

Bestimmung der Raumausfüllung von
Partikelmischungen – Modelle und
Datenstrukturen für die Simulation durch
Kugelpackungen

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

vorgelegt von
Steffen Raschdorf
aus Einbeck

genehmigt von der Fakultät für
Mathematik/Informatik und Maschinenbau
der Technischen Universität Clausthal

Tag der mündlichen Prüfung
28.04.2010

Bibliographische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Dissertation Clausthal 2010

Vorsitzender der Promotionskommission:

Prof. Dr. Jörg P. Müller, Technische Universität Clausthal

Hauptberichterstatter:

Prof. Dr. Michael Kolonko, Technische Universität Clausthal

Berichterstatter:

Prof. Dr. Gabriel Zachmann, Technische Universität Clausthal

D 104

© PAPIERFLIEGER VERLAG GmbH, Clausthal-Zellerfeld, 2010

Telemannstraße 1, 38678 Clausthal-Zellerfeld

<http://www.papierflieger-verlag.de>

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Wege (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2010

ISBN: 978-3-86948-084-8

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all jenen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Da wäre zunächst mein Doktorvater Herr Prof. Dr. Kolonko zu nennen, der mir mit vielen hilfreichen Anregungen und Diskussionen zur Seite stand. Zudem danke ich Herrn Prof. Dr. Zachmann für die (kurzfristige) Übernahme des Korreferats. Großer Dank gebührt außerdem der Arbeitsgruppe für Bindemittel und Baustoffe, deren Know-how für diese fächerübergreifende Thematik unverzichtbar war. Die Treffen mit Herrn Prof. Dr. Wolter brachten stets viele gute Ideen für dieses Projekt hervor. Ganz besonders danke ich auch meinem Mit-Stipendiaten Herrn Dr. Palm für die gute Zusammenarbeit, von der unsere Dissertationen wechselseitig immens profitierten. Meinem Kollegen Herrn Dr. Wäsch gilt mein Dank für seine überaus engagierte Unterstützung in diesem Projekt, er war ein sprudelnder Quell der Ideen.

Diese Arbeit wurde durch ein Stipendium der Dyckerhoff-Stiftung (Projektnummer T218/15631/2006) ermöglicht. Daher gilt mein herzlicher Dank dem Stifterehepaar Dr. Dyckerhoff und ihrer Förderung der Baustoff-Forschung an der TU Clausthal. Desweiteren danke ich Herrn Schaaf vom Stifterverband für die Deutsche Wissenschaft für seine Hilfsbereitschaft in organisatorischen Fragen und die stets gute und unbürokratische Kommunikation mit der Stiftungsverwaltung.

Ganz besonders danke ich meiner Frau Corinna, die mich in allen Phasen des Promotionsvorhabens motiviert und mir den Rücken frei gehalten hat, und meinem Sohn Felix für seine Geduld mit mir.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.1.1	Der Baustoff Beton	2
1.1.2	Einfluss der Raumauffüllung auf die Betoneigenschaften	3
1.1.3	Bestimmung und Optimierung der Raumauffüllung	5
1.2	Überblick der Arbeit	6
2	Grundlagen	9
2.1	Die Korngrößenverteilung	9
2.1.1	Spezielle Verteilungen	12
2.1.2	Polydispersität	15
2.2	Partikelpackungen	16
2.2.1	Makroskopische Eigenschaften	17
2.2.2	Analyse der Mikrostruktur	20
2.2.3	Reguläre Packungen	23
3	Einfache Hartkugel-Modelle	27
3.1	Stienen-Modell	28
3.2	Matérn-Modell	29
3.3	Lilypond-Modell	30
3.4	Dead-Leaves-Modell	32
3.5	Random Sequential Adsorption	33
4	Analytisch-empirische Modelle der Raumauffüllung	37
4.1	Vorstellung verbreiteter Modelle	39
4.1.1	Furnas-Modell	39
4.1.2	Modell von Aïm und Goff	42
4.1.3	Toufar-Modell	42
4.1.4	Modifiziertes Toufar-Modell	43
4.1.5	Dewar-Modell	44
4.1.6	Linear Packing Model	45
4.1.7	Mixture Packing Model	47
4.1.8	Linear-Mixture Packing Model	48
4.1.9	Compressible Packing Model	50
4.1.10	Modell von Schwanda/Reschke	53
4.2	Vergleich der Modelle	55

5	Hierarchisches, simulationsgestütztes Modell zur Bestimmung der Raumausfüllung	59
5.1	Interaktion zwischen den Fraktionen	63
5.1.1	Wandeffekt	63
5.1.2	Keilung	64
5.2	Einteilung der Fraktionen und Samples	64
5.3	Abkürzung des Simulationsvorgangs	68
5.3.1	Vorzeitiger Simulationsabbruch	68
5.3.2	Präemptive Fraktionsberechnung	69
5.4	Wahl der Parameter	70
5.5	Empirische Untersuchung des Modells und der Parameter	72
5.6	Vergleich mit weiteren analytischen Modellen	77
5.7	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	79
6	Erzeugung von Kugelpackungen per Simulation	83
6.1	Sampling	84
6.1.1	Simple Random Sampling With Replacement	84
6.1.2	Stratifizierung	84
6.1.3	Vergleich der Samplingvarianten	87
6.2	Container	91
6.3	Methoden zur Erzeugung von Kugelpackungen	92
6.3.1	Random Sequential Addition	92
6.3.2	Collective Rearrangement	95
6.3.3	Diskrete Elemente Methode	98
6.3.4	Weitere Methoden	99
6.4	Anwendungen	102
6.5	Aus der Literaturlauswertung resultierende Entscheidungen für die Implementierung	103
7	Implementierung der Packungssimulation	105
7.1	Struktureller Aufbau des Simulationssystems	105
7.2	Ermittlung der Eigenschaften von CR-Prozess und Packung	107
7.2.1	Überlappungsrate	107
7.2.2	Koordinationszahl	108
7.2.3	Paarkorrelationsfunktion	109
7.2.4	Weitere Eigenschaften	110
7.3	Ablauf der Simulation	110
7.3.1	Erzeugung der Kugeln	111
7.3.2	Initiale Kugelplatzierung	113
7.3.3	Collective Rearrangement	119
7.3.4	Veränderung der Kennzahlen während der Simulation	132
7.4	Simulationsergebnisse	136
7.5	Möglichkeiten der Parallelisierung des Programms	137
7.5.1	Parallelisierung auf globaler Ebene	138
7.5.2	Parallelisierung auf Fraktionsebene	138
7.5.3	Parallelisierung im Collective Rearrangement	138

8	Effiziente Nachbarschaftsbestimmung	141
8.1	Ausnutzen von Kohärenz durch Verlet-Listen	142
8.2	Datenstrukturen für die Bestimmung der Nachbarn	143
8.2.1	Adaptives Gitter	144
8.2.2	Loose Octree	154
8.2.3	Geschachtelte Verlet-Listen	159
8.3	Implementierung	161
8.4	Leistungsvergleich	163
9	Lokale Packungsdichte	169
9.1	Monte-Carlo-Methode zur Bestimmung der Raumausfüllung	170
9.1.1	Erzeugung der Testpunkte im Zylinder	172
9.2	Untersuchung der Verteilung der Packungsdichte	175
10	Packungen weiterer Partikelformen	181
10.1	Literaturübersicht	181
10.1.1	Ellipsoide	182
10.1.2	Zylinder	183
10.1.3	Würfel	183
10.1.4	Tetraeder	183
10.2	Realisierung alternativer Partikelformen	184
10.2.1	Bestimmung des Volumens	185
10.2.2	Bestimmung der Oberfläche	186
10.2.3	Erzeugung und Platzierung	188
10.2.4	Translation und Rotation im CR	189
10.3	Raumausfüllung für verschiedene Partikelformen	190
10.4	Erzeugung von polydispersen und polymorphen Packungen	194
11	Agglomeration	197
11.1	Ursache	198
11.2	Relevanz	199
11.3	Vermeidung	201
11.4	Berücksichtigung in der Simulation	202
11.4.1	Modifizierung der simulativ ermittelten Packungsdichte	202
11.4.2	Konzept für die Modellierung der Agglomeration durch Änderung der Korngrößenverteilung	204
11.4.3	Konkrete Agglomerate	215
12	Optimierung	219
12.1	Optimierungsszenarien	220
12.1.1	Bestimmung einer KGV für dichteste Packungen	220
12.1.2	Optimierung für gegebene Bestandteile	221
12.1.3	Austausch einzelner Komponenten unter Beibehaltung der Betoneigenschaften	221
12.2	Methoden für die Black-Box-Optimierung	223
13	Fazit und Ausblick	227

13.1 Offene Fragestellungen und Erweiterungsmöglichkeiten	229
A Anleitung zur Benutzung des Simulationsprogramms	231
A.1 Die Konfigurationsdatei	231
A.2 Verwendete Dateitypen	240
A.3 Bildschirmausgaben während der Simulation	241

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Granulare Medien sind in vielen Forschungsgebieten und in der Industrie allgegenwärtig. In der Pharmazie beschreibt die Tablettierung die Erzeugung eines Komprimats aus einem Haufwerk, wobei die Homogenität der Wirkstoffe kritisch eingehalten werden muss. Ein Teilgebiet der Geowissenschaften befasst sich mit dem Kollektivverhalten der Partikel in Gerölllawinen, Dünen und Treibsand. Die Materialwissenschaften verarbeiten u. a. natürliche Baustoffe, metallische Rohstoffe und keramische Pulver zu leistungsfähigen Werkstoffen, die sich durch hohe Festigkeiten auszeichnen. Dies sind nur einige Beispiele für die Vielseitigkeit und Bedeutung der Granulate.

Die vorliegende Arbeit ist aus einer Problemstellung im Rahmen eines Projekts zur kombinierten Korngrößen- und Phasenoptimierung von Hochleistungsbindemitteln entstanden. Nach ersten Ergebnissen zu experimentellen [Pal06] und simulativen [Ras06] Methoden brachte dieses Projekt schließlich die Dissertation von Palm [Pal09] hervor. Sie behandelt die Komposition von Bindemittelsystemen aus verschiedenen feinen Schüttgütern, deren Materialkenngrößen die Eigenschaften des Endproduktes beeinflussen. Der labortechnische Aufwand für die Prüfung der Packungsdichte einer beliebigen Mischung solcher Komponenten soll mit Hilfe der hier vorgelegten Arbeit durch die Simulation einer Partikelpackung und automatisierte Auswertung ihrer Eigenschaften ersetzt bzw. ergänzt werden.

Das entstandene Modell der Packungsgenerierung sowie auch die Implementierung sind im Hinblick auf die genannte Einsatzmöglichkeit angefertigt worden. Allerdings

wurde auf eine universelle Umsetzung geachtet, sodass über die Bindemittelkomponenten hinaus nicht nur das gesamte Korngrößenspektrum bis hin zum groben Zuschlag abgedeckt werden kann – was die Simulation von Packungen aus Zement, Gips, Mörtel und Beton einschließt –, sondern gleichsam die Raumauffüllungen beliebiger granularer Medien bestimmt werden können. Einzige Voraussetzung ist, dass die Packungsstruktur durch die dichte, geometrische Anordnung der Partikel bestimmt wird. Eine Kugelgestalt der Partikel erleichtert die Simulation erheblich, jedoch sind auch andere Kornformen realisierbar. Bestehen Kräfte, die einer dichten Packung entgegenwirken, muss zusätzlicher Aufwand für deren Modellierung betrieben werden. So sind zusätzlich verschiedene Ansätze entstanden, um die Wirkung der Agglomeration feinsten Partikel bei der Bestimmung der Raumauffüllung zu berücksichtigen.

Da letztendlich die Optimierung von Betoneigenschaften das Ziel der Bemühungen ist, soll dieser Baustoff im Folgenden näher vorgestellt werden.

1.1.1 Der Baustoff Beton

Vereinfacht stellt der Verbundwerkstoff Beton ein Zweistoffsystem dar, das aus einer Gesteinskörnung als Zuschlagstoff und dem erhärteten Bindemittel besteht. Der Betonzuschlag besteht aus einem Gemenge von verschiedenen großen Körnern, meist aus natürlichem oder künstlichem Gestein mit dichtem oder porigem Gefüge, in Sonderfällen auch aus natürlichen oder künstlichen organischen Stoffen, z. B. Holzabfällen, Polystyrol oder Metallen. Als Bindemittel werden anorganische hydraulisch erhärtende Stoffe, in der Regel Zement, oder bituminöse Massen, z. B. Asphalt, und für Sonderzwecke auch Kunstharze verwendet.

Beton kann neben diesen beiden Grundbestandteilen noch Zusatzmittel und Zusatzstoffe enthalten, um die Herstellung zu erleichtern oder um einzelne Eigenschaften zu verbessern. Zusammen mit dem Anmachwasser ergibt sich detailliert betrachtet ein 5-Stoff-System, das in Abbildung 1.1 aufgeführt ist.

Die Festigkeit gilt als die definierende und zugleich wichtigste Charakteristik des Baustoffs Beton. Eine moderne Variante wie ultrahochfester Beton (UHPC) [SFG04] zeichnet sich durch enorme Tragfähigkeit aus: Einerseits kann damit eine Druckfestigkeit von deutlich über 200 N/mm^2 erzielt werden, was nahezu an die Leistungswerte von Stahl heranreicht, andererseits kann UHPC aufgrund des im Vergleich zu Normalbeton um 30–50 % reduzierten Eigengewichts als High-Tech-Werkstoff im Brückenbau eingesetzt werden; Abbildung 1.2 zeigt die Gärtnerplatzbrücke in Kassel,

Stoff	Unterscheidungsmerkmale und Varianten
Zement	Zementart, -festigkeitsklasse Zementgehalt besondere Eigenschaften
Gesteinskörnung	Rohdichte (normal, leicht, schwer) natürlich (Sand, Kies), künstlich (Brechsand, Splitt) Kornaufbau, Sieblinie besondere Eigenschaften
Wasser	Begrenzung betonschädlicher Inhaltstoffe (pH-Wert, CO ₂ -Gehalt, SO ₄ -Gehalt)
Zusatzstoffe	Flugasche, Trass, Silicastaub Gesteinsmehl Pigmente, Kunststoff (-dispersion) Fasern (Stahl, Glas, Kunststoff)
Zusatzmittel	Betonverflüssiger, Fließmittel, Luftporenbildner, Dichtungsmittel, Verzögerer, Beschleuniger, Stabilisierer, ...

Abbildung 1.1: Beton als 5-Stoff-System (nach [GR99]).

eine Fußgänger- und Radfahrerbrücke aus UHPC [SF03].

Mit der Festigkeit korreliert auch die Dauerhaftigkeit, und damit die Wirtschaftlichkeit und Nachhaltigkeit des Werkstoffes. Daneben sind weitere Eigenschaften von Bedeutung, so etwa die Verarbeitbarkeit, Beständigkeit, usw.; eine praxisrelevante Optimierung der Betonfestigkeit darf diese Charakteristika schlussendlich nicht unbeachtet lassen. Aus diesem Grund ist auch bei der computergestützten Analyse und Optimierung der Granulometrie von Betonmischungen die Expertise von Sachverständigen bei der praktischen Umsetzung unabdinglich.

1.1.2 Einfluss der Raumausfüllung auf die Betoneigenschaften

Die Notwendigkeit der granulometrischen Optimierung mit dem Ziel einer höheren Raumausfüllung wird aus der Betrachtung der Zusammenhänge deutlich: Eine hohe Raumausfüllung und somit dichte Gefügestruktur einer trockenen Schüttung bedeutet eine Verringerung des gesamten Porenvolumens innerhalb der Packung. Da der Porenraum bei der Herstellung von Frischbeton vollständig mit Wasser gefüllt wird, sorgt eine optimierte Mischung für einen reduzierten Wasseranspruch. Während des Trockenvorgangs verdunstet das für die Hydratation überschüssige Wasser, im aushärtenden Beton bleiben Kapillarporen im Nano- und Mikrometerbereich zurück. Diese Poren hängen direkt mit der zugegebenen Wassermenge und damit auch mit



Abbildung 1.2: Die aus ultrahochfestem Beton gefertigte Gärtnerplatzbrücke in Kassel.

der Raumauffüllung der trockenen Packung zusammen.

Um eine gute Verarbeitbarkeit zu gewährleisten, muss das dem Beton zuzugebende Wasser nach Möglichkeit sämtliche Partikel benetzen. Für optimierte Gefügestrukturen, bei denen immer feinere Partikel die Lücken der nächstgrößeren Kornklasse ausfüllen, kann dies zu einem erhöhten Wasseranspruch führen, denn mit abnehmendem Durchmesser sinkt die Partikeloberfläche langsamer als das Volumen; eine hohe Gesamtoberfläche der Partikel in der Schüttung ist die Folge.

Eine möglichst hohe Raumauffüllung einer (trockenen) Partikelmischung senkt also den Porenraum im Beton und wirkt sich dadurch nicht nur auf die Festigkeit positiv aus, sondern auch auf die Rissfreiheit, Dichtigkeit und Kapillarporosität – alles Eigenschaften, die wiederum für die Dauerhaftigkeit ausschlaggebend sind [NBK⁺07]: Beton mit reduziertem Porenanteil ist beispielsweise in geringerem Maße durch Regenwasser, Salz und sonstige Umwelteinflüsse angreifbar. Die Anforderungen an die Verarbeitbarkeit können jedoch bei hohen Feinanteilen eine beträchtliche Erhöhung des Wasseranspruchs nach sich ziehen; dies muss vor dem Einsatz in der Praxis für jede Mischung und bezogen auf die Erfordernisse der jeweiligen Anwendung individuell überprüft werden. Dennoch bildet eine Mischung mit hoher Raumauffüllung eine gute Basis für weitere Anpassungen, sodass die nachfolgenden Kapitel dieser Arbeit von

einer erwünschten Maximierung der Packungsdichte ausgehen, ohne die genannten Nebenbedingungen zu berücksichtigen.

1.1.3 Bestimmung und Optimierung der Raumausfüllung

Bevor die granulometrische Zusammensetzung optimiert werden kann, ist zunächst eine Methode erforderlich, die Raumausfüllung einer gegebenen Mischung zu bestimmen. Der „klassische“ Ansatz ist das Experiment im Labor. So kann z. B. das Verfahren nach Punkte [Pun02] angewendet werden, bei dem einem Kornhaufwerk gerade genug Wasser zugefügt wird, um die Sättigung der Poren, Minimierung der Kapillarspannung und somit maximale Verdichtung herbeizuführen. Aus dem Wasseranspruch lässt sich dann der Porenanteil bzw. die Raumausfüllung berechnen.

