

Zur Beschreibung grobgranularer Schüttgüter mit zellulären Automaten

Wolfgang Eisenberg, Uwe Renner

Arnold-Sommerfeld-Gesellschaft e.V.
Thaerstraße 34
D-04129 Leipzig
Eisenberg.Wolfgang@t-online.de
info@renner-uwe.de

Abstract: Der Artikel geht zunächst auf die Bedeutung zellulärer Automaten für die Simulation dynamischer Prozesse ein. Im weiteren wird ein Schwerpunkt auf die Simulation der Lagerung von Massengütern eingegangen, sogenannten Schüttgütern, für die es aufgrund mangelnder Berechnungsverfahren bis heute keine befriedigende numerische Lösung gibt. Mittels zellulärer Automaten sind hierbei zumindest für grobgranulARES Schüttgut brauchbare Lösungen ermittelbar. Der Artikel beschreibt den aktuellen Stand der Forschung auf dem Gebiet der Simulation von Schüttgut mittels zellulärer Automaten.

1 Einführung

Ziel der Untersuchungen mit zellulären Automaten (ZA) ist die Simulation dynamischer Prozesse. Wilson [Wi88] gelang die Verknüpfung der Physik mit der Computertechnik im konzeptionellem Rahmen des ZA. Er konnte den ZA als diskrete Näherungslösung von Differentialgleichungen einsetzen.

Der zelluläre Automat gewann an Bedeutung, als er sich auch bei der Simulation realer physikalischer Vorgänge, z.B. von Diffusionsvorgängen, bewährte. Einen Überblick über die Anwendungsmöglichkeiten der ZA findet man bei Gerhardt u.a. [GeSc95] Hilfreich für die ZA-Forschung war dabei die Entwicklung des ZA als Hardware, z.B. die CAM-6 Karte für Personalcomputer [Ma91].

Eine interessante Anwendung der zellulären Automaten ist die Beschreibung der Lagerung von Massengütern, die im allgemeinen als Schüttgüter bezeichnet werden. Das Schüttgutverhalten kann sowohl künstlich begrenzt, z. B. durch einen Trichter, als auch in natürlicher Weise realisiert werden. In beiden Fällen ist aber die Schüttgutedynamik noch nicht genügend erforscht.

Bis heute wurde kein Berechnungsverfahren entwickelt, welches die Spannungsverhältnisse im Schüttgut und an deren Rändern – z.B. Trichterwand – hinreichend beschreibt. Im Bereich der Kontinuumsmechanik existiert bereits eine Vielzahl von Lösungen zur Beschreibung des Fließverhaltens von Schüttgütern und der daraus resultierenden Spannungsverteilung. Einer der ersten und bedeutendsten Ansätze wurde von Janssen [Ja85] entwickelt. Neben den Analysen des Spannungsfeldes sind auch zielgerichtete Untersuchungen zu den Stoffgesetzen mit der FEM-Methode durchgeführt worden [Fe96], [Hä85].

Mittlerweile sind Forschungen zur diskreten Mechanik möglich geworden, entweder mit den Methoden der molekularen Dynamik [CuSt79], [Gr97] oder der zellulären Automaten [BaBe90a], [BaBe90b], [PeHe94]. Mit diesem ZA lässt sich auch ein partikuläres Berechnungsmodell mit stochastischen Elementen und basierend auf einem relativ einfachen, physikalisch sinnvollen Stoffgesetz – vorerst für grobgranuläres Schüttgut – ableiten.

2 Zelluläre Automaten

Die ZA-Methode ist eine Untersuchungsmethode, deren Anwendung und Ausprägung wesentlich durch die Entwicklung der Computertechnik möglich geworden ist. Sie wird auch oft der „Experimentellen Mathematik“ zugeordnet. Die allgemeine Vorgehensweise ähnelt der in der Experimentellen Mechanik.

Analogien der „Experimentellen Mathematik“ und der Experimentellen Mechanik

Allgemeine Vorgehensweisen	
Experimentelle Mechanik	Experimentelle Mathematik
Experiment - Hypothese - Beweis	Simulation - Vermutung - Beweis

Ein zellulärer Automat besteht aus einer regelmäßigen Anordnung gleichartiger, endlicher Automaten mit einem meist recht einfachen Regelsatz. Mit dem ZA wird die Beschreibung der zeitlichen Veränderung eines Entwicklungsprozesses im Raum vieler wechselwirkender gleicher Teilchen (Automaten) realisiert.

Dabei wird im Gegensatz zu anderen „stetigen“ Methoden die Zeit und der Raum diskretisiert. Der Raum selbst wird durch Zellen beschrieben. Bisher wurden der Modellierung ein- und zweidimensionale Zellräume (wie auch hier) zugrunde gelegt. Wegen der Symmetrieproblematik wurden dreidimensionale Räume erst wenig untersucht. Jeder Zelle können Eigenschaften als eine endliche diskrete Wertemenge (Zustandsmenge) zugeordnet werden.

