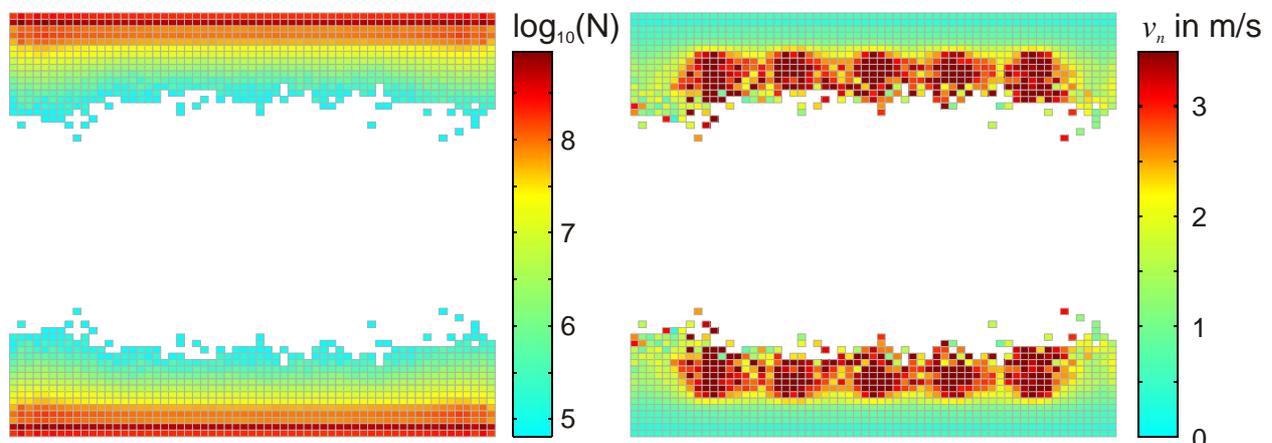


Abbildung 17-10 Normal-Komponente der Kugel-Kugel Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen
Rechts: Normalkomponente im axialen Schnitt.

17.2.2 Kugel-Zylinderwand Kollisionsklasse

Die Kugel-Zylinderwand Kollisionen bilden die zweithäufigste Kollisionsklasse (20 %). Die Anzahl der Kollisionen nimmt von rechts oben nach links unten zu. Bei der Kollisionsstärke ist dies genau umgekehrt. Die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit entspricht der radialen Komponente. Beim Vergleich (siehe Abbildung 17-6) mit der absoluten Geschwindigkeit ist auffällig, dass die Diagramme um 90° verdreht erscheinen. Die geringe Normalkomponente gegen die Zylinderwand erklärt auch, warum während der Experimente mit der transparenten Mahleinheit (siehe Kapitel 7.1) die Acrylglaswand kaum verkratzt wurde.

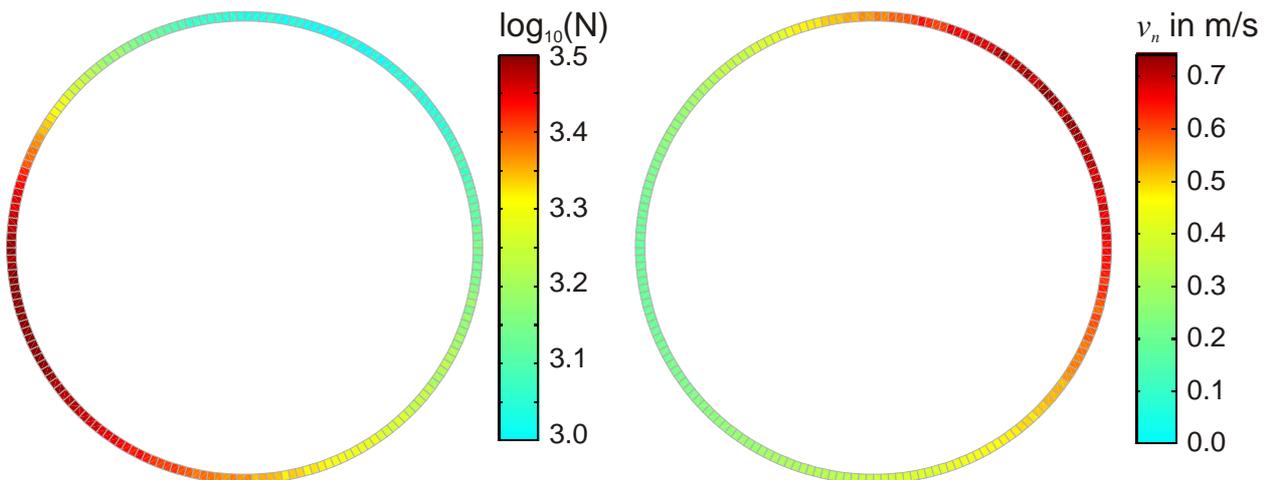


Abbildung 17-11 Normal-Komponente der Kugel-Zylinderwand Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen Rechts: Normalkomponente im radialen Schnitt.

Beim axialen Schnitt in Abbildung 17-12 ist zu erkennen, dass die größten Kollisionsgeschwindigkeiten im Bereich des Rotors stattfinden. Hier wird der Impuls der vom Rotor beschleunigten Kugeln an die Trommelwand übertragen.

Die häufigsten Kollisionen treten jedoch in den Ecken der Mahlkammer auf, hier jedoch mit einer wesentlich kleineren Kollisionsgeschwindigkeit.

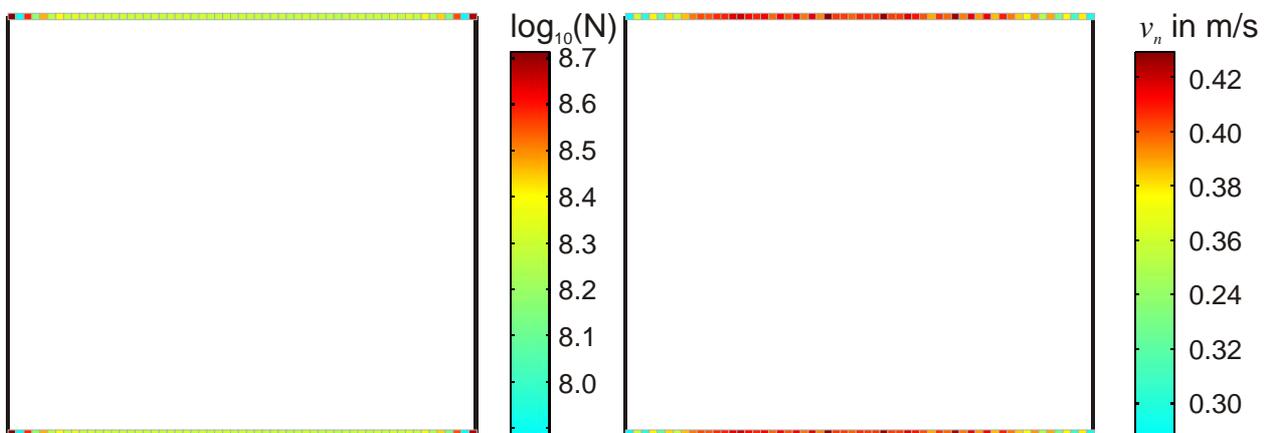


Abbildung 17-12 Normal-Komponente der Kugel-Zylinderwand Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen Rechts: Normalkomponente im axialen Schnitt.

17.2.3 Kugel-Trommelwand Kollisionsklasse

Die Kugel-Trommelwand Kollisionen bilden die dritthäufigste Kollisionsklasse (2,6 %). Die häufigsten Kollisionen treten wiederum in den Ecken der Mahleinheit auf und ebenfalls, wie bei der Kugel-Zylinderwand Kollision mit geringer Geschwindigkeit (Abbildung 17-13). Die höchsten Kollisionsgeschwindigkeiten treten im Radius der Rotoren auf. Hier wird die kinetische Energie nach außen weitergegeben.

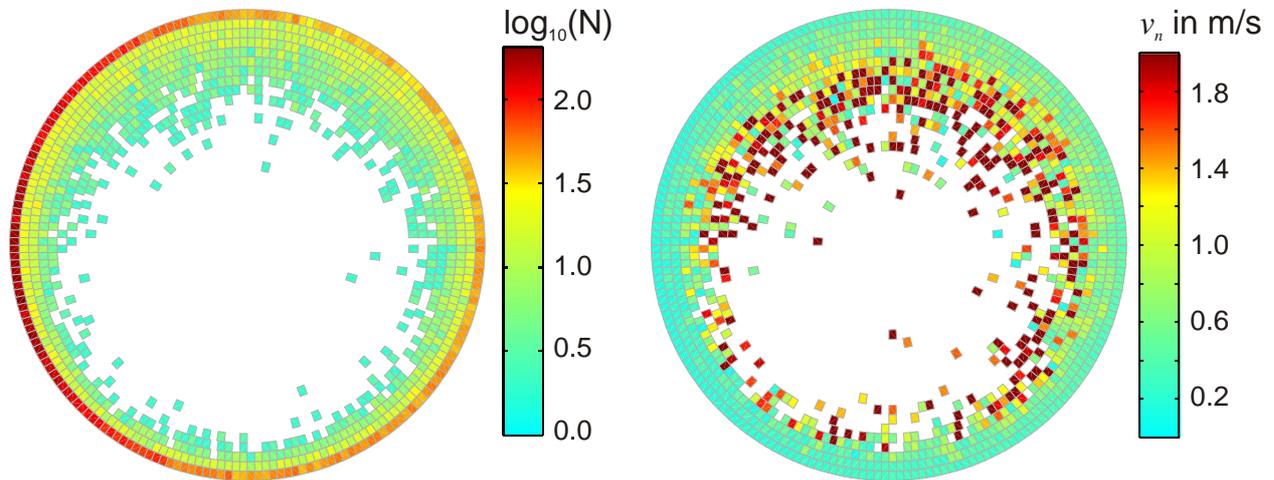


Abbildung 17-13 Normal-Komponente der Kugel-Trommelwand Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen Rechts: Normalkomponente im radialen Schnitt.

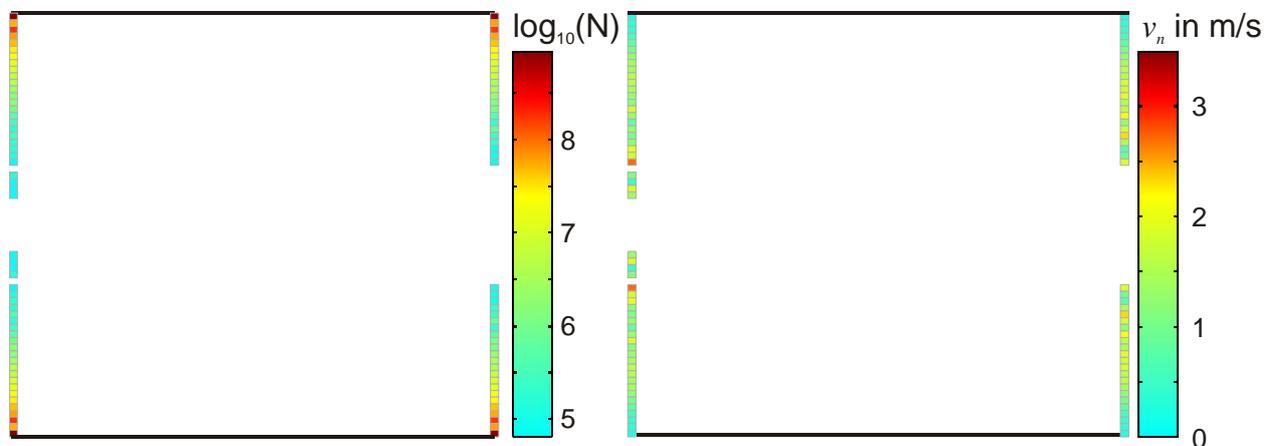


Abbildung 17-14 Normal-Komponente der Kugel-Trommelwand Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen Rechts: Normalkomponente im axialen Schnitt.

17.2.4 Kugel-Rotor Kollisionsklasse

Die Kugel-Rotor Kollisionen bilden die seltenste Kollisionsklasse (0,3), jedoch diejenige mit den höchsten Kollisionsgeschwindigkeiten. Beim Vergleich der Kollisionshäufigkeit und der Kollisionsintensität tritt bzgl. der Häufigkeit der linke obere Bereich der Mahlkammer deutlich hervor, während die Kollisionsgeschwindigkeit in diesem Bereich relativ gering ist, weil die Kugeln dort fast mit Rotorgeschwindigkeit fliegen und daher der Impulsübertrag geringer ist (Abbildung 17-15).

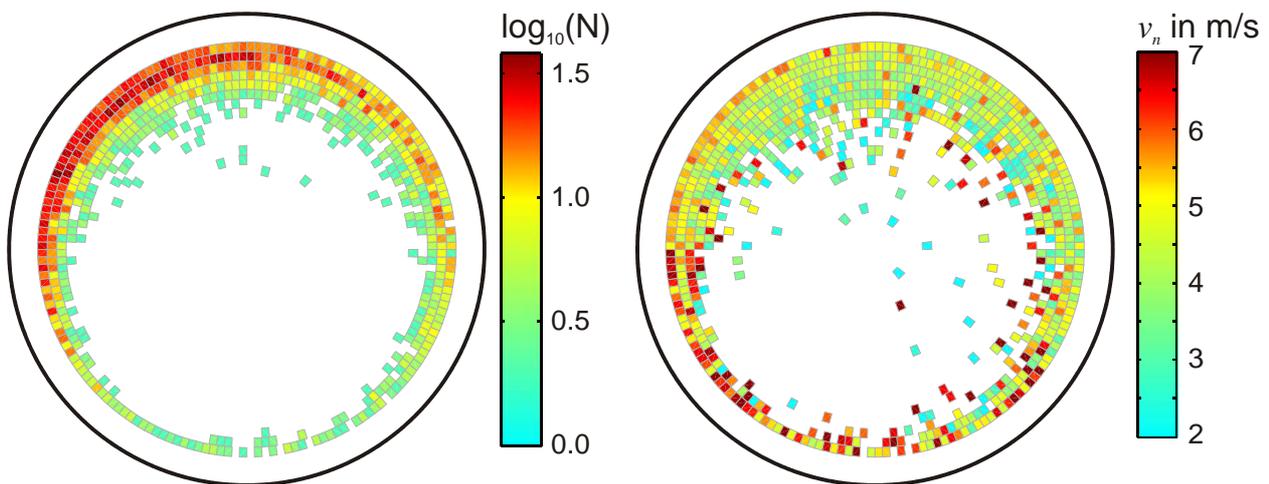


Abbildung 17-15 Normal-Komponente der Kugel-Rotor Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen
Rechts: Normalkomponente im radialen Schnitt.

Aus Abbildung 17-16 ist die Breite der fünf Rotoren ersichtlich. Die Kollisionshäufigkeit nimmt von innen nach außen zu, proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Kugeln. Die Kollisionsgeschwindigkeit ist in etwa entsprechend der Umfangsgeschwindigkeit am Rotorradius.

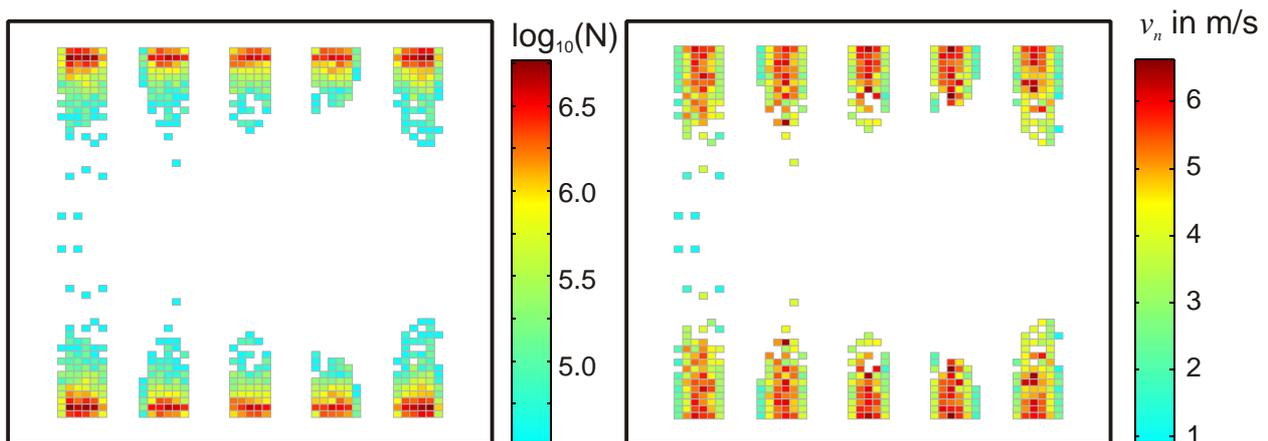


Abbildung 17-16 Normal-Komponente der Kugel-Rotor Kollisionen. Links: Häufigkeit der Kollisionen
Rechts: Normalkomponente im axialen Schnitt.

17.2.5 Geschwindigkeitsverteilung pro Kollisionsklasse

Bei der Analyse der Kollisionsklassen stellt sich einerseits die Frage nach deren Anteil an der Gesamtzahl der Kollisionen, andererseits die Frage nach der Geschwindigkeitsverteilung innerhalb der Kollisionsklassen.

Die Geschwindigkeitsverteilungen getrennt nach Kollisionsklassen (Abbildung 17-17) zeigen, dass die Verteilungsform der Kugel-Rotor Kollision sich erheblich von den anderen Verteilungen unterscheidet. Während die Verteilung der Kugel-Rotor Kollision eher einem Halbkreis ähnelt, ähneln die anderen Verteilungen zwar eher einer Weibull Verteilung, jedoch lassen sich die Verteilungen nicht zufrieden stellend an diese Formen anpassen.

Überraschend ist die Übereinstimmung zwischen den Verteilungen der Kugel-Trommelwand Kollisionen (rot) und Kugel-Kugel Kollision (blau), denn die Normalkomponente der Kugel-Trommelwand Kollision entspricht der Kugelgeschwindigkeit in axialer Richtung.

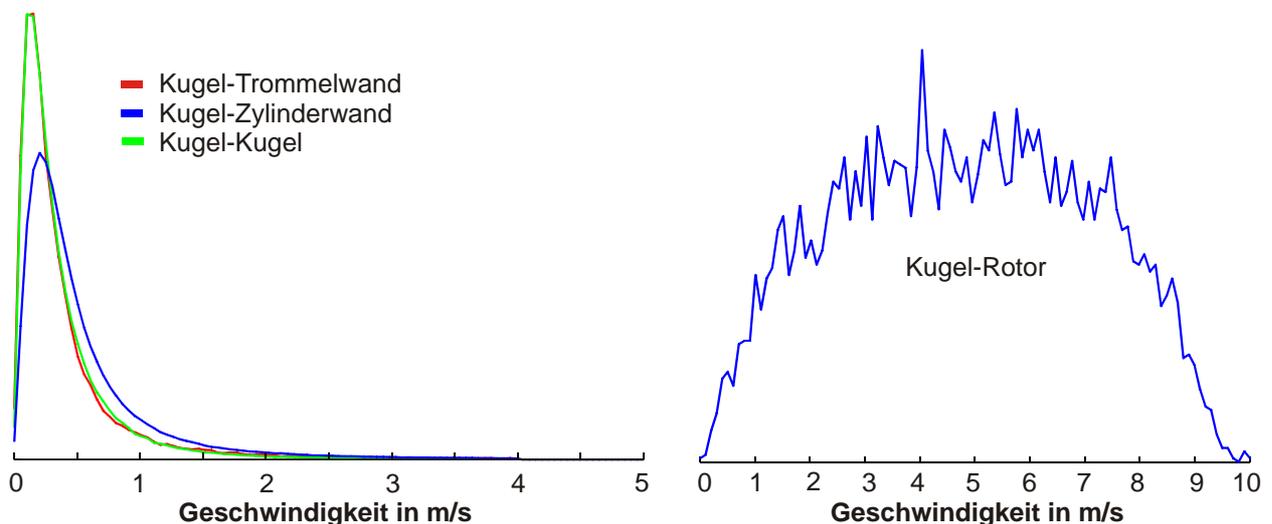


Abbildung 17-17 Histogramme der einzelnen Normalkomponenten. Links: Kugel-Kugel, Kugel-Zylinderwand und Kugel-Trommelwand. Rechts: Kugel-Rotor

Die Verteilung aller Kollisionsklassen zeigt im Wesentlichen die Form der Kugel-Kugel Kollision, weil diese den größten Anteil (77 %) an den Kollisionen hat. Abbildung 17-18 zeigt links die Geschwindigkeitsverteilung und rechts die kumulierte normierte Verteilung.

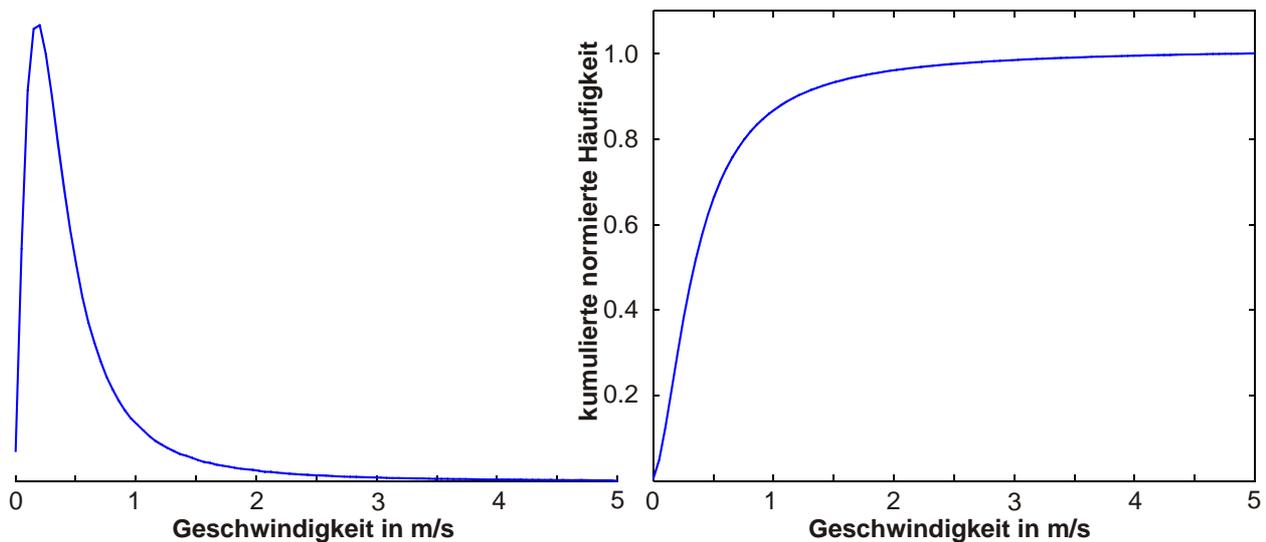


Abbildung 17-18 Links Histogramme der Normalkomponente. Rechts kumulierte normierte Häufigkeit der Normalkomponente

Das Maximum der Verteilung liegt bei 0,17 m/s. Dies entspricht der Geschwindigkeit einer Kugel aus einer Fallhöhe von nur ca. 1,5 mm – selbst bei einer Drehzahl von 1700 rpm!