Die Bestimmung der Raumausfüllung für eine trockene Mischung kann mit Hilfe der Messung der Masse und des eingenommenen Volumens erfolgen. Hierbei wird zwischen der Schüttdichte und der Stampfdichte unterschieden; letztere ist für dichte Packungen vorzuziehen. Zu beachten ist bei dieser Klasse von Methoden, dass die erzielbare Packungsdichte nicht verfahrensunabhängig ist, sondern stark durch den Verdichtungsdruck beeinflusst wird.

Eine in den letzten Jahren zunehmend stärker aufkommende Alternative ist die Simulation: Mit fortschreitender Leistungsfähigkeit moderner Prozessoren und stetig ansteigender Kapazitäten des Arbeitsspeichers ist es möglich, den Packungsvorgang oder zumindest dessen Resultat, eine dichte Partikelpackung, für Mischungen immer größerer Partikelanzahlen auf dem Rechner abzubilden. Für diese „virtuelle“ Packung können dann Eigenschaften wie Raumausfüllung, Kontaktzahl usw. effizient bestimmt werden. Der labortechnische Aufwand entfällt größtenteils, zudem lassen sich automatisiert neue Mischungen aus gegebenen Komponenten erzeugen und simulieren, was für eine nachgeschaltete Optimierung essenziell ist. Daher bildet diese Methode den Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

Daneben existiert als dritte Möglichkeit die Anwendung empirisch-analytischer Modelle. Diese berechnen die Raumausfüllung einer Mischung aus den Packungsdichten und Anteilen der beteiligten Stoffe, deren Kenntnis vorausgesetzt werden muss.

Eine Optimierung der Zusammensetzung der Betoninhaltsstoffe kann bereits für geringe Komponentenanzahlen aufgrund des enorm umfangreichen Suchraums nur mittels Heuristiken durchgeführt werden, die sich einer guten Lösung iterativ annähern. Umso wichtiger sind daher schnelle Algorithmen zur Simulation und Auswertung

von Partikelpackungen. Ferner bietet sich für eine heuristische Optimierung die Möglichkeit, multikriterielle Techniken einzusetzen und so weitere wünschenswerte Charakteristika der Partikelmischung als Optimierungsziele oder Nebenbedingungen zu berücksichtigen, etwa technische und wirtschaftliche Aspekte.

1.2 Überblick der Arbeit

Im Anschluss an diese Einleitung wird im nächsten Kapitel eine Einführung in die Grundbegriffe des Themengebietes der Korngrößenverteilungen und Partikelpackungen gegeben, danach folgen die Vorstellungen der verschiedensten in der Literatur beschriebenen Methoden zur Ermittlung der Raumauffüllung einer zufällig und dicht angeordneten Partikelmischung. Dazu werden als erstes in Kapitel 3 die Modelle der statistischen Geometrie präsentiert, die zwar einen analytischen Zugang erlauben, jedoch für reale Bindemittel- oder Betonmischungen weniger geeignet zu sein scheinen. Den Gegensatz bilden die analytisch-empirischen Modelle in Kapitel 4, die direkt durch die Verbesserung der Raumauffüllung motiviert sind und hauptsächlich von Fachleuten auf dem Gebiet der granularen Systeme entwickelt wurden. Einige dieser in der Literatur zahlreich beschriebenen Modelle liefern für ein breites Feld möglicher Mischungen realistische Ergebnisse und sind daher für die Bestimmung der Raumauffüllung von Betonmischungen geeignet. Allerdings benötigen sie dazu etliche Daten der Ausgangsstoffe, was einen erheblichen vorausgehenden experimentellen Aufwand impliziert. Um den Umfang dieser Laborarbeit deutlich zu reduzieren, wurde in dieser Arbeit ein neues, auf hierarchischer Fraktionierung basierendes Modell geschaffen, das stattdessen die Simulation einbezieht. Eine ausführliche Beschreibung wird in Kapitel 5 gegeben.

Die Erzeugung von Kugelpackungen per Simulation ist ebenfalls eine etablierte Methodik, um Informationen über Größen wie die Raumauffüllung zu gewinnen. Eine Literaturübersicht dazu liefert Kapitel 6, an dessen Ende ein Zwischenresümee gezogen wird, um einige Entscheidungen in Bezug auf die Implementierung zu fällen. Diese wird schließlich in Kapitel 7 in Form des in dieser Arbeit entstandenen Simulationsprogramms und seiner Komponenten dargestellt. Die für das Laufzeitverhalten wichtigen Datenstrukturen zur Organisation der Kugeln behandelt Kapitel 8, Methoden zur Bestimmung der lokalen Packungsdichte und zur Implementierung weiterer Partikelformen werden in den folgenden beiden Kapiteln vorgestellt. Kapitel 11 beschäftigt sich mit den Ursachen und Auswirkungen der Agglomeration, die bei der Packung von Feinstoffen immer eine Rolle spielt. Mehrere Varianten zur

Einbeziehung des Agglomerationseffekts in die Simulation werden vorgestellt.

Die Existenz einer automatisiert ablaufenden Simulation eröffnet letztendlich die Möglichkeit, diese als Bewertungsinstrument einer Mischung im Rahmen einer Optimierung zu nutzen. Kapitel 12 liefert dafür mehrere Anwendungsszenarien und gibt Hinweise zu geeigneten Optimierungsverfahren, bevor im letzten Kapitel 13 ein abschließendes Fazit gezogen sowie ein Ausblick auf mögliche Erweiterungen gegeben wird.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Die Korngrößenverteilung

Die Korngrößenverteilung (kurz: KGV) dient der statistischen Charakterisierung einer Mischung und kann mit Hilfe verschiedener Verfahren der Partikelmesstechnik ermittelt werden. Diese umfassen u. a. die Laserbeugung und automatische Bildanalysemethoden im Fein- und Feinstbereich, sowie die Trockensiebung für mittlere bis grobe Korngrößen. Die vermessenen Partikel werden dabei nach ihrer Größe in Klassen eingeteilt, um so die auf jede Klasse entfallenen Mengenanteile zu ermitteln. Die Klassenbreite wächst bei den meisten Verfahren mit aufsteigendem Durchmesser exponentiell, sodass die Klassen in einem Histogramm mit logarithmischer Skalierung der Abszissenachse wie in Abbildung 2.1 optisch gleich breit erscheinen; die Balkenhöhen im Histogramm spiegeln die relativen Häufigkeiten der Kornklassen wieder.

Je nach Anwendung, aber auch aufgrund der unterschiedlichen Messmethoden, sind verschiedene Mengenangaben gebräuchlich. So liefern optische Zählverfahren meist Anzahlverteilungen, während bei Siebmethoden der Rückstand bzw. Durchgang gewogen wird, wodurch sich eine Masseverteilung ergibt. Ist die Reindichte des Materials über alle Größenklassen konstant, so entspricht die Masseverteilung der Volumenverteilung. Tabelle 2.1 listet die möglichen Quantitätsmaße auf.

Statt der Veranschaulichung der KGV durch ein Histogramm wird normalerweise die Verteilungssumme $Q_r(x)$ dargestellt (Q für *Quantity*), oder alternativ die Verteilungsdichte $q_r(x)$.

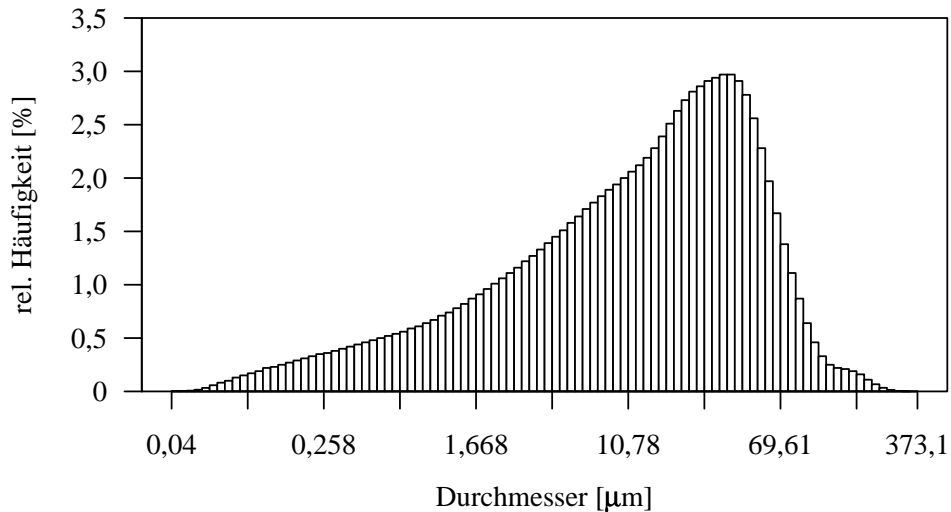


Abbildung 2.1: Histogramm einer Korngrößenverteilung.

Definition 2.1.0.1 Eine KGV lässt sich durch die **Verteilungssumme** $Q_r: \mathbb{R} \mapsto [0, 1]$ beschreiben. $Q_r(x)$ gibt den Mengenanteil der Partikel mit Korngröße $d \leq x$ an, dabei ist r der Index des Quantitätsmaßes aus Tabelle 2.1.

Index r	Maß der Quantität	gewonnen durch
0	Anzahl	optische Zählverfahren
1	Länge	—
2	Fläche	Bildauswertung der Projektionsfläche
3	Volumen/Masse	Wägung des Siebdurchgangs

Tabelle 2.1: Quantitätsmaße in der Korngrößenverteilung.

Definition 2.1.0.2 Eine KGV lässt sich durch die **Verteilungsdichte** $q_r: \mathbb{R} \mapsto [0, 1]$ mit

$$q_r(x) = \frac{dQ_r(x)}{dx}$$

beschreiben, wenn Q_r stetig differenzierbar ist. Dabei ist r der Index des Quantitätsmaßes aus Tabelle 2.1.

Wie anfangs beschrieben liefern Messverfahren in der Praxis nicht die Verteilungsdichte für jede einzelne Korngröße x , sondern für ganze Kornklassen $[x_u, x_o]$, innerhalb derer $q_r(x)$ konstant bleibt. Stetige Differenzierbarkeit (wie in Definition 2.1.0.2 gefordert) ist dann für $Q_r(x)$ nicht mehr gegeben, allerdings lässt sich $q_r(x)$ auch auf andere Weise berechnen. Dazu muss zunächst den Definitionen 2.1.0.1 und 2.1.0.2 folgend der bereits verwendete Begriff der relativen Häufigkeit definiert werden:

Definition 2.1.0.3 Den Anteil der Partikel eines Korngrößenintervalls $[x_u, x_o]$ an der Gesamtmischung gibt die **relative Häufigkeit** $h_r: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \mapsto [0, 1]$ mit

$$h_r(x_u, x_o) := \int_{x_u}^{x_o} q_r(x) dx = Q_r(x_o) - Q_r(x_u)$$

an. Dabei ist r der Index des Quantitätsmaßes aus Tabelle 2.1.

Ergänzend zur Definition 2.1.0.2 berechnet sich die Verteilungsdichte für eine Korngröße $x \in [x_u, x_o]$ aus dem Verhältnis der relativen Häufigkeit dieser Kornklasse und der Klassenbreite, was

$$q_r(x) = \frac{Q_r(x_o) - Q_r(x_u)}{x_o - x_u}$$

ergibt. Zur graphischen Darstellung von $q_r(x)$ wird jedoch meist das arithmetische Mittel $x_m = (x_o - x_u)/2$ jeder Kornklasse als Abszisse verwendet. Abbildung 2.2 zeigt die zum Histogramm aus Abbildung 2.1 gehörende Verteilungssumme sowie Verteilungsdichte.

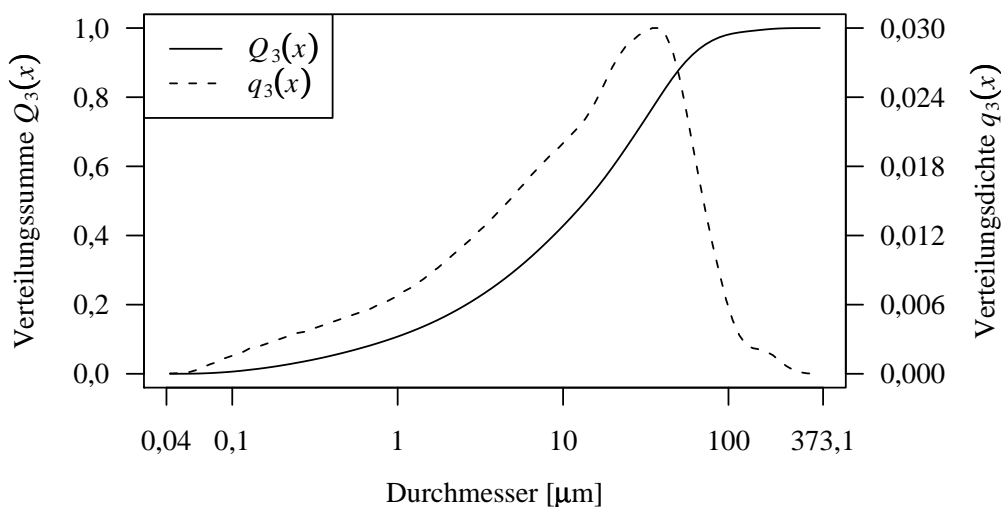


Abbildung 2.2: Verteilungssumme und -dichte einer Korngrößenverteilung.

Die in der Praxis am häufigsten verwendete Verteilungssumme ist $Q_3(x)$, welche in der Regel durch das Abwiegen der Siebdurchgänge bzw. Rückstände während der Dispersitätsanalyse gewonnen wird. Für die Erzeugung einer virtuellen Partikelpackung am Computer müssen jedoch individuelle Partikel (z. B. durch Kugeln) repräsentiert werden, weshalb die Kenntnis der Anzahlverteilungssumme $Q_0(x)$ nötig ist. Die Umrechnung zwischen den beiden Verteilungsdichten $q_0(x)$ und $q_3(x)$ ist

durch

$$q_3(x) = \frac{x^3 \cdot q_0(x)}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} y^3 \cdot q_0(y) dy}$$

bzw.

$$q_0(x) = \frac{x^{-3} \cdot q_3(x)}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} y^{-3} \cdot q_3(y) dy}$$

möglich, dabei kennzeichnet x_{\min} den kleinsten und x_{\max} den größten Partikeldurchmesser der Mischung. Allgemein gilt

$$q_r(x) = \frac{x^{r-s} \cdot q_s(x)}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} y^{r-s} \cdot q_s(y) dy}, \quad r, s = 0, \dots, 3,$$

mit

$$Q_r(x) = \int_{x_{\min}}^x q_r(y) dy$$

ergibt sich die entsprechende Verteilungssumme.

Für die Beschreibung von Granulaten häufig verwendete Kenngrößen der Korngrößenverteilung sind der Medianwert sowie der Modalwert, welche als Lageparameter direkt aus der Verteilung ablesbar sind.

Definition 2.1.0.4 (a) Die Umkehrfunktion der Verteilungssumme ist die **Quantilfunktion** $Q_r^{-1}: [0, 1] \mapsto \mathbb{R}$, sie lautet

$$Q_r^{-1}(p) = \inf\{x \in \mathbb{R}: Q_r(x) \geq p\} \quad \text{für } p \in [0, 1].$$

(b) Die Quantilfunktion liefert mit $x_{50} := Q_r^{-1}(0,5)$ den **Medianwert** (bezogen auf das durch r angegebene Quantitätsmaß) der Korngrößenverteilung.

Definition 2.1.0.5 Der **Modalwert** der Verteilung ist diejenige Korngröße, für die die Verteilungsdichte ein (lokales) Maximum annimmt. Verteilungen mit mehreren Maxima werden **multimodal** genannt, mit zwei Maxima insbesondere auch **bimodal**.

2.1.1 Spezielle Verteilungen

In der Betontechnik wird die KGV einer Partikelmischung oft näherungsweise durch eine Funktion beschrieben, für die eine analytische Formel angegeben werden kann. So

reduziert sich die Charakterisierung der KGV auf wenige Kennzahlen (die Parameter der Formel). Einige der wichtigsten Verteilungen werden im Folgenden vorgestellt.

RRSB-Verteilung

Diese Verteilung nach Rosin, Rammler, Sperling und Bennett [RRS33, RR33, Ben36] lautet

$$Q_3(x) = 1 - e^{-\left(\frac{x}{x'}\right)^n},$$

mit dem Parameter x' als derjenigen Partikelgröße, für die die Kurve einen Wendepunkt markiert. Dort ist

$$Q_3(x') = 1 - e^{-1} \approx 0,632;$$

x' wird auch *Lageparameter* genannt. Als zweiter Parameter gibt n das *Steigungsmaß* an. Der üblicherweise betrachtete Siebrückstand $R(x)$ für eine Siebgröße x ist hier

$$R(x) = 1 - Q_3(x) = e^{-\left(\frac{x}{x'}\right)^n},$$

zweimaliges Logarithmieren von $1/R(x)$ liefert

$$\lg \lg \frac{1}{1 - Q_3(x)} = n \lg x - n \lg x' + \lg \lg e.$$

Die reziproke Darstellung von $R(x)$ in einem Diagramm mit doppeltlogarithmischer Ordinate und logarithmischer Abszisse (sog. *RRSB-Netz*, DIN 66145 [DIN76]) ergibt somit eine Gerade mit der Steigung n .

Fullerkurve

Die Fullerkurve gilt als klassisches Verteilungsmodell in der Betonherstellung, seit sie 1907 von Fuller und Thompson [FT07] und später von Andreasen [AA30] beschrieben wurde. Ihr Ziel war das Finden einer analytischen Beschreibung einer Idealsieblinie für dichte Packungen des Zuschlags im Beton. Erkenntnisse aus Experimenten, aber auch theoretische Überlegungen zur optimalen Radienabstufung idealer Kugeln führten zur Verteilungssumme

$$Q_3(x) = \left(\frac{x}{x_{\max}}\right)^n$$

mit dem bei Fuller und Thompson gewählten Parameter $n = 0,5$. In der Praxis hat sich die Wahl eines kleineren Exponenten – etwa $n = 0,4$ für Kiessande und $n = 0,3$

für gebrochene Körnungen – als besser (im Sinne möglichst dichter Packungen mit guter Verarbeitbarkeit) erwiesen, was der von der idealen Kugelgestalt abweichenden Kornform realer Partikel Rechnung trägt. Auch bei der Komposition der Zementfraktionen wird die Fullerkurve oft als ideal angesehen [NBK⁺07], außerdem ist sie in die DIN 1045-2 [DIN01] eingeflossen, in der u. a. Sieblinien mit Exponenten $0,22 \leq n \leq 0,7$ genormt sind.

Ausfallkörnungen

Unter Ausfallkörnungen versteht man Mischungen mit sogenannten unstetigen Sieblinien, bei denen die Kurve für $Q_r(x)$ in einem Bereich waagrecht verläuft. Partikel aus diesem Korngrößenintervall sind somit nicht in der Mischung vorhanden, Ausfallkörnungen sind daher immer multimodal.