Die Zeit wird durch eine Sequenz diskreter Zeitschritte beschrieben. Bei jedem Zeittakt werden alle Zellwerte gleichzeitig durch einen festen, vorgegebenen Regelsatz aktualisiert (Zustandsberechnung, Updating, Shifting). Er bestimmt auch den neuen Wert einer Zelle. Die Regeln können deterministisch oder probabilistisch sein. Durch die Zellgeometrie werden für die Nachbarschaften entscheidende Vorgaben gemacht.

Eine wichtige Weiterentwicklung der zellulären Automaten sind die zellulären Gittergase (Lattice Gas Method - LGM). Die LGM formalisiert ein Gas oder eine Flüssigkeit als eine idealisierte Menge einzelner Partikel auf einem einfachen regulärem Gitter, die sich Schritt für Schritt (step by step) entsprechend der Entwicklungsregeln auf den Knoten des Gitters bewegen. Für die zweidimensionale inkompressible Navier-Stokes-Gleichung ist ein hexagonales Gitter notwendig (FHP-Modell) [FHP89]. Interessant ist auch, dass vor allem die turbulente Strömungen simuliert [Na90] wurden. Offensichtlich erscheint die ZA-Methode für solche Untersuchungen methodisch relevant zu sein.

3 Zur Modellbildung

Die FEM-Anwendung ist auf der Grundlage der Kontinuumsmechanik weit entwickelt worden. Problematisch erscheint für diese Methode die Berücksichtigung von Diskontinuitäten im Schüttgut. Die Methoden der Molekulardynamik (MD) und der LGrM betrachten im Gegensatz zur FEM das Schüttgut als ein diskretes Medium.

Die LGrM unterscheidet sich von der Vorgängermethode LGM dadurch, dass sie unelastische Stoßvorgänge mit Energiedissipation und unterschiedliche Dichten im ZA-Regelsatz berücksichtigt. Ein Vorteil der LGrM liegt in ihrem endlichen Zustandsraum und den geringeren Anforderungen an die Computertechnologie. Aber die Digitalisierung und die Zustandsbeschränkungen sind auch mit methodischen Nachteilen verknüpft, nämlich mit Genauigkeitsverlusten.

Es ist daher sicher vernünftig, bei der Modellbildung einen Kompromiss einzugehen. So enthalten die zweidimensionalen LGrM-Modelle hier Hybrideigenschaften (MD, LGM). Die sinnvolle Nutzung solcher zweidimensionaler Modelle setzt im Anwendungsfall natürlich gewisse symmetriebedingten Vereinfachungen voraus.

4 Relativ einfache Stoffgesetze

Zwei Ansätze für die Stoffgesetze in den ZA sind untersucht worden, der energetische und der probabilistische Ansatz. Dabei sind die Iterationsschritte identisch mit Zeitschritten (geeignete experimentelle Kalibrierung).

Bei den energetischen Stoffgesetzen müssen weitere Annahmen gemacht werden, wie z.B. dass die Partikel nur in den Kontaktpunkten wechselwirken. Weiterhin sollen die elastischen Deformationen der Partikel klein bleiben. Die Kontakte werden dementsprechend einfach strukturiert; sie werden z. B. durch ein an den zellulären Automaten angepasstes Feder-Dämpfer-System mit Reibelementen modelliert [CuSt79].

Das energetische Grundmodell berücksichtigt die kinetische, die potentielle, die Dämpfungs-, die Reibungs- und die Federenergie. Denn das Kontaktmodell enthält als Elemente die Hertz'sche Pressung, die viskose Dämpfung und die Coulombsche Reibung.

Aufgrund der Schwierigkeiten (Erzeugung von Massenfluss) des energetischen Ansatzes wurde zu Vergleichszwecken ein einfacher probabilistischer Ansatz gewählt, bei dem die Form der Partikel keine Rolle mehr spielt. Beim probabilistischen Ansatz wird für die Interaktionsanalyse eine Wahrscheinlichkeitsbelegung definitorisch vorgegeben, wobei die Gravitation berücksichtigt wird.

5 Füllvorgang und Entleeren – Simulationsergebnisse

Auffällig ist die schon aus früheren ZA-Arbeiten bekannte Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Geometrie des Zellraumes. Es zeigt sich z.B. eine typische Abhängigkeit des Böschungswinkels der Schüttgutoberfläche von der inneren Reibung, die dem realen Verhalten des Schüttgutes tendenziell entspricht. Auch die starke Abhängigkeit des Füllzustandes und des Fließverhaltens des Schüttgutes von der Partikelform lässt sich mit dem ZA simulieren. Hier zeigt sich der Vorteil der Simulationen oder „theoretischen Experimente“, da nicht selten entsprechende Realexperimente nicht durchführbar sind. Trotzdem bleibt das Testproblem – verknüpft mit geeigneten „rückwirkungsschwachen“ Messverfahren – für die „theoretischen Experimente“ als zu lösende Aufgabe bestehen.