Kollisionen mit hoher kinetischer Energie sind in der „Hochenergie“-Kugelmühle relativ selten. Dass die häufigsten Kollisionsgeschwindigkeiten für die Mahlwirkung dieser Mühle nicht entscheidend sein können, um Pulver mit Korngrößen im Nanometerbereich entstehen zu lassen, liegt auf der Hand. Vielmehr müssen die zwar sehr viel selteneren, aber die Kollisionen mit hohen Relativgeschwindigkeiten für die Mahlwirkung entscheidend sein.

Wenn beispielsweise eine Mindestgeschwindigkeit von 3 m/s (Fallhöhe ca. 46 cm) erforderlich ist, um ein fiktives Pulver zu zerbrechen, würden nur 1,9 % der Kollisionen (siehe Abbildung 17-18 rechts) diese Bedingung erfüllen. In absoluten Zahlen ausgedrückt bedeutet dies immerhin noch ca. 44.000 Kollisionen pro Sekunde.

18. Parameterstudien mit dem Kollisionsmodell

Das Kollisionsmodell beschreibt den Energieverlust und die Rotationsänderung beim Stoß durch die normalen und tangentialen Restitutionskoeffizienten (siehe Kapitel 6). Die korrekte Bestimmung der beiden Parameter des Kollisionsmodells ist maßgeblich für die Realitätstreue der Simulation verantwortlich. In diesem Kapitel wird der Einfluss der Restitutionskoeffizienten auf das Simulationsergebnis genauer untersucht.

In der Mehrzahl der Simulationen, welche dieses oder ein ähnliches Kollisionsmodell verwenden, wird sowohl von einem geschwindigkeitsunabhängigen Restitutionskoeffizienten als auch von rotationsfreien ideal glatten Kugeln ausgegangen – jüngst noch von HERBST et al. (2004). Dass in den angesprochenen Simulationen das Kollisionsmodell auf diese Weise vereinfacht implementiert wurde, hat mehrere Gründe:

- Den Autoren ist der Einfluss der Geschwindigkeitsabhängigkeit des Energieverlustes beim Kugelstoß nicht bekannt, weil in vielen Veröffentlichungen zu diesem Thema immer noch ein konstanter Restitutionskoeffizient propagiert wird (Herbst et al., 2004).
- Es existieren, auch aus dem o.g. Grund, in der Literatur fast ausschließlich Tabellen für konstante Restitutionskoeffizienten in Abhängigkeit der Materialpaarung.
- Die Kugeln werden der Einfachheit halber als ideal glatte harte Kugeln modelliert und lassen dadurch kein Drehmoment und somit keine Rotationsänderung zu.

18.1 Konstante normale Restitution

Es wurden diverse Parameterstudien durchgeführt, bei denen der tangential Restitutionskoeffizient mit $\varepsilon_t = 1.0$ so eingestellt war, dass die Kugeln nicht rotieren. Die Parameter wurden, wie in Tabelle 18-1 angegeben, variiert.

Parameter	Min.	Max.	Schrittweite
ε_n	0,80	0,95	0,01
Kugelanzahl	2000	5000	200
Drehzahl	900	2000	100

Tabelle 18-1 Übersicht der Parameter für die Parametervariation.

Insgesamt wurden folglich 3072 Simulationsexperimente mit konstantem Restitutionskoeffizient durchgeführt. Jede Simulation hatte eine Simulationszeit von 30 Sekunden. Die Rechenzeit für diese Parameterstudie betrug in Summe ca. 480 Tage. Verteilt auf 250 Knoten des Rubens-Cluster lagen alle Ergebnisse nach 46 Stunden (ein Wochenende) vor.

Bei den Experimenten wurde alle 0,01 Sekunden die absolute Geschwindigkeit der Kugeln gemessen und nur der Median der Geschwindigkeit, als Repräsentant für die Ge-

schwindigkeitsverteilung, verwendet. Alle 3072 Versuche zeigten einen ähnlichen sägezahnförmigen Verlauf des Medians der Kugelgeschwindigkeit während der Simulationszeit. Abbildung 18-1 zeigt exemplarisch den Versuch mit $\varepsilon_n = 0,9$, 1300 rpm und 4000 Kugeln. Die Frequenz des sägezahnförmigen Verlaufs ist annähernd konstant.

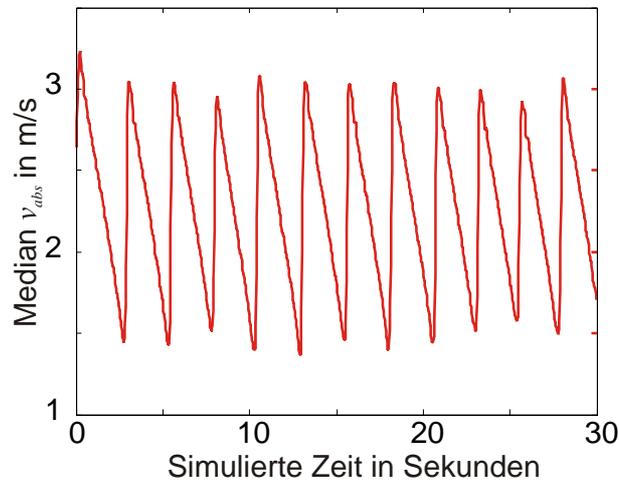


Abbildung 18-1 Median der absoluten Geschwindigkeit der Simulation mit $\varepsilon_n = 0,9$, 1300 rpm und 4000 Kugeln.

Bei den anderen Simulationsexperimenten bewirkte die Erhöhung der Drehzahl und der Kugelanzahl eine Erhöhung der Amplitude. Die Reduzierung des normalen Restitutionskoeffizienten bewirkt eine Erhöhung der Frequenz.

Um den Grund für das Sägezahnverhalten näher zu untersuchen, wurden einige Versuche wiederholt und Computeranimationen der simulierten Mühle generiert (siehe Kapitel 12.2). Es zeigt sich, dass die anfangs homogen verteilten Kugeln direkt zu Anfang der Simulation vom Rotor gegen die Zylinderwand geschossen werden. Die Kugeln *rollen*¹⁰ in hoher Packungsdichte entlang der Zylinderwand und reduzieren durch Kollisionen untereinander und mit der Zylinderwand aufgrund des konstanten Restitutionskoeffizienten ihre Geschwindigkeit. Dabei sind alle Kugeln außerhalb des Rotorbereichs. Schließlich fällt die Geschwindigkeit aller Kugeln unter einen Schwellwert, an dem die Kugeln, bedingt durch die Gravitation, ins innere der Mühle fallen. Dort werden diese, wie zur Anfangssituation, vom Rotor getroffen, beschleunigt, und rollen wiederum an der Zylinderwand entlang, bis sie wieder nach innen fallen. Dieser Synchronisationseffekt konnte bei allen Simulationen dieser Parametervariation beobachtet werden. Die Kugelgeschwindigkeiten synchronisieren sich vermutlich dadurch, dass schnellere Kugeln ihre Geschwindigkeit an langsamere Kugeln abgeben und selbst wiederum durch schnellere Kugeln angestoßen werden. Bei jeder Kollision geht derselbe Prozentsatz an Energie verloren, so dass alle Kugeln eine ähnliche Geschwindigkeit haben. In der

¹⁰ Der Begriff *rollen* wird hier verwendet, weil die Kugeln im Video diesen Anschein erweckten. Da keine Rotation in dieser Simulation zugelassen war und der ereignisdiskrete Algorithmus an sich keine rollende Bewegung abbilden kann, ist dieser Begriff streng genommen nicht korrekt.

photorealistischen Computeranimation werden die Kugelgeschwindigkeiten farbkodiert dargestellt (siehe Kapitel 12.2). In diesen Filmen zeigen alle Kugeln denselben Farbton, welcher sich für alle Kugeln gemeinsam langsam ändert – die Kugeln werden langsamer – bis schließlich die Kugeln kollabieren und ins innere Fallen. In der Beschleunigungsphase zeigen alle Kugeln einen unterschiedlichen Farbton, bis sie schließlich wieder an der Zylinderwand entlang rollen und sich die Farbkodierung wieder einheitlich einstellt (Synchronisationszeitpunkt). An dieser Auswertung zeigen sich abermals die Stärken der Visualisierung als Analyseinstrument, denn alternativ hätte diese Erkenntnis auch durch langwierige Untersuchungen der zeitlichen Entwicklung der Geschwindigkeitsverteilungen erfolgen können.

Der linear fallende Teil der Sägezahnkurve aus Abbildung 18-1 entspricht dem linearen Energieverlust aufgrund des konstanten normalen Restitutionskoeffizienten. Die fast vertikalen Steigungen entsprechen der Beschleunigungsphase der in die Trommel gefallenen Kugeln.

Das Verhalten der Kugeln, sich an die Zylinderwand zu schmiegen, wird vor allem durch die Kugel-Zylinderwand Kollisionen verursacht. Da nur die Normalenkomponente des Geschwindigkeitsvektors verkürzt wird und die tangentielle Komponente unverändert bleibt, wird der Einfallswinkel der Kugel zunehmend flacher (siehe Kapitel 9.3 und Kapitel 6.1).

Das hier simulierte Verhalten entspricht bei keinem der 3072 verwendeten Parameter der Realität. Während des Betriebs der Maschine müsste, entsprechend der Sägezahnfrequenz, alle 3 bis 4 Sekunden die Maschine, bedingt durch die nur dann auftretenden Kugel-Rotor Kollisionen, sehr laut werden. Faktisch ist dies aber nicht der Fall. Folglich ist die Simulation der Mühle, unter Verwendung der hier variierten konstanten Restitutionskoeffizienten, nie realitätsgetreu. Das Kollisionsmodell ist somit unzulässig vereinfacht.

18.2 Dynamische normale und tangentielle Restitution

In diesem Kapitel wird für den normalen Restitutionskoeffizienten die in Kapitel 7.2 experimentell bestimmte phänomenologische Funktion verwendet. Der tangentielle Restitutionskoeffizient wurde als konstanter Wert zwischen $\varepsilon_t = 0,7$ und $\varepsilon_t = 0,95$ variiert, weil keine experimentellen Daten vorliegen.

Abbildung 18-2 zeigt exemplarisch den Versuch mit $\varepsilon_n = \text{dynamisch} = f(v_n)$, $\varepsilon_t = 0,9$, 1000 rpm und 4000 Kugeln. Nach kurzer Beschleunigungsphase der anfangs isotrop verteilten Kugeln erreicht der Simulation nach ca. 0,2 Sekunden den stationären Zustand (siehe Kapitel 13.2). Der Median der absoluten Geschwindigkeit ist um den Wert von ca. 1,2 m/s verrauscht.

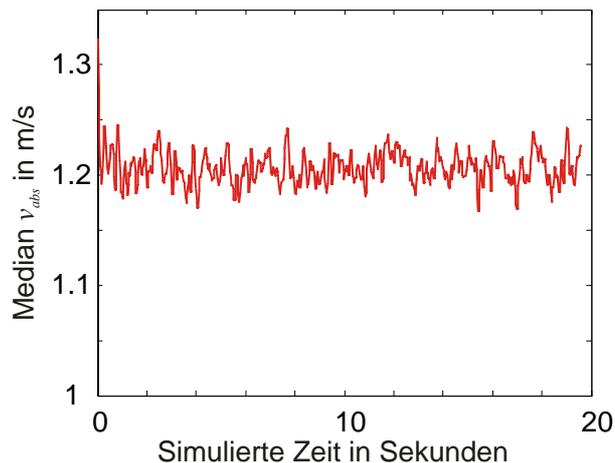


Abbildung 18-2 Median der absoluten Geschwindigkeit der Simulation mit $\varepsilon_n = f(v_n)$, $\varepsilon_t = 0,9$, 1000 rpm und 4000 Kugeln. Die Simulation befindet sich nach 0,2 Sekunden im stationären Zustand.

Es wurden Computeranimationen mit den Betriebsparametern und der Bildfrequenz angefertigt, die den vorliegenden Hochgeschwindigkeitsaufnahmen der transparenten Mahlkammer entsprechen (siehe Kapitel 7.1). Beide Videos wurden zu einem Video zusammengesetzt, so dass der direkte Vergleich von Computersimulation und Experiment möglich ist. Durch visuellen Vergleich des Bewegungsverhaltens hat sich ein Wert von $\varepsilon_t = 0,9$ als realitätstreu unabhängig von der Kollisionsklasse erwiesen.

Bei der Kollision mit den Wänden bewirken höhere Werte von ε_t , dass die Kugeln sich zu flach an diese anschmiegen. Niedrigere Werte von ε_t bewirken, dass die Kugeln von den Wänden zu stark ins innere der Trommel reflektiert werden. Dieses Verhalten wird durch das Kollisionsmodell begründet, weil sich der Ausfallswinkel durch steigende Werte von ε_t vergrößert (siehe Kapitel 9.3 und Kapitel 6.1).

18.3 Einfluss der tangentialen Restitution

Obwohl der tangential Restitutionskoeffizient empirisch in Kapitel 18.2 bestimmt wurde, werfen die eklatanten Unterschiede der stationären Zustände von Abbildung 18-1 verglichen mit Abbildung 18-2 die Frage auf, bei welchem Wert für den tangentialen Restitutionskoeffizienten sich das dynamische Verhalten der Mühle qualitativ ändert.

Aus diesem Grund wurden zunächst Parametervariationen des tangentialen Restitutionskoeffizienten im Bereich von $\varepsilon_t = 0,85 \dots 1,00$ in Schrittweite 0,01 durchgeführt. Aus den Simulationsergebnissen wurden photorealistische Videos generiert (siehe Kapitel 12.2) und jeweils vier Simulationen in einem Video zusammengesetzt.

Abbildung 18-3 zeigt ein Standbild eines Videos mit vier Parametervariationen. Die ersten drei Bilder zeigen den Zustand für $\varepsilon_t = 0,85$; 0,90 und 0,95.

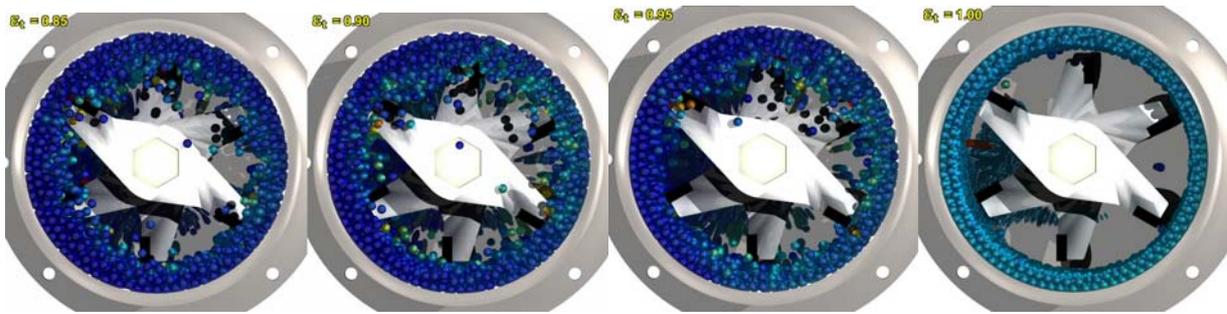


Abbildung 18-3 Standbild aus den Videos zur Analyse der tangentialen Restitution. Die Restitutionskoeffizient wurde von links nach rechts erhöht (von links nach rechts: 0,85; 0,90; 0,95; 1,00). Während sich die ersten drei Bilder noch recht ähnlich sehen, ist ein deutlicher Unterschied zum letzten Bild zu erkennen. Die Kugeln rollen dort in zwei Lagen an der Tommelwand entlang.

Diese ersten drei Bilder unterscheiden sich nur geringfügig. Mit zunehmendem tangentialen Restitutionskoeffizienten befinden sich die Kugeln weiter außen. Beim letzten Bild ist die Situation mit $\varepsilon_t = 1,0$ dargestellt – ohne Rotationsfreiheitsgrad. Zwischen dem Parameter $\varepsilon_t = 0,95$ und $\varepsilon_t = 1,0$ wird das Verhalten der Kugeln realistischer. Dieser Bereich wurde mit weiteren Parametervariationen untersucht, in dem der tangentiale Restitutionskoeffizient in Schrittweiten von 0,002 variiert wurde. Als Indikator dient der Median der absoluten Geschwindigkeit der Kugeln.

Abbildung 18-4 zeigt als 3D-Fläche den zeitlichen Verlauf des Medians bei ansteigendem tangentialen Restitutionskoeffizienten. Der Wert des Medians ist gleichzeitig farb-kodiert dargestellt. Im vorderen Bereich ($\varepsilon_t < 0,98$) ist erkennbar, dass der Median nach der kurzen Einschwingphase in ein Rauschen um einen zeitlich konstanten Mittelwert übergeht. Im hinteren Bereich ($\varepsilon_t > 0,98$) ändert sich das Verhalten und der zeitliche Verlauf des Medians beginnt sinusförmig zu schwingen, um dann in einen sägezahnförmigen Verlauf ($\varepsilon_t \sim 1,0$) überzugehen was der Darstellung in Abbildung 18-1 entspricht.

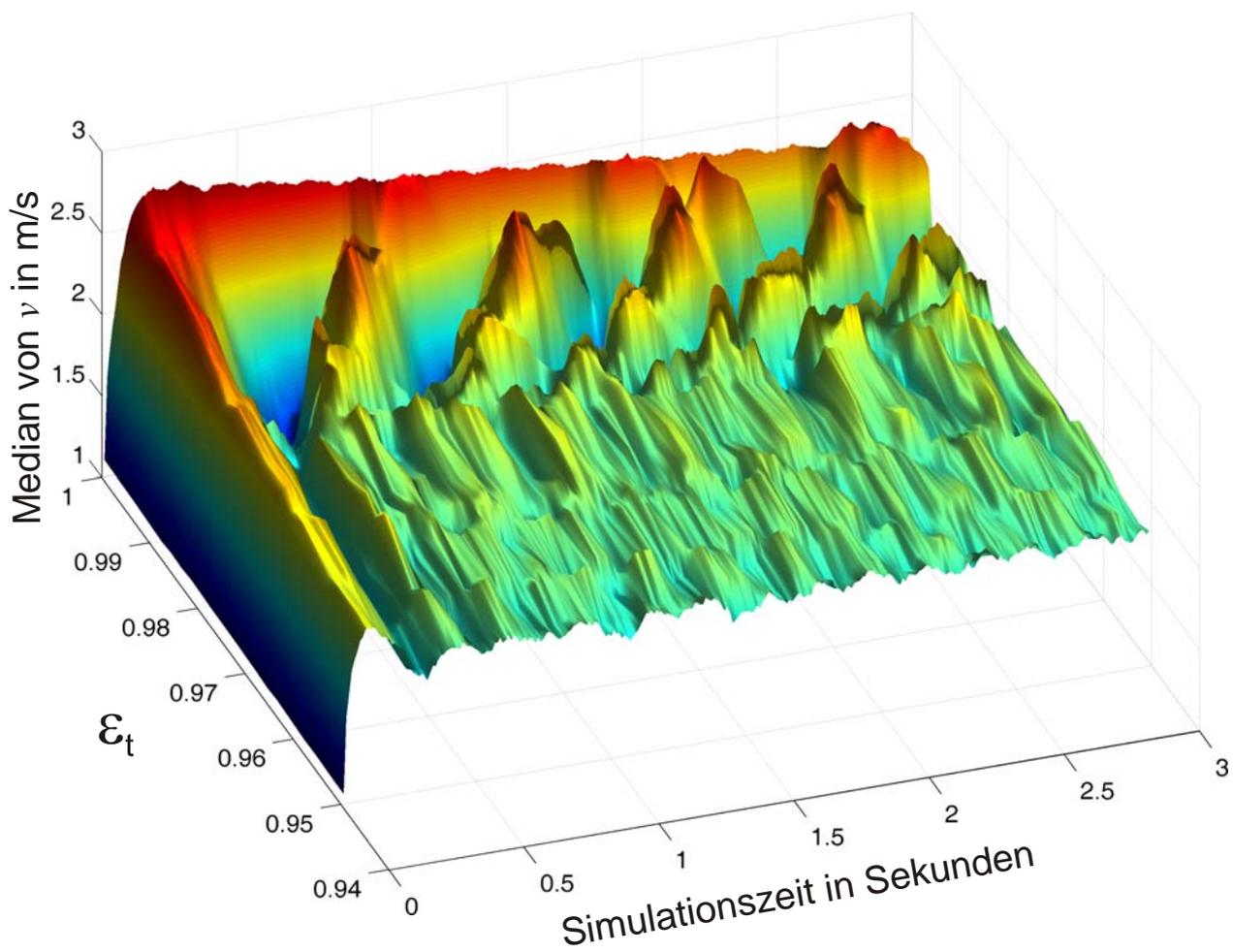


Abbildung 18-4 Parametervariation des tangentialen Restitutionskoeffizient im Bereich $\varepsilon_t = 0,95 \dots 1,00$ in Schrittweite 0,001 als 3D-Oberfläche. Dargestellt ist der Median der absoluten Geschwindigkeit der Kugeln bis 3,0 Sekunden. Ab ca. $\varepsilon_t = 0,98$ ändert sich das stationäre Verhalten und der Median beginnt sinusförmig zu schwingen.