In stetigen Verteilungen wie der Fullerkurve sind alle Kornklassen zwischen x_{\min} und x_{\max} besetzt. Dies kann zu Einschränkungen der Platzwechselforgänge während der Verdichtung der Packung führen, wenn kleine Partikel nicht zu den idealen Positionen in den Zwischenräumen der großen Partikel finden können, weil Partikel der mittleren Kornklassen den Weg versperren. Das Entfernen einer mittleren Kornklasse führt dann zu einer Ausfallkörnung, die möglicherweise eine höhere Packungsdichte erzielt als die in der Theorie ideale Fullerkurve.

Kurven der drei vorgestellten Verteilungsmodelle sind in Abbildung 2.3 zu sehen.

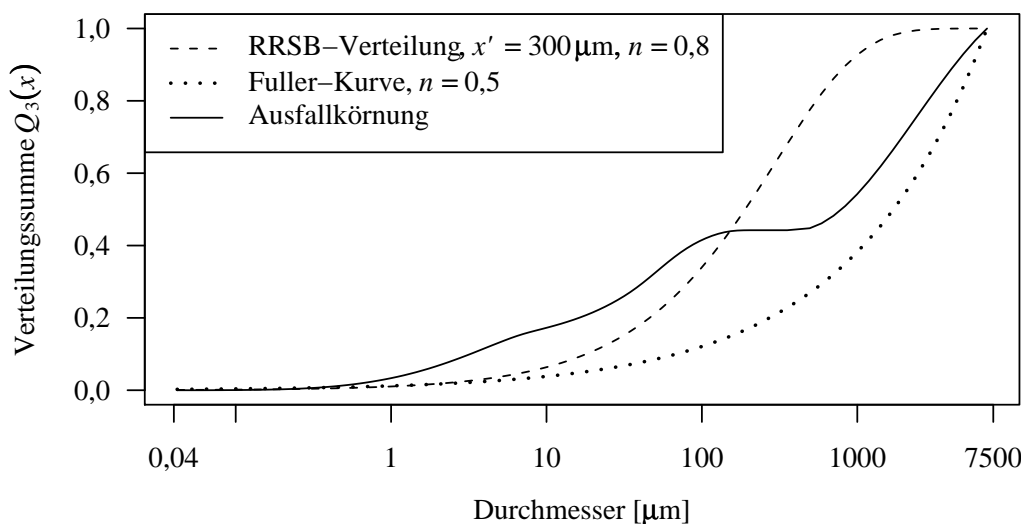


Abbildung 2.3: Summenkurven verschiedener Verteilungsmodelle.

2.1.2 Polydispersität

Unter der Polydispersität einer Mischung ist anschaulich die Breite der Verteilungsdichtekurve zu verstehen. Hier sei sie folgendermaßen definiert:

Definition 2.1.2.1 *Der Quotient aus größtem und kleinstem Partikeldurchmesser ist die **Polydispersität***

$$P = \frac{x_{max}}{x_{min}}.$$

Für $P = 1$ spricht man von einer **monodispersen**, für $P > 1$ von einer **polydispersen** Mischung.

Eine andere mögliche Charakterisierung der Mischung [Sch05] berücksichtigt das Auftreten von Messungenauigkeiten gerade an den Rändern der Verteilung oder tatsächlich vorhandene, aber unerwünschte Ausreißer, wie etwa deutlich kleinere Partikel durch Abrieb oder größere durch Agglomeration. Hier ist die Breite P_B der Mischung durch die Differenz der 10 % bzw. 90 %-Quantile von $Q_3(x)$ definiert, also durch den *Interdezilbereich*

$$P_B = x_{90} - x_{10} = Q_3^{-1}(0,9) - Q_3^{-1}(0,1).$$

Polydisperse Korngrößenverteilungen sind sehr oft multimodal, z. B. wenn eine Mischung mehrerer Materialien vorliegt. Umgekehrt ist nach Definition 2.1.2.1 eine multimodale Verteilung immer polydispers.

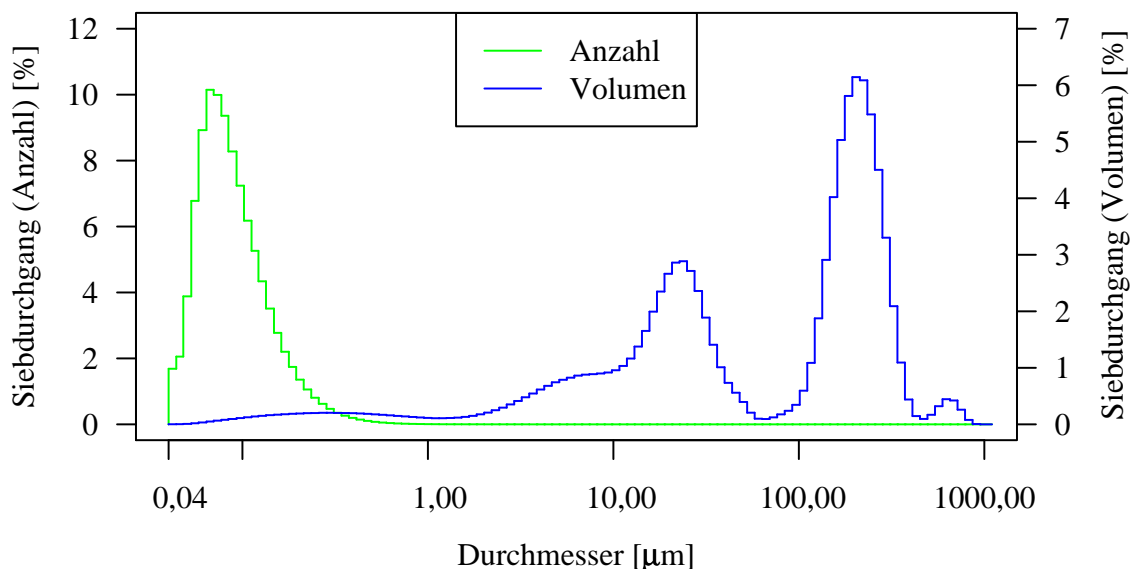


Abbildung 2.4: Die Korngrößenverteilung (relative Häufigkeiten) einer stark polydispersen Mischung aus Flugasche, Zement und Hüttensand.

Granulare Mischungen von Bindemittelsystemen umfassen typischerweise einen sehr breiten Korngrößenbereich, angefangen bei Feinstoffen wie Flugasche, Mikrosilika oder Gesteinsmehl mit Korngrößen von weniger als $0,1 \mu\text{m}$ bis maximal $125 \mu\text{m}$ über die Zementfraktionen, die sich ebenfalls innerhalb dieses Intervalls befinden, bis hin zu Sanden im Bereich $125\text{--}2000 \mu\text{m}$. Für Beton gibt es zusätzlich noch den groben Zuschlag (z. B. Kies, Splitt, Schotter) mit Korngrößen von 2 mm bis teilweise über 32 mm zu berücksichtigen. Abbildung 2.4 zeigt eine typische Korngrößenverteilung am Beispiel einer Mischung aus Flugasche, Zement und Hüttensand, dabei ist das Histogramm sowohl der Anteile am Gesamtvolumen als auch der Anteile an der Gesamtpartikelanzahl dargestellt. Beide Kurven weichen stark voneinander ab: Während die Volumenanteilskurve den Beitrag der großen Partikel zur Packung hervorhebt, verläuft die Anzahlanteilskurve in jenem Bereich scheinbar auf der Nulllinie. Tatsächlich bilden die Partikel aus dem Intervall $213,2\text{--}948,3 \mu\text{m}$ etwa ein Viertel des *Gesamtvolumens* der Mischung ab, jedoch beträgt ihr Anteil an der *Anzahlverteilung* nur $8,31 \cdot 10^{-7} \%$.

Die Realisierung einer Packung am Computer wird so für stark polydisperse Mischungen enorm eingeschränkt, da sich die für ein repräsentatives Sample erforderliche Partikelanzahl reziprok zum Anteil $h_0(x_u, x_o)$ verhält, wenn Partikel des Durchmesserintervalls $[x_u, x_o]$ im Sample vorkommen sollen. Im Beispiel wären dies ca. $1,20 \cdot 10^8$ Partikel. Eine hohe Polydispersität steigert außerdem die Rechenzeit von Packungsprogrammen, zum einen indirekt über die hohe Partikelanzahl, andererseits aber auch unmittelbar, wenn spezielle, auf eine einzelne Partikelgröße optimierte Methoden und Datenstrukturen mit einer polydispersen Mischung konfrontiert werden. Nach Wackenhut [Wac06] wächst beispielsweise die Berechnungszeit eines mittels der *Diskreten Elemente Methode* operierenden Algorithmus mit P^{d_f+1} an, wobei d_f die fraktale Dimension der Mischung ist und für Betonmischungen ungefähr $3\text{--}3,5$ beträgt.

2.2 Partikelpackungen

Als Modell realer (verdichteter) Betonschüttungen dienen in dieser Arbeit virtuelle Partikelpackungen. Sie sollen – wenn nicht anders angegeben – aus Gründen der Vereinfachung und im Hinblick auf die später diskutierten Methoden ihrer Erzeugung ausschließlich aus Kugeln bestehen.

Definition 2.2.0.2 *Eine **Kugelpackung** ist eine dichte, zusammenhängende Anordnung von Kugeln; sie wird **regulär** genannt, wenn sich regelmäßige Strukturen in*

der Anordnung erkennen lassen, ansonsten heißt sie **zufällig**.

Die Anordnung wird gewöhnlich durch einen geschlossenen Container zu allen Seiten begrenzt, für „virtuelle“, d. h. am Computer per Simulation erzeugte Packungen muss dies nicht gelten, siehe Kapitel 6.2. Einige Eigenschaften der ihr zugrunde liegenden Korngrößenverteilung werden auch der Kugelpackung zugeschrieben, etwa die Mono- oder Polydispersität und die Mono- oder Multimodalität.

Neben dreidimensionalen Kugelpackungen ist das Prinzip der dichten Anordnung auch in anderen Dimensionen von Bedeutung. So dienen Kreisscheibenpackungen in der Ebene [BDGL00, SMC⁺07] etwa als Modell für Mobilfunkzellen und helfen so bei der Positionierung von Mobilfunkmasten, oder erlauben optimierte Schnittmuster für Stoffe und Bleche in der Bekleidungs- bzw. metallverarbeitenden Industrie. D -dimensionale Packungen von Hyperkugeln sind für die Kodierungstheorie relevant, dort liefern sie ein System von Code-Wörter der Länge D [Slo84].

Torquato et al. warfen die Frage auf, ob der Begriff der „zufälligen, dichten Packung“ wohldefiniert sei [TTD00]. Sie argumentieren, dass „zufällig“ und „dicht“ in diesem Zusammenhang zueinander kontradiktionär seien, da Packungen mit maximaler Raumausfüllung keine zufällige Anordnung aufwiesen. Stattdessen plädierten sie für die Bezeichnung „maximally random jammed“ für einen Zustand minimaler Ordnung in einer dichten Struktur der Kugeln, in der keine Kugel durch Translation bewegt werden kann, wenn die Positionen aller anderen Kugeln fixiert sind.

Im Folgenden werden einige Kennzahlen und Eigenschaften von Partikelpackungen beschrieben, ausführlichere Beschreibungen und weitere Charakteristika aus der räumlichen Statistik finden sich in [BSB01, LAE⁺06, LOS06, WP06, SCDS97, RVC08, BBS02, Sto02, SKM95, SS94, IPSS08, MW04].

2.2.1 Makroskopische Eigenschaften

Die für die Simulation von Betonmischungen wichtigste Eigenschaft einer Kugelpackung ist die Raumausfüllung.

Definition 2.2.1.1 Die **Raumausfüllung** ϕ einer Kugelpackung ist der Anteil des durch Kugeln ausgefüllten Volumens V_K am Gesamtvolumen V_C des umgebenden Containers:

$$\phi = \frac{V_K}{V_C}$$

ϕ wird auch als **Packungsdichte** bezeichnet und beträgt für monodisperse Kugeln in einer zufälligen, dichten Packung („random close packing“, RCP) fast 64% [Sco60, SK69], wogegen eine zufällige, lockere Packung („random loose packing“, RLP) durch $\phi \approx 60\%$ charakterisiert ist [Sco60]. Bei einem Kornhaufwerk spricht man ebenso von **Schüttdichte**.

Für N harte, disjunkte Kugeln mit Durchmessern d_1, \dots, d_N gilt

$$\phi = \frac{1}{V_C} \sum_{i=1}^N \frac{\pi}{6} d_i^3 = \frac{\pi}{6V_C} \sum_{i=1}^N d_i^3. \quad (2.1)$$

Definition 2.2.1.2 *Der Anteil des Hohlraumvolumens V_H am Gesamtvolumen V_C des umgebenden Containers ist die **Porosität***

$$\epsilon = \frac{V_H}{V_C} = 1 - \phi.$$

Wird ein geschlossener Container mit festen, ebenen Rändern verwendet, so ist der **Wandeffekt** zu berücksichtigen: Zwischen den äußersten Kugeln und dem Containerrand befindet sich Hohlraum, der die Porosität dort lokal erhöht. Für monodisperse Packungen wirkt der Wandeffekt einige Kugeldurchmesser weit nach innen, da die Kugeln am Rand ausgerichtet werden; es entsteht eine regelmäßige Struktur, die innerhalb mehrerer Schichten in eine ungeordnete Packung übergeht. Untersuchungen des Wandeffekts anhand simulierter Kugelpackungen folgen in Kapitel 9.2.

Eine weitere Eigenschaft von Kugelpackungen ist die Anzahl der Berührungspunkte einer Kugel mit anderen Kugeln.

Definition 2.2.1.3 *Die durchschnittliche Anzahl von Kontakten pro Kugel in einer Kugelpackung heißt **Koordinationszahl***

$$K = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N K_i,$$

dabei sind K_1, \dots, K_N die Kontaktzahlen der einzelnen Kugeln.

Selbstverständlich wird auch diese durch den Wandeffekt beeinträchtigt, da Randkugeln im Mittel weniger Kontakte besitzen als im Packungsinneren befindliche, selbst wenn der Kontakt zur Containerwand mitgezählt werden würde. Bei Betrachtung einer genügend großen Packung kann die Beeinträchtigung der Koordinationszahl durch den Wandeffekt vernachlässigt werden. Die Koordinationszahl einer zufälligen,

dichten Packung monodisperser Kugeln beträgt ca. 6.0 [BM60, GF74]. Mit zunehmender Polydispersität sinkt dieser Wert immer weiter ab, während die Raumausfüllung ansteigt (Abbildung 2.5).

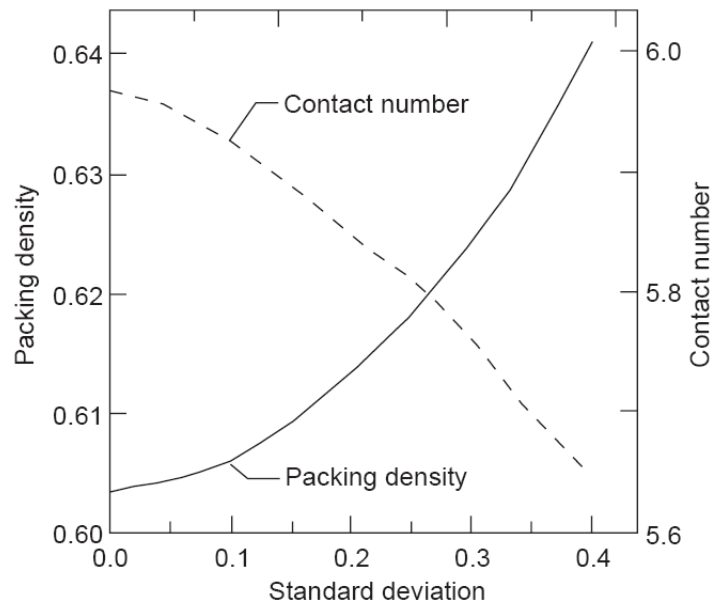


Abbildung 2.5: Raumausfüllung und Koordinationszahl als Funktionen der Standardabweichung der Kugelradien (aus [HE98]).

Eine weitere Eigenschaft poröser Materialien und granularer Medien ist der Anteil der gesamten inneren Oberfläche in der Materialmenge. Er ist für viele chemische Reaktionen von Bedeutung, die die Oberfläche als Angriffspunkt nutzen.

Definition 2.2.1.4 (a) Der Quotient aus innerer Oberfläche O und Volumen V_C einer Packung ergibt die **volumenbezogene spezifische Oberfläche**

$$S_V = \frac{O}{V_C}.$$

(b) Der Quotient aus innerer Oberfläche O und Masse m einer Packung ergibt die **massenbezogene spezifische Oberfläche**

$$S_m = \frac{O}{m}.$$

Für Festkörper muss in der Definition die innere durch die äußere Oberfläche ausgetauscht werden, und das Volumen des Körpers ersetzt das Containervolumen. Der Körper mit der kleinsten volumenbezogenen spezifischen Oberfläche ist die Kugel,

hier ergibt sich

$$S_V = \frac{\pi d^2}{\frac{\pi}{6} d^3} = \frac{6}{d}$$

bei einem Kugeldurchmesser d . Harte Kugeln bilden nur punktförmige Kontakte zueinander, somit lassen sich die Oberflächen einer Kugelpackung aus n Kugeln mit Durchmessern d_1, \dots, d_n einfach aufaddieren, womit sich die volumenbezogene spezifische Oberfläche zu

$$S_V = \frac{1}{V_C} \sum_{i=1}^n \pi d_i^2 = \frac{\pi}{V_C} \sum_{i=1}^n d_i^2$$

ergibt. Mit Gleichung (2.1) folgt

$$S_V = 6\phi \frac{\sum_{i=1}^n d_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^3}.$$

Die massenbezogene spezifische Oberfläche einer solchen Kugelpackung ist

$$S_m = \frac{\sum_{i=1}^n \pi d_i^2}{\rho \frac{\pi}{6} \sum_{i=1}^n d_i^3} = \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{\rho \sum_{i=1}^n d_i^3},$$

dabei gibt ρ die Reindichte des Materials an.

Anmerkung: S_m hängt – im Gegensatz zu S_V – nicht von der Raumauffüllung der Packung ab und kann somit auch direkt für Mischungen bzw. einer gegebenen Korngrößenverteilung gehorchende Durchmesser bestimmt werden, ohne die Kugelpackung per Simulation generieren zu müssen.