Es ist aus obigem verständlich, dass es auch weiterhin ungelöste Probleme gibt. So ist z.B. der Grenzwert für den Sanduhreffekt weiterhin nicht genau bekannt (nur Schätzwerte). Außerdem ist auch die Modell-Kalibrierung (experimentelles Massenflusskriterium) nicht gelungen.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Die Untersuchungen zeigen zweifelsfrei, dass die Forschungen in der Schüttgutmechanik fortgesetzt und thematisch ausgedehnt werden müssen (z. B. Einfluss der Gittertopologie auf die Simulation, Bestimmung der Wandspannungen, realistische Fließprofile usw.).

Wichtig und hilfreich sind in der Schüttgutdynamik die Gegenüberstellungen der erzeugten Simulationsergebnisse mit den gesicherten Ergebnissen (aus Experimenten und analytischen Lösungen), wie andere ZA-Anwendungen zeigen [Ei00]. Die ZA-Modellierung enthält eben auch hypothetische Annahmen und Vereinfachungen, die es zu prüfen gilt. Sie ist auch unterschiedlich zu bewerten, je nachdem sie anfänglich, als komplementäre Ergänzung oder thematisch abschließend eingesetzt wird.

Interessant sind die Schüttgut-Modellierungen auch für andere Anwendungen, wie z. B. für die Membranforschung [Ei03], wobei aktuell insbesondere mechanische und elektrische Eigenschaften der Partikel (Ionen) in die Modellierung solcher „Schüttungen“ einzubeziehen sind. Man kann sich dabei sicher auch mikro- und nanozelluläre Automaten in Aktion vorstellen.

Realistischer und sicher auch schwieriger werden die Modellierungen der Schüttgutdynamik, wenn gewisse Idealisierungen (z.B. keine plastische Verformungen der Partikel) nicht mehr vorausgesetzt werden. Das sollte ein Bewährungsfeld für die ZA-Modellierung werden.

Literaturverzeichnis

- [BaBe90a] Baxter, G. W., Behringer, R. P.: Cellular automata models of granular flow, Phys. Rev. A, Vol. 42, Nr. 2, S. 1017, 1990.
- [BaBe90b] Baxter, G. W., Behringer, R. P.: Cellular automata models for the flow of granular materials, Physica D 51, S. 465 – 471, 1991.
- [CuSt79] Cundall, P. A.: Strack, O. D. L.: A discrete numerical model for granular assemblies, Geotech 29, 47, 1979.
- [Ei00] Eisenberg, W.: Zelluläre Automaten und verallgemeinerte Boltzmann-Gleichungen. In: Synergie, Syntropie, nichtlineare Systeme/hrsg. von W. Eisenberg. – Leipzig: Dr. Wolfgang Vörkel – Verl. Im Wiss. – Zentrum Leipzig – H. 3. Soft Computing, S. 31 ff, 2000.
- [Ei03] Eisenberg, W., Renner, U.: Systemmodellierung mit zelluläre und mikrozellulären Automaten. – Vortrag, gehalten auf dem Symposium „Modellierung in physikalischen und Informationssystemen und in der Informationstechnik“ in Leipzig (6./7. November 2003) – wird 2004 veröffentlicht
- [Fe96] Feise, H.-J.: Modellierung des mechanischen Verhaltens von Schüttgütern, Braunschweiger Schriften zur Mechanik 23-1996, TU Braunschweig, 1996.
- [FHP86] Frisch, U., Hasslacher, B. and Pomeau, Y.: Lattice Gas Automata for the Navier-Stokes Equation, Phys. Rev. Lett. 58 (14), 1506-8, 1986.
- [GeSc95] Gerhardt, M. und Schuster, H.: Das digitale Universum, Vieweg, 1955.
- [Gr97] Gröger, T.: Rheologische Untersuchungen an Schüttgütern in Schlauchgurtförderern – Numerische Experimente, Schüttgut, Heft 1, S. 35 – 40, 1997.
- [Hä84] Häubler, U.: Geschwindigkeits- und Spannungsfelder beim Entleeren von Silozellen, Dissertation TU Karlsruhe, 1984.
- [Ja95] Janssen, H. A.: Versuche über Getreidedruck in Silozellen, VDI-Zeitschrift Nr. 35, S. 1045-1049, 1985.
- [Ma91] Mai, J.: Frischzellenkultur, c`'t, 1991.
- [Na90] Nasilowski, R.: A cellular-automation fluid model with simple rules in arbitrary many dimensions, Diss., Universität Oldenburg, 1990.
- [PeHe94] Peng, G., Herrmann, H. J.: Density waves of granular flow in a pipe using lattice-gas automata, Phys. Rev. E, Vol. 49, Nr. 3, R 1796, 1994.
- [Wi88] Wilson, G.: The life and times of cellular automata. New Scientist (8), October 1988.