Um den Übergangsbereich deutlicher zu identifizieren sind dieselben Daten in Abbildung 18-5 als Konturplot dargestellt. Die farbigen Flächen illustrieren die Zonen mit gleichwertigem Median der absoluten Geschwindigkeit. Die Farbverteilung ist in Abbildung 18-5 und Abbildung 18-4 dieselbe, um die beiden Abbildungen besser vergleichen zu können. Der Bereich der stationären Schwingung befindet sich oberhalb von $\varepsilon_t > 0,985$. Unterhalb von $\varepsilon_t < 0,98$ geht der Systemzustand nach einem Einschwingvorgang, erkennbar an dem gelben Maximum und dem blauen Minimum (vertikale Streifen), in ein Rauschen um einen zeitlich konstanten Mittelwert über.

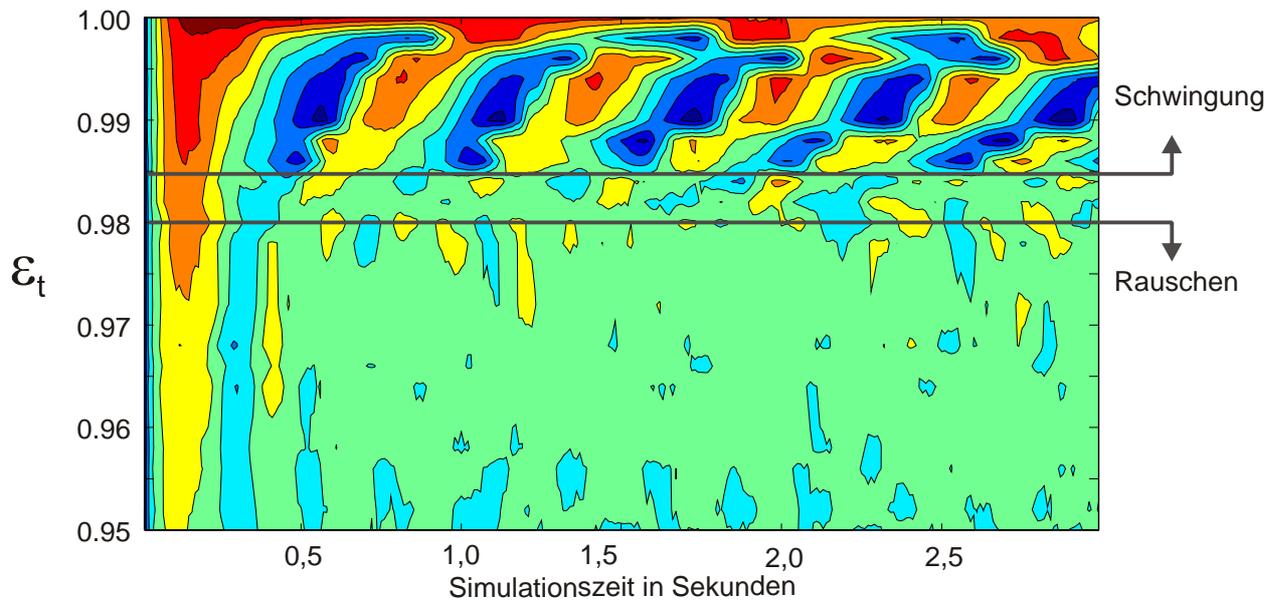


Abbildung 18-5 Dieselben Daten als farbkodierten Konturplot. In dieser Darstellung ist der Übergangsbereich der Form des stationären Zustands leichter zu erkennen. Im Bereich links unten ist an den vertikalen gelben und blauen Bereichen die Einschwingphase zu erkennen. Das stationäre Rauschen liegt für $\varepsilon_t < 0,98$ vor, die Schwingung für $\varepsilon_t > 0,985$.

Die Analyse der Parametervariation des tangentialen Restitutionskoeffizienten bestätigt die Vermutung, dass die Rotationsfreiheitsgrade der Kugeln das Verhalten des Systems stark beeinflussen und diese Freiheitsgrade nicht vernachlässigt werden dürfen. Schon bei geringen Abweichung vom idealen Zustand ohne Rotation ($\varepsilon_t < 0,985$) ändert sich das System von realitätsfernen Schwingungen zugunsten des realistischeren Rauschens des Medians der absoluten Geschwindigkeit.

19. Variation der Betriebsparameter

Um den Einfluss der Drehzahl und der Kugelanzahl auf das Bewegungsverhalten bzw. die von der Maschine abzugebende Motorleistung zu untersuchen, wurden auf dem Rubens-Cluster einige Parameterstudien durchgeführt. Dabei wurde die Drehzahl von 800 rpm bis 2000 rpm in 13 Schritten von 100 rpm variiert und außerdem die Kugelanzahl von 2000 Kugeln bis 5000 Kugeln in 16 Schritten von 200 Kugeln erhöht (siehe Tabelle 19-1). Der normale Restitutionskoeffizient wurde entsprechend der phänomenologischen Gleichung aus Kapitel 7.2 verwendet. Als tangentialer Restitutionskoeffizient wurde der in Kapitel 18.2 als realitätstreu ermittelte Wert von $\varepsilon_t = 0,9$ verwendet. Die Simulationszeit betrug 30 Sekunden.

Parameter	Min.	Max.	Schrittweite
Kugelanzahl	2000	5000	200
Drehzahl	800	2000	100

Tabelle 19-1 Übersicht der Parameter für die Parametervariation.

19.1 Absolute Geschwindigkeit

Als Datenbasis dient Mittelwert des Medians der absoluten Geschwindigkeit.

Abbildung 19-1 links zeigt den Median der absoluten Geschwindigkeit als 3D-Fläche in Abhängigkeit von Kugelanzahl und Rotordrehzahl. Abbildung 19-1 rechts zeigt dieselben Daten als Konturplot mit den Höhenlinien des Median der absoluten Geschwindigkeit. Die absolute Geschwindigkeit der Kugeln wird maßgeblich von der Rotordrehzahl beeinflusst. Sie steigt nahezu linear mit der Rotordrehzahl an. Die Kugelanzahl hat nur geringen Einfluss auf die Kugelgeschwindigkeit.

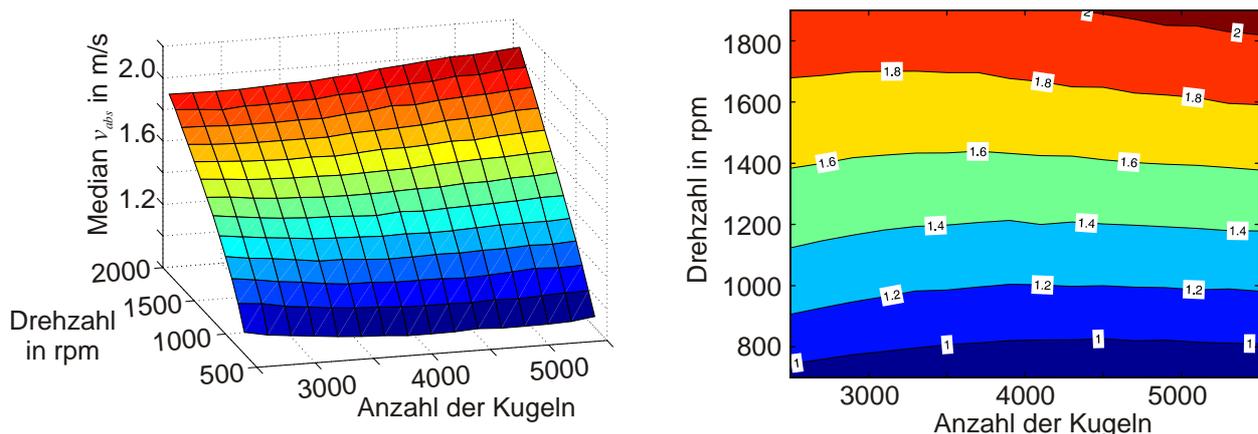


Abbildung 19-1 Links: Kennfeld des Median als Repräsentant für die absolute Geschwindigkeit der Kugeln in Abhängigkeit von Rotordrehzahl und Kugelanzahl. Rechts: Dieselben Daten als Konturplot der absoluten Geschwindigkeit. Die Geschwindigkeit der Kugeln ist hauptsächlich abhängig von der Rotordrehzahl.

Das Verhalten wurde so erwartet und begründet die in Kapitel 3.3 vorgestellten empirischen Skalierungsregeln, welche immer von der Umfangsgeschwindigkeit der Rotoren ausgehen. Abbildung 19-1 untermauert die empirische Annahme, dass die Kugelge-

schwindigkeit proportional zur Umfangsgeschwindigkeit der Rotoren und unabhängig von der Kugelanzahl ist.

19.2 Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit

Als Datenbasis für die folgenden Untersuchungen dient der zeitliche Mittelwert des Medians der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit.

Abbildung 19-2 links zeigt den Median der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit als 3D-Fläche in Abhängigkeit von Kugelanzahl und Rotordrehzahl. Abbildung 19-2 rechts zeigt dieselben Daten als Konturplot mit den Höhenlinien.

Die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit wird im Gegensatz zur absoluten Geschwindigkeit sowohl von der Kugelanzahl als auch von der Rotordrehzahl beeinflusst. Abbildung 19-2 rechts verdeutlicht den stark nichtlinearen Einfluss dieser beiden Betriebsparameter.

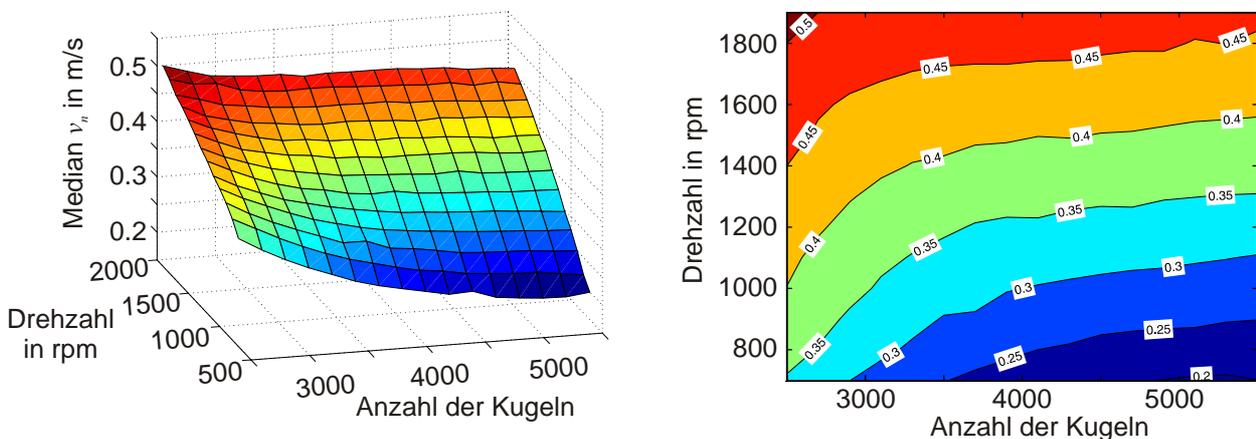


Abbildung 19-2 Links: Kennfeld des Median als Repräsentant für die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit der Kugeln in Abhängigkeit von Rotordrehzahl und Kugelanzahl. Rechts: Dieselben Daten als Konturplot der Normalkomponente. Die Normalkomponente der Kugeln ist abhängig von der Rotordrehzahl und Kugelanzahl.

Das Verhalten widerspricht den in Kapitel 3.3 vorgestellten empirischen Skalierungsregeln. Denn nicht die absolute Geschwindigkeit der Kugeln ist für die Mahlwirkung bestimmend, sondern die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit, weil diese für den Druck zwischen den kollidierenden Oberflächen und somit für die Zerkleinerung des Mahlguts verantwortlich ist (siehe Kapitel 3.2.1).

19.3 Abschätzung der mechanischen Motorleistung

Ein wichtiger Punkt bei der Auslegung von Hochenergiekugelmühlen ist die Abschätzung der benötigten mechanischen Leistung des Motors. Für die Entwicklung neuer Maschinengrößen ist dies ein wichtiger Parameter. Im Hinblick auf die Überprüfung der Realitätstreue der Simulation, ist die Motorleistung ein experimentell bestimmbarer Wert. Die bisherige Ausstattung der Maschinen lässt jedoch keine korrekte Messung des Drehmoments und damit der Leistungsabgabe zu.

Für die Simulation der mechanischen Motorleistung können zwei verschiedene Wege beschrieben werden, die beide auf dasselbe Ergebnis führen. Die Motorleistung wird allein durch die Kugel-Rotor Kollisionen beeinflusst. Anhand der Kugel-Rotor Kollisionen bieten sich folgende beide Möglichkeiten an:

1. Die Kugeln treffen in einem messbaren Abstand zur Rotationsachse des Motors auf den Rotor und üben aufgrund der Impulsänderung bei der Kugel-Rotor Kollision eine Kraft in diesem Abstand zur Rotationsachse aus. Diese Kraft entspricht daher dem Drehmoment, welches der Motor aufbringen muss.
2. Die Kugeln werden durch die Kugel-Rotor Kollision beschleunigt und gewinnen an kinetischer Energie. Außerdem geht durch die Kollision entsprechend dem Kollisionsmodell Energie verloren. Die Summe beider Energien, bzw. der Energiegewinn durch eine potentiell voll elastische Kollision, entspricht der Energie, die der Motor aufwenden muss, um die Kugeln anzutreiben.

Die erste Möglichkeit entspricht der Impulserhaltung, die zweite Möglichkeit der Energieerhaltung.

Als Datenbasis dienen die oben beschriebenen Simulationsexperimente. Die mechanische Arbeit, die während $t = 1.0$ s bis $t = 30.0$ gemessen wurde, wurde in die Leistung während der 29 Sekunden umgerechnet.

Abbildung 19-3 links zeigt das Kennfeld der Motorleistung in Abhängigkeit von Drehzahl und Kugelanzahl. Als Masse der Kugeln wurde die der üblicherweise verwendeten 100Cr6 Stahlkugeln verwendet. Abbildung 19-3 rechts zeigt wiederum dieselben Daten als Konturplot.

Die Motorleistung zeigt ein stark nichtlineares Verhalten. Sie steigt überproportional mit der Anzahl der Kugeln und der Rotordrehzahl. Logischerweise ist die Motorleistung abhängig vom verwendeten Kollisionsmodell, speziell von den beiden Restitutionskoeffizienten. Sollte sich auch Pulver zwischen den Kugeln befinden, dann würde sich der Restitutionskoeffizient in Normalenrichtung vermutlich reduzieren und es würde mehr Leistung erforderlich sein.

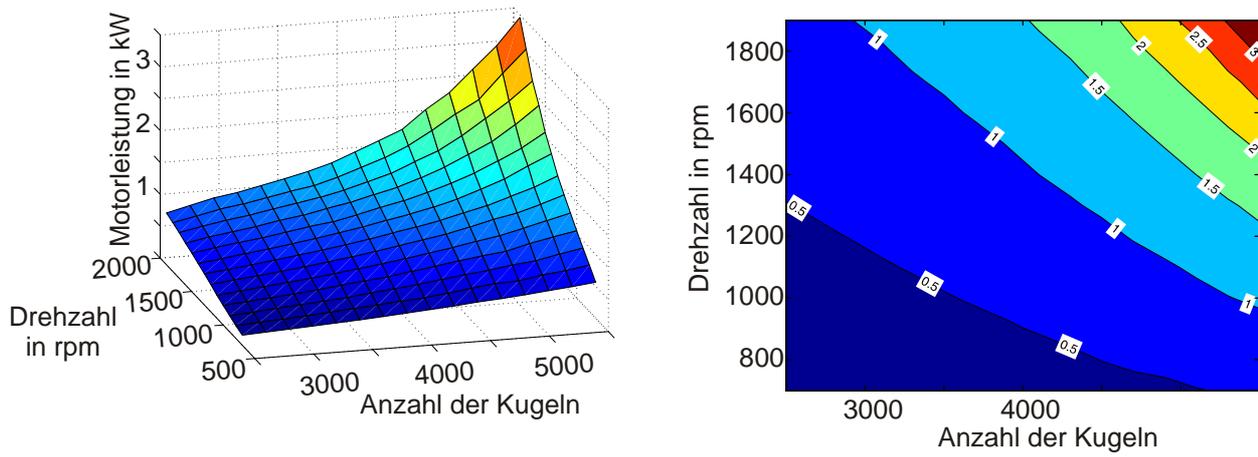


Abbildung 19-3 Links: Kennfeld der durchschnittlichen vom Motor abgegebenen Leistung in Abhängigkeit von Rotordrehzahl und Kugelanzahl. Rechts: Dieselben Daten als Konturplot der Motorleistung. Die vom Motor abgegebene Leistung steigt überproportional mit Rotordrehzahl und Kugelanzahl.

20. Vorschläge zur Konstruktionsänderung

Die im Rahmen dieser Arbeit gewonnen Erkenntnisse zum Bewegungsverhalten der Mahlkugeln in der Mahlkammer und die Analyse der Geschwindigkeitsverteilungen haben ergeben, dass die Mahlkugeln sich bevorzugt am Rand der Trommel auf Kreisbahnen bewegen. Die Kugeln bewegen sich mit relativ hoher Geschwindigkeit durch die Mahlkammer, haben jedoch geringe Relativgeschwindigkeiten. Ziel einer Änderung an den Baugruppen ist es, sowohl die Anzahl der Kugel-Rotor Kollisionen zu steigern, als auch die Relativgeschwindigkeit der Kugeln untereinander zu erhöhen, was Kollisionen mit höherer Intensität nach sich zieht.

In den folgenden Unterkapiteln werden Änderungsvorschläge der drei zentralen Baugruppen vorgestellt, die auf Erkenntnissen, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit gewonnen wurden, beruhen. Diese Erfindungen sind bereits beim Deutschen Patentamt in München eingereicht (Patent, 2005a, 2005b). Die nachfolgend vorgestellten Simulationsergebnisse wurden bisher nicht veröffentlicht, und zeigen exemplarisch an einer nicht optimierten Formänderung das noch auszuschöpfende Potential von Hochenergie-Kugelmühlen.

20.1 Mahlbehälter

Der Mahlbehälter der hier simulierten Hochenergie-Kugelmühle hat, ebenso wie bei allen anderen Rührwerks-Kugelmühlen, einen kreisförmigen Querschnitt. Diese Bauform hat vor allem fertigungstechnische Gründe, da die Behälter in spanender Bearbeitung auf konventionellen Drehmaschinen hergestellt werden können. Sowohl die Experimente mit der transparenten Mahlkammer (Kapitel 7.1) als auch die statistische Auswertung der Computersimulationen (Kapitel 15) haben gezeigt, dass die Kugeln sich im Wesentlichen entlang der zylindrischen Trommelwand bewegen. Die Simulationsergebnisse der Normalkomponente der Kugel-Zylinderwand Kollisionen zeigen sehr geringe Geschwindigkeiten. Experimentell ist dies indirekt dadurch belegt, dass das empfindliche Acrylglas der transparenten Mahleinheit auch nach mehreren Experimenten bei unterschiedlichen Drehzahlen keine merklichen Verschleißerscheinungen aufgewiesen hat. Bei produktionsüblichen Drehzahlen oberhalb von 1000 rpm entfallen weniger als 1 % auf die Kugel-Rotor Kollisionen.

Die Idee ist, die Form des Mahlbehälters so zu verändern, dass die Kugeln von der Trommelwand weg, ins Innere der Mahlkammer bewegt werden. Das eingereichte Patent beinhaltet alle Bauformen, die von einem kreisförmigen oder elliptischen Querschnitt abweichen. Dies kann durch alle Formen erreicht werden, die von der konventionellen konvexen Querschnittsform abweichen, etwa durch Rampen, Wölbungen nach Innen, Epizykloide etc.

20.1.1 Rampen in der Mahlkammer

Die einfachste Änderung der Querschnittsform im o.g. Sinn ist das Hinzufügen von Rampen in die Mahlkammer. Im ereignisdiskreten Algorithmus muss die Kugel-Zylinderwand Kollisionsklasse geändert werden, um eine Mahlkammer mit Rampen korrekt abzubilden. In dem hier vorgestellten Simulationsexperiment wurde stattdessen vereinfachend das Kollisionsmodell der Kugel-Zylinderwand-Kollision abgeändert. Das neue Kollisionsmodell entspricht zweier gegenüberliegender 30° Rampen. Die Form der Zylinderwand wurde nicht verändert, sondern nur die Kollisionsbehandlung.

Wenn eine Kugel in zwei gegenüberliegenden (oben, unten) Bereichen von $\pm 10^\circ$ links und rechts der vertikalen Achse mit der Zylinderwand kollidiert, dann wird die Flächennormale um 30° gegen die x-Komponente der Flugrichtung verdreht. Auf diese Weise wird eine Kollision gegen eine 30° Rampe nachgeahmt, obwohl keine Rampe existiert.

Mit dem neuen Einheitsvektor \vec{e} wird die Berechnung der Kollisionsbehandlung mit Gleichung (9-16) fortgesetzt, um den neuen Geschwindigkeitsvektor der Kugel zu berechnen.

Es wurde mit dieser modifizierten Kollisionsbehandlung der Kugel-Zylinderwand eine Simulation mit denselben Parametern, wie in Kapitel 15 durchgeführt, um die Simulationsergebnisse miteinander zu vergleichen.

Tabelle 20-1 zeigt die Gegenüberstellung der Kollisionsereignisse pro Kollisionsklasse. Mit der modifizierten Mahleinheit finden in Summe weniger Kollisionen im gleichen betrachteten Zeitraum statt. Die Anzahl der Kugel-Rotor Kollisionsereignisse hat sich jedoch verdoppelt, was mit der modifizierten Trommelform auch beabsichtigt wurde.

Kollisionsklasse	Ohne Ablenkung		30° Ablenkung oben / unten	
	Anteil an Gesamtanzahl	Absolut	Anteil an Gesamtanzahl	Absolut
Kugel-Kugel	77,0 %	1.454.868	77,2 %	1.230.453
Kugel-Zylinderwand	20,1 %	378.992	18,7 %	298.280
Kugel-Trommelwand	2,6 %	49.687	3,3 %	52.801
Kugel-Rotor	0,3 %	6246	0,8 %	12.535
		Σ 1.889.793		Σ 1.594.069

Tabelle 20-1 Anteil der Kollisionsklassen an der Gesamtzahl der Kollisionen im betrachteten Zeitraum.

Die Analyse der Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeiten (Abbildung 20-1) zeigt eine deutliche Verschiebung zu höheren Geschwindigkeiten. Abbildung 20-1 rechts verdeutlicht in der kumulierten Darstellung, dass gerade diese, für den Mahlprozess verantwortliche Eigenschaft, wesentlich verbessert wurde. Bei gleicher Rotordrehzahl ist mit erheblich höheren Kollisionsgeschwindigkeiten zu rechnen, obwohl nur zwei Rampen eingebaut wurden.