2.2.2 Analyse der Mikrostruktur

Die stochastische Geometrie hält einige Werkzeuge bereit, die die Analyse der Mikrostruktur unterstützen und insbesondere Aufschluss über die Homogenität innerhalb der Kugelpackung geben können. Ein in diesem Zusammenhang wichtiger Begriff ist die Nachbarschaft:

Definition 2.2.2.1 Die Kugel k_i (mit Mittelpunkt \vec{x}_i und Radius r_i) ist ein **Nachbar** der Kugel k_j (mit Mittelpunkt \vec{x}_j und Radius r_j), wenn mit dem euklidischen Abstand

der Mittelpunkte $d(\vec{x}_i, \vec{x}_j) := \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|_2$ für den Abstand der Kugeln

$$d(\vec{x}_i, \vec{x}_j) - (r_i + r_j) \leq \epsilon_{ij}, \quad \epsilon_{ij} \geq 0$$

gilt.

Für theoretisch betrachtete und auch viele reale Packungen wird üblicherweise $\epsilon_{ij} := 0$ gesetzt, für durch Simulation erzeugte Packungen kann ϵ_{ij} auch einen positiven (von r_i und r_j abhängigen) Wert annehmen, z. B. wenn der Simulationsalgorithmus keine exakten Kontakte ermöglichen kann.

Ein in der Simulation sehr einfach umzusetzendes Verfahren ist die Bestimmung des durchschnittlichen Mittelpunkts aller Kugeln.

Definition 2.2.2.2 Sei \vec{x}_i der Ortsvektor des Mittelpunkts der i . Kugel. Der **durchschnittliche Mittelpunkt** ist der Mittelwert der Mittelpunkte aller Kugeln, also

$$\vec{M} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{x}_i$$

für N Kugeln. Wird zudem der Durchmesser d_i jeder Kugel berücksichtigt, so liefert

$$\vec{M}_w := \frac{1}{W} \sum_{i=1}^N d_i^3 \vec{x}_i \quad \text{mit} \quad W := \sum_{i=1}^N d_i^3$$

den **gewichteten durchschnittlichen Mittelpunkt**.

Anmerkung: Der Durchmesser geht in der dritten Potenz in die gewichtete Variante ein, um dem Volumenanteil jeder Kugeln in der Packung Rechnung zu tragen.

Für eine zufällige Packung kann von einer guten Durchmischung der Kugeln unterschiedlicher Durchmesser ausgegangen werden, entsprechend sollte im monodispersen Fall $\vec{M} (= \vec{M}_w)$ und im polydispersen Fall \vec{M}_w nahe bei $\vec{0}$ liegen, wenn sich die Containermitte im Ursprung befindet (geeignete Symmetrie des Containers vorausgesetzt). Ein großer Abstand zum Ursprung deutet auf eine ungleichmäßige Verteilung des Kugelvolumens innerhalb der Packung hin, sodass sich in einem sehr dicht gepackten Sektor viele Kugelmittelpunkte befinden, während sich in einem anderen Sektor nur wenige Kugeln zu einer lockeren Anordnung anlagern. Umgekehrt kann jedoch nicht von einer niedrigen Abweichung des (gewichteten) durchschnittlichen Mittelpunkts zum Ursprung auf eine hohe Zufälligkeit der Packungsstruktur geschlossen werden, denn selbst eine reguläre Anordnung (siehe Abschnitt 2.2.3) kann $\vec{M} = \vec{0}$ erzielen.

Ein etwas komplexeres Konstrukt der räumlichen Statistik erlaubt die Untersuchung der Abstände zwischen den Kugeln:

Definition 2.2.2.3 Die Intensität $I(r)$ der Kugelmittelpunkte einer Packung, die im Abstand r zu einem beliebig gewählten weiteren Kugelmittelpunkt liegen, ins Verhältnis gesetzt zur Intensität I der Kugelmittelpunkte in der Gesamtpackung liefert die **Paarkorrelationsfunktion** (PKF) $g: [0, \infty) \mapsto [0, \infty)$. Seien diese Intensitäten durch

$$I(r) = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} I(r, \Delta s) \text{ mit } I(r, \Delta s) = \frac{\frac{n(r, \Delta s)}{N/2}}{V_S(r, \Delta s)}$$

und $I = N/V_C$ gegeben. Dann kann die PKF mittels

$$g(r) = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} g(r, \Delta s) \text{ mit } g(r, \Delta s) = \frac{I(r, \Delta s)}{I} = \frac{2n(r, \Delta s) \cdot V_C}{N^2 \cdot V_S(r, \Delta s)} \quad (2.2)$$

berechnet werden. Dabei ist N die Kugelanzahl in der Packung und V_C das Volumen des Containers. $n(r, \Delta s)$ gibt die Anzahl der Kugelpaare an, deren Mittelpunkte einen Abstand zwischen $r - \Delta s$ und $r + \Delta s$ zueinander besitzen. Eine Normierung dieser absoluten Häufigkeit erfolgt, indem durch die maximale Anzahl $N/2$ dividiert wird. $V_S(r, \Delta s) = \frac{4}{3}\pi(r_2^3 - r_1^3)$ bezeichnet schließlich das Volumen einer Kugelschale der Dicke Δs mit innerem Radius $r_1 = r - \Delta s$ und äußerem Radius $r_2 = r + \Delta s$.

In der Implementierung sollte Δs für eine hochaufgelöste Bestimmung der PKF möglichst klein gewählt werden. Die angegebene Definition orientiert sich an dieser praktischen Umsetzung, theoretische Betrachtungen und ausführliche Herleitungen der PKF können in der Literatur nachgelesen werden, z. B. in [SKM95, MW04, SS94, IPSS08]. Dort wird teilweise auch die Bezeichnung *Radiale Verteilungsfunktion* verwendet.

Für $r < d_{\min}$ ist $g(r) = 0$, für große Abstände r ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines zweiten Kugelmittelpunkts unabhängig von der Position des beliebig gewählten ersten und damit $\lim_{r \rightarrow \infty} g(r) = 1$ für unendliche Packungen. Die Maxima der PKF entstehen durch besonders häufig auftretende Kugelabstände. Abbildung 2.6 zeigt die PKF einer monodispersen Packung von Kugeln mit Durchmesser d . Das 1. deutliche Maximum bei $r = d$ lässt sich durch Kugeln erklären, die unmittelbar aneinanderstoßen, das 2. Maximum ist zweigeteilt, bei $r = \sqrt{3}d$ und $r = 2d$, und entsteht durch Kugeln, die einen gemeinsamen Nachbarn besitzen.

Für bidisperse Packungen ergibt sich ein anderer Verlauf der Kurve, sie bildet mehr Maxima, jedoch mit weniger starken Ausprägungen. Mit zunehmend polydisperseren Mischungen nähert sich die Funktion für Werte $r \geq d_{\min}$ der Geraden $g(r) = 1$ an.

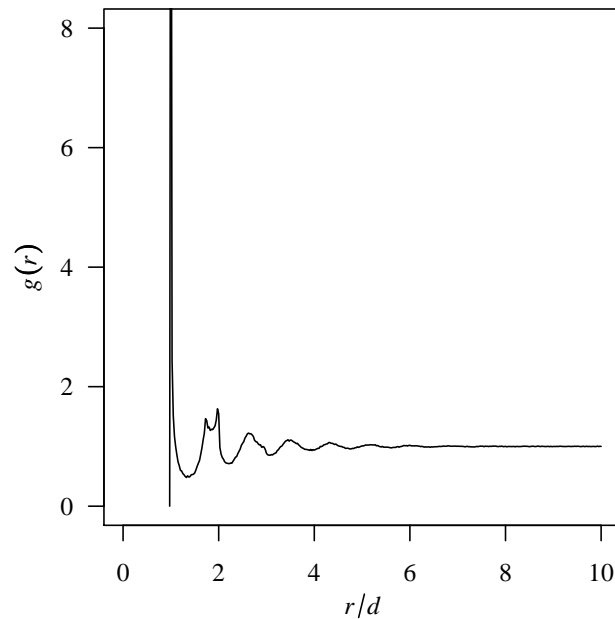


Abbildung 2.6: Paarkorrelationsfunktion einer zufälligen, dichten Packung monodisperser Kugeln mit Durchmesser d .

2.2.3 Reguläre Packungen

Das Problem der dichtesten monodispersen Kugelpackung beschäftigte schon Johannes Kepler zu Beginn des 17. Jahrhunderts. Er stellte die Vermutung auf, dass es keine dichtere Anordnung gleicher Kugeln geben könne als diejenige, die üblicherweise für Kanonenkugeln, aber auch Orangen am Obststand benutzt wurde (Abb. 2.7). Hierbei berührt jede Kugel in einer Schicht 4 Nachbarkugeln, sowie jeweils 4 Kugeln der darunter- und darüberliegenden Schicht. Die Koordinationszahl beträgt exakt 12. Diese Packung führt tatsächlich zur maximalen Raumauffüllung von

$$\phi_{\text{mono}}^* = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \approx 0,7405, \quad (2.3)$$

wie Hales in einer sehr umfangreichen Arbeit (siehe [Hal05] und darin enthaltene Referenzen) 400 Jahre nach Kepler bewies.

Es gibt verschiedene Variationen bei der Anordnung der Kugeln, die allesamt zur dichtesten Packung führen. Die **hexagonal dichteste Packung** (engl.: *hexagonal close packed, HCP*) birgt in der ersten Schicht eine hexagonale Anordnung der Kugeln. In der zweiten Schicht sitzen die Kugeln in den Lücken der ersten Schicht. Die Kugeln der dritten Schicht liegen wiederum in den Lücken der zweiten, exakt über den Positionen der ersten Schicht; das Muster A-B-A-B-... wiederholt sich ab hier. In der **kubisch-flächenzentrierten Packung** (engl.: *face centered cubic, FCC*) ist

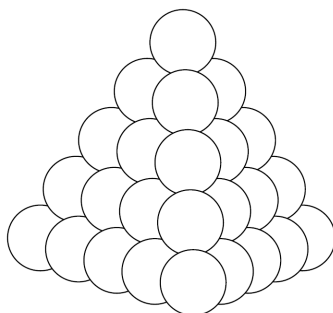


Abbildung 2.7: Stapel von Kugeln (aus [Hal00]).

die dritte Schicht um 60° gedreht, erst Kugeln der vierten Schicht liegen wieder exakt über den Positionen der ersten, wodurch die Schichtfolge A-B-C-A-B-C... entsteht. Neben diesen beiden regelmäßigen Anordnungen gibt es durch beliebige Kombinationen dieser Schichten unendlich viele weitere Packungen mit $\phi = \phi_{\text{mono}}^*$, wie Hales in [Hal06] zeigt. Anwendung finden diese dichtesten Packungen bei der Beschreibung von atomaren Kristallstrukturen [Ben72, BRW97, Sch02, Kit06].

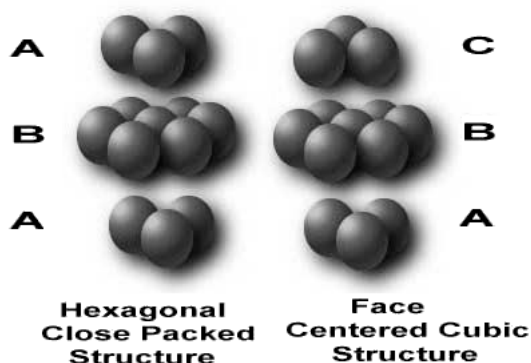


Abbildung 2.8: Die dichtesten Packungsstrukturen HCP und FCC im Vergleich (aus [NDT09]).

Wenn Positionen und Radien der Kugeln in einer Packung frei gewählt werden können, besteht die Möglichkeit, sich der theoretischen maximalen Packungsdichte $\phi = 1$ beliebig anzunähern. So wird die **Apollonische Packung** iterativ aufgebaut, indem die Lücke zwischen anfangs 4 platzierten Kugeln durch die größte hineinpassende Kugel gefüllt wird. Das gleiche geschieht mit allen weiteren entstehenden Lücken. Nach etlichen Iterationen können Packungen wie in Abb. 2.9 entstehen. Benannt ist diese Form der Kugelpackung nach dem griechischen Mathematiker Apollonius von Perge (etwa 262–190 v. Chr.), der bereits zu Lebzeiten als „der große Geometer“ bekannt war und sich u. a. mit Planetenbewegungen und Kegelschnitten befasste, aber auch das Problem untersuchte, zu drei gegebenen, disjunkten Kreisen einen

vierten zu finden, der diese berührt.

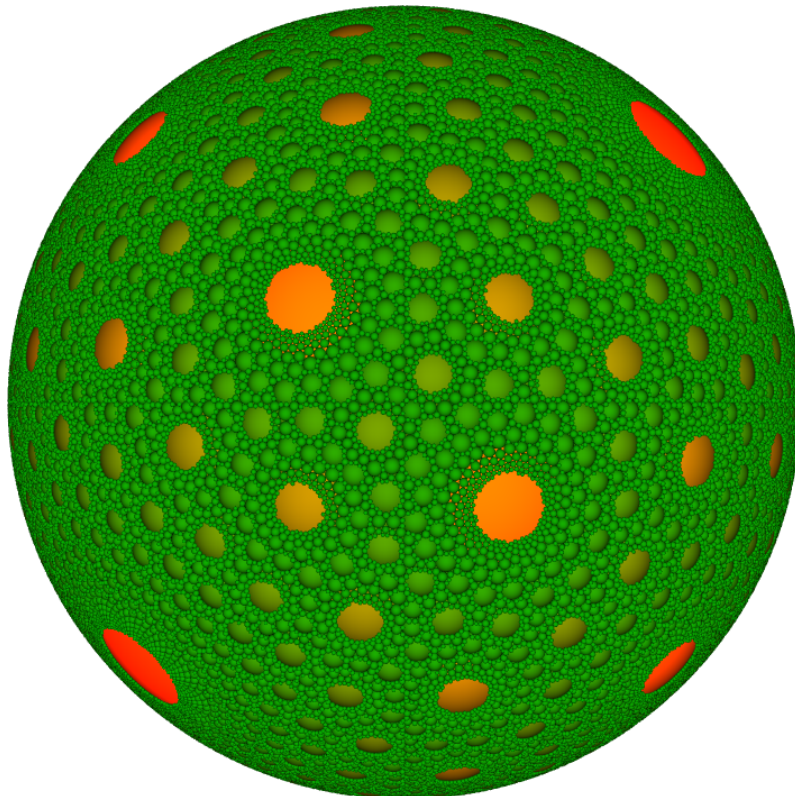


Abbildung 2.9: Eine dreidimensionale Apollonische Packung innerhalb einer Kugel.

In der Literatur finden sich zahlreiche Arbeiten zu diesem Thema: Basierend auf einem Algorithmus von Peikert et al. [PBP94] erzeugen Herrmann et al. bichromatische Apollonische Packungen, in denen die Kugeln reibungsfrei aufeinander abrollen können [MBH04, MB05, HMBW06], siehe auch [Pöp04]. Einen Voronoi-Delaunay-Ansatz beschreiben Anishchik und Medvedev [AM95], während Amirjanov und Sobolev [AS06a] einen Genetischen Algorithmus zum Auffinden und Füllen der Lücken benutzen.

Kapitel 3

Einfache Hartkugel-Modelle

Viele der hier vorgestellten mathematisch formalisierten Modelle aus dem Gebiet der stochastischen Geometrie erlauben einen analytischen Zugang zu den Packungseigenschaften und insbesondere der Raumauffüllung. In den Fällen, in denen dies nicht möglich ist, besteht zumindest eine simple, wenig aufwändige Realisierung des Packungsmodells durch Simulation. Als Modelle realer Betonmischungen sind sie allerdings nur bedingt geeignet, da sie allesamt nur zu einer sehr geringen Packungsdichte führen.

Sei $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^n$ eine Menge von Punkten mit $2 \leq |\mathbb{X}| < \infty$ und einer Abbildung $d: \mathbb{X} \times \mathbb{X} \mapsto [0, \infty)$. Die Zahl $d(x, y)$ soll wieder als euklidischer Abstand zwischen den Punkten $x, y \in \mathbb{X}$ interpretiert werden.

Definition 3.0.3.1 (a) Eine Funktion $f: \mathbb{X} \mapsto [0, \infty]$ heißt **Radienfunktion** auf \mathbb{X} .

(b) Eine Radienfunktion f ist eine **Hartkugelfunktion** auf \mathbb{X} , wenn für jedes $x, y \in \mathbb{X}$, $x \neq y$ die Ungleichung $f(x) + f(y) \leq d(x, y)$ erfüllt ist.

(c) Sei f eine Hartkugelfunktion. Analog zu Definition 2.2.2.1 sind unterschiedliche Punkte $x, y \in \mathbb{X}$ dann **Nachbarn bezüglich** f , wenn $f(x) + f(y) = d(x, y)$ gilt. Für zwei Nachbarn x und y ist y ein **kleinerer Nachbar** von x , wenn $f(y) \leq f(x)$ gilt.

Im Folgenden soll – wenn nicht anders angemerkt – vom dreidimensionalen Fall der Kugelpackungen ausgegangen werden, d. h. $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^3$. Ein Punkt x wird dann auch als Kugel x mit $f(x) = 0$ betrachtet.

Eine Hartkugel-Packung zeichnet sich durch die Abwesenheit von Überlappungen

zwischen den Kugeln aus. Für die Erzeugungsmethode der Packung lässt sich nach [IPSS08] eine Klassifikation in zwei Kategorien vornehmen:

- Auf Ausdünnung basierende Methoden: Diese umfassen Operationen der Reduzierung, wie das Entfernen von Kugeln, die dicht an anderen Kugeln liegen oder diese überlappen.
- Auf Interaktion basierende Methoden: Hierbei sind harte, undurchdringliche Kugeln beteiligt, die entweder vom Beginn der Simulation an vorhanden sind, oder zu späteren Zeitpunkten der Packung hinzugefügt werden. Im Gegensatz zu Ausdünnung können diese jedoch nicht wieder gelöscht werden. Während der Entstehung der Packung können diese Kugeln bewegt werden.

Es ist offensichtlich, dass das Löschen von Kugeln eine Veränderung der Korngrößenverteilung verursacht. Daher muss zwischen Vorschlagsverteilung und resultierender Verteilung unterschieden werden.

Definition 3.0.3.2 Die *Vorschlagsverteilung* ist die ursprüngliche Radienverteilung, nach der die Kugelradien ausgewählt werden, die *resultierende Verteilung* ergibt sich daraus durch Nichtberücksichtigung von Kugeln oder Ausdünnung der Packung.

Bei Anwendung der verschiedenen Modelle stellt sich oftmals das Problem, dass nur die resultierende Verteilung bekannt ist (etwa aus experimentellen Arbeiten, die es zu simulieren gilt), die Vorschlagsverteilung aber für die Modellierung und Simulation bestimmt werden muss [SS00].

3.1 Stienen-Modell

Definition 3.1.0.3 Eine Radienfunktion f_S auf \mathbb{X} mit

$$f_S(x) := \min_{y \neq x} \left\{ \frac{d(x, y)}{2} \right\}, \quad x, y \in \mathbb{X}$$

definiert ein *Stienen-Modell*.

Offensichtlich erfüllt f_S die Definition 3.0.3.1 (b) und bildet somit eine Hartkugelfunktion auf \mathbb{X} . Das Modell geht zurück auf die Dissertation von Hans Stienen [Sti82]. Typisch für eine Packung nach diesem Modell ist die Bildung vieler paarweise benachbarter Kugeln, jedoch können auch vereinzelte Kugeln ohne Nachbarn entstehen.

Die erreichbare Raumausfüllung ist relativ gering, sie beträgt im \mathbb{R}^d nur $\frac{1}{2^d}$ und damit im Dreidimensionalen 12,5% [DSS99].

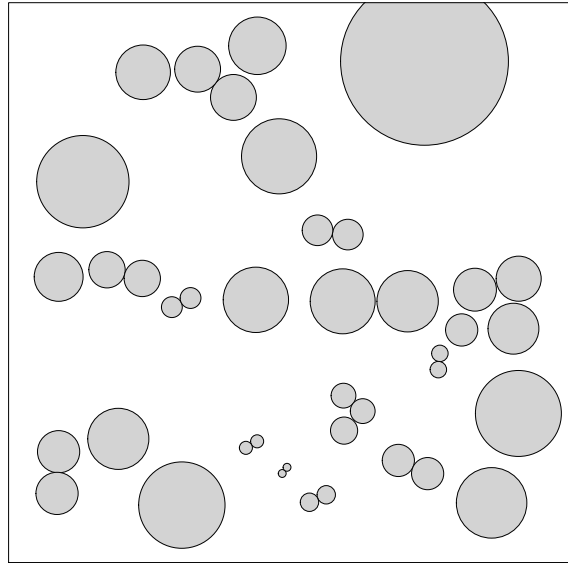


Abbildung 3.1: Realisierung eines Stienen-Modells.

Die Erzeugung eines Stienen-Modells ist simpel und benötigt lediglich eine Iteration über alle Punkte aus \mathbb{X} , um den Abstand jedes Punktpaares zu bestimmen; dies ist für m Punkte in $O(m^2)$ möglich.

3.2 Matérn-Modell

Das von Matérn [Mat60, Mat86] eingeführte Modell wird durch bedingte Ausdünnung gewonnen. Eine von Månsson und Rudemo [MR02] untersuchte Variante für polydisperse Kugeln beginnt mit einer überlappenden, zufälligen Kugelplatzierung und ordnet zunächst jeder Kugel x eine Marke $m(x)$ zu, welche aus dem Intervall $(0, 1)$ zufällig gleichverteilt bestimmt wird. Eine Kugel x wird dann aus der Packung entfernt, wenn es eine weitere Kugel y mit

$$d(x, y) \leq f(x) + f(y) \quad \text{und} \quad m(y) \leq m(x)$$

gibt. Kugeln mit kleineren Marken werden somit als „stärker“ betrachtet und setzen sich bei Überlappung durch.

Die maximal erreichbare Raumausfüllung des Matérn-Modells für monodisperse Kugeln beträgt ebenfalls $\frac{1}{2^d}$ im \mathbb{R}^d , also 12,5% für eine dreidimensionale Packung [MR02]. Für polydisperse Kugeln kann durch geschickte Wahl der Radien und

Festlegung der Marken auf $m(x) = 1/f(x)$ für alle $x \in \mathbb{X}$ eine beliebig hohe Raumausfüllung erzielt werden [AHM06].

Das Matérn-Modell lässt sich relativ simpel simulieren: Nachdem die Kugeln mit den durch f festgelegten Radien zufällig platziert worden sind, werden ihnen unabhängige, gleichverteilte Marken aus dem Intervall $(0, 1)$ zugeordnet. Damit der anschließende Ausdünnungsprozess nicht durch die Reihenfolge der sequentiellen Abarbeitung der Kugeln beeinflusst wird, muss beachtet werden, dass bereits ausgedünnte Kugeln ihrerseits dennoch die Ausdünnung weiterer Kugeln mit höheren Marken bedingen können. Daher sollte in einem ersten Durchlauf zunächst nur vorgemerkt werden, welche Kugeln entfernt werden müssen, um diese dann in einem zweiten Schritt tatsächlich aus der Datenstruktur zu löschen.

3.3 Lilypond-Modell

Das Lilypond-Modell (deutsch: Seerosen-Modell) wurde von Häggström und Meester [HM96] eingeführt, unabhängig davon entwickelten Daley et al. ausgehend vom Stienen-Modell das gleiche Modell unter dem Namen PMS [DSS99]. Es zeichnet sich durch einen dynamischen Erzeugungsprozess aus.

Definition 3.3.0.4 *Eine Hartkugelfunktion f_L auf \mathbb{X} ist eine **Lilypond-Funktion**, wenn jedes $x \in \mathbb{X}$ einen kleineren Nachbarn bezüglich f_L in \mathbb{X} besitzt.*

Durch diese Definition werden nicht nur Einzelkugeln ohne Kontakt zu anderen Kugeln verhindert, als weitere Konsequenz besitzt jede Kugel Kontakt zu einer anderen Kugel, die nicht größer ist als sie selbst. Eine Besonderheit des Lilypond-Modells sind die wie schon im Stienen-Modell häufig auftretenden Kugelzwillinge, wie Abb. 3.2 veranschaulicht.

Die Erzeugung eines Lilypond-Modells kann durch ein stetiges Wachstum der initial vorhandenen Punkte zu Kugeln beschrieben werden. Dieses Wachstum wird für alle Kugeln gleichzeitig und mit gleichbleibender Geschwindigkeit durchgeführt. Sobald eine wachsende Kugel x eine weitere Kugel y berührt, stoppt das Wachstum von x (und das Wachstum von y , falls dieses nicht bereits zuvor gestoppt wurde). Auf diese Weise gelangen sämtliche Kugeln in einem endlichen Zeitraum zu ihrem finalen Lilypond-Radius, da \mathbb{X} mindestens 2 Punkte enthält.

Eine sehr effiziente Umsetzung des Wachstumsprotokolls ermöglicht der Lilypond-Operator [HL06].

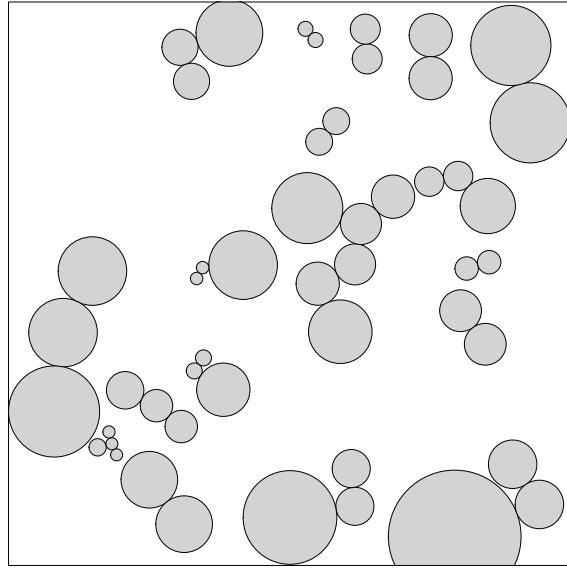


Abbildung 3.2: Realisierung eines Lilypond-Modells.

Definition 3.3.0.5 Mit $F(\mathbb{X})$ soll die Menge aller Radienfunktionen bezeichnet werden. Sei der Operator $T : F(\mathbb{X}) \mapsto F(\mathbb{X})$ gegeben durch

$$Tf(x) := \min_{y \neq x} \max \left(\frac{d(x, y)}{2}, d(x, y) - f(y) \right), \quad x, y \in \mathbb{X}.$$

Dann heißt T der **Lilypond-Operator**.

Wie in [HL06] gezeigt, führt die auf eine Radienfunktion f (endlich oft) wiederholte Hintereinanderanwendung von T unweigerlich in einen stationären Zustand, der dem Lilypond-Modell entspricht, d. h. es existiert ein Fixpunkt f_L mit $Tf_L = f_L$. Die Autoren geben für diese Iteration sogar ein für jede Kugel individuell bestimmbares Abbruchkriterium an: Ändert sich der Radius einer Kugel x von einem Iterationsschritt zum nächsten nicht, so hat x bereits den finalen Lilypond-Radius $f_L(x)$ erreicht, d. h. aus $f_n(x) = f_{n+1}(x)$ folgt $f_n(x) = f_L(x)$. Im schlechtesten Fall beträgt der Aufwand zur Berechnung aller Lilypond-Radien $O(m^2)$, wobei m die Anzahl der Kugeln angibt.

Die Raumauffüllung des Lilypond-Modells beträgt ungefähr 18,6 % [DSS99]. Eine Möglichkeit zur Erhöhung dieses Wertes bietet die Erweiterung auf ein **mehrstufiges Lilypond-Modell**: Es bezeichne $L^{(i)} = (\mathbb{X}^{(i)}, f_L^{(i)})$, $i \geq 1$ die i . Stufe des mehrstufigen Lilypond-Modells mit einer Punktmenge $\mathbb{X}^{(i)}$ und einer Hartkugelfunktion $f_L^{(i)}$. Insbesondere ist $f_L^{(1)}$ eine Lilypond-Funktion gemäß Definition 3.3.0.4. Die im erweiterten Modell in der n . Stufe hinzugefügten Punkte aus $\mathbb{X}^{(n)}$ wachsen dann solange, bis sie einen Nachbarn in $\bigcup_{i=1}^n \mathbb{X}^{(i)}$ berühren. Für die Stufen $i \geq 2$ ist zu beachten,

dass die Funktionen $f_L^{(i)}$ keine Lilypond-Funktionen mehr sind, da die Kugeln aus $\mathbb{X}^{(i)}$ nicht zwingend Nachbarn in $\mathbb{X}^{(j)}$ besitzen müssen und auch bzgl. $\mathbb{X}^{(j)}$ mit $j < i$ nur größere Nachbarn aufweisen können, was Definition 3.3.0.4 widerspricht.

Eine interessante Variante liefern Dodds und Weitz [DW02]: Die Punkte werden erst nach und nach mit einer vorgegebenen Rate dem Leerraum der Packung hinzugefügt, außerdem wachsen die Kugeln nicht gleichmäßig, sondern mit individuellen Raten. Ebenso wie mit dem mehrstufigen Lilypond-Modell können auf diese Weise beliebig hohe Raumauffüllungen erzielt werden, die Autoren geben dazu als Beispiel eine zufällige Apollonische Packung mit $\phi \approx 94\%$ an.

3.4 Dead-Leaves-Modell

Das Dead-Leaves-Modell (deutsch: Laub-Modell) wurde von Matheron [Mat68] vorgestellt, um überlappungsfreie Scheiben- oder Kugelpackungen zu beschreiben. Es entsteht ebenfalls durch einen dynamischen Erzeugungsprozess, der hier für Scheiben (zweidimensionaler Fall) dargestellt ist:

Nacheinander werden im Zeitintervall $(-\infty, 0]$ Scheiben zufällig und gleichverteilt in einer Fläche platziert. Überlappungen sind dabei gestattet, und so wird jeder Ausschnitt der Fläche zum Zeitpunkt $t = 0$ von einer unendlichen Anzahl an Scheiben überdeckt. Das dabei entstehende Muster (siehe Abbildung 3.3) lässt sich als dicke Laubschicht interpretieren, was die Namensgebung des Modells erklärt. Entfernt man nun die überlappten Scheiben, dann bleiben nur die intakten Scheiben der obersten („jüngsten“) Schicht zurück und bilden so eine Hartscheibenpackung. Der Weg zu einer Hartkugelpackung im \mathbb{R}^3 erfolgt analog dazu.

Die intakten, nicht-überlappten Kugeln als Resultat des Dead-Leaves-Modells (im \mathbb{R}^3) entsprechen dem Ergebnis eines Mätern-Modells mit den Marken $m(x) = -t(x)$, wenn $t(x)$ den Zeitpunkt der Platzierung der Kugel x kennzeichnet [MR02]. Daher beträgt die erreichbare Raumauffüllung im Dead-Leaves-Modell für monodisperse Kugeln ebenfalls 12,5%. Gemeinsam ist beiden Modellen im polydispersen Fall auch die Erzeugung einer resultierenden Verteilung, die von der Vorschlagsverteilung abweicht.

Trotz des nur für unbegrenzte Zeitintervalle und Scheibenzahlen definierten Modells lässt sich die Simulation mit einer endlichen Anzahl Scheiben in begrenzter Zeit durchführen. Dazu müssen nur solange Scheiben in einer zuvor festgelegten endlichen Fläche zufällig platziert werden, bis diese vollkommen bedeckt ist. Ab jenem Zeitpunkt

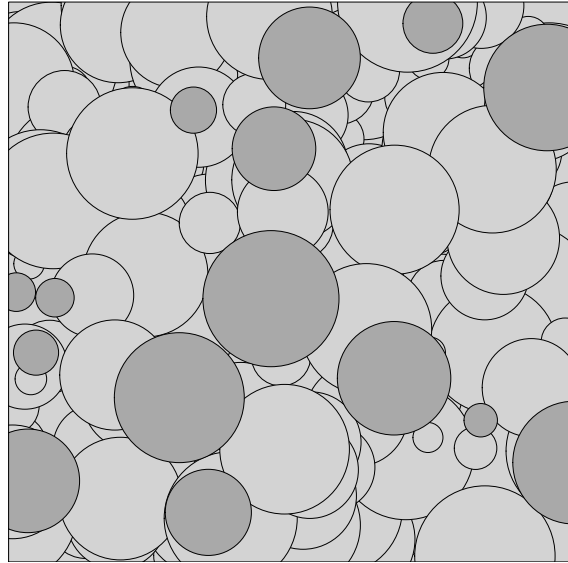


Abbildung 3.3: Realisierung eines polydispersen Dead-Leaves-Modells; die intakten Scheiben sind farblich hervorgehoben.

kann die Packung als Simulationsergebnis des Dead-Leaves-Modells betrachtet werden, da unter der Schicht der sichtbaren Scheiben eine unendliche Anzahl weiterer Scheiben angenommen werden kann.

Eine weitere Anwendung erfährt das Dead-Leaves-Modell in der Bildverarbeitung (siehe z. B. [AGM99, LMH01]). Die Zerlegung natürlicher Bilder in einzelne, teilweise verdeckte Objekte ist etwa bei der Gesichtserkennung und der Bildkompression hilfreich. Dabei unterstützt das Dead-Leaves-Modell die Untersuchung des Einflusses von Überdeckung auf die Größenverteilung der Objekte.

3.5 Random Sequential Adsorption

Random Sequential Adsorption bezeichnet ein Modell, das schon 1959 von Bernal benutzt wurde, um die Struktur des flüssigen Aggregatzustandes zu modellieren [Ber59]. Allerdings erkannte Bernal selbst, dass diese Modellvorstellung aufgrund der zu geringen Raumausfüllung nicht tragfähig war.

Der Begriff „Random Sequential Adsorption“ ist durch die Physik und Chemie geprägt, gerade in der Literatur zur stochastischen Geometrie findet sich häufig auch die Bezeichnung „Simple Sequential Inhibition“, siehe z. B. [SKM95]. Diese beschreibt treffend den Erzeugungsprozess (vgl. Abbildung 3.4): Nacheinander werden Kugeln mit Radien gemäß einer Vorschlagsverteilung zufällig gleichverteilt in einem Container platziert. Wenn eine Kugel x dabei eine bereits platzierte Kugel y schneidet, so wird

die Positionierung von x zurückgewiesen und mit der nächsten Kugel fortgefahren. Der Vorgang endet, sobald alle Kugeln positioniert wurden, oder der Sättigungszustand eintritt, d. h. keine neue Kugel mehr Platz findet. Auf diese Weise entsteht eine (Hart-)Kugelpackung mit einer durch die ausgelassenen Kugeln von der Vorschlagsverteilung abweichenden resultierenden Verteilung.

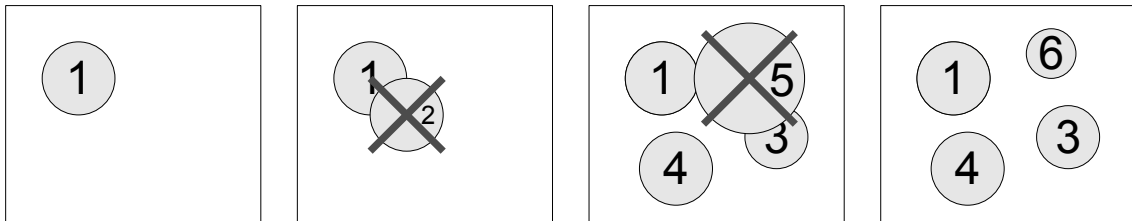


Abbildung 3.4: Entstehung einer polydispersen Packung mittels Random Sequential Adsorption; die Nummern geben die Reihenfolge der versuchten Platzierung an. Die beiden Scheiben Nr. 2 und Nr. 5 konnten nicht platziert werden.

Eine häufig benutzte Variation erzeugt nach Ablehnung einer Kugel x eine neue Kugel y mit neuer Position, aber dem gleichen Radius ($f(y) = f(x)$). Aber auch auf diese Weise lässt sich keine Realisierung der Vorschlagsverteilung garantieren, denn es ist nicht gewährleistet, dass überhaupt eine gültige (d. h. überlappungsfreie) Position für eine Kugel mit diesem Radius gefunden werden kann. Dennoch lässt sich die Erfolgsquote erhöhen, wenn die Kugeln der Größe nach in absteigender Reihenfolge platziert werden.

Ballani et al. untersuchten sowohl das klassische Modell als auch die Variante mit absteigend sortierten Kugeldurchmessern auf ihre Tauglichkeit zur Modellierung der Zuschlagspartikel (Korund-Kugeln) im Feuerbeton [BDS06, Bal06]. Mit der ersten Variante erwies es sich als äußerst schwierig, eine Vorschlagsverteilung zu finden, welche eine resultierende Verteilung entsprechend der realen Korndurchmesser ergab; der Sättigungszustand wurde zu frühzeitig erreicht.

Die zweite beschriebene Variante wurde unter der Voraussetzung analysiert, dass tatsächlich alle Kugeln platziert werden konnten. Konnte eine solche Packung einmal nicht erzielt werden, dann wurde dieser Versuch nicht gewertet, somit entsprach die Kugelradienverteilung immer den Vorgaben. Diese Variante erzielte Ergebnisse, die zumindest für Packungen moderater Dichte ohne direkte Kontakte zwischen den Partikeln (wie die Korund-Kugeln innerhalb der Bindemittelmatrix) geeignet zu sein scheinen.