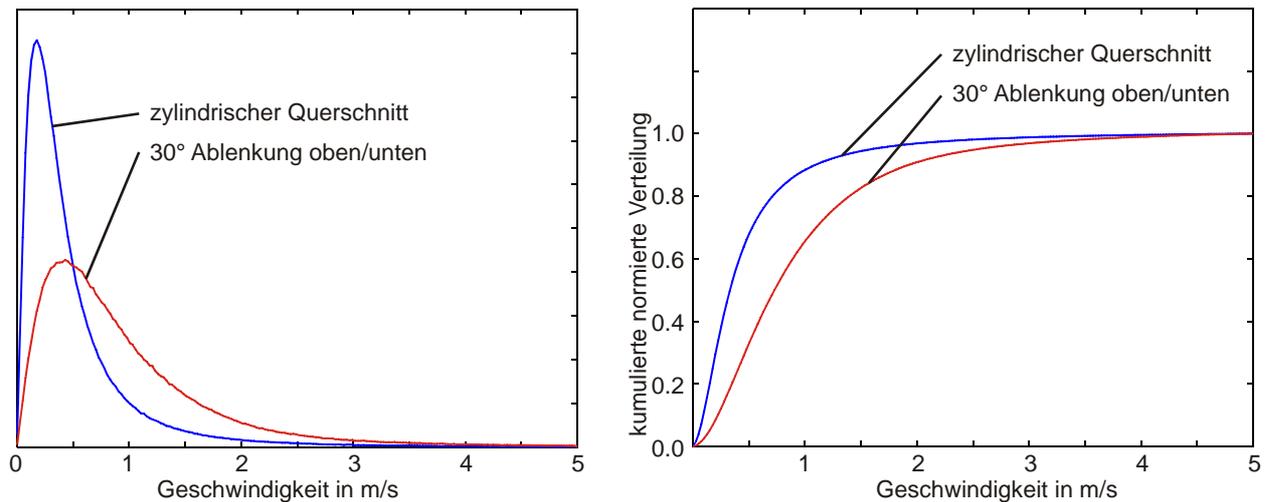


Abbildung 20-1 Histogramme der Normalkomponenten der Kollisionsgeschwindigkeit. Links: Das Histogramm der Mahlkammer mit Ablenkung zeigt eine deutliche Verschiebung zu höheren Geschwindigkeiten im Vergleich zur Mahlkammer mit zylindrischem Querschnitt. Rechts: Vergleich der kumulierten normierten Verteilung.

Die in Abbildung 20-1 dargestellten Ergebnisse setzen sich aus den einzelnen Kollisionssklassen zusammen. Um die Veränderung der Geschwindigkeitsverteilung genauer zu untersuchen, wird im Folgenden jede Kollisionssklasse einzeln mit der Geschwindigkeitsverteilung der Originalform verglichen.

Abbildung 20-2 links zeigt die Geschwindigkeitsverteilung der Kugel-Kugel Kollisionen, rechts ist die Verteilung der modifizierten Kugel-Zylinderwand dargestellt. Wichtig an diesen Darstellungen ist die Erkenntnis, dass nicht nur die Kugel-Wand Kollisionen in ihrer Intensität zugenommen haben, sondern auch die häufigen Kugel-Kugel Kollisionen. Die von der Wand nach innen abgelenkten Kugeln werden von den anderen, tangential fliegenden, Kugeln seitlich getroffen.

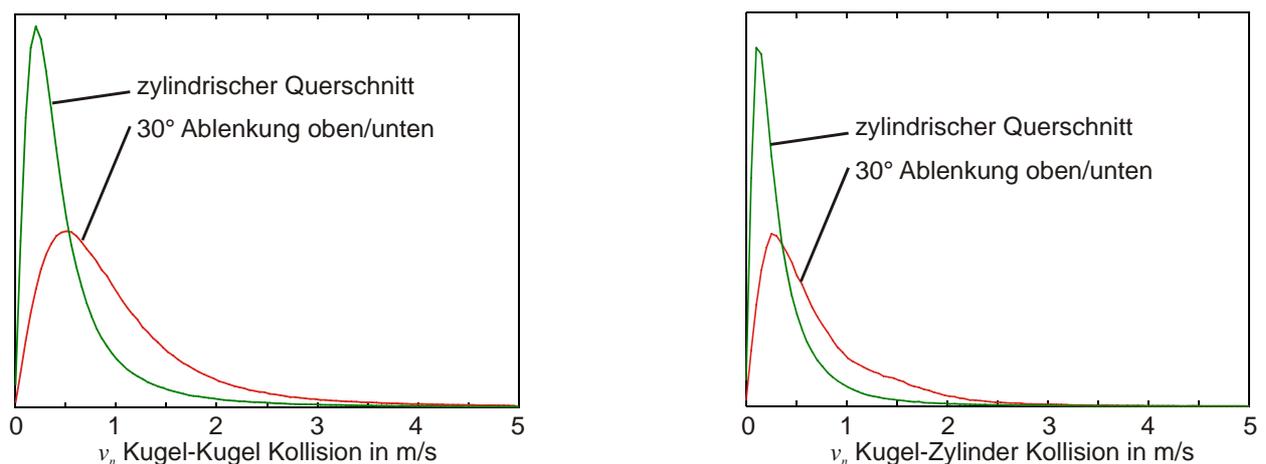


Abbildung 20-2 Links: Vergleich der Verteilung der Kugel-Kugel Kollisionen.
Rechts: Vergleich der Verteilung der Kugel-Zylinderwand Kollisionen.

Abbildung 20-3 links zeigt die Verteilung Kugel-Wand (Seitenwände) Kollisionsgeschwindigkeiten, die dem allgemeinen Trend der höheren Geschwindigkeiten entspricht. Abbildung 20-3 rechts zeigt die Verteilung der Kugel-Rotor Kollisionsgeschwindigkeiten.

Entgegen der üblichen Erhöhung der Kollisionsgeschwindigkeiten ist die Verteilung der Geschwindigkeiten im Vergleich niedriger.

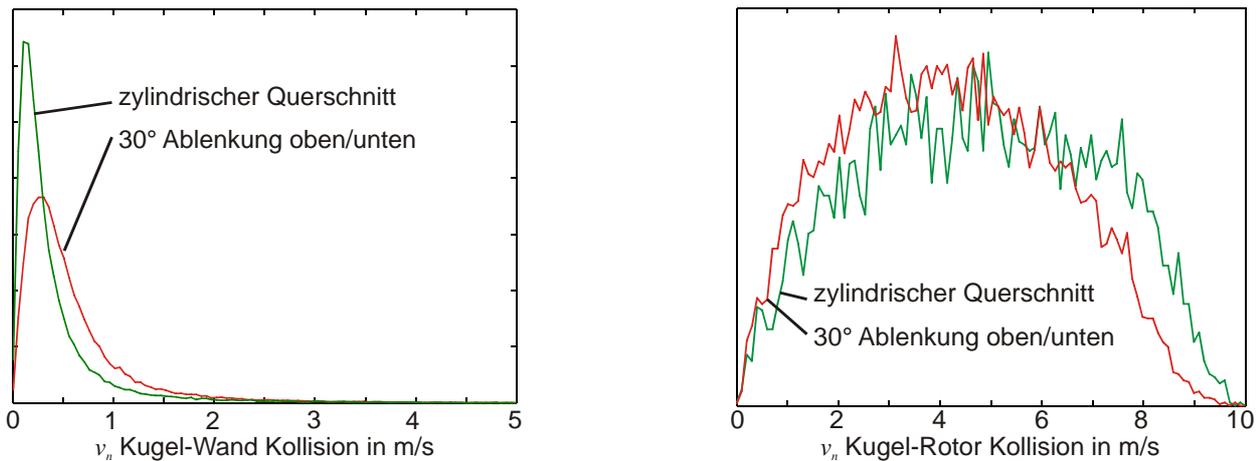


Abbildung 20-3 Links: Vergleich der Verteilung der Kugel-Wand Kollisionen.
Rechts: Vergleich der Verteilung der Kugel-Rotor Kollisionen.

Die Kugeln werden durch den Rotor pro Kollisionsereignis folglich nicht mehr so stark beschleunigt, wie in der Mahlkammer mit der Originalform. Die Anzahl der Kugel-Rotor Kollisionen ist jedoch doppelt so hoch (siehe Tabelle 20-1). In der Praxis bedeutet dies außerdem, dass mit einem geringeren Rotor-Verschleiß zu rechnen ist.

In der weiteren vergleichenden Analyse wird die Darstellungsart aus Kapitel 15 verwendet. Abbildung 20-4 zeigt die beiden Mahlkammern im radialen Schnitt. Die pro Sektor gemittelte Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit ist farbkodiert dargestellt. Rechts ist deutlich erkennbar, dass die Kugeln von den beiden Rampen oben und unten nach Innen abgelenkt und wiederum vom im Uhrzeigersinn drehenden Rotor abgelenkt werden. Der Schwerkrafteinfluss scheint in der modifizierten Mahlkammer nicht so ausgeprägt, wie im Original zu sein.

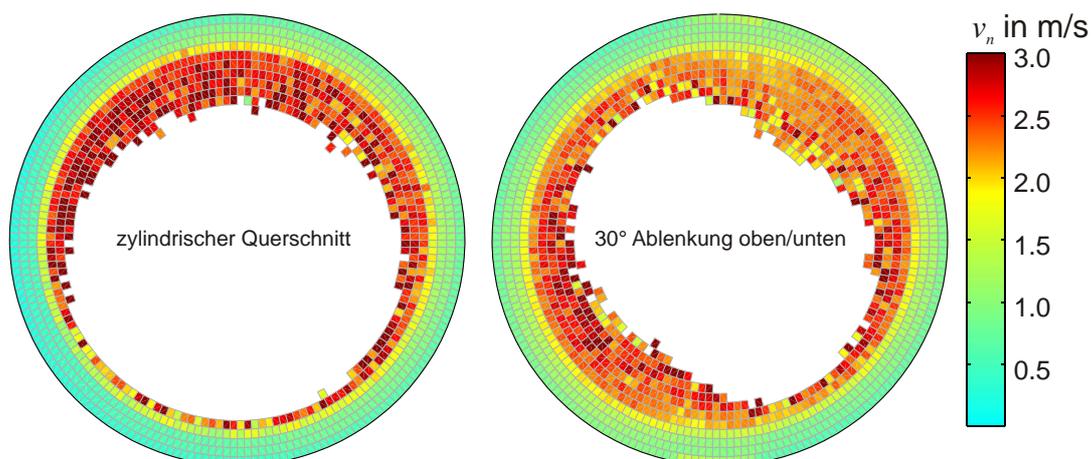


Abbildung 20-4 Radialer Schnitt. Vergleich der durchschnittlichen Kollisionsgeschwindigkeit in Normalen-Richtung. Links: zylindrischer Querschnitt Rechts: 30° Ablenkung oben und unten.

Abbildung 20-5 zeigt vergleichend die Kollisionshäufigkeit. In der Nähe der Rampen finden häufiger Kollisionen statt. Vor den Rampen stauen sich die Kugeln und verursachen wiederum häufigere Kollisionen.

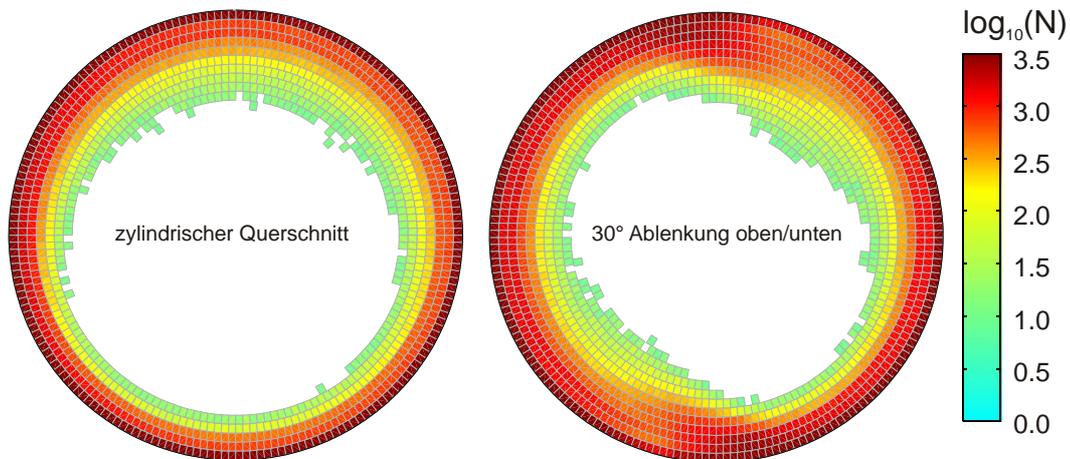


Abbildung 20-5 Radialer Schnitt. Vergleich der Kollisionshäufigkeit. Links: zylindrischer Querschnitt
Rechts: 30° Ablenkung oben und unten.

Abbildung 20-6 zeigt den Vergleich der Kollisionsgeschwindigkeiten im axialen Schnitt. Die Originalform links lässt die höheren Kollisionsgeschwindigkeiten in Rotornähe erkennen.

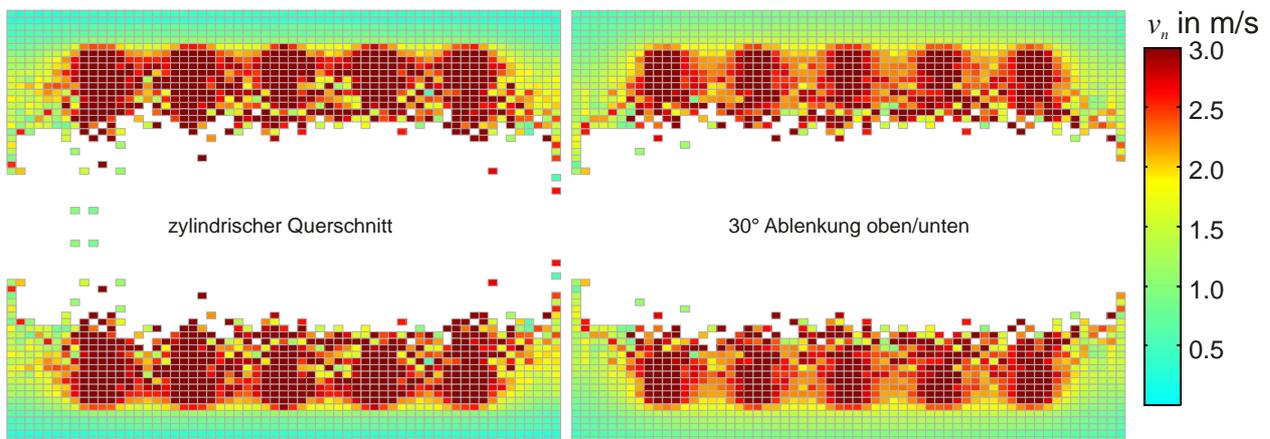


Abbildung 20-6 Axialer Schnitt. Vergleich der durchschnittlichen Kollisionsgeschwindigkeit in Normalen-Richtung. Links: zylindrischer Querschnitt
Rechts: 30° Ablenkung oben und unten.

Abbildung 20-7 zeigt die Kollisionshäufigkeit im radialen Schnitt. Durch die Einteilung in Ringe bei der Zählung der Kollisionseignisse scheint die modifizierte Mahleinheit am Rand generell häufiger Kollisionen zu haben. Faktisch ist es jedoch so, dass die Kollisionen sich nur in der Nähe der Rampen häufen. Der Vergleich der beiden Grafiken zeigt jedoch, dass in den Seitenbereichen links und rechts am Trommelrand die Kollisionen bei der modifizierten Mahlkammer häufiger sind.

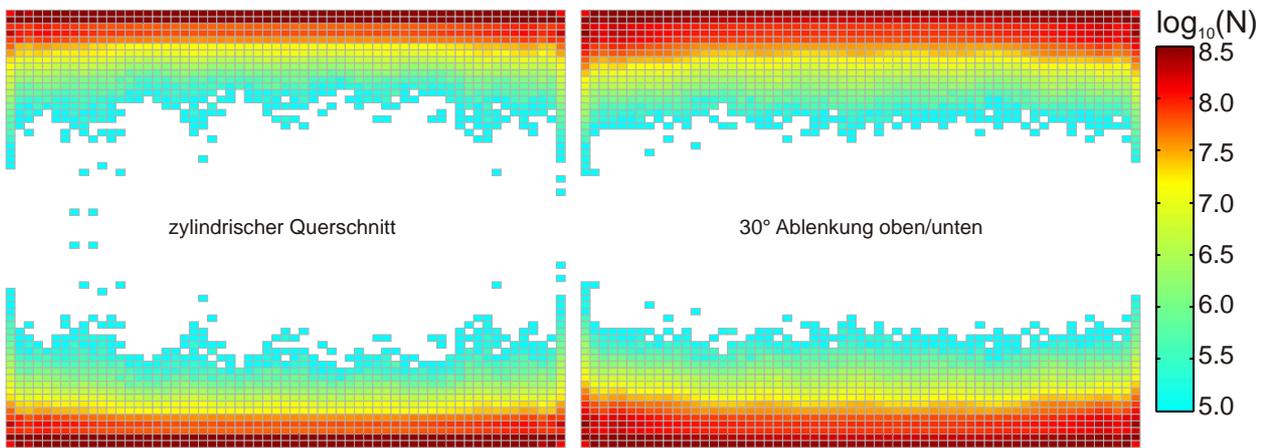


Abbildung 20-7 Axialer Schnitt. Vergleich der Kollisionshäufigkeit. Links: zylindrischer Querschnitt
Rechts: 30° Ablenkung oben und unten.

Um die Unterschiede der beiden Mahlkommerformen deutlicher hervorzustellen wurden in den folgenden Abbildungen die Differenzen pro Sektor gebildet. Abbildung 20-8 zeigt im radialen Schnitt die Differenz der durchschnittlichen Kollisionsgeschwindigkeit (Normalkomponente). Links ist farbkodiert eingetragen, wo die Kollisionsgeschwindigkeiten bei der modifizierten Mahlkommer langsamer sind, rechts, wo sie schneller sind, als in der Originalform. In der Abbildung 20-8 zeigt sich, dass die Schwerkraft sehr wohl Einfluss auf die Kollisionsgeschwindigkeiten hat.

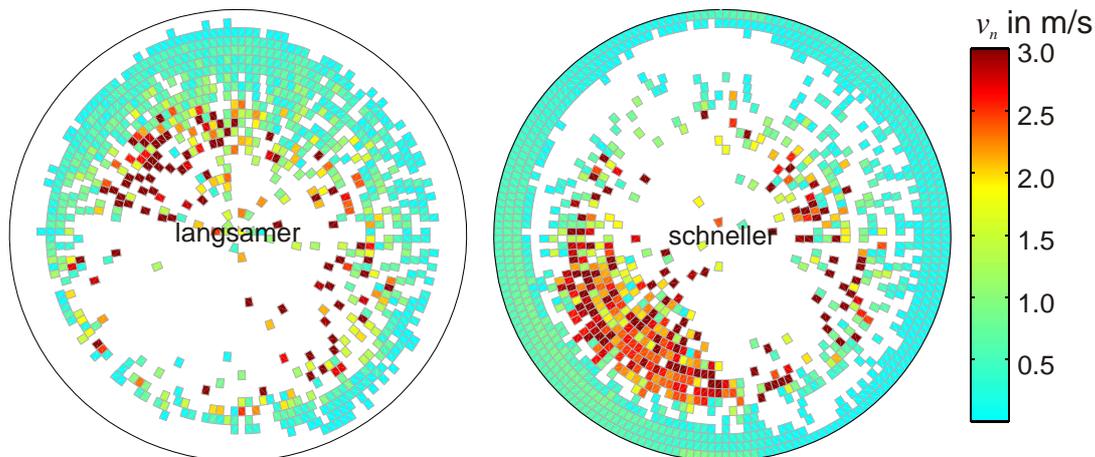


Abbildung 20-8 Radialer Schnitt. Differenz der durchschnittlichen Kollisionsgeschwindigkeiten in Normalenrichtung. Die Farbkodierung gibt den Betrag der Differenzgeschwindigkeiten an. Links: Sektoren, an denen die Geschwindigkeit kleiner ist, als im zylindrischen Querschnitt. Rechts: Sektoren, an denen die Geschwindigkeit größer ist, als im zylindrischen Querschnitt.

Abbildung 20-9 zeigt die Unterschiede in den Kollisionshäufigkeiten. Im Uhrzeigersinn, der Drehrichtung des Rotors, gesehen unmittelbar hinter den Rampen sind Kollisionen erwartungsgemäß seltener. Im unteren linken Bereich der Mahlkommer sind die Kollisionen häufiger.

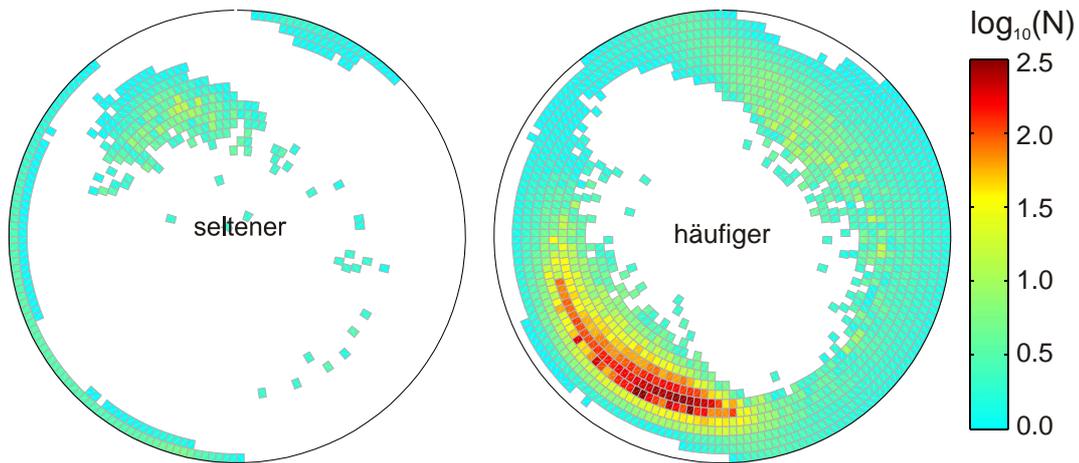


Abbildung 20-9 Radialer Schnitt. Vergleich der Häufigkeitsdifferenz. Die Farbkodierung gibt den Betrag der Häufigkeitsdifferenz an. Links: Sektoren, an denen Kollisionen seltener sind als im zylindrischen Querschnitt. Rechts: Sektoren, an denen die Kollisionen häufiger sind als im zylindrischen Querschnitt.

Eine quantitative Aussage über die Verbesserung durch die beiden Rampen soll ein Vergleich der kinetischen Energien der Kugeln direkt vor der Kollision ergeben. Es wird angenommen, dass alle Mahlkugeln einen Radius $r_{Kugel} = 0,0025$ m haben und aus dem Material 100Cr6 mit der Dichte $\rho = 7,85$ g/cm³ bestehen. Somit erhält man mit Gleichung (20-1) die Masse $m_{Kugel} = 0,52$ g.

$$m_{Kugel} = \frac{4}{3} r_{Kugel}^3 \pi \rho \quad (20-1)$$

Im betrachteten Zeitraum von $t = 0,2$ s bis $t = 1,0$ s werden für jede der beiden Simulationen die Kollisionsenergien E_{kin}^n – resultierend aus der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeiten – aller N Kollisionen summiert.

$$E_{kin}^n = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_{Kugel} (v_i^n)^2 \quad (20-2)$$

Der Vergleich der beiden so summierten Energien ergibt, dass dieser Wert bei der modifizierten Mahlkammer mit dem beiden 30° Rampen um 61,2 % höher liegt, als bei der Originalmahlkammer mit dem kreisförmigen Querschnitt.

Diese Verbesserung wurde allein durch die beiden Rampen erreicht. Es ist damit zu rechnen, dass dieses Ergebnis noch weiter verbessert werden kann, wenn etwa eine Wellenform verwendet wird (siehe Kapitel 20.1.2). Die Wellenform wurde im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht mehr simuliert.

In Kapitel 17.2.5 wurde am Beispiel einer Mindestgeschwindigkeit von 3 m/s (Fallhöhe ca. 46 cm) gezeigt, dass ca. 44.000 Kollisionen pro Sekunde (1,9 %) diese Geschwindigkeit in einer zylindrischen Mahlkammer überschreiten. In der hier simulierten Mahlkammer mit den beiden Rampen überschreiten ca. 72.000 Kollisionen pro Sekunde (4,5 %) diesen Schwellwert bei gleichen Betriebsparametern.

20.1.2 Epizykloide Mahlkamerwand

Als eine geeignete Bauform wird, ohne Beweis durch realisierte Prototypen oder Simulationen, eine wellenförmige Umfangsform vorgeschlagen (siehe Abbildung 20-10). Der Radius $\rho(\varphi)$ der Mantelfläche lässt sich in Abhängigkeit des Winkels φ in Polarkoordinaten beschreiben:

$$\rho(\varphi) = \cos(\varphi \cdot n) \cdot (R - r) + R \quad \text{mit} \quad 0 \leq \varphi < 2\pi \quad (20-3)$$

In Gleichung (20-3) ist die Anzahl der Wellen mit n angegeben, der mittlere Radius mit R und der minimale Radius mit r (siehe Abbildung 20-10).

Abbildung 20-10 zeigt den Querschnitt einer wellenförmigen Mahlkammer mit $n = 6$ Wellen. Der Rotor mit dem Radius R_R ist grau gefüllt symbolisiert dargestellt. Der minimale Radius der Mahlkammer muss größer als der Radius des Rotors sein. In Gleichung (20-3) ist das Verhältnis von R zu r so zu bestimmen, dass der Krümmungsradius R_D von $\rho(\varphi)$ stets größer als der Radius R_B der Kugeln ist. Somit ist gewährleistet, dass die Kugeln nur einen Kontaktpunkt haben. Auf diese Weise wird vermieden, dass Pulver in Lücken geraten kann, die von den Kugeln nicht erreicht werden können (*Tote Zonen*).

Im *Batch-Betrieb* wird die Mahlkammer entleert, indem das Pulver aus einem Loch am unteren Teil der Mahlkammer fließt (siehe Kapitel 3.1). Es wird vorgeschlagen, dass bei vorher bekannten Anwendungen der Winkel in der Mahlkammer α stets größer als der Schüttwinkel des Pulvers β ist, damit eine zügige Entleerung möglich ist (Abbildung 20-10 rechts). Bei pneumatischer Entleerung durch einen Inertgasstrom ist dies bedeutungslos.

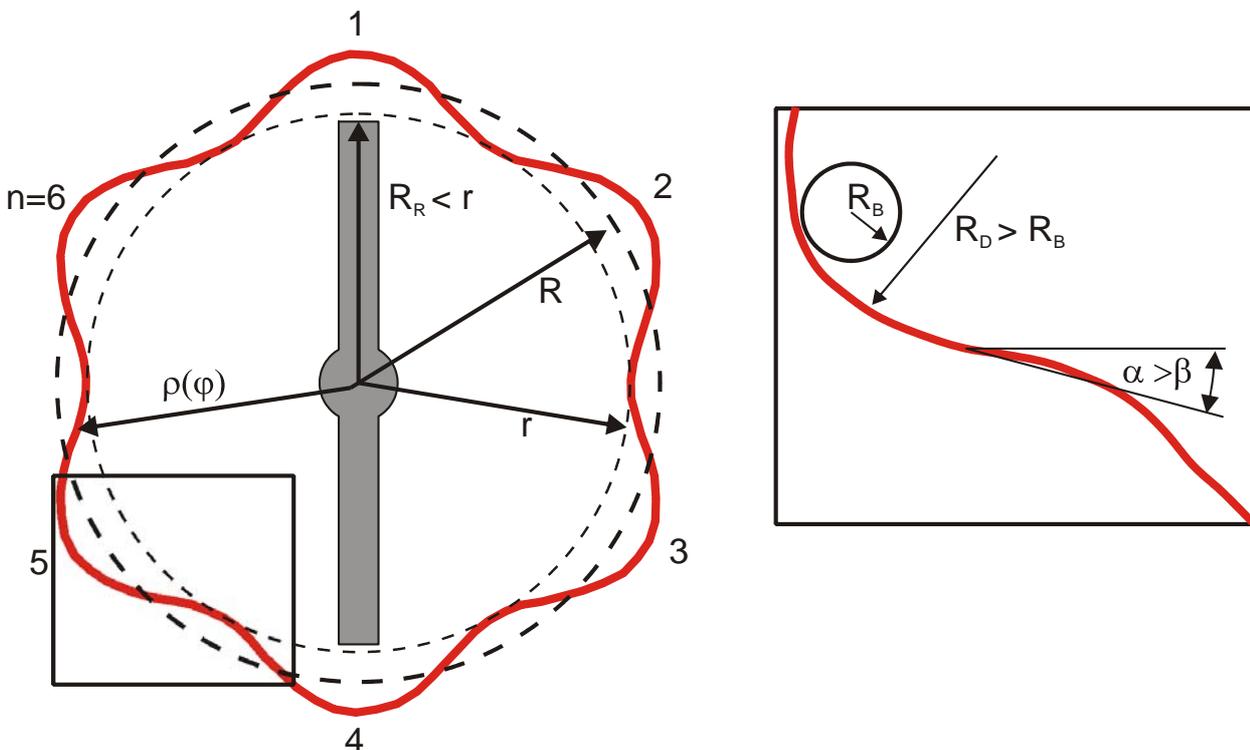


Abbildung 20-10 Vorschlag für eine wellenförmige Querschnittsfläche eines Mahlbehälters. Hier am Beispiel von 6 Wellen. Der Krümmungsradius R_D des Mahlbehälters muss an jedem Punkt größer als der Radius R_B der kleinsten Kugel sein, damit die Oberfläche der Kugel nur in einem Punkt die Oberfläche der Mantelfläche berührt. Bei Auslegung auf ein spezielles Pulver in Batch-Betrieb mit Auslassöffnung nach unten, muss die Steigung α der Mantelfläche stets größer als der Schüttwinkel β des Pulvers sein.

Um eine Mahlkammerwand, welche gemäß Gleichung (20-3) geformt ist, im ereignisdiskreten Algorithmus zu implementieren, muss ein neuer Nullstellensucher für diese neue Objekt-Klasse entwickelt werden. Durch die transzendente Gleichung wäre eine Implementierung ähnlich der Kugel-Rotor Kollisionserkennung erforderlich.

20.2 Rotorform

Die bisherigen Rotoren, sowohl der rechteckige Querschnitt der Original Form, als auch der in den Simulationen verwendete kreisförmige Querschnitt, verleiht den Kugeln keine axiale Vorzugsrichtung. Die Idee bei der Rotormodifikation ist, den Kugeln eine derartige axiale Vorzugsrichtung zu geben, dass die Rotoren sich die Kugeln gegenseitig „zuschießen“.

Als Querschnittsform für die Rotoren eignet sich beispielsweise eine Ellipse, der etwa um 45° verdreht in an der Achse befestigt ist. Die Verdrehung gegenüber der Achse bewirkt, dass die Kugeln der Idee entsprechend axial abgelenkt werden.

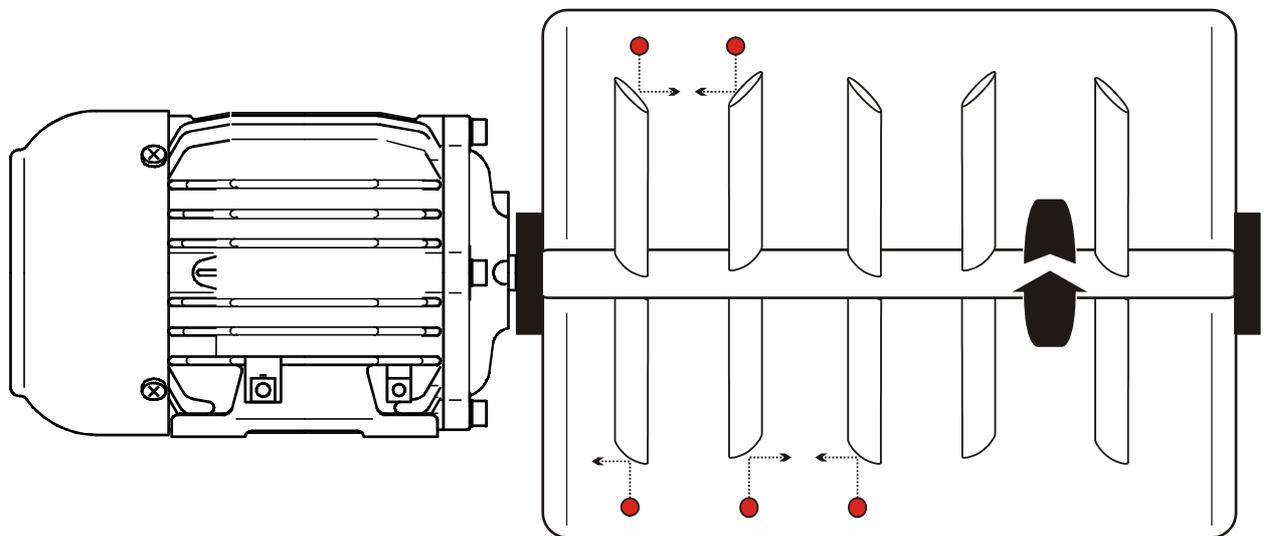


Abbildung 20-11 Die Roten sind schräg angestellt, so dass sie sich die Kugeln gegenseitig zuschießen. Als Querschnittsform eignet sich eine Ellipse. Die Rotoren werden z.B. durch die Welle gesteckt und fixiert. Die Fortführung der Form auf der andern Seite des Rotors hat den Vorteil, dass axiale Kräfte auf die Lager im Mittel gering gehalten werden, weil die Kugel auf der einen Seite nach links, auf der anderen nach rechts geschossen werden.

Abbildung 20-11 zeigt die Skizze einer Mahlkammer mit den schräg angestellten Rotorblättern. Die Rotoren werden, wie bisher, von einem Motor angetrieben, wobei in der Originalversion, im Gegensatz zu der hier vorgeschlagenen, die Drehrichtung beachtet

werden muss. Die Rotoren sind abwechselnd um einen Winkel versetzt angeordnet, so dass sich jeweils zwei benachbarte Roten die Kugeln gegenseitig zuschießen.

Da der Winkel der Querschnittform auf der anderen Seite des Rotors fortgesetzt wird, werden die Kugeln auf beiden Seiten des Rotors in axial entgegengesetzte Richtungen bewegt, wodurch sich im Mittel die axiale Kraft auf die Kugellager aufheben dürfte.

Würden die Rotoren so geformt sein wie ein Propeller, würde eine axiale Richtung bevorzugt werden, was wiederum eine axiale Kraft auf die Kugellager bewirkt. Bei der Auslegung der Kugellager müsste dies beachtet werden.

20.3 Doppelrotor

In der Hochenergiekugelmühle befindet sich nur ein Rotor. Würden zwei gegenläufige Rotoren verwendet werden, könnten diese sich die Kugeln gegenseitig zuschießen. Es sind dabei zwei verschiedenen Konzepte denkbar. Zum einen könnten die Wellen der Rotoren fluchtend aufgebaut sein, zum anderen könnten sie parallel angeordnet sein (siehe Abbildung 20-12)

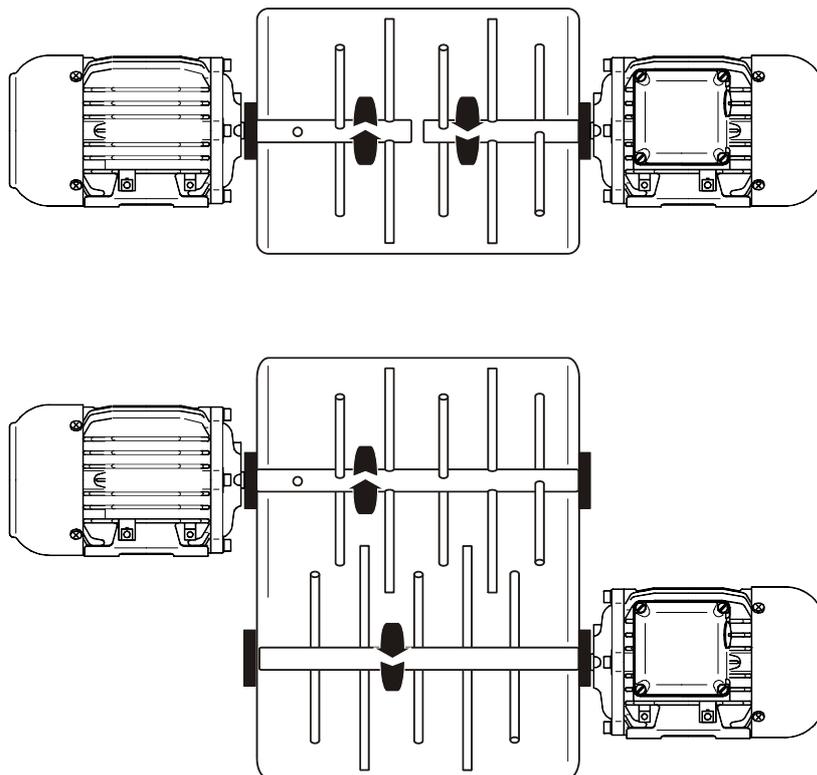


Abbildung 20-12 Doppelrotor. Oben: die beiden Achsen fluchten. Unten: Die beiden Achsen sind parallel. Die Rotoren sind versetzt angeordnet und können sich kollisionsfrei ineinander bewegen.

Die Rotorgeschwindigkeit der beiden Rotoren muss dabei nicht zwingend identisch sein. Bei der in Abbildung 20-12 oben gezeigten Version, ist jedoch wichtig, dass die Rotorblätter den Kugeln zusätzlich eine axiale Vorzugsrichtung in Richtung des anderen Rotors geben. Wenn dies nicht der Fall ist, bewegen sich Kugeln in beiden Hälften links und rechts relativ ungestört voneinander. Nur in einem schmalen Bereich in der Mitte

kommt es zu stärkeren Kollisionen, die jedoch auf die Geschwindigkeitsverteilung der Kollisionen kaum Einfluss haben. Dies wurde im Rahmen dieser Arbeit simuliert, wird hier aber nicht weiter vertieft.

Bei den parallelen Rotoren, wie in Abbildung 20-12 unten gezeigt, könnte die konventionelle Bauform der Rotorblätter beibehalten werden. Es ist jedoch zu vermuten, dass eine Schrägstellung der Rotoren zusätzliche Vorteile bzgl. der Kollisionsgeschwindigkeit bringen dürfte.

Sinnvollerweise kombiniert man alle drei Vorschläge zur Bauteiländerung, weil Synergieeffekte zu erwarten sind.

21. Diskussion

Entsprechend den einleitend formulierten Zielvorgaben dieser Arbeit, wurde ein zeiteffizienter Algorithmus zur Simulation der Mahlkugelbewegungen einer Hochenergie-Kugelmühle entwickelt. Es wurde gezeigt, dass die verwendete ereignisdiskrete Simulationemethode bei praxisrelevanten Betriebsparametern die Eigenschaften der Maschine realitätstreu nachbilden kann. Die nicht linear eingehenden Parameter des Kollisionsmodells wurden mittels eines eigens entwickelten Versuchsaufbaus experimentell bestimmt. Auf Basis der durch die Parameterstudien gewonnenen Daten, wurden detaillierte Analysen der Kugelgeschwindigkeiten und der Kollisionsintensität durchgeführt. Motiviert durch die neuen Erkenntnisse, wurden abschließend Verbesserungsvorschläge der drei zentralen Baugruppen formuliert. In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die methodischen und rechnerischen Ergebnisse kapitelübergreifend zusammengefasst und diskutiert.

21.1 *Simulationsmethode*

Der Ausgangspunkt der Simulatorenentwicklung waren die durch einschlägige Literatur bekannten und variantenreich implementierten Simulationsalgorithmen für Trommelmühlen. Aufgrund der verfahrenstechnischen Ähnlichkeit bietet sich an, die dort verwendeten zeitkontinuierlichen Verfahren ebenfalls einzusetzen. Jedoch sind zeitkontinuierliche Simulatoren sehr rechenintensiv, weil zur Positionsverschiebung der Kugeln in äquidistanten Zeitschritten aufwendige Differenzialgleichungslöser verwendet werden müssen. Außerdem ist die präzise Kollisionserkennung von sich schnell bewegenden Objekten, wie es in einer Hochenergie-Kugelmühle der Fall ist, eine komplexe Aufgabe deren Implementierung die Rechenzeit zusätzlich verlängert.

Die in dieser Arbeit verwendete Simulationemethode der diskreten Ereignisse wurde erstmals auf eine Kugelmühle angewendet. Ereignisdiskrete Simulationen verwenden Ereignisse, hier Kollisionen, als Diskretisierungspunkte. Die Flugbahnen der Kugeln werden durch die analytisch bekannte Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichung beschrieben. Dieser Ansatz schließt somit Dämpfungsterme, wie die Luftreibung, aus. Die Mahlkammer der simulierten Mühle ist jedoch i.d.R. evakuiert, um das reaktive Pulver vor der Atmosphäre zu schützen und ungewollte heftige Reaktionen (Staub-Explosionen) zu vermeiden.

Zur Kollisionserkennung wird der Zeitpunkt der Kollision, bevorzugt analytisch, durch Nullstellensuche der minimalen positiven reellen Nullstelle der zeitlichen Abstandsfunktion bestimmt. Die mathematisch korrekte analytische Lösung eines quadratischen Polynoms für den Zeitpunkt der Kugel-Kugel Kollision ist allgemein bekannt und wurde in zahlreich publizierten Verfahren in derselben Weise implementiert. In dieser Arbeit wurde zunächst diese Gleichung für numerische Verfahren optimiert umgestellt und zusätzlich die physikalische Bedeutung der mathematisch möglichen Nullstellen analysiert.

Durch die Reduzierung auf die physikalisch einzig mögliche Lösung konnte das klassische Verfahren um 24 % beschleunigt werden.

Für die analytisch nicht lösbare transzendente Gleichung der Kugel-Rotor Kollision wurde ein Nullstellenverfahren entwickelt, welches unter Einbeziehung von heuristischen Verfahren gezielt eine existierende positive reelle Nullstelle findet. Kritisch anzumerken bleibt, dass seltene Situationen konstruiert werden können, in denen das beschriebene Verfahren die Nullstelle nicht findet. Dies gilt jedoch allgemein für nichtlineare Problemen.

Die zitierten klassischen ereignisdiskreten Simulationen weisen einige konzeptionelle Schwächen auf, die darin resultieren, dass sich Kugeln unerkannt durchdringen, die Systemgrenze verlassen (*Inkontinenz*) oder sich unwiederbringlich ineinander verkeilen. Diese Schwächen wurden im Rahmen dieser Arbeit erkannt, dokumentiert und erfolgreiche Maßnahmen vorgestellt, die diese Situationen erkennen und beheben. Nichts desto trotz können aufgrund von Rundungsfehlern Konstellationen auftreten, die zwar vom Algorithmus erkannt werden, jedoch eine Positionskorrektur nach sich ziehen. Diese Positionskorrekturen bewirken leichte Abweichungen der potentiellen Energie oder ein gewolltes Ignorieren einer Kollision, um Folgefehler zu vermeiden.

Konzeptionelle Basis einer ereignisdiskreten Simulation ist die Ereignisliste, welche alle Kollisionen der Objekte beinhaltet. Die aus der Literatur bekannten Algorithmen zur Verwaltung einer Ereignisliste wurden vergleichend vorgestellt. Es wurde ein Synergieeffekte nutzendes Kombinationsverfahren vorgestellt und implementiert, welches durch Mehrfachverkettung der Datenstrukturen zeiteffizient die Kollisionsereignisse verwalten kann. Es soll jedoch nicht verschwiegen werden, dass die klassischen Verfahren bei Problemgrößen oberhalb des Speicherplatzbedarfs (Anzahl der Kugeln > 100.000) des neu entwickelten Verfahrens, Vorteile haben. Für die Simulation der Hochenergie-Kugelmühle mit maximal ca. 5000 Kugeln spielt dies jedoch keine Rolle.