Die erreichbare Raumauffüllung dieses Modells beträgt für monodisperse Kugeln ca. 38–38,5% [Coo88, Tor06, IPSS08]. Für die Berechnung sind keine Formeln bekannt, die Raumauffüllung kann nur per Simulation bestimmt werden. Dabei hängt

der Rechenaufwand stark vom Aufwand für die Suche nach den potenziellen Positionen der zu platzierenden Kugeln ab, und Überlappungen müssen schnell erkannt werden; eine Umsetzung liefert Döge [Dög01].

Kapitel 4

Analytisch-empirische Modelle der Raumausfüllung

Motiviert durch den Aufwand experimenteller Untersuchungen einerseits und den Optimierungsbedarf vorhandener Rezepturen andererseits wurde im Laufe der Jahre eine Vielzahl an Modellen entwickelt, um die Raumausfüllung einer granularen Mischung aus den Eigenschaften und Mischungsverhältnissen der Einzelkomponenten abzuleiten. Dabei müssen sich die Komponenten nicht notwendigerweise stofflich unterscheiden, häufig wird das gleiche Material in mehrere Klassen unterschiedlicher Feinheit eingeteilt, um Komponenten – dann auch als **Fraktionen** bezeichnet – mit individuell möglichst engen Korngrößenverteilungen zu erhalten.

In den folgenden Unterkapiteln sollen als Ergebnis der Literaturrecherche die wichtigsten Modelle vorgestellt sowie die Resultate aus Untersuchungen zu ihrer Eignung zusammengefasst werden. Treffend ist die Bezeichnung für einen exemplarischen Vertreter dieser Raumausfüllungsmodelle – das Linear Packing Model – durch Gan et al. als „eine im Grunde analytische Formel mit zu bestimmenden empirischen Konstanten“ [GGJW04]. Den vorgestellten Modellen ist in der Tat gemeinsam, dass eine breite Datenbasis für die Komponenten vorhanden sein bzw. im Experiment gewonnen werden muss. Diese umfasst typischerweise mindestens die folgenden zwei Eigenschaften:

- Die Korngröße als repräsentativer Durchmesser. Da es kein standardisiertes Verfahren gibt, variiert der verwendete Durchmesser je nach Modell. So wird er etwa anhand des Siebdurchgangs (z. B. die Sieblochweite, bei der der Siebdurchgang ein bestimmtes Volumen überschreitet) oder des Korngrößenintervalls (z. B. der Mittelwert aus oberem und unterem Korndurchmesser) bestimmt,

wobei ebenso auf das arithmetische, geometrische oder logarithmische Mittel zurückgegriffen wird. Für enge Korngrößenverteilungen hat die verwendete Definition relativ geringen Einfluss auf den ermittelten Durchmesser, für breite Verteilungen ist sie jedoch deutlich signifikanter [Dew99].

- Die Eigenpackungsdichte. Dieser Begriff beschreibt diejenige Raumausfüllung, die eine allein aus dieser Komponente bestehende Packung erzielt. Bei der Ermittlung der Eigenpackungsdichte ist darauf zu achten, möglichst keine Wandeffekte zuzulassen, die verfälschend auf das Ergebnis wirken, daher sollte der Container genügend groß gegenüber der Korngröße des Stoffes sein.

Ist wie oben beschrieben ein Ausgangsstoff in viele enge Fraktionen eingeteilt worden, müssen selbstverständlich der typische Durchmesser und die Eigenpackungsdichte jeder Fraktion separat bestimmt werden. Dies kann einen nicht unerheblichen experimentellen Aufwand bedeuten, insbesondere dann, wenn etliche sehr breit oder un stetig verteilte Stoffe beteiligt sind. Daher wird in der Praxis häufig auf eine sehr enge Fraktionierung verzichtet, obwohl bislang keine Sensitivitätsanalyse zu den Auswirkungen auf die Genauigkeit der vorhergesagten Raumausfüllung bekannt ist.

Typisch für viele dieser analytisch-empirischen Modelle ist außerdem ihr rekursiver Aufbau: Von 2 Komponenten ausgehend wird zunächst die Raumausfüllung der Mischung aus diesen beiden bestimmt, wobei das Mischungsverhältnis fest vorgegeben wird und sich an den Anteilen orientiert, die in der Gesamtmischung gelten sollen. Sodann kann diese Mischung als neue Komponente betrachtet werden, die ihrerseits wiederum mit einer weiteren Komponente gemischt wird. So gelangt das Modell Komponente für Komponente zu einer kompletten Mischung und damit auch zur finalen Raumausfüllung.

Die Raumausfüllung einer Mischung wird mit den vorgestellten Modellen immer unter fest definierten Mischungsverhältnissen kalkuliert. Da sich in der Praxis meist die Frage nach der dichtesten Mischung vorgegebener Komponenten (unter Berücksichtigung gewisser anwendungsbezogener Restriktionen) stellt, bietet sich eine explorative Suche durch eine breite Rasterung über die möglichen Mischungsanteile an. Eine Optimierungsroutine kann so sehr viele Mischungsvarianten durchrechnen und diejenige unter ihnen bestimmen, die zur höchsten Raumausfüllung führt. Von Vorteil ist dabei die Tatsache, dass die aufwändige Bestimmung der Stoffeigenschaften – typischer Durchmesser und Eigenpackungsdichte – nur einmalig durchgeführt werden muss, während die Berechnung auch einer großen Anzahl von Mischungen dann sehr schnell auf dem Computer vollzogen werden kann.

4.1 Vorstellung verbreiteter Modelle

In den hier diskutierten Modellen werden folgende Variablen benutzt:

- d_i : Der typische Durchmesser der Komponente i . Die Komponenten sollen nach aufsteigendem Durchmesser sortiert vorliegen, d. h. $d_i \leq d_j$ für $i < j$.
- ϕ_i : Die Eigenpackungsdichte der Komponente i .
- v_i : Der Anteil der Komponente i am Gesamtvolumen der Mischung. Für n Komponenten muss $\sum_{i=1}^n v_i = 1$ gelten.

Ebenso nützlich ist an dieser Stelle die Definition des spezifischen Volumens:

Definition 4.1.0.6 Das *spezifische Volumen* V_{spez} einer Kugelpackung ist der Quotient aus dem Volumen des Containers V_C einer Packung und dem Kugelvolumen V_K , es drückt den Kehrwert der Raumauffüllung aus, also

$$V_{spez} := \frac{V_C}{V_K} = \phi^{-1}.$$

Nahezu alle Modelle stützen sich auf geometrische Überlegungen zu bidispersen Kugelpackungen. Dias et al. [DTMY04] betrachteten solche Packungen aus Glaskugeln mit diskreten Kugelgrößen in verschiedenen Durchmesserhältnissen von $\frac{d_1}{d_2} < 0,1$. Abbildung 4.1 illustriert die die Packungsstruktur beeinflussenden Effekte, deren Auswirkungen die Autoren untersuchten: Für ein Verhältnis von $\frac{d_1}{d_2} > 0,01$ besteht eine Keilwirkung der kleineren Partikel, sie drängen das Packungsskelett der größeren auseinander. Der interpartikuläre Randeffect verursacht hingegen eine höhere Porosität nahe der Oberflächen der großen Partikel, die auf die kleinen Partikel wie eine Wand wirken; er besteht bis zu einem Verhältnis von $\frac{d_1}{d_2} > 0,0035$. Ab $\frac{d_1}{d_2} < 0,0035$ bilden die kleineren Partikel eine monodisperse Packung in den Zwischenräumen der größeren Partikel, die beiden die Raumauffüllung mindernden Effekte sind dann vernachlässigbar.

4.1.1 Furnas-Modell

Eines der ersten Modelle wurde in den Zwanziger Jahren von Furnas aufgestellt [Fur28, Fur29]. Dieser betrachtete bidisperse Systeme mit stark unterschiedlichen Partikelgrößen, d. h. $d_1 \ll d_2$, sodass die kleineren Partikel mühelos in die Lücken zwischen den größeren passen. Für diese Anordnung sind dann zwei qualitativ unterschiedliche extreme Ausprägungen zu unterscheiden:

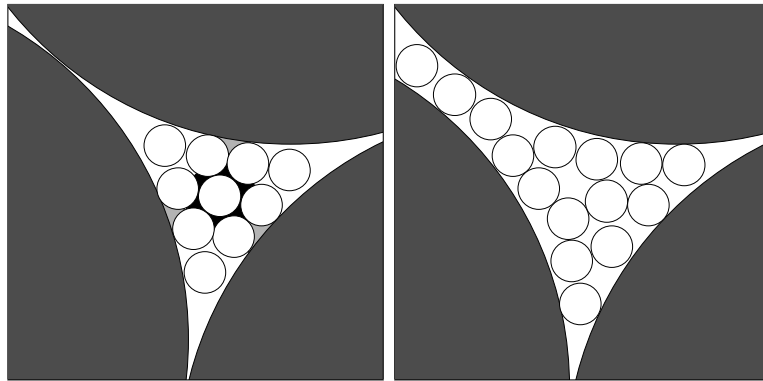


Abbildung 4.1: Der interpartikuläre Randeffekt (links) sorgt im Vergleich zu den inneren Poren (schwarz) für vergrößerten Leerraum (hellgrau) am Rand zu den größeren Partikeln. Die Keilung (rechts) drängt das dichte Packungsskelett der größeren Partikel auseinander.

1. Der Volumenanteil v_1 der kleinen Partikel ist sehr hoch, sodass die Packung als Matrix der kleinen Partikel betrachtet werden kann, die an einigen diskreten Positionen mit großen Partikeln bestückt ist (siehe Abb. 4.2 a).
2. Der Volumenanteil v_2 der großen Partikel ist sehr hoch. Diese bilden dann eine dichte Packung, in ihren Lücken finden die kleinen Partikel Platz (siehe Abbildung 4.2 b).

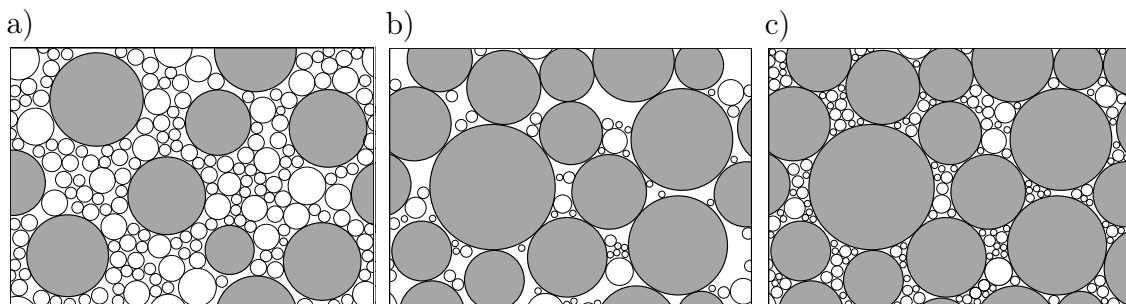


Abbildung 4.2: Das Furnas-Modell. a) Volumenanteil der kleinen Partikel dominiert. b) Volumenanteil der großen Partikel dominiert. c) Maximale Raumauffüllung.

Das anteilige spezifische Volumen der feineren Fraktion ist für den 1. Fall

$$V_{\text{spez},1} = \frac{v_1}{\phi_1}.$$

Die Partikel der größeren Fraktion sind dicht von den kleineren umschlossen, sie tragen mit ihrem Volumenanteil direkt zum spezifischen Volumen V_{spez} bei, welches dann

$$V_{\text{spez}} = V_{\text{spez},1} + v_2 = \frac{v_1}{\phi_1} + v_2$$

ergibt. Die Raumauffüllung betragt daher

$$\phi = \frac{1}{\frac{v_1}{\phi_1} + v_2}.$$

Der 2. Fall gestaltet sich simpler: Die Packung wird durch die grobere Fraktion bestimmt, die Partikel der kleineren Fraktion sind nur Fullmaterial fur die Lucken und erhohen nicht das benotigte Containervolumen, welches

$$V_C = \frac{v_2 V_K}{\phi_2}$$

bei einem Gesamtkugelvolumen von V_K betragt. Somit gilt fur die Raumauffüllung in diesem Fall

$$\phi = \frac{V_K}{V_C} = \frac{\phi_2}{v_2}.$$

Anhand der Gleichungen ist offensichtlich, dass die Raumauffüllung der Mischung in beiden betrachteten Fallen groer ist als die Raumauffüllung der jeweils dominierenden Komponente.

Es lasst sich sogar ein Maximum fur gegebene Eigenpackungsdichten ϕ_1 und ϕ_2 bestimmen: Sei in diesem Fall V^* das (unbekannte) (Netto-)Gesamtvolumen der Partikel beider Komponenten, und $v_2^* V^* / \phi_2$ somit das von einer monodispersen Packung der groeren Komponente eingenommene Volumen. Fur eine Mischung mit maximaler Raumauffüllung muss nun v_1^* gerade gro genug sein, sodass die kleineren Partikel die Lucken zwischen den groeren genau ausfullen (siehe Abbildung 4.2 c). Der Anteil dieser Lucken in einer Packung der groeren Komponente ist die Porositat $1 - \phi_2$. Sind sie durch Partikel der feineren Komponente mit ϕ_1 ausgefullt, ergibt sich fur das Volumen der feineren Komponente

$$v_1^* V^* = (1 - \phi_2) \phi_1 \frac{v_2^* V^*}{\phi_2}.$$

Das absolute Volumen V^* kurzt sich heraus und mit $v_2^* = 1 - v_1^*$ folgt

$$v_1^* = \frac{\phi_1(1 - \phi_2)}{\phi_2 + (1 - \phi_2)\phi_1},$$

was dann zur (dieses Modell betreffend) maximalen Raumauffüllung

$$\phi^* = \phi_2 + (1 - \phi_2)\phi_1.$$

führt.

Es ist zu beachten, dass das Furnas-Modell einen idealisierten Fall betrachtet, da etwa der interpartikuläre Randeffect (siehe Abbildung 4.1) nicht berücksichtigt wird.

4.1.2 Modell von Aïm und Goff

Das Modell von Ben Aïm und Le Goff [AG68] eignet sich für die Mischung zweier monodisperser oder sehr eng verteilter Komponenten; die Raumauffüllung berechnet sich aus

$$\phi = \begin{cases} \frac{\phi_2}{v_2} & \text{für } v_1 < \frac{a}{1+a}, \\ \frac{1}{\frac{v_1}{\phi_1} + v_2 \left(1 + 0,9 \frac{d_1}{d_2}\right)} & \text{sonst} \end{cases}$$

mit

$$a = \frac{\phi_1}{\phi_2} - \left(1 + 0,9 \frac{d_1}{d_2}\right) \phi_1.$$

Es ähnelt damit stark dem Furnas-Modell und kann als dessen Erweiterung auf beliebige Durchmesserhältnisse angesehen werden, während das Furnas-Modell auf bidisperse Packungen mit deutlich unterschiedlichen Kugeldurchmessern beschränkt ist.

Goltermann et al. stellten fest, dass dieses Modell für den Zuschlag im Beton im Allgemeinen ungeeignet ist [GJP97]. Jedoch verspricht es den von Andersen und Johansen [AJ93] zitierten Ergebnissen zufolge für bidisperse Systeme mit $\frac{d_1}{d_2} < 0,22$ die besten Resultate, wogegen für größere Durchmesserhältnisse besser das Toufar-Modell benutzt werden sollte.

4.1.3 Toufar-Modell

Dieses von Toufar, Born und Klose [TBK76, TKB77] aufgestellte Modell basiert auf der Annahme, dass für Packungen zweier Komponenten mit Durchmessern d_i und d_j die Partikel der feineren Fraktion nicht in die Lücken zwischen den Partikeln der gröberen Fraktion passen, was die Autoren für ein Durchmesserhältnis von $0,22 < \frac{d_i}{d_j} < 1$ empirisch belegen. Die Raumauffüllung zweier Komponenten mit Indizes i und j berechnet sich aus

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\frac{v_i}{\phi_i} + \frac{v_j}{\phi_j} - v_j \left(\frac{1}{\phi_j} - 1\right) k_d k_s}$$

mit

$$k_d = \frac{d_j - d_i}{d_i + d_j}, \quad k_s = 1 - \frac{1 + 4x}{(1 + x)^4}$$

sowie

$$x = \frac{v_i \phi_j}{v_j \phi_i}.$$

Das spezifische Volumen als reziproker Wert der Raumauffüllung wird in diesem Modell somit als Summe der beiden spezifischen Volumina der Komponenten aufgefasst, wovon aufgrund der Interaktion der Komponenten noch eine weitere Größe subtrahiert wird. In diese Größe fließt neben dem relativen Unterschied der Durchmesser (k_d) auch ein empirisch hergeleiteter Term (k_s) ein, der wiederum vom Verhältnis der spezifischen Volumina der Komponenten sowie der Porosität einer Packung der größeren Partikel abhängt.

Sind $n > 2$ Komponenten vorhanden, so werden zunächst die spezifischen Volumina

$$V_{\text{spez},ij} = \frac{1}{\phi_{ij}}$$

aller möglichen Paar-Kombinationen $i < j$ berechnet, um dann mit Hilfe der aus den Volumenanteilen berechneten Gewichte

$$v_{ij} = \frac{v_i v_j}{1 - v_i} + \frac{v_j v_i}{1 - v_j}$$

ein gewichtetes Mittel der spezifischen Volumina

$$V_{\text{spez}} = \sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} v_{ij} V_{\text{spez},ij}$$

zu bestimmen, und damit die Raumauffüllung

$$\phi = \frac{1}{V_{\text{spez}}} = \frac{1}{\sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{v_{ij}}{\phi_{ij}}}.$$

4.1.4 Modifiziertes Toufar-Modell

Goltermann et al. [GJP97] geben eine (durch empirische Untersuchungen motivierte) Modifizierung des k_s -Wertes im Toufar-Modell an, nämlich

$$k_s = \frac{0,3881x}{0,4753} \quad \text{für } x < 0,4753.$$

Des Weiteren schlagen die Autoren vor, für etwas breiter verteilte Fraktionen als charakteristischen Durchmesser diejenige Siebgröße zu wählen, bei der 36,8 % des Materials im Sieb zurückbleibt. Dies ist genau der Lageparameter einer RRSB-Verteilung (vgl. Kapitel 2.1.1).