21.2 Kollisionsmodell

Die Verwendung des ereignisdiskreten Algorithmus erzwingt paarweise Kollisionen unendlich kurzer Dauer. In Realität haben Kollisionen jedoch eine Kontaktzeit. Der Einsatz von ereignisdiskreten Simulationen ist daher auf Systeme beschränkt bei denen die Flugzeit wesentlich größer als die Kontaktzeit ist. Für die Hochenergie-Kugelmühle ist diese Bedingung jedoch nur unter produktionsüblichen Drehzahlen gegeben. Es ist mit dem hier vorgestellten Simulator nicht möglich die Startphase, beginnend mit ruhenden Kugeln und beschleunigender Drehzahl des Rotors, zu simulieren. Aufgrund der im Vergleich zur Startphase langen Mahldauer, wurde vereinfachend angenommen, dass die Startphase keinen beachtenswerten Einfluss hat.

Das Kollisionsmodell wurde anhand von aus der Literatur bekannten Modellen beschrieben und in sinnvoller Weise modifiziert. Der Energieverlust und die Rotationsän-

derung bei der Kollision werden durch den tangentialen und normalen Restitutionskoeffizienten beschrieben. Dieses Literaturmodell wurde in dieser Arbeit dahingehend geändert, dass der normale Restitutionskoeffizient für den Energieverlust zuständig ist und der tangentielle Restitutionskoeffizient für die Rotationsänderung. Das neue Modell lässt somit Energieverlust und Drehimpulsänderung zu.

Zur Bestimmung des normalen Restitutionskoeffizienten wurden Kugel-Wand Experimente mit den in der Realität verwendeten Materialpaarungen durchgeführt. Der aus den Messdaten gewonnene phänomenologische funktionale Zusammenhang zwischen Kollisionsgeschwindigkeit und Energieverlust wurde nicht nur für die Kugel-Wand Kollision verwendet, sondern, mangels korrekter Daten, ebenfalls für die Kugel-Kugel und Kugel-Rotor Kollision. Dies entspricht nicht ganz der Realität, weil bei der Kugel-Kugel bzw. Kugel-Rotor Kollision andere Materialpaarungen als die des Experiments gegeben sind. Es ist damit zu rechnen, dass der Energieverlust bei hohen Geschwindigkeiten bei diesen Kollisionsklassen zu hoch berechnet wurde, weil diese Materialpaarungen aufgrund ihrer Härte einen höheren Restitutionskoeffizienten vermuten lassen. Bei den Kugel-Kugel Kollisionen, die relativ geringe Geschwindigkeiten aufweisen, wird dieser Fehler noch relativ gering sein. Bei den Kugel-Rotor Kollisionen ist jedoch mit einem zu hohen Energieverlust zu rechnen, wodurch die benötigte mechanische Motorleistung vermutlich etwas zu hoch bestimmt wurde.

Für den tangentialen Restitutionskoeffizienten existieren weder konkrete Literaturdaten, noch experimentell bestimmte Werte. Es wurde angenommen, dass dieser Wert geschwindigkeitsunabhängig ist und sich aufgrund der sehr glatten Kugeln in der Nähe von Eins befindet. Der konkrete Wert wurde aufgrund von Parametervariationen durch visuellen Vergleich von Computeranimation und Hochgeschwindigkeitsaufnahmen bestimmt. Durch diese Methode kann derzeit noch kein Vertrauensbereich dieses Parameters angegeben werden.

21.3 Parametervariationen

Auf dem Rubens-Cluster wurden umfangreiche Parametervariationen durchgeführt. Es konnte festgestellt werden, dass die oft implementierte Vereinfachung eines geschwindigkeitsunabhängigen Restitutionskoeffizienten und der Verzicht auf die Rotationsfreiheitsgrade der Kugeln eine unzulässige Vereinfachung ist. Die Parametervariationen zur Untersuchung der Betriebsparameter wurden mit den experimentell bestimmten Restitutionskoeffizienten durchgeführt. Mit der durch die Variation der Betriebsparameter gefundenen Abhängigkeit zwischen Kugellanzahl, Rotordrehzahl und Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit können die eingangs vorgestellten und von den dort zitierten Autoren als unbrauchbar bewerteten Skalierungsregeln begründet werden. Diese Skalierungsregeln standen zwar noch in Übereinstimmung mit der absoluten Geschwindigkeit, jedoch kann man nicht von der Verteilung der absoluten Geschwindigkeit

der Mahlkugeln auf die Verteilung der Normalkomponente ihrer Kollisionsgeschwindigkeit schließen. Dies steht im Gegensatz zu den gefunden Zusammenhängen beim idealen Gas, da dieses als idealisierter Grenzfall angesehen werden muss.

An einem Beispiel wird nun die empirische Skalierungsregel mit einem neuen Vorschlag, basierend auf den vorgestellten Ergebnissen der Betriebsparametervariation, verglichen. Die Skalierungsregel für die Produktivitätssteigerung innerhalb von baugleichen Mahleinheiten besagt, dass das Pulver zu Kugel Verhältnis konstant bleiben muss und die Rotordrehzahl unverändert bleibt.

Beispiel: Um die Pulverproduktion von 200 g um 66 % auf ca. 333 g zu steigern, muss proportional auch die Kugelanzahl von 3000 Kugeln auf 5000 Kugeln erhöht werden. Die Rotordrehzahl von 1000 rpm soll nach der empirischen Skalierungsregel unverändert bleiben

Unter der realistischen Annahme, dass die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit und damit die mechanische Beanspruchung des Mahlguts bei der Skalierung gleich bleiben soll, wird nach der neuen Skalierungsregel unter Zuhilfenahme von Abbildung 21-1 folgendermaßen verfahren:

1. Der ursprüngliche Betriebspunkt A von 1000 rpm und 3000 Kugeln wird im Diagramm von Abbildung 21-1 gesucht.
2. Der Höhenlinie des Median der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit wird bis zur Drehzahl von 5000 rpm (= 3000 rpm + 66 %) gefolgt. Dies ist der neue Betriebspunkt B.
3. Die Drehzahl am Betriebspunkt B wird auf der vertikalen Achse mit ca. 1300 rpm abgelesen. Dies ist die neue Rotordrehzahl

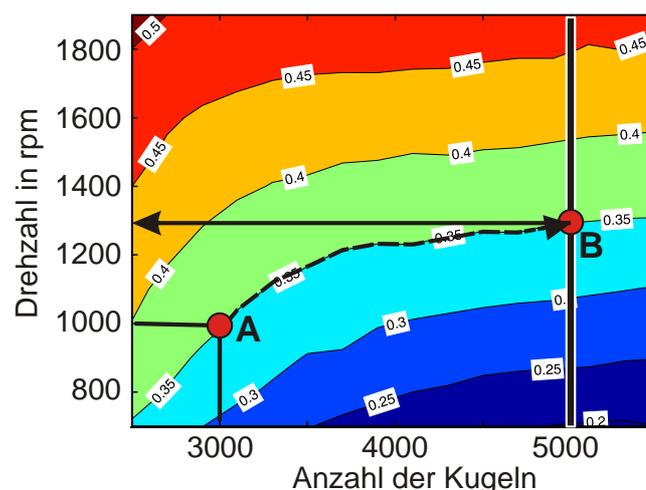


Abbildung 21-1 Neue Skalierungsregel auf Grundlage der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit. Die Produktion im Beispiel soll um 66 % gesteigert werden. Die Betriebsparameter verschieben sich vom Betriebspunkt A zum Betriebspunkt B. Neben einer Erhöhung der Kugelanzahl um 66 % ist auch eine Erhöhung der Rotordrehzahl um 30 % erforderlich.

Durch das vorgeschlagene Verfahren muss abweichend von der ursprünglichen Skalierungsregel auch die Rotordrehzahl geändert werden und zwar um 30 % von 1000 rpm auf 1300 rpm. Nach der empirischen Skalierungsregel würde die Drehzahl unverändert bleiben, was am neuen Betriebspunkt einer Reduzierung der Kollisionsenergie gleichkommen würde. Entweder wäre das gewünschte Ergebnis erst nach wesentlich längerer Mahldauer oder sogar überhaupt nicht erreichbar. Der Median der Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit bei 1000 rpm und 5000 Kugeln – die empirische Skalierungsregel befolgend – beträgt nur ca. 0,28 m/s und nicht, wie vorgeschlagen, die 0,35 m/s. Dies entspricht einer Abweichung von 20 %. Das neue Verfahren ist jedoch noch nicht experimentell untermauert, sondern geht von der Annahme aus, dass die Computersimulation realitätstreu ist.

21.4 Konstruktive Veränderungen

Bisher wurde vermutet, dass der Großteil der Kollisionen zur Zerkleinerung des Mahlguts beiträgt. Anhand von Auswertungen der Parametervariationen konnte jedoch durch Untersuchungen der Verteilungen der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit gezeigt werden, dass diese bei den meisten Kollisionen weit unterhalb von 0,5 m/s liegen. Kollisionen mit hoher Kollisionsenergie sind relativ selten – ganz im Gegensatz zu dem, was der Name „Hochenergie“-Kugelmühle vermuten lässt und bisher der allgemeinen Auffassung entsprach. Eine wichtige und neue Erkenntnis ist, dass der Mahleffekt in der Hochenergie-Kugelmühle, da er auf Kollisionen mit hoher Relativgeschwindigkeit beruht, nur relativ selten stattfindet.

Anhand der Annahme einer Mindestgeschwindigkeit von 3 m/s als Schwellwert für das Zerkleinern eines fiktiven Pulvers wurde gezeigt, dass diese Geschwindigkeitsanforderung zwar nur bei 1,9 % der Kollisionen erfüllt ist, jedoch aufgrund der hohen Kollisionsfrequenz immerhin doch ca. 44.000 Kollisionen pro Sekunde oberhalb dieses Schwellwertes stattfinden.

Konstruktive Änderungen können die Verteilung der Relativgeschwindigkeit der Kugeln wesentlich verbessern. Beispielsweise erhöht schon eine leichte konstruktive Änderung der Mahlkammer (zwei 30° Rampen) die Relativgeschwindigkeit der Kugeln erheblich und bewirkt unter gleichen Betriebsparametern eine Steigerung auf ca. 72.000 über dem Schwellwert liegende Kollisionen pro Sekunde.

22. Ausblick

Für die Simulation einer Hochenergiekugelmühle steht mit der vorliegenden Arbeit ein funktionsfähiges und ausgiebig getestetes Werkzeug zur Verfügung. Gerade durch die neu gewonnenen Erkenntnisse ist das Thema jedoch bei weitem nicht erschöpfend behandelt, sondern bietet viel Potential für weitere wissenschaftliche Forschungsarbeiten.

22.1 Simulationsalgorithmus

Die Analyse des ereignisdiskreten Algorithmus hat gezeigt, dass ca. 50 % der berechneten Ereignisse im Verlauf der Simulation als ungültig erkannt werden. Während der Berechnung eines Ereignisses werden zwar alle potentiellen Kollisionen erkannt, jedoch nur das zeitlich nächste als gültiges Kollisionsereignis bewertet und alle nachfolgenden verworfen. Wird nun dieses Kollisionsereignis ungültig, setzt die Kugel ihre Flugbahn durch die Mahlkammer fort und kollidiert mit der nächsten Kugel. Es ist sehr wahrscheinlich, dass während der ersten Kollisionsprüfung dieses, nun gültige, Kollisionsereignis zwar schon berechnet, jedoch aus genannten Gründen verworfen wurde. Eine interessante Alternative wäre eine Ereignisverwaltung, in der alle berechneten Ereignisse gespeichert werden. Es würden auf diese Weise zwar zu viele Ereignisse abgespeichert, aber möglicherweise ist die Identifikation der überflüssigen Datensätze – etwa durch einen Kollisionszähler – schneller als eine komplette Neuberechnung.

Auf eine Parallelisierung der Simulation wurde verzichtet, da bekannt ist, dass ereignisdiskrete Simulationen schlecht auf einem Rechen-Cluster skalierbar sind (Pöschel, 2004). Es müssen zu viele Daten über das Netzwerk ausgetauscht werden und jeder Knoten hat abhängig von der Kollisionsanzahl eine andere Simulationszeit, was zu erheblichen Synchronisierungsproblemen führt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde hergeleitet, dass zwei kollidierende Kugeln ohne Zwischenereignis nicht wieder kollidieren können. An diesem Punkt lässt sich der Algorithmus in zwei Hälften trennen, indem ein Prozessor das nächste Kollisionsereignis für die eine Kugel und ein anderer Prozessor das nächste Kollisionsereignis für die andere Kugel berechnet. Dieses Parallelisierungskonzept nutzt nur zwei Prozessoren pro Simulation und ist auf gemeinsamen Speicherzugriff angewiesen. Bei den vorhandenen Computern des Rubens-Clusters liegt allerdings genau diese Konfiguration vor. Der Geschwindigkeitsgewinn bei der Parallelisierung auf zwei Prozessoren wäre folglich maximal so hoch, wie der Anteil an Kugel-Kugel Kollisionen, also ca. 70 %. Fraglich an diesem Parallelisierungskonzept ist, ob sich die Aufteilung lohnt, denn die Berechnungszeit für ein Kollisionsereignis beträgt in Abhängigkeit der Kugelanzahl nur zwischen 50 bis 150 μs . Der Zeitaufwand für die parallelisierten Funktionsaufrufe muss also wesentlich kürzer sein.

22.2 Kollisionsmodell

Das Kollisionsmodell basiert auf dem materialpaarungsabhängigen normalen und tangentialen Restitutionskoeffizienten. Um die Simulation noch realitätstreuer werden zu lassen, sind weitere Experimente mit dem vorhandenen oder einem erweiterten Versuchsaufbau unerlässlich. Beispielsweise müssen noch die Kugel-Kugel Restitutionskoeffizienten bestimmt werden, wenn möglich auch mit anderen, in der Praxis eingesetzten, Kugelmaterialien.

Ein zusätzlicher Weg wären Leistungsmessungen der Maschine. Die von den Kugeln dissipierte Energie muss vom Motor aufgebracht werden. Durch Parameteranpassung muss die simulierte Motorleistung mit den experimentellen Daten in Einklang gebracht werden. Für diese Experimente ist bisher eine modifizierte Maschine mit zusätzlichen Sensoren zur Messung des Drehmoments und der Drehzahl nötig.

Das bisherige Kollisionsmodell berücksichtigt kein Pulver zwischen den Kugeln. Um Werkstoffwissenschaftlern ein Werkzeug für die Versuchsplanung zur Verfügung zu stellen, ist eine Erweiterung des Modells für Pulver notwendig. Dies könnte ebenfalls durch Messung der Motorleistung, jedoch bei einem realen Mahlprozess mit Pulver, umgesetzt werden. Die Restitutionskoeffizienten werden durch das Pulver vermutlich kleinere Werte haben.

Ein aufwendigeres Kollisionsmodell, welches auch das Mahlgut berücksichtigt, sollte beachten, dass sich das Verhalten des Mahlguts im Verlauf des Mahlprozesses ändert. Außerdem ist vermutlich das Kollisionsverhalten durch die unterschiedlichen Partikelgrößen, unregelmäßige Oberflächenbeschafftheiten und –geometrien nicht mehr deterministisch beschreibbar. Im Kollisionsmodell kann dies beispielsweise durch stochastisch beeinflusste Stöße beschrieben werden.

22.3 Skalierungsregeln

Mit der neuen Skalierungsregel für die Produktivitätssteigerung innerhalb einer baugleichen Mahleinheit ist jedoch nur eine der eingangs aufgeworfenen Fragen beantwortet. Die Änderung der Betriebsparameter aufgrund von anderem Kugelmateriale kann ebenfalls mit dem hier vorgestellten Simulator in ähnlicher Weise beantwortet werden, jedoch fehlen bislang experimentelle Daten über das Kollisionsverhalten von anderen Mahlkugeln. Die Skalierung zwischen verschiedenen Maschinengrößen ist ebenfalls mit diesem Simulator möglich. Jedoch sollte vor der Entwicklung dieser wirtschaftlich wichtigen Skalierungsregeln die Realitätstreue des Simulators experimentell validiert werden.

22.4 Bauteilgeometrien

Die in dieser Arbeit vorgeschlagenen Änderungen der drei wichtigsten Baugruppen sind bisher noch nicht realisiert worden. Durch Optimierungsverfahren könnten die Rotor-

formen so verbessert werden, dass die Kollisionsgeschwindigkeiten maximiert werden. Gerade im Hinblick auf eine Realisierung dieser neuen Rotorformen ist jedoch auf eine fertigungsgerechte Konstruktion zu achten. Der Optimierungsalgorithmus muss folglich auch die Realisierbarkeit beachten. Dasselbe gilt für die Optimierung der Mahlkammerform.

Die so optimierte Form könnte in Kooperation mit Werkstoffwissenschaftlern an Pulvern getestet und das Ergebnis mit der klassischen Maschine verglichen werden. Durch die höheren Kollisionsenergien ist damit zu rechnen, dass mit der optimierten Mühle auch bisher unerreichte Korngrößen oder Legierungen realisiert werden können.

23. Literatur

- Adam, S., (2004), Bestimmung des normalen Restitutionskoeffizienten von Stahlkugeln, Studienarbeit, Lehrstuhl für Simulationstechnik und Informatik im Maschinenbau, Universität Siegen
- Adams, G. G. (1987), Imperfectly Constrained Planar Impacts – A Coefficient-of-Restitution Model, *Int. J. Impact Engng*, Vol. 19, No. 8, 1997, pp. 693-701.
- Alder, B. J. und Wainwright, T. E., (1959), Studies in molecular dynamics, I. general method. *Chem. Physics*, 31, 2, 459-466.
- Andrews, J.P., (1930), Theory of collision of spheres of soft metals, *Phil. mag.*, Vol. 9, pp. 593-610
- Araki, S. (1991), Dynamics of planetary rings. *Am. Scientist* 79, 1 (Jan.–Feb.), 44–59.
- Aspelmeier, T., (2000), Microscopic models of energy dissipation by internal degrees of freedom in particle collisions, Dissertation, Georg-August-Universität zu Göttingen
- Baeza-Yates, R. Marín, M. und Cordero, P. (1994) Analysis of an improved priority queue for discrete event simulation of many moving objects. In C. Isaac and R. Peralta, editors, *Proceedings of the XIV International Conference of the Chilean Computer Science Society*, pp. 29-41
- Barker, G. C. und Mehta, A. (1995), Kommentar zu “Particle size segregation by shaking in two-dimensional disk packings” von Jullien et al., *Europhys. Lett.* 29, 61.
- Barker, G. C., Mehta, A. und Grimson, M. J. (1993), Kommetar zu “Three-dimensional model for particle size segregation by shaking”, *Phys. Rev. Lett.* 70, 2194.
- Baumann, G. (1997), Modelle und Computersimulationen granularer Materie, Doktorarbeit, Universität Duisburg
- Baumann, G. und Wolf, D. E. (1996), Self-organized criticality in a two-dimensional rotating drum model, *Phys. Rev. E* 54, R4504.
- Baumann, G., Janosi, I. M., und Wolf, D. E., (1995), Surface properties and flow of granular material in a two-dimensional rotating drum model, *Phys. Rev. E* 51, 1879.
- Baumann, G., Janosi, I., und Wolf, D. E., (1994), Particle trajectories and segregation in a two dimensional rotating drum, *Europhys. Lett.* 27, 203.
- Benz, H.U., (2005), Diskussion mit Dipl.-Ing. Hans Ulrich Benz von der Zoz GmbH über die praktischen Erfahrungen bei der Skalierung zwischen Maschinengrößen.
- BGV (1981), BGV D 13: Durchführungsanweisungen zur Unfallverhütungsvorschrift – Herstellen und Bearbeiten von Aluminiumpulver (bisherige VBG 56), in der Fassung vom 1. Januar 1993
- Boldyrev V. V. und Tkacova, K., (2000), Mechanochemistry of solids: Past, present, and prospects. *Journal of Materials Synthesis and Processing*, Vol. 8, N 3-4, p.121-131
- Borderies, N.; Goldreich, P. and Tremaine S., (1984), Unsolved Problems in Planetary Ring Dynamics, in *Planetary Rings*, Editors: Richard Greenberg and Andr´ Brachic, The University of Arizona Press, Tucson, Arizona, pp. 713-734
- Brach, R. M. (1991), *Mechanical Impact Dynamics: Rigid Body Collisions*, John Wiley & Sons, New York

- Brach, R. M., (1989), Rigid body collisions, *J. Appl. Mech.*, Vol. 56, pp. 133-138
- Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A., (1989), Taschenbuch der Mathematik, 23. Auflage, Verlag Harri Deutsch.
- Bridges, F.G.; Hatzes, A. und Lin, D. N. C., (1984), Structure, stability and evolution of Saturn's rings, *Nature*, Vol. 309, pp. 333-335
- Brilliantov, N. V. ; Spahn, F.; Hertzsch, J.-M. und Pöschel, Th., (1996), Model for collisions in granular gases, *Phys. Rev. E*, Vol. 53, 382-5392.
- Buchholtz, V., Pöschel, T., und Tillemans, H. J. (1995), Simulation of rotating drum experiments using non-circular particles, *Physica A* 216, 199.
- Buchholtz, V.; Freund, J. A., und Pöschel, Th., (2000a), Molecular dynamics of comminution in ball mills. *Europ. Phys. J. B.*, Vol 16, 169-182
- Buchholtz, V.; Freund, J. A., und Pöschel, Th., (2000b). Molekulardynamische Untersuchung von Zerkleinerungsprozessen in Kugelmöhlen. *Schüttgut*, Vol 6, 11-24
- Cardano, G., (1545), *Artis magna sive de regulis algebraicis*, *unbekannter Verlag*
- Cleary, P., (2003), Axial Transport in Dry Ball Mills, Third International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, CSIRO, Melbourne, Australien, 651-656
- Cormen, T.H.; Leiserson, Ch. E.; Rivest, R. L. und Stein, C., (2003), Introduction to Algorithms, 2nd Edition, The MIT Press, Cambridge
- Cundall, P. A, (1988), Computer Simulations of Dense Sphere Assemblies, *Micromechanics of Granular Material*, 113-123
- Cundall, P.A. (1971), A Computer Model for Simulating Progressive Large Scale Movements in Block Rock Systems, Proc. Symp., Int'l Soc. Rock Mechanics, Nancy II. Art. 8
- Czichos, H., (1978), *Tribology*, Elsevier, Amsterdam
- Deuffhard, P., (2004), Newton methods for nonlinear problems – Affine Invariance and Adaptive Algorithms, Springer Series in Computational Mathematics
- DFG (2003), Handhabung hochdisperser Pulver / Handling of Highly Dispersed Powders, Jahresbericht 2003, SPP 1062 / Priority Programmes 1062
- Droste, P; Hofmann, C.; Klein, U.; Küter, G.; Sedler, M.; Zimmermann, M., (2005), Ball-Mill-Visualization, Projektarbeit des Fachbereichs Informatik.
- Ernst, D.; Weiss, H.; Reichardt, R.; Zoz, H., (1998), Mechanical Alloying of Fe-Based Solid Lubricant Composite Powders; TMS Fall Meeting, Processing and Fabrication of Advanced Materials VII, Oct 11-15 1998, Rosemont, IL, USA, Proceedings of the TMS Fall Meeting, pp. 225-234
- Erpenbeck, J. J. und WOOD, W. W., (1977), Molecular dynamics techniques for hard-core systems. In *Statistical Mechanics, Part B*, Bruce J. Berne, ed., Plenum Press, New York, 1–40.
- Falcon, E.; Laroche C.; Fauve S. und Coste C., (1998), Behavior of One Elastic Ball Bouncing Repeatedly off the Ground, *The European Physical Journal B*, Vol. 3, 1998, pp. 45-57.
- Fishman, G. S., (2001), *Discrete-Event Simulation: Modeling, Programming, and Analysis*, Springer Series in Operations Research and Financial Engineering