4.1.5 Dewar-Modell

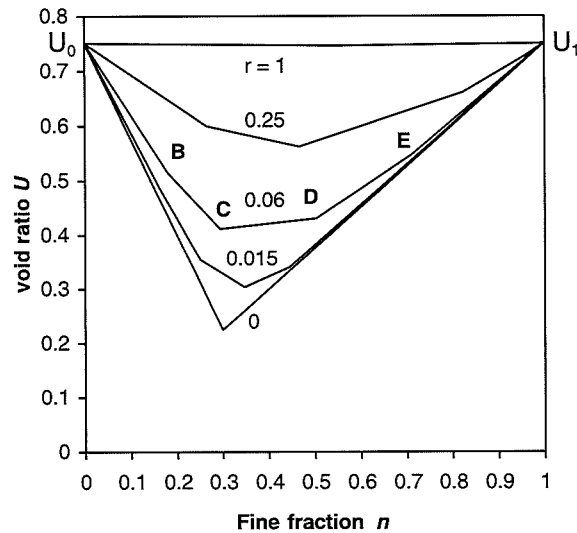


Abbildung 4.3: Einige theoretische Porenzahl-Diagramme für verschiedene Partikelgrößenverhältnisse $r = \frac{d_1}{d_2}$ (aus [Dew99]). U_0 und U_1 entsprechen den Punkten A bzw. F. Auf der Abszisse ist v_1 aufgetragen.

Dewar [Dew99] teilt die mögliche Packungsstruktur bidisperser Mischungen in 5 vom Mischungsverhältnis abhängige Klassen ein, die durch eine Menge von 6 Punkten $M = \{A, \dots, F\}$ abgegrenzt sind. Jeder dieser Punkte markiert einen Übergang im stückweise linearen Porenzahl¹-Diagramm, siehe Abbildung 4.3. So entspricht ein Punkt einem gewissen Volumenanteil v_1 der feinen Fraktion, die Punkte A und F stehen dabei für die Grenzfälle $v_1 = 0$ bzw. $v_1 = 1$. Die Raumausfüllungen der beiden individuellen Stoffe an jedem Punkt betragen

$$\phi_2(x) = \frac{\phi_2}{\left(1 + m \frac{d_1}{d_2}\right)^3}, \quad x \in M$$

und

$$\phi_1(x) = \frac{(1 - (1 + Z)^3 \phi_2(x)) \phi_1}{1 - \phi_2(x)}, \quad x \in M \setminus \{A, F\}.$$

¹Die Porenzahl U bezeichnet das Verhältnis von Porenvolumen zu Partikelvolumen und lässt sich mit $\phi = \frac{1}{U+1}$ in die Raumausfüllung überführen.

Insbesondere sind für die Grenzfälle (monodisperse Packungen) $\phi_1(A) = 0$, $\phi_2(A) = \phi_2$, $\phi_1(F) = \phi_1$ und $\phi_2(F) = 0$.

Das Dewar-Modell berücksichtigt einen Abstandsfaktor m , der den durchschnittlichen Abstand der größeren Partikel untereinander als Vielfaches des Durchmessers der kleinen Partikel ausdrückt, siehe Tabelle 4.1. Ein weiterer, auf den Leerraum bezogener Faktor ist

$$Z = k_{int} + \left(\phi_2^{-\frac{1}{3}} - 1 - k_{int} \right) \left(\frac{d_1}{d_2} \right)^{k_p},$$

die empirisch bestimmten Werte für k_{int} und k_p sind ebenfalls in Tabelle 4.1 aufgelistet.

Punkt $x \in M$	Abstandsfaktor m	k_{int}	k_p
A ($v_1 = 0$)	0	—	—
B	0,3	0,12	0,60
C	0,75	0,06	0,65
D	3	0,015	0,8
E	7,5	0	0,9
F ($v_1 = 1$)	∞	—	—

Tabelle 4.1: Empirisch bestimmte Faktoren im Dewar-Modell.

Bevor die Raumauffüllung für ein gegebenes Mischungsverhältnis ermittelt werden kann, müssen zunächst mit

$$v_1(x) = \frac{\phi_1(x) - \phi_1(x)\phi_2(x)}{\phi_1(x) + \phi_2(x) - \phi_1(x)\phi_2(x)}$$

die Anteile der feineren Fraktion (und damit die Mischungsverhältnisse) für die Punkte $x \in M$ bestimmt werden. Die Raumauffüllung für einen Punkt $x \in M$ beträgt dann

$$\phi(x) = \frac{1}{v_1 \left(\frac{1}{\phi_1(x)} - 1 \right) + 1}.$$

Schließlich können auch Raumauffüllungen für beliebige Mischungsverhältnisse bestimmt werden, indem zwischen den bekannten Punkten interpoliert wird.

4.1.6 Linear Packing Model

Das Linear Packing Model wurde von Stovall et al. [SDLB86] entwickelt, Yu und Standish verbesserten später die Formel zur Berechnung der Interaktion zwischen den Fraktionen [YS87]. Das Modell basiert auf der Annahme, dass sich das spezifische

Volumen einer bidispersen Mischung linear mit dem Anteil einer Komponente ändert. Erhöht sich beispielsweise der Anteil der kleinen Partikel, so steigt auch deren spezifisches Volumen an, während das spezifische Volumen der großen Partikel sinkt. Für die Grenzfälle $v_1 = 0$ und $v_1 = 1$ beträgt das spezifische Volumen $\frac{1}{\phi_2}$ bzw. $\frac{1}{\phi_1}$, dazwischen fällt es linear auf ein Minimum, das dem Maximum der Raumausfüllung entspricht.

Dieses lineare Verhalten findet sich auch schon in den Modellen von Toufar sowie Aïm und Goff, jedoch sollte das Linear Packing Model nicht als bloße Erweiterung dieser Idee auf $n \geq 2$ Komponenten betrachtet werden, da ebenso zusätzliche Erkenntnisse zu einer Fallunterscheidung auf Grund des Größenverhältnisses d_i/d_j und zur Abhängigkeit der Raumausfüllung von d_i/d_j aus empirischen Daten eingeflossen sind.

Für Mischungen aus n Komponenten wird jede Komponente abwechselnd als dominierende Fraktion betrachtet, die Raumausfüllung ist durch

$$\phi = \min_{1 \leq i \leq n} \{\phi_i^T\}$$

und

$$\begin{aligned} \phi_i^T &= \frac{\phi_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left(1 - \frac{\phi_i}{\phi_{ij}}\right) \frac{v_i}{v_{ij}} - \sum_{j=i+1}^n \left(1 - \frac{\phi_i}{\phi_{ij}}\right) \frac{v_i}{v_{ij}}} \\ &= \frac{\phi_i}{1 - \sum_{j=1}^n \left(1 - \frac{\phi_i}{\phi_{ij}}\right) \frac{v_i}{v_{ij}}} \end{aligned}$$

für $i = 1, \dots, n$ gegeben, dabei sind

$$\phi_{ij} = \begin{cases} \phi_i + \phi_i(1 - \phi_i)(1 - 2,35d_{ij} + 1,35d_{ij}^2) & \text{für } d_{ij} \leq 0,741, \\ \phi_i & \text{für } d_{ij} > 0,741 \end{cases},$$

$$v_{ij} = \begin{cases} \frac{1-d_{ij}^2}{2-\phi_i} & \text{für } i < j \\ 1 - \frac{1-d_{ij}^2}{2-\phi_i} & \text{für } i \geq j \end{cases}$$

und

$$d_{ij} = \begin{cases} \frac{d_i}{d_j} & \text{für } i < j \\ \frac{d_j}{d_i} & \text{für } i \geq j \end{cases}.$$

4.1.7 Mixture Packing Model

Yu und Standish entwarfen das Mixture Packing Model [YS88], als sie erkannten, dass eine bidisperse Packung entweder aus einer Mischung oder Entmischung der beiden Komponenten bestehen kann, was von deren Größenverhältnis abhängt. Für ein kleines Verhältnis $\frac{d_1}{d_2} < 0,154$ wird solch eine Packung durch einen Entmischungsmechanismus dominiert, für größere Verhältnisse durch einen Mischungseffekt. Entmischung bedeutet in diesem Fall, dass das Packungsskelett der dominierenden Komponente nicht grundlegend durch die andere Komponente beeinflusst wird; im Gegensatz dazu wird die Packungsstruktur bei einem Mischungseffekt durch beide Komponenten kontrolliert. Dieser verläuft zudem nicht linear, sodass die Autoren eine Alternative zum Linear Packing Model schaffen wollten.

Die Autoren betrachten bei diesem Ansatz das spezifische Volumen $V_{\text{spez}} = \phi^{-1}$, welches für zwei geschichtete (d. h. nicht gemischte) Komponenten unter Vernachlässigung von Randeffekten dann

$$V_{\text{spez}} = \frac{v_1}{\phi_1} + \frac{v_2}{\phi_2}$$

beträgt. Für eine Mischung der beiden Komponenten ändert sich das Volumen aufgrund der Interaktion der Komponenten zu

$$V_{\text{spez}} = \frac{v_1}{\phi_1} + \frac{v_2}{\phi_2} + C_{12}v_1v_2.$$

Für den Koeffizienten geben die Autoren die lineare Gleichung

$$C_{12} = \beta_{12} + \gamma_{12}(v_2 - v_1)$$

an. Erweitert auf eine Multikomponentenmischung (mit n Komponenten) ergibt sich

$$V_{\text{spez}} = \sum_{i=1}^n \frac{v_i}{\phi_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \beta_{ij}v_iv_j + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \gamma_{ij}v_iv_j(v_j - v_i).$$

Zu beachten ist dabei die jeweils nur paarweise modellierte Synergie der Komponenten, um die Komplexität der Berechnung nicht noch zusätzlich zu steigern.

Das Mixture Packing Model basiert auf der vereinfachenden Annahme, dass $\phi_i = \phi_j = \phi_0$ für alle Komponenten i und j gilt; es ist somit nur für Mischungen aus Materialien mit ähnlichen Packungseigenschaften geeignet. Die von Durchmesser Verhältnis und Eigenpackungsdichte abhängigen Koeffizienten für die Interaktion wurden mit der

Methode der kleinsten Quadrate aus empirischen Ergebnissen bidisperser Packungen gewonnen [YS91] und betragen

$$\beta_{ij} \left(\frac{d_i}{d_j}, \phi_0 \right) = 10,288 \cdot 10^{-1,4566\phi_0} \cdot \left(-1,0002 + 0,1126 \frac{d_i}{d_j} + 5,8455 \left(\frac{d_i}{d_j} \right)^2 - 7,9488 \left(\frac{d_i}{d_j} \right)^3 + 3,1222 \left(\frac{d_i}{d_j} \right)^4 \right)$$

und

$$\gamma_{ij} \left(\frac{d_i}{d_j}, \phi_0 \right) = (-1,3092 + 15,039\phi_0 - 37,453\phi_0^2 + 40,869\phi_0^3 - 17,110\phi_0^4) \cdot \left(-1,0029 + 0,3589 \frac{d_i}{d_j} + 10,970 \left(\frac{d_i}{d_j} \right)^2 - 22,197 \left(\frac{d_i}{d_j} \right)^3 + 12,434 \left(\frac{d_i}{d_j} \right)^4 \right).$$

4.1.8 Linear-Mixture Packing Model

Yu und Standish bemerkten, dass einige Aspekte der Packung nur durch lineare Modelle erfasst werden konnten. Daher kombinierten sie das Linear Packing Model mit ihrem Mixture Packing Model [YS91]. Auf diese Weise wurde die dominierende Komponente im Modell durch eine dominierende Mischung ersetzt, die ihrerseits aus mehreren Komponenten bestehen konnte. Voraussetzung ist wie im Mixture Packing Model, dass jede Komponente dieselbe Raumauffüllung ϕ_0 besitzt.

Auch in diesem Modell wird das spezifische Volumen $V_{\text{spez}} = \phi^{-1}$ bestimmt, indem mittels

$$V_i^T = V_i^{\text{mix}} \sum_{j=M}^N v_j + V_i^{\text{fill, S}} + V_i^{\text{fill, L}}, \quad i = 1, \dots, n$$

der Beitrag V_i^{mix} einer Mischung der Komponente i mit anderen Komponenten ähnlichen Durchmessers, sowie die Beiträge $V_i^{\text{fill, S}}$ und $V_i^{\text{fill, L}}$ für die Fülleffekte zwischen dieser Mischung und weiteren Komponenten kleineren bzw. größeren Durchmessers berechnet werden, wodurch dann mit

$$V_{\text{spez}} = \max_{1 \leq i \leq n} \{V_i^T\}$$

der größte Wert über alle n Komponenten das spezifische Volumen der Gesamtmi-

schung festlegt. Dabei sind

$$V_i^{\text{mix}} = \sum_{j=M}^N \frac{Y_j}{\phi_j} + \frac{\sum_{h=M}^{N-1} \sum_{l=h+1}^N \beta_{hl} \left(\frac{d_h}{d_l}, \phi_0 \right) v_h v_l}{\left(\sum_{j=M}^N v_j \right)^2} + \frac{\sum_{h=M}^{N-1} \sum_{l=h+1}^N \gamma_{hl} \left(\frac{d_h}{d_l}, \phi_0 \right) v_h v_l (v_l - v_h)}{\left(\sum_{j=M}^N v_j \right)^3}, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$Y_j = \frac{v_j}{\sum_{k=M}^N v_k}, \quad j = M, \dots, N,$$

$$M = \begin{cases} k & \text{für } d_{k-1} < 0,154d_i \leq d_k, \quad k = 1, \dots, i, \\ 1 & \text{für } 0,154d_i < d_1 \end{cases}$$

$$N = \begin{cases} k & \text{für } d_k \leq \frac{d_i}{0,154} < d_{k+1}, \quad k = i, \dots, n, \\ n & \text{für } \frac{d_i}{0,154} > d_n \end{cases}$$

$$\beta_{hl} \left(\frac{d_h}{d_l}, \phi_0 \right) = \begin{cases} 10,288 \cdot 10^{-1,4566\phi_0} \left(-1,0002 + 0,1126 \frac{d_h}{d_l} + 5,8455 \left(\frac{d_h}{d_l} \right)^2 - 7,9488 \left(\frac{d_h}{d_l} \right)^3 + 3,1222 \left(\frac{d_h}{d_l} \right)^4 \right) & \text{für } \frac{d_h}{d_l} \leq 0,741, \\ 0 & \text{für } \frac{d_h}{d_l} > 0,741 \end{cases}$$

$$\gamma_{hl} \left(\frac{d_h}{d_l}, \phi_0 \right) = \begin{cases} \left(-1,3092 + 15,039\phi_0 - 37,453\phi_0^2 + 40,869\phi_0^3 - 17,110\phi_0^4 \right) \left(-1,0029 + 0,3589 \frac{d_h}{d_l} + 10,970 \left(\frac{d_h}{d_l} \right)^2 - 22,197 \left(\frac{d_h}{d_l} \right)^3 + 12,434 \left(\frac{d_h}{d_l} \right)^4 \right) & \text{für } \frac{d_h}{d_l} \leq 0,741, \\ 0 & \text{für } \frac{d_h}{d_l} > 0,741 \end{cases}$$

$$V_i^{\text{fill, S}} = \begin{cases} 0 & \text{für } M = 1 \\ \sum_{j=1}^{M-1} V_i^{\text{mix}} (1 - f(i, j)) v_j & \text{für } M \geq 2 \end{cases},$$

$$f(i, j) = \frac{(1 - \phi_i^{\text{mix}}) (2 - \phi_i^{\text{mix}}) \left(1 - 2,35 \frac{d_j}{d_i} + 1,35 \left(\frac{d_j}{d_i}\right)^2\right)}{\left(1 - \phi_i^{\text{mix}} + \left(\frac{d_j}{d_i}\right)^2\right) \left(1 + (1 - \phi_i^{\text{mix}}) \left(1 - 2,35 \frac{d_j}{d_i} + 1,35 \left(\frac{d_j}{d_i}\right)^2\right)\right)},$$

$$V_i^{\text{fill, L}} = \begin{cases} 0 & \text{für } N = n \\ \sum_{j=N+1}^n (V_i^{\text{mix}} - (V_i^{\text{mix}} - 1) g(i, j)) v_j & \text{für } N \leq n - 1 \end{cases},$$

$$g(i, j) = \frac{(2 - \phi_i^{\text{mix}}) \left(1 - 2,35 \frac{d_i}{d_j} + 1,35 \left(\frac{d_i}{d_j}\right)^2\right)}{\left(1 - \left(\frac{d_i}{d_j}\right)^2\right) \left(1 + (1 - \phi_i^{\text{mix}}) \left(1 - 2,35 \frac{d_i}{d_j} + 1,35 \left(\frac{d_i}{d_j}\right)^2\right)\right)},$$

$$\phi_i^{\text{mix}} = \frac{1}{V_i^{\text{mix}}}.$$

Für die jeweilige Komponente i bilden die Komponenten M, \dots, i, \dots, N somit die dominierende Mischung, alle weiteren Komponenten sorgen für Fülleffekte, siehe Abbildung 4.4.

4.1.9 Compressible Packing Model

Ebenfalls auf Grundlage der Idee des Linear Packing Models entwickelte de Larrard zunächst das Solid Suspension Model [LS94a] und später das Compressible Packing Model [Lar99]. Dieses unterscheidet zwischen einer virtuellen Raumausfüllung, die der theoretisch maximal möglichen Packungsdichte entspricht, und der tatsächlichen Raumausfüllung. Letztere ist nicht zuletzt auch eine Funktion des Packungsvorgangs, weshalb der Kompaktionsindex K eine zentrale Rolle im Modell spielt. K kann durch Kalibrierung aus experimentellen Daten gewonnen werden, de Larrard gibt für verschiedene Verdichtungsarten folgende Werte an:

- $K = 4,1$ für Schütten,
- $K = 4,5$ für Stopfen,
- $K = 4,75$ für Vibration,
- $K = 9$ für Vibration mit einem gleichzeitigen Verdichtungsdruck von 10 kPa und

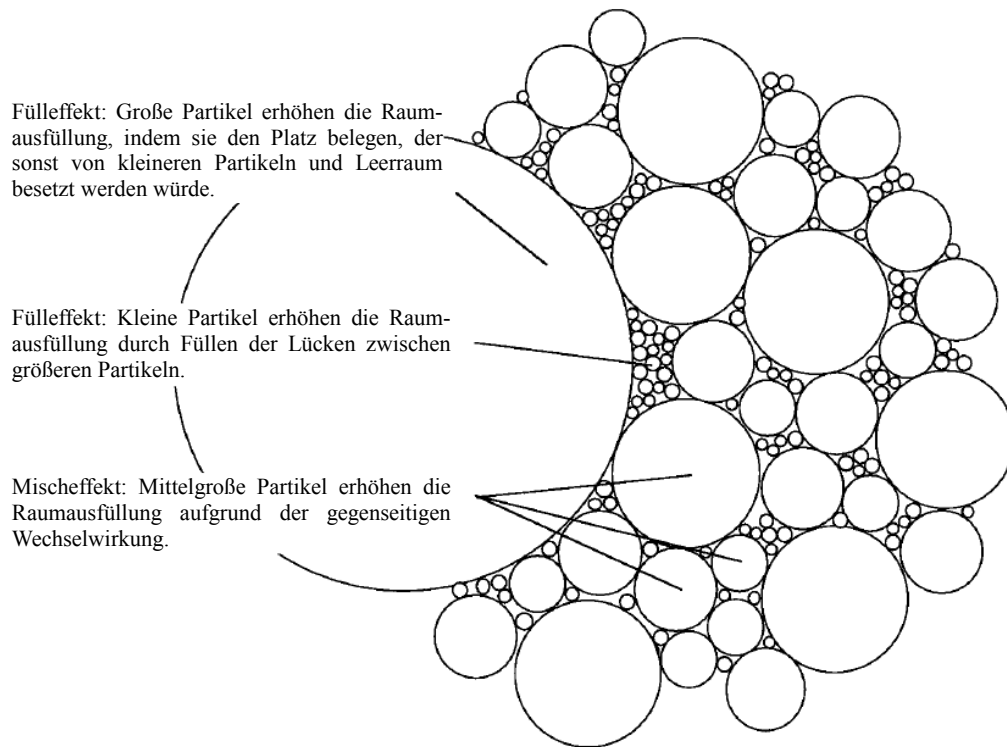


Abbildung 4.4: Die strukturbestimmenden Misch- und Fülleffekte einer Kugelpackung (aus [YZS96]).