- Fließbach, Th. (2004a), erste private Mitteilung zum Thema Normalkomponente beim Kugelstoß.
- Fließbach, Th. (2004a), zweite private Mitteilung zum Thema Normalkomponente beim Kugelstoß.
- Freeman, H., (1961), On the Encoding of Arbitrary Geometric Configurations, TC, Vol. 10, No. 2, pp 260-268
- Garwin, R. L. (1969), Kinematics of an ultraelastic rough ball, Am. J. Phys., Vol. 39, pp. 88-92
- Gavrilova, M.; Rokne, J.; Gavrilov D. und Vinogradov O. (2002) Optimization Techniques in an Event-Driven Simulation of a Shaker Ball Mill, International Workshop on Computational Geometry and Applications'02, Lecture Notes in Computer Science LNCS 2331, Springer-Verlag, pp. 115-124
- Given, J. A. und Clementi, E., (1989), Molecular dynamics and Rayleigh-Bénard convection., J. Chem. Physics 90, 12 (June), pp. 7376-7383.
- Goldberg, D., (1991), What every computer scientist should know about floating-point arithmetic, ACM Comput. Surv., Vol 23, No. 1, ACM Press, pp. 5-48
- Goldman, D; Shattuck, M. D.; Bizon, C.; McCormick, W. D.; Swift, W. D. und Swinney H. L., (1998), Absence of inelastic collapse in a realistic three ball model, Phys. Rev. E., 57:4831-4833
- Goldsmith, W., (1960), Impact, Edward Arnold, London,
- Greenberg, R., (1988), Particle properties and the large-scale structure of planetary rings: Rebound characteristics and viscosity, Icarus, Vol. 75, pp. 527-539
- Hannon, L., Lie, G. C., und Clementi, E., (1986), Molecular dynamics simulation of flow past a plate. J. Scientific Comput. 1 2, pp. 145–150.
- Herbst, O.; Müller, P.; Otto, M. und Zippelius, A. (2004), Local equation of state and velocity distributions of a driven granular gas, Phys. Rev. E, Vol 70 , 21195
- Herr, U. und Samwer, K., (1995), Phase formation during ball milling of intermetallic compounds with different structures, Materials Science Forum 179-181 p. 85-90
- Hertz, H., (1882), Über die Berührung fester elastischer Körper. J. f. reine u. angewandte Math., 92:156-171
- Hodkinson, E., (1835), Report of the 4th Meeting of the British Association for the Advancement of Science, London, Cambridge
- Hoppe, D., (2004), Untersuchungen zur Herstellung des nanostrukturierten elektrischen Kontaktmaterials Silber-Zinndioxid (Ag-SnO₂) durch mechanisches Legieren, Dissertation, Universität Siegen
- IEEE/ANSI Standard 754 (1985), Standard for Binary Floating Point Arithmetic
- Ivanov, A. P., (1995), Visco-elastic Approach to Impact with Friction, AMD-Vol. 205, Impact, Waves and Fracture, ASME 1995. Edited by R. C. Batra et al.
- Johnson, K.L., (1985), Contact Mechanics, Cambridge University Press
- Jullien, R., Meakin, P., und Pavlovitch, A. (1992), Three-dimensional model for particle-size segregation by shaking, Phys. Rev. Lett. 69, 640.
- Jullien, R., Meakin, P., und Pavlovitch, A. (1993a), Particle size segregation by shaking in two dimensional disc packings, Europhys. Lett. 22, 523.

- Jullien, R., Meakin, P., und Pavlovitch, A. (1995), Antwort zum Kommentar von C. Barker und A. Mehta, *Europhys. Lett.* 29, 63.
- Jullien, R., Meakin, P., und Pavlovitch, A. (1993b), Antwort zum Kommentar von Barker et al., *Phys. Rev. Lett.* 70, 2195.
- Kalkuhl, M., (2003), Studienarbeit, Fachbereich Maschinentechnik, Universität Siegen.
- Karavelas, M.I., (2001), Proximity structures for moving objects in constrained and unconstrained environments, Ph.D. thesis, Stanford University
- Kaupp, G.; Naimi-Jamal, M. R.; Ren, H.; Zoz, H., (2003), Reactive Dry-Milling for Environmental Protection – Encouraging Industrial Applications for High Kinetic Processing – in: *Advanced technologies based on self-propagating and mechanochemical reactions for environmental protection*, 83-100
- Kern, E., (2004), Herstellung und Charakterisierung von thermisch gespritzten Al_2O_3 -SiC-Nanokompositschichten, Dissertation, Universität Siegen
- Kern, E., (2005), Diskussion mit Dr.-Ing. Eduard Kern über die praktischen Erfahrungen bei der Erhöhung der Pulverproduktion.
- Kharaz, A. H.; Gorham, D A und Salman A. D., (1999), Accurate measurement of particle impact parameters; *Meas. Sci. Technol.* 10, pp. 31–35.
- Knorr, K., Th. Sell, H. Mehrer, (1997), Amorphization of Nb- and Ta-powder with Co, Ni and Cu by mechanical alloying, *Defect and Diffusion Forum*, 777 – 782
- Kozlov, V. V. und Treshchëv, D. V., (1991), *Billiards: A Genetic Introduction to the Dynamics of Systems with Impacts*, American Mathematical Society, Providence
- Krantz, A. (1993), An efficient algorithm for the hard-sphere problem. Ph.D. thesis, University of Colorado, Department of Computer Science, Boulder, Colorado
- Kreutzer, W., (1986), *Systems Simulation – Programming Styles & Languages*. Addison-Wesley
- Kuwabara, G. und Kono K. (1987), Restitution Coefficient in a Collision Between Two Spheres, *Jap. J. of Appl. Physics*, Vol. 26, No. 8, pp. 1230-1233.
- Lubachevsky, B. D. und Stillinger, F. H., (1990), Geometric properties of random disk packings. *J. Statist. Physics* 60, 561–583.
- Lubachevsky, B. D., (1992), Simulating billiards: Serially and in parallel. *Int. J. Comput. Simul.* 2, 373–411.
- Lubachevsky, B. D., (1993), Note: Which algorithm is better? *J. Comput. Physics* 105, 369–370.
- Luding, S. (2002), Liquid-solid transition in bi-disperse granulates, *Adv. Complex Syst.* 4 (4), 379-388
- Marín, M., (1998), On the pending event set and binary tournaments. In A. Bargiela and E. Kerckhoffs, editors, *Proceedings of the 10th SCS European Simulation Symposium*, pages 110-114
- Marín, M.; Risso, D. und Cordero, P., (1993), Efficient algorithms for many-body hard particle molecular dynamics. *J. Comput. Physics* 109, 306–317.
- Matsumoto, M. und Nishimura, T., (2005), Mersenne Twister in der 64-Bit Version vom 23.02.2005. Die ursprüngliche Version wurde von denselben Autoren 1998 publiziert: Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudoran-

- dom number generator, ACM Trans. on Modeling and Computer Simulation Vol. 8, No. 1, January pp.3-30.
- McNamara, S. und Young, W. R. (1992), Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium. Phys. Fluids A, 4:496-504
- Morikita, H. und Taylor, A., (1998), Application of shadow Doppler velocimetry to paint spray: potential and limitations in sizing optically inhomogeneous droplets, Meas. Sci. Technol. 9 (1998) 221–231.
- Pan, V. Y., (1997), Solving a Polynomial Equation: Some History and Recent Progress, SIAM Review, Vol. 39, No. 2, pp. 187-220
- Patent (1997), Apparatus for charging and emptying a receptacle, especially a milling machine operating discontinuously with discrete milling bodies, Pr.: US5678776 – 1997-10-21
- Patent (1998), Vorrichtung zur Hochenergie- und/oder Feinstmahlung von Feststoffen und Verfahren zu dessen Betrieb, Pr.: DE19635500A1 – 05.03.1998
- Patent (2000), Vorrichtung zur Hochenergie- und/oder Feinstmahlung von Feststoffen , Zoz GmbH, Pr.: DE19912594A1 – 21.09.2000
- Patent (2005a), Rotorform, eingereicht durch die Universität Siegen. Patentnummer z.Z. noch nicht verfügbar.
- Patent (2005b), Mahlbehälterform, eingereicht durch die Universität Siegen. Patentnummer z.Z. noch nicht verfügbar.
- Phul, A., Mansour, M. M. und Maescital, M., (1989). Quantitative comparison of molecular dynamics with hydrodynamics in Rayleigh-Bénard convection. Physical Rev. A 40 4, pp. 1999-2012.
- Pöschel, T. und Herrmann, H. J. (1993), A simple geometrical model for solid friction, Physica A, Vol. 198, pp. 441-448
- Pöschel, Th. und Brilliantov, N. (2003), Granular Gas Dynamics, Gebundene Ausgabe – XIV, Springer-Verlag
- Pöschel, Th., (2004), private Mitteilung über die schlechte Skalierbarkeit von ereignisdiskreten Simulatoren.
- Pöschel, Th. und Schwager T. (2005), Computational Granular Dynamics - Models and Algorithms, Springer Verlag
- Pöschel, Th., (2000), Dynamik granularer Systeme – Theorie, Experimente und numerische Experimente, Habilitationsschrift, Logos Verlag, Berlin
- Press, W. H.; Teukolsky, S.A.; Vetterling, W.T., (2002), Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, Hardcover, 2nd edition, Published April 2002
- Raman, C.V. (1918), The photographic study of impact at minimal velocities, Phys. Rev, Vol. 12, pp. 442-447
- Ramírez, R.; Pöschel, T.; Brilliantov, N. V. und Schwager, T., (1999), Coefficient of restitution of colliding viscoelastic spheres, Physical Review E, Vol. 60, No. 4, October 1999, pp. 4465-4472.
- Rapaport, D. C. (1980) The event scheduling problem in molecular dynamic simulation. J. Comput. Physics 34, 184–201.

- Rapaport, D. C., (1993) Note: A note on algorithms for billiard-ball dynamics. *J. Comput. Physics* 105, 367–368.
- Redeker, D. (2003), Zerkleinerung – Eine uralte Technologie und immer noch eine Herausforderung, *Chemie Ingenieur Technik*, Volume 75, Issue 10, 1438 – 1442
- Reichardt, R., (2002b), Simulation of High Energy Ball Mills: FOMAAS Status Report 2000-2002, 2002, Siegen, pp. 78-79
- Reichardt, R. und Wiechert, W., (2003a), Simulating High Energy Ball Mills using Discrete Events, *Simulation News Europe*, Vol. 12, 2004, pp. 3-11
- Reichardt, R. und Wiechert, W., (2003b), Event driven simulation of a high energy ball mill, *ASIM 2003*, 17. Symposium Simulationstechnik, 16.09.2003 – 19.09.2003 in Magdeburg, SCS Publishing House, pp. 249-254
- Reichardt, R. und Wiechert, W., (2005a), Event Driven Algorithms applied to a High Energy Ball Mill Simulation, Submitted to *Granular Matter*, Springer Verlag
- Reichardt, R. und Wiechert, W., (2005c), Ereignisdiskrete Simulation von Vielteilchensystemen, *ASIM Workshop 2005*, Wuppertal, Proceedings in Print
- Reichardt, R.; Adam, S. und Wiechert, W. (2005b) Collision Modelling for High Energy Ball Mills using Event Driven Simulation, *Simulation in wider Europe*, 19th European Conference on Modelling and Simulation, Edited by Yuri Merkurjev
- Reichardt, R.; Adam, S. und Wiechert, W. (2005d) Measurement of the Velocity Dependent Spheres-Plane Restitution Coefficient, Paper in submission.
- Reichardt, R.; Buschmann, U. und Wiechert, W., (2002a), Simulationskonzepte in der Werkstofftechnik, *Werkstoffe und Werkstofftechnische Anwendungen Band 11*, 5. Werkstofftechnisches Kolloquium 24./25.10.2002 in Chemnitz, pp. 146-151
- Ren, H.; Zoz, H.; Kaupp, G. und Naimi-Jamal M. R. , (2003), Environmentally protecting reactive milling, *Adv. in Powder Metallurgy & Particulate materials*, pp. 216-222
- Ristow, G. (1998), Flow Properties of Granular Materials in Three-Dimensional Geometries, Habilitationsschrift, Philipps-Universität Marburg
- Rivin, E. I., (1999), *Stiffness and damping in Mechanical Design*, Marcel Dekker, New York, 1999.
- Ross, S. M., (1996), *Simulation, 2nd Edition*, Statistical Modeling and Decision Science, Academic Press
- Rothenberg, G.; Downie, A. P.; Raston C. L. and Scott, J. L. , (2001), Understanding solid/solid organic reactions., *Journal. Am. Chem. Soc.*, Vol. 123, 8701-8708
- Salo, H., (1987), Numerical Simulations of Collisions between Rotating Particles. *Icarus*, Vol. 70, pp. 37-51
- Schwager, T. (1998), Dissipative Prozesse und Kinetik granularer Stöße in viskoelastischer Teilchennäherung, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin
- Scott, J.F., (1938), The Mathematical Work of John Wallis 1616 – 1703 (→ siehe Wallis, J., (1669), *Mechanica, sive de motu tractatus geometricus*, Typis Gulielmi Godbid, London, 1669-1671)
- Sell, Th. und H. Mehrer, (1997), Formation of metastable phases by mechanical alloying in the Ta-Co, Ta-Ni and Ta-Cu systems, *Zeitschrift Metallkunde*. 88, 842 – 843
- Shida, K. und Kawai, T., (1989), Cluster formation by inelastically colliding particles in one-dimensional space. *Physica A*, 162, 145-160

- Sigurgeirsson, H., (2001), Particle-Flid Models: Algorithms and Application, Dissertation, Standfort University, UK.
- Sommerfeld, M. (1999), Inter-particle collisions in turbulent flows: A stochastic model. To appear in the Proc. Of the 1st Int. Symp. Turbulence and Shear Flow Phenomena, Santa Barbara, CA, Sept. 1999
- Spahn , F.; Schwarz, U. und Kurths, J., (1997), Clustering of granular assemblies with temperature dependent restitution and under Keplerian differential rotation., Phys. Rev. lettr., Vol. 78, pp. 1596 .
- Spradley, J. L., (1983), Velocity amplification in vertical collisions, Am. J. Phys., Vol. 55, pp. 183,184
- Stoink, G., (1983), Super ball problem, The Physics Teacher, Vol. 21, pp. 466
- Strack. O. D. L. und Cundall, P. A. (1984), Fundamental Studies of Fabric in Granular Materials, Interim Report to NSF. CEE-8310729. Dept. of Civil and Mineral Engineering, Univ. of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, 1984.
- Stronge, W. I., (1991), Friction in collisions: Resolution of a paradow, J. Appl. Phys., Vol. 69, pp. 610-612
- Stronge, W., (1995), Theoretical Coefficient of Restitution for Planar Impact of Rough Elasto-Plastic Bodies, AMD-Vol. 205, Impact, Waves and Fracture, ASME 1995., Edited by R. C. Batra et al.
- Sundaram, S. und Collins, L. R. (1996), Numerical considerations in simulating a turbulent suspension of finite-volume particles. Journal of Computational Physics, 124(2), pp. 337-350
- Taguchi, Y., (1992), Powder turbulence: Direct onset of turbulent flow, J. Physique, Vol. 2, 2103-2144
- Timoshenko, S.P. und Goodier J. N (1951), Theory of Elasticity, 3rd edition, McGraw Hill, New York, 1951.
- Tomas, J. (2004), Vorlesung (Einführung in die) MVT, Kapitel 2, Otto-von-Guericke Universität Magdeburg, Institut für Verfahrenstechnik, 57ff.
- Wallis, J., (1669), Mechanica, sive de motu tractatus geometricus, Typis Gulielmi Godbid, London, 1669-1671
- Wallqvist, A.; Bruce, J. und Pangali, C., (1987), Exploiting physical parallelism using supercomputers: two examples from chemical physics, Computer, vol. 20, 5, pp. 9-21
- Walton, O. R.. Braun. R. L., Mallon. R. O., und Correlli, D. M. (1988), Particle-Dynamics Calculations of Gravity Flows of Inelastic, Frictional Spheres, Micromechanics of Granular Material. 153-161
- Weinhold, F., (2004), Partikelbasierte Simulation des mechanischen Legierens von Pulvern, Diplomarbeit, Universität Siegen.
- Wiechert, W. und Reichardt, R., (2005), Einführung in die Informatik im Maschinenbau I+II, Vorlesungsunterlagen, Universität Siegen
- Wiechert, W; Reichardt, R.; Adam, S.; Weitzel, M., (2004), Bestimmung des normalen Restitutionskoeffizienten von Stahlkugeln beim Kugel-Wand Stoß, ZESS Projekt, Forschungsschwerpunkt Multisensorik, http://www.zess.uni-siegen.de/cms/front_content.php?idcatart=130

- Wren, C., (1669), The law of nature in the collision of bodies, Phil. Trans. Roy. Soc., London, Vol. 3, pp. 867-868
- Ying, D. Y. und Zhang, D. L., (2000), Processing of Cu/Al₂O₃ metal matrix nanocomposite materials by using high energy ball milling, Materials Science and Engineering A, pp. 152-156
- Yoder, J.G., (1988), Unrolling time, Christian Huygens and the mathematization of nature, Cambridge University Press
- Young, D. A. und Alder, B. J. 1977. Melting-curve extrema from a repulsive step potential. Physical Rev. Lett. 38, 21, 1213–1216
- Young, D. A. und Alder, B. J., (1979), Studies in molecular dynamics. xvii. phase diagrams for step potentials in two and three dimensions. J. Chem. Physics 70 1, 473–481
- Young, Warren C. (1989), Roark's Formulas for Stress and Strain, 6th edition, McGraw Hill
- Zeigler, B. P., (1990), Object-oriented Simulation with Hierarchical, Modular Models. Academic Press
- Zoz, H und Reichardt, R. (2002), Application and Design of Drummills, PM2TEC'2002, 2002 World Congress on Powder Metallurgy & Particulate Materials, June 16-21, 2002, Orlando, FL, USA
- Zoz, H. und Reichardt, R., (1998b) Semi-kontinuierliches mechanisches Legieren im Produktionsmaßstab unter Verwendung von Cycle Operation, Metall – Internationale Fachzeitschrift für Metallurgie, Band 52 (1998) Heft 9, pp. 521-527
- Zoz, H.; Kim, J.-S.; Reichardt, R. (2001a), Anwendung und Auslegung von Trommelmühlen, Keramische Zeitschrift, Band 53 [5], pp. 384-392
- Zoz, H.; Reichardt, R.; Ren, H., (1999b), Energy Balance during Mechanical Alloying, Measurement and Calculation Method supported by the Maltoz-Software, Advances in Powder Metallurgy & Particulate Materials – 1999, Proc. of 1999 Internat. Conf. on Powder Metallurgy & Particulate Materials , Vol. 1, Vancouver, CDN, Jun 20-24 1999
- Zoz, H.; Reichardt, R.; Ren, H.; Mizutani, M.; Nishida, M.; Okouchi, H, (1999c), Simoloyer CM100s: Semi-Continuous Mechanical Alloying on a Production Scale Using Cycle Operation – Part I, Materials and Manufacturing Processes, Vol. 14, No. 6 , pp. 861-874
- Zoz, H.; Ren, H.; Reichardt, R.; Benz, H.U. (1998b) Herstellung von Metall-Flakes durch hochkinetischen Mahlprozess, Innovative Produkte durch neue Pulver, Vorträge des Hagener Symp., Hagen, D, 19.-20. Nov, 1998, Pulvermetallurgie in Wissenschaft und Praxis, Band 14 (1998), pp. 366-370, Düsseldorf: VDI-Ges. Werkstofftechnik
- Zoz, H; Benz, H.U.; Schäfer, G; Dannehl, M; Krüll, J; Kaup, F; Ren, H; Reichardt, R.; (2001b) High kinetic processing of enamel – part I, Advances in Powder Metallurgy & Particulate Materials – 2001, Proc. of 2001 Internat. Conf. on Powder Metallurgy & Particulate Materials , Part 2, New Orleans, USA, May 13-17, 2001, Band 2 (2001), pp 122-139
- Zoz, H; Benz, H.U.; Schäfer, G; Dannehl, M; Krüll, J; Kaup, F; Ren, H; Reichardt, R., (2001d), Hochkinetische Aufbereitung von Email, Teil I-a, Interceram, Band 50, Heft 5, pp. 388-396

- Zoz, H; Benz, H.U.; Schäfer, G; Dannehl, M; Krüll, J; Kaup, F; Ren, H; Reichardt, R., (2001c), Hochkinetische Aufbereitung von Email, Teil I-b, Interceram, Band 50, Heft 6, pp. 470-477
- Zoz, H; Ernst, D.; Reichardt, R.; Ren, H.; Mizutani, T. (1999d); Nishida-M; Okouchi-H: Simoloyer CM100s: Semi-continuous mechanical alloying on a production scale using cycle operation – part II, Materials and Manufacturing Processes, Band 14, Heft 6, pp. 861-874
- Zoz, H; Ren, H; Kim J.-S., Reichardt, R; Benz H.U., (2001e), Industrial Applications of MA/HEM – a review of new processes/PM-products of the last 12 months at Zoz in Germany-, PTECH 2001, 3rd International Latin-American Conference on Powder Technology, November 26-28, Florianópolis, Brazil, proceedings
- Zoz, H; Ren, H; Reichardt, R; Benz, H.U.; Nadkarni, A.; Wagner, G., (1999a), Ductile metal flakes based on [Au], [Ag], [Al], [Cu], [Ti], [Zn] and [Fe] materials by high energy milling (HEM) – Part I, Advances in Powder Metallurgy & Particulate Materials – 1999, Proc. of 1999 Internat. Conf. on Powder Metallurgy & Particulate Materials , Vol. 1, Vancouver, CDN, Jun 20-24 1999, pp. 93-107
- Zukas, J. A.; Nicholas, T.; Swift, H. F.; Greszczuk, L. B. und Curran, D. R. , (1992), Impact Dynamics, Krieger Publishing Company, Malabar

Anhang

A Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit

Im Folgenden wird die Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit von idealen Gasen hergeleitet.

A.1 Verteilung der Relativkomponenten.

Die mittlere Anzahl von n Kugeln pro Volumeneinheit mit einer Schwerpunktgeschwindigkeit im Bereich zwischen \vec{v} und $\vec{v} + d\vec{v}$ erhält man durch Division der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung durch das Volumenelement $d^3\vec{r}$:

$$f(\vec{v}) d^3\vec{v} = n \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\|\vec{v}\|^2 \alpha} d^3\vec{v} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{m}{2k_b T} = \frac{4}{\pi \|\vec{v}\|^2} \quad (\text{A-1})$$

Da die Gleichung (A-1) nur vom Betrag der Geschwindigkeiten abhängig ist, gilt:

$$f(\vec{v}) = f(v) \quad \text{mit} \quad v = \|\vec{v}\| \quad (\text{A-2})$$

Für die Fragestellung interessiert aber nur die mittlere Anzahl der Kugeln pro Volumeneinheit mit einer Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung und Bereich zwischen v_x und $v_x + dv_x$. Dabei sollen die anderen beiden Geschwindigkeitskomponenten in y- und z-Richtung keine Rolle spielen:

$$g(v_x) dv_x = \int_{v_z} \int_{v_y} f(\vec{v}) d^3\vec{v} \quad (\text{A-3})$$

Gleichung (A-3) ist über alle Geschwindigkeiten der y- und z-Komponenten zu integrieren – (A-1) in (A-3):

$$\begin{aligned} g(v_x) dv_x &= n \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_z} \int_{v_y} e^{-(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \alpha} dv_y dv_z dv_x \\ &= n \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-v_x^2 \alpha} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v_y^2 \alpha} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v_z^2 \alpha} dv_z \\ &= n \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-v_x^2 \alpha} dv_x \frac{\pi}{\alpha} \\ &= n \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-v_x^2 \alpha} dv_x \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

Gleichung (A-4) ist eine um den Erwartungswert $\bar{v}_x = 0$ symmetrische Gausverteilung. Eine Zufallsgröße heißt normalverteilt (Gaußverteilung) mit dem Erwartungswert a und der Standardabweichung σ , wenn sie eine Dichte folgender Gestalt hat:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}} \quad (\text{A-5})$$

Durch Koeffizientenvergleich erhält man:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{g(v_x)}{n} \\ \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}} &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-v_x^2 \alpha} \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

Somit ist die Standardabweichung $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$ und der Erwartungswert $a = \bar{v}_x = 0$.

Die Geschwindigkeitskomponente v_x kann folglich durch eine normalverteilte Zufallszahl dargestellt werden:

$$v_x \square n \left(0, \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \right) \quad (\text{A-7})$$

Dies gilt in gleicher Weise für alle drei Geschwindigkeitskomponenten (v_x, v_y, v_z).

Zwei beliebige Kugeln haben die Relativgeschwindigkeit \vec{v}_{rel} :

$$\vec{v}_{rel} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2, \quad v_{rel} = \|\vec{v}_{rel}\| \quad (\text{A-8})$$

Deren Geschwindigkeitskomponenten seien nach Gleichung (A-7) verteilt. Die drei Geschwindigkeitskomponenten von Gleichung (A-8) stellen die Differenz zweier erwartungswertfrei normalverteilter Zufallszahlen dar, wodurch wiederum eine Normalverteilung mit Erwartungswert Null aber doppelter Varianz entsteht. Folglich gilt:

$$v_{rel-x} \square n \left(0, \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \right) \quad (\text{A-9})$$

Die normierte Verteilung der x-Komponente der Relativgeschwindigkeit ergibt sich aus Gleichung (A-9) und (A-4) zu:

$$G(v_{rel-x}) dv_x = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} e^{-v_{rel-x}^2 \frac{\alpha}{2}} dv_{rel-x} \quad (\text{A-10})$$

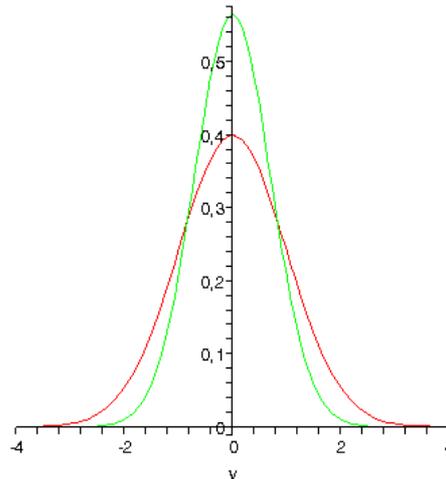


Abbildung A-1 Verteilung einer Geschwindigkeitskomponente mit $\alpha = 1$. *Grüne Kurve*: Geschwindigkeitskomponente einer Kugel. *Rote Kurve*: Geschwindigkeitskomponente der Relativgeschwindigkeit zweier Kugeln. Man erkennt die doppelte Varianz der roten Kurve. Berechnet mit Maple.

Um die Verteilung des Geschwindigkeitsbetrags des Relativgeschwindigkeit $v_{rel} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ anzugeben, bieten sich sphärische Polarkoordinaten an, die zusätzlich zu v_{rel} (Bereich 0 bis ∞) noch die beiden Winkelkoordinaten $v_\theta = \arccos(v_z / v_{rel})$ (Bereich 0 bis π) und $v_\phi = \arctan(v_y / v_x)$ (Bereich 0 bis 2π) enthalten. Es gilt dann:

$$\begin{aligned} v_x &= v_{rel} \cos(v_\theta) \sin(v_\phi) \\ v_y &= v_{rel} \sin(v_\theta) \sin(v_\phi) \\ v_z &= v_{rel} \cos(v_\theta) \end{aligned} \quad (\text{A-11})$$

Um eine Integration in nur noch einer Dimension zu ermöglichen, wird das infinitesimale Volumenelement $dv_x dv_y dv_z$ mit einer Jacobi Determinante transformiert:

$$\begin{aligned} dv_x dv_y dv_z &= \begin{vmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial v_{rel}} & \frac{\partial v_x}{\partial v_\theta} & \frac{\partial v_x}{\partial v_\phi} \\ \frac{\partial v_y}{\partial v_{rel}} & \frac{\partial v_y}{\partial v_\theta} & \frac{\partial v_y}{\partial v_\phi} \\ \frac{\partial v_z}{\partial v_{rel}} & \frac{\partial v_z}{\partial v_\theta} & \frac{\partial v_z}{\partial v_\phi} \end{vmatrix} dv_{rel} dv_\theta dv_\phi \\ &= v_{rel}^2 \sin(v_\theta) dv_{rel} dv_\theta dv_\phi \end{aligned} \quad (\text{A-12})$$

Die Verteilung der Absolutwerte der Relativgeschwindigkeit aus Gleichung (A-10) und Gleichung (A-12) ergibt:

$$\begin{aligned}
 F(v_{rel}) &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} v_{rel}^2 \sin(v_{\theta}) dv_{\theta} \left(\frac{\alpha}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-v_{rel}^2 \frac{\alpha}{2}} \\
 &= 4\pi \left(\frac{\alpha}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} v_{rel}^2 e^{-v_{rel}^2 \frac{\alpha}{2}}
 \end{aligned}
 \tag{A-13}$$

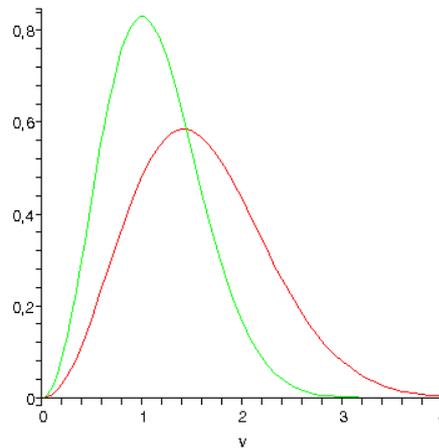


Abbildung A-2 Verteilung der absoluten Geschwindigkeiten mit $\alpha = 1$. *Grüne Kurve*: Geschwindigkeitsverteilung einer Kugel. *Rote Kurve*: Verteilung der Relativgeschwindigkeit. Berechnet mit Maple.

A.2 Verteilung des Stoßparameter

Die Positionen der Kugeln sind isotrop verteilt ($d^3\vec{r}$ in der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung). Jeder Ort im Raum ist gleich wahrscheinlich. Jede Komponente des Positionsvektors stellt folglich eine gleichverteilte Zufallszahl dar.

Der Relativvektor \vec{r}_{rel} ist definiert als:

$$\vec{r}_{rel} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{r}_{rel} = \|\vec{r}_{rel}\|
 \tag{A-14}$$

Das Koordinatensystem zweier stoßender Kugeln wird durch eine Galileitransformation so gedreht, dass eine Kugel steht (Mittelpunkt auf der x-Achse) und die andere Kugel parallel zur x-Achse auf die stehende Kugel zufliegt. Der Relativpositionsvektor ist die Verbindung der Kugelmittelpunkte. Zwei Kugeln treffen sich in dem Moment, wenn die Länge des Relativpositionsvektors gleich dem doppelten Kugelradius ist ($\omega = \phi$).

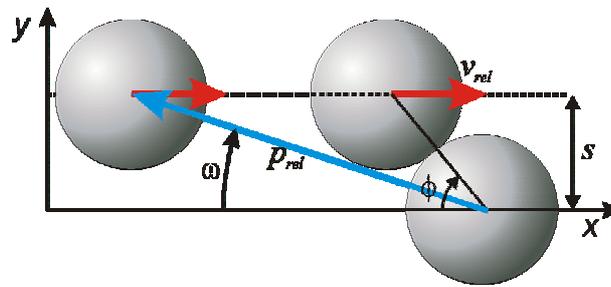


Abbildung A-3 Die linke Kugel trifft auf die rechte stehende Kugel. Das Koordinatensystem ist so gedreht, dass die Kugel immer entlang der x-Achse fliegt. Der Stoßparameter s gibt den Abstand der Mittelpunkte projiziert auf die y-Achse an. Ist $s = 0$ treffen sich die Kugeln zentral. Ist $s = 2R$, dann streifen sich die Kugeln.

Zwischen dem Stoßparameter s und dem Kugelradius R , und zwischen der Normalkomponente v_n der Relativgeschwindigkeit v_{rel} selbst bestehen folgende Beziehungen:

$$s = 2R \sin \phi, \quad v_n = v_{rel} \cos \phi, \quad s = 2R \sqrt{1 - \frac{v_n}{v_{rel}}} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{2} \quad (\text{A-15})$$

Die Auftreffpunkte auf der Kugeloberfläche auf der Projektion auf die y-z-Ebene sind gleichverteilt. Die Auftreffpunkte pro Umfang der Kreisfläche steigen also linear von innen nach außen.

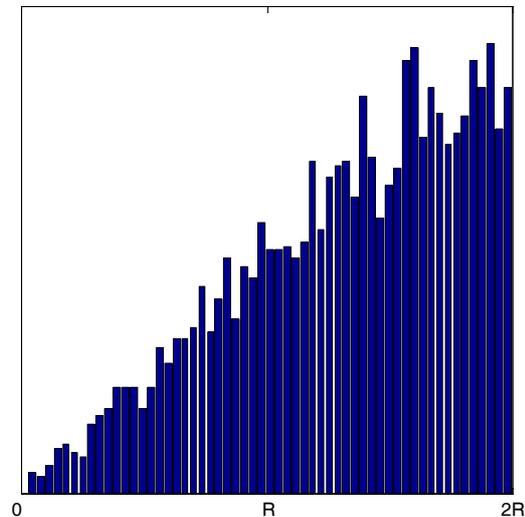
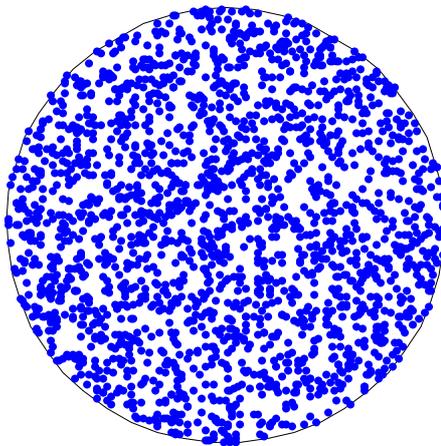


Abbildung A-4 Links: Markierung der Treffer auf der Projektion der Kugeloberfläche auf die x-z-Ebene durchgeführt mit einer Monte Carlo Simulation, $n=2000$ Treffer. Die Treffer sind auf der Fläche gleichverteilt. Rechts: Histogramm des Stoßparameters. Die Messdaten stammen aus einer ereignisdiskreten Simulation. Die Häufigkeit des Stoßparameters steigt, wie erwartet, linear an.

Daraus ergibt sich die Verteilung des Stoßparameters:

$$\begin{aligned}
 S(\phi) &= \frac{1}{\pi 4R^2} \int_0^R s \, ds \int_0^{2\pi} d\theta && \left| \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi \right. \\
 &= \frac{2}{4R^2} \int_0^R 2R \sin(\phi) \, d(2R \sin(\phi)) && \left| \frac{d \sin \phi}{d\phi} d\phi = \cos \phi \, d\phi \right. \\
 &= 2 \int_0^{\frac{1}{2}\pi} \sin(\phi) \cos(\phi) \, d\phi && \quad \quad \quad (A-16)
 \end{aligned}$$

A.3 Verteilung der Relativgeschwindigkeit beim Kugelstoß

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $F(v_{rel})$ entspricht einem Ensemble von $N \cdot (N-1)/2$ Kugelpaaren. Das Ziel ist, die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für ein Ensemble bestehend aus M paarweisen Kollisionen herzuleiten wobei eine Kugel, mit der Geschwindigkeit v_{rel} fliegend, betrachtet wird. Im Zeitintervall Δt trifft diese Kugel alle anderen Kugeln die sich im Zylinder $v_{rel} \Delta t (2\pi R)^2$ befinden. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Relativgeschwindigkeit v_{rel} in einem Ensemble von Kollisionen ist proportional zu $F(v_{rel})$, weil dies die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aller Kugelpaare ist. Außerdem ist sie proportional zu v_{rel} , weil die Anzahl der Kollisionen in einem vorgegebenen Zeitintervall proportional zur Relativgeschwindigkeit der Kugeln ist. Für diese Wahrscheinlichkeitsdichte der Relativgeschwindigkeit beim Kugelstoß gilt, dass $R(v_{rel}) \propto v_{rel} F(v_{rel})$ wahr ist:

$$R(v_{rel}) = \frac{\alpha^2}{2} v_{rel}^3 e^{-v_{rel}^2 \frac{\alpha}{2}} \quad (A-17)$$

A.4 Verteilung der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit

Die Verteilung der Relativgeschwindigkeit aus Gleichung (A-17) und die Verteilung der Relativposition aus Gleichung (A-16) sind unabhängige Zufallsgrößen und können daher unabhängig voneinander über alle möglichen Werte von v_{rel} respektive ϕ integriert werden. Die Integration wird über eine Dirac'sche Deltafunktion so eingeschränkt, dass der Zusammenhang $v_n = v_{rel} \cos \phi$ erzwungen wird.

$$\begin{aligned}
 N(v_n) &= \int_0^\infty R(v_{rel}) \, dv_{rel} \, S(\phi) \, \delta(v_n - v_{rel} \cos \phi) \\
 &= \int_0^\infty \frac{1}{2} \alpha^2 v_{rel}^3 e^{-v_{rel}^2 \frac{\alpha}{2}} \, dv_{rel} \, 2 \int_0^{\frac{1}{2}\pi} \sin(\phi) \cos(\phi) \delta(v_n - v_{rel} \cos \phi) \, d\phi && (A-18)
 \end{aligned}$$

Um $N(v_n)$ zu bestimmen wird bei Gleichung (A-18) zuerst die Integration über ϕ durchgeführt:

$$\begin{aligned} &= 2 \int_0^{\frac{1}{2}\pi} \sin(\phi) \cos(\phi) \delta(v_n - v_{rel} \cos \phi) d\phi \\ &= 2 \frac{v_n}{v_{rel}^2} \quad , \text{für } v_{rel} \geq v_n \end{aligned} \quad (\text{A-19})$$

Aus Gleichung (A-19) und (A-18) folgt:

$$N(v_n) = \alpha v_n e^{-\frac{\alpha}{2}v_n^2} \quad (\text{A-20})$$

Eine Zufallsgröße heißt Rayleigh verteilt (mit dem Erwartungswert b), wenn sie eine Dichte folgender Gestalt hat:

$$f_R(x) = \frac{x}{b^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \quad (\text{A-21})$$

Der Erwartungswert der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit kann – durch Koeffizientenvergleich - bestimmt werden mit:

$$\begin{aligned} f_R(x) &= N(v_n) \\ \frac{x}{b^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} &= \alpha v_n e^{-\frac{\alpha}{2}v_n^2} \quad | x = v_n \\ b &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \end{aligned} \quad (\text{A-22})$$

Somit ist die Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit eine Rayleigh Verteilung mit dem Erwartungswert $b = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$. Dieser Erwartungswert ist identisch mit dem der Maxwell-Verteilung. Die Maxima der Maxwell Verteilung der Maxwell-Verteilung der absoluten Geschwindigkeit und die Verteilung der der Normalkomponente der Kollisionsgeschwindigkeit befinden sich bei derselben Geschwindigkeit.

B Technische Daten des Rubens-Clusters

128 IBM eServer 325, jeweils ausgestattet mit:

- 2x AMD Opteron-64bit-Prozessoren (Model 246) mit 2 GHz
- 2 GB RAM (2x1GB PC2700 ECC DDR SDRAM)
- 2x 80 GB IDE Festplatten
- 2x Gigabit Ethernet
- Betriebssystem: SuSE-Linux Professional, 64 Bit-Version, Linux Kernel 2.4
- in einem Teil der Rechner Myrinet-200-Vernetzung (Myrinet=High-Speed-Vernetzung mit sehr niedriger Latenz)

2 Management Nodes

2 Storage Nodes

Gesamt:

- Hauptspeicher: 256 GB
- Festplattenspeicher: 20 Terabyte

C Kugelstoß Literaturgleichung

BRILLIANTOV et al. (1996) haben eine wichtige Arbeit über die Restitutionskoeffizienten verfasst, welche schon mehrfach zitiert wurde. Die dort angegebene Formel für den Kugelstoß kann allerdings nicht richtig sein:

$$\vec{v}'_{i/j} = \vec{v}_{i/j} \mp \frac{m_{eff}}{2m_{i/j}} \left((\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t - (\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n \right) \quad \text{mit} \quad m_{eff} = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{C-1})$$

Angenommen zwei Kugeln gleicher Masse treffen sich im gravitationsfreien Raum. Eine der beiden Kugeln hat keine Geschwindigkeit, die andere eine beliebige Geschwindigkeit \vec{v} . Der Stoß sei voll elastisch, rotationsfrei und zentral. Somit entfällt die Tangentialkomponente $(\varepsilon_t - 1) \vec{g}_t = 0$ und die Normalkomponente ist gleich der Geschwindigkeit $(\varepsilon_n + 1) \vec{g}_n = \vec{v}$ – siehe Abbildung C-1 oben. Gleichung (C-1) ist jetzt auf einen Spezialfall reduziert:

$$\vec{v}'_{i/j} = \vec{v}_{i/j} \pm \frac{1}{2} \vec{v} \quad (\text{C-2})$$

Die ankommende Kugel mit der Geschwindigkeit \vec{v} fliegt nach der Kollision mit der Hälfte der Geschwindigkeit wieder zurück. Die andere Hälfte der Geschwindigkeit wurde an die ruhende Kugel übertragen – siehe Abbildung C-1 mitte. Richtig wäre jedoch, dass die Geschwindigkeit vollständig an die ruhende Kugel übergeben wird und die ankommende Kugel nach der Kollision ruht – siehe Abbildung C-1 unten.

Vermutlich ist BRILLIANTOV et al. (1996) nur ein Tippfehler in den beiden Formeln unterlaufen, der von anderen Autoren per „Copy & Paste“ übernommen wurde.

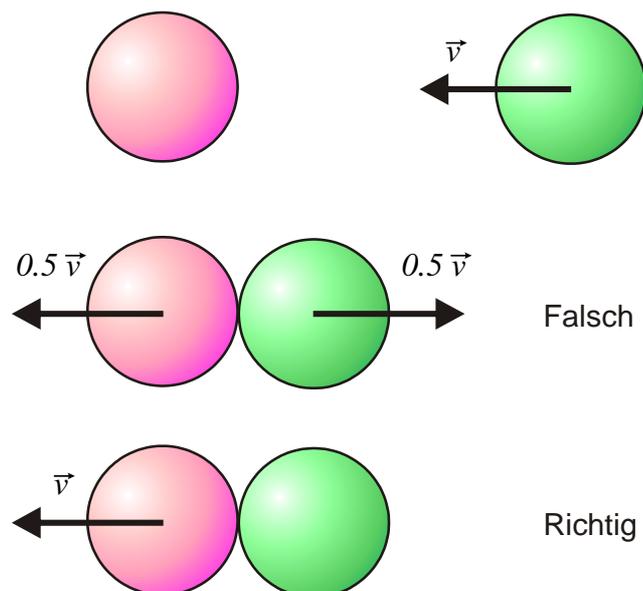


Abbildung C-1 Oben: Die grüne Kugel wird mit der ruhenden roten Kugel kollidieren. Mitte: Falsch ist, dass die Kugeln sich die Kollisionsgeschwindigkeit teilen. Unten: Richtig, ist dass die Geschwindigkeit der grünen Kugel vollständig an die rote Kugel übergeben wird.