- $K = 6,7$ für ein Verdichten in feuchter/nasser Umgebung.

Für ein so vorgegebenes K ist die Raumaufüllung implizit durch

$$K = \sum_{i=1}^n K_i = \sum_{i=1}^n \frac{\frac{v_i}{\beta_i}}{\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_i}} \quad (4.1)$$

definiert. Dabei ist β_i die virtuelle Packungsdichte einer Komponente i und γ_i die virtuelle Raumaufüllung einer Packung, bei der die Komponente i dominant ist. Für eine monodisperse Packung ist $\beta_1 = \gamma_1$ und die Gleichung (4.1) vereinfacht sich zu

$$K = \frac{1}{\frac{\beta_1}{\phi} - 1},$$

woraus die Umrechnung zwischen virtueller Raumaufüllung und Eigenpackungsdichte folgt:

$$\beta_i = \left(1 + \frac{1}{K}\right) \phi_i$$

Die Interaktion der unterschiedlichen Komponenten wird in diesem Modell durch γ_i getragen und ist durch

$$\gamma_i = \frac{\beta_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left(1 - a_{ij} \frac{\beta_i}{\beta_j}\right) v_j - \sum_{j=i+1}^n \left(1 - \beta_i + b_{ij} \beta_i \left(1 - \frac{1}{\beta_j}\right)\right) v_j} \quad (4.2)$$

gegeben, dabei sind a_{ij} und b_{ij} zwei Koeffizienten, die de Larrard mit Hilfe von Experimenten an bidispersen Packungen bestimmt. Demnach beträgt der Koeffizient für den Keileffekt

$$a_{ij} = \sqrt{1 - \left(1 - \frac{d_i}{d_j}\right)^{1,02}}$$

und derjenige für den interpartikuläre Wandeffekt

$$b_{ij} = 1 - \left(1 - \frac{d_i}{d_j}\right)^{1,50}.$$

De Larrard erlaubt in seinem Modell auch die Berücksichtigung des Wandeffekts am Containerrand. Dieser Effekt modifiziert die Raumausfüllung innerhalb eines Abstandes von $\frac{d}{2}$ von der Containerwand, sodass dort eine mittlere Packungsdichte von $k_w \beta$ vorherrscht, während sie im restlichen Container weiterhin β beträgt². Soll diesem Effekt Rechnung getragen werden, so muss in den Gleichungen (4.1) und (4.2) β_i durch α_i ersetzt werden, mit

$$\begin{aligned} \alpha_i &= (1 - V_p) \beta_i + V_p k_w \beta_i \\ &= (1 - (1 - k_w) V_p) \beta_i. \end{aligned}$$

Dabei ist V_p der durch den Wandeffekt beeinflusste Volumenanteil des Containers und k_w eine Konstante, die von de Larrard für runden Zuschlag auf $k_w = 0,88$ und für gebrochenen Zuschlag auf $k_w = 0,73$ bestimmt wurde.

Grünwald [Grü04] setzte das Compressible Packing Model zur Vorhersage der Raumausfüllung von faserverstärktem Beton ein. Die beste Übereinstimmung zwischen Berechnung und Experiment ergab sich, wenn für die Stahlfasern nach einem Ansatz von Yu et al. [YSM93] ein Kugelpackungsäquivalenzdurchmesser eingesetzt wurde, also der Durchmesser jener Kugel, die in einer Packung zur gleichen Packungsdichte führt wie die zylinderförmige Stahlfaser. Im Mittel ergab sich eine Abweichung von 2–2,4%, wobei das Modell die tatsächliche Raumausfüllung im Bereich hoher Pa-

²Tatsächlich reicht der Einfluss des Wandeffekts noch weiter in das Containerinnere hinein, siehe Kapitel 9.2.

ckungsdichten leicht unterschätzte und für Mischungen weniger Komponenten (etwa eine Mörtelmischung mit $n = 3$) überschätzte.

Für die Berechnung der Raumauffüllung sowohl von Mischungen aus Zement, Kalksteinmehl, Sand und Kies als auch von Stahlkugelpackungen modifizierten Jones et al. [JZN02] den Kompaktionsindex K und wählten ihn deutlich höher als in den Versuchen von de Larrard. Hier ergab sich für $K = 12,5$ die beste Anpassung an die experimentellen Ergebnisse.

4.1.10 Modell von Schwanda/Reschke

In seiner Arbeit über die Feinstoffgranulometrie im Beton wählte Reschke [Res01] das Modell von Schwanda [Sch56, Sch59], um die Packungsdichte von Partikelmischungen zu berechnen. Dieses benötigt die Hohlraumanteile k_i der Komponenten, die sich mittels

$$k_i = \frac{1 - \phi_i}{\phi_i}, \quad i = 1, \dots, n$$

aus den Eigenpackungsdichten berechnen lassen. Der Hohlraumanteil ist somit eine andere Bezeichnung der von Dewar verwendeten Porenzahl U , vgl. die Fußnote auf Seite 44. Reschke ging vom theoretischen Kugelmodell mit Eigenpackungsdichte $\phi = 62,5\%$ aus und setzte zunächst $k_0 = k_i = 0,6$ für alle $1 \leq i \leq n$ fest, was sich durch Wahl enger Kornklassen als Komponenten rechtfertigen lässt.

Im Modell werden nun sämtliche Komponenten miteinander kombiniert, sodass jede Komponente einmal als *Grundkorn* fungiert, also die Packungsstruktur dominiert. Die Raumauffüllung der Gesamtmischung liefert

$$\phi = \frac{1}{1 + \max_{1 \leq i \leq n} h_i}$$

mit

$$h_i = k_i - \sum_{j=1}^n a_{i,j} \cdot v_j, \quad i = 1, \dots, n.$$

Der Faktor $a_{i,j}$ stellt den Beitrag der Teilchenbehinderung dar, wenn die Komponente

j als *Beikorn* zu einer dichten Packung der Komponente i zugeführt wird. Er beträgt

$$a_{i,j} = \begin{cases} k_0 + 1 & \text{für } w_{i,j} \leq -w_0, \\ -\frac{k_0+1}{w_0} w_{i,j} & \text{für } -w_0 < w_{i,j} \leq 0, \\ \frac{k_0}{w_0} w_{i,j} & \text{für } 0 < w_{i,j} < w_0, \\ k_0 & \text{für } w_{i,j} \geq w_0 \end{cases}$$

mit

$$w_{i,j} = \log \frac{d_j}{d_i},$$

dabei ist w_0 die Reichweite der Teilchenbehinderung. Diese beeinflusst bidisperse Mischungen, bei denen der Durchmesser der feinen Partikel das 0,315-fache des Durchmessers der groben Partikel überschreitet, somit ergibt sich die Reichweite $w_0 = \log 1/0,315 \approx 0,502$.

Vergleiche mit experimentell bestimmten Packungsdichten zeigten Reschke, dass die Unterstellung eines pauschalen Hohlraumanteils k zu Diskrepanzen führt, wenn sehr feine Stoffe beteiligt sind und somit starke interpartikuläre Kräfte wirken, oder die tatsächliche Partikelform stark von der Kugelform abweicht. Daher modifizierte er das Modell von Schwanda, indem er zunächst den Kornformfaktor α bestimmte und mit

$$k_\alpha = k_0 \cdot \alpha = 0,6 \cdot \alpha$$

einen mit α korrigierten Hohlraumanteil k_α ansetzte. Für alle Komponenten wird die gleiche Kornform angenommen, daher ergibt sich der korrigierte Hohlraumgehalt jeder Komponente zu

$$\epsilon_\alpha = \frac{k_\alpha}{1 + k_\alpha}.$$

Der durch interpartikuläre Kräfte verursachte Hohlraumzuwachs $\Delta\epsilon_F$ in einer Fraktion mit Durchmesser d_i beträgt

$$\Delta\epsilon_F(d_i) = (1 - \epsilon_\alpha) e^{-d_i^{0,35}}$$

und wird mittels

$$\epsilon_i = \epsilon_\alpha + \Delta\epsilon_F(d_i)$$

eingbracht. Daraus ergibt sich schließlich

$$k_i = \frac{\epsilon_i}{1 - \epsilon_i}.$$

Später wurde das Modell von Geisenhanslüke untersucht und implementiert [SG05], um die Packungsdichten ultrahochfester Betone zu berechnen. Eine weitere Anwendung erfährt dieses Modell in einem Expertensystem der Forschungsvereinigung Kalk-Sand e.V. [EGS⁺08], um die maximale Packungsdichte von Kalk-Sand-Rohmassen zu berechnen. Dort gelang eine enorme Reduzierung des experimentellen Aufwands, indem der Parameter k für alle Komponenten identisch gewählt wurde, nämlich $k := 0,82$. Als Raumauffüllung sämtlicher n Komponenten wird damit $\phi_i \approx 54,95\%$, $i = 1, \dots, n$ unterstellt. Diese Pauschalisierung würde in den meisten Fällen zu größeren Fehlern führen; für diese spezielle Anwendung hat sie jedoch keine negativen Auswirkungen, weil die im Modell zu berücksichtigenden Stoffe allesamt Sande mit ähnlichen Packungseigenschaften sind. Anzumerken ist außerdem, dass die Kalkkomponente in das Packungsmodell nicht explizit miteinbezogen wird, da festgestellt wurde, dass der Kalkanteil – im Rahmen der geeigneten Rezepturen – lediglich additiv auf die Raumauffüllung der Mischung wirkt und somit keinen Einfluß auf die Sandzusammensetzung bei maximaler Packungsdichte hat.

4.2 Vergleich der Modelle

Die Modelle von Aïm/Goff und Toufar werden von Reschke [Res01] zu einem Vergleich mit dem Modell von Schwanda herangezogen. Die untersuchte Mischung besteht aus 20 Vol.-% Zement und 80 Vol.-% Zuschlag, letzterer wurde in seiner Zusammensetzung variiert. Über alle 84 Varianten zeigt sich zwar ein linearer Zusammenhang unter den Modellen, die Raumauffüllungen der Modelle von Aïm/Goff und Toufar liegen jedoch meist ca. 7 Prozentpunkte über der durch das Modell von Schwanda berechneten Packungsdichte.

Dewar [Dew99] führt zur Untersuchung der Tauglichkeit seines Modells Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen sowie weiteren Packmodellen durch, dazu werden die Raumauffüllungen bidisperser Mischungen mit einem Größenverhältnis $r = d_1/d_2$, $d_1 < d_2$ bestimmt. Demnach liefert das Aïm/Goff-Modell nur für große Anteile der feinen Komponente passable Resultate, für andere Mischungsverhältnisse liegt die Raumauffüllung zu hoch und der dem Optimum der dichtesten zufälligen Packung entsprechende Feinanteil wird unterschätzt. Das von Goltermann et al. modifizierte Toufar-Modell hingegen stimmt in einem mittleren Bereich für r gut mit den experimentellen Daten überein, überschätzt die Raumauffüllung jedoch für $r > 0,2$, während es sie für starke Größenunterschiede zwischen den Komponenten (etwa $r < 0,02$) unterschätzt. De Larrards Solid Suspension Model kann eine gute Über-

einstimmung mit den Ergebnissen dicht gepackter Partikel vorweisen, liefert jedoch größere Abweichungen für die Raumausfüllung bei niedrigerem Verdichtungsdruck. Dewars eigenes Modell schneidet bei allen gezeigten Vergleichen gut ab.

Die gute Vorhersagequalität des Dewar-Modells zeigt sich ebenfalls in den vergleichende Untersuchungen verschiedener Packmodelle, die Jones et al. [JZN02] sowohl für Mischungen aus zwei als auch aus drei Komponenten durchführten. Die Autoren klassifizieren die Eignung des Modells von Dewar, des modifizierten Modells von Toufar, des Linear Packing Modells und des Compressible Packing Modells für unterschiedliche Größenverhältnisse r . Demnach liefern alle vier Modelle zufriedenstellende Ergebnisse im Bereich $r > 0,4$. Werden die Größenunterschiede der beiden Komponenten einer bidispersen Mischung jedoch stärker, scheinen das modifizierte Modell von Toufar sowie das Linear Packing Model und das Compressible Packing Model weniger geeignet zu sein. Auch für eine Zuschlagsmischung dreier Komponenten liefert das Modell von Dewar die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, sowohl für die Raumausfüllung, als auch für die optimale Zusammensetzung der Mischung aus den Komponenten. Lediglich für eine Mischung aus Stahlkugeln dreier Durchmesser erzielt das Dewar-Modell eine starke Abweichung vom Optimum der Mischungsanteile.

Insgesamt zeigt sich, dass den neueren Modellen wie dem Linear Mixture Packing Model, dem Compressible Packing Model sowie dem Modell von Dewar qualitativ gute Ergebnisse zugesprochen werden können. Sie basieren wie die anderen Modelle auch auf den Zusammenhängen zwischen Anteilen, Größenverhältnissen und Gefügestrukturen bidisperser Packungen. Durch eine Vielzahl enthaltener, empirisch bestimmter Parameter schneiden sie im Vergleich jedoch besser ab als die simpleren Modelle, beispielsweise von Toufar oder Furnas. Diese Parameter stellen sich zugleich aber auch als Nachteil der komplexeren Modelle heraus, da sie unter bestimmten experimentellen Voraussetzungen gewonnen wurden und so die Allgemeingültigkeit der Modelle teilweise einschränken. Außerdem nimmt mit zunehmender Komplexität auch die labortechnische Arbeit zu, um die Daten für eine Parameteranpassung zu gewinnen. Hierdurch wird der zeitliche Aufwand (und damit ein wichtiger Kostenfaktor) für den Einsatz analytisch-empirischer Modelle zusätzlich erhöht, welcher ohnehin schon durch die notwendige Bestimmung der Korngrößen und Eigenpackungsdichten aller Mischungskomponenten eine nicht zu vernachlässigende Größe darstellt.

Eine Alternative bietet das Modell von Schwanda. Hier wird der Hohlraumanteil – und damit die Eigenpackungsdichten – jeder Komponente mit einem theoretischen Wert festgesetzt, die in der Praxis aufwändige Bestimmung von Einzelwerten ent-

fällt. Reschke zeigte jedoch, dass dies insbesondere für Feinstoffe zu Abweichungen mit experimentell bestimmten Vergleichsdaten führen kann. Seine Erweiterung des Schwanda-Modells um die Berücksichtigung der Partikelform und -oberfläche mittels eines Kornformfaktors ist vielversprechend. Hier sollte allerdings besser keine Pauschalisierung erfolgen, sondern der Formfaktor jeder Klasse individuell eingebracht werden. Da jedoch bei entsprechend engen Kornklassen der experimentelle Aufwand enorm ansteigen würde, könnte als Kompromiss die Bestimmung des Formfaktors zumindest für jedes Material unabhängig von dessen Kornklassen vorgenommen werden.

Kapitel 5

Hierarchisches, simulationsgestütztes Modell zur Bestimmung der Raumausfüllung

Die in Kapitel 4 aufgelisteten Verfahren benötigen allesamt empirische Daten als Eingangsgrößen des jeweils zugrundeliegenden Modells, was einen enormen Aufwand insbesondere bei einer hohen Anzahl von Komponenten bedeuten kann. In diesem Kapitel soll zur Entlastung der experimentellen Arbeiten ein anderer Ansatz präsentiert werden: Die Substitution der experimentellen Bestimmung der Raumausfüllung durch Simulation. Zweifellos können bereits die bekannten analytisch-empirischen Modelle ohne Änderung direkt mit einer Simulation gekoppelt werden, welche die Werte der ϕ_i liefert. Die hier erarbeitete neue Methode profitiert jedoch zusätzlich von der Tatsache, dass eine Korngrößenverteilung am Rechner in frei vorgegebene, exakt begrenzte Intervalle eingeteilt werden kann. Dies erlaubt die Simulation wohldefinierter Fraktionen, die mit zunehmendem Durchmesser enger und damit in kritischen Bereichen genauer werden, da sich gerade die Anteile des Größtkorns stark auf die Raumausfüllung auswirken. Außerdem kann das Modell relativ simpel gehalten werden, weil keine empirischen Konstanten zur Modellierung der Interaktion verschiedener Partikelgrößen einfließen müssen; diese Interaktion wird bereits in der Simulation berücksichtigt. Wie sich zeigt, verlagert sich das Augenmerk stattdessen auf die „richtige“ Einteilung und Zusammensetzung der zu simulierenden Samples.

In den folgenden Abschnitten wird keine spezifische Annahme über die vom hierarchische Modell benutzte Simulation gemacht, tatsächlich ist dieses Modell an keine bestimmte Methode für die Packungssimulation der einzelnen Fraktionen gebunden.

Wie später zu sehen sein wird, kann jedoch von gewissen Eigenschaften der Simulation profitiert werden, etwa wenn die Simulation vorzeitig abgebrochen werden kann, um einen noch nicht sehr dichten, aber dennoch validen Packungszustand zu erlangen.

Aus der in Kapitel 2.1.2 beschriebenen Problematik bei der repräsentativen Umsetzung stark polydisperser Mischungen auf dem Rechner folgt, dass in einem Sample der Packungssimulation enorm viele Partikel aus der Gesamtmischung vorhanden sein müssten, um auch nur einen einzigen Partikel aus einem kleinen, aber für die Packungsstruktur wichtigen Intervall entsprechend seiner realen Häufigkeit zu berücksichtigen. Anhand des dort aufgeführten Beispiels wird deutlich, dass die Repräsentativität eines Samples in der Simulation nur für eng fraktionierte Korngrößenbereiche gewährleistet werden kann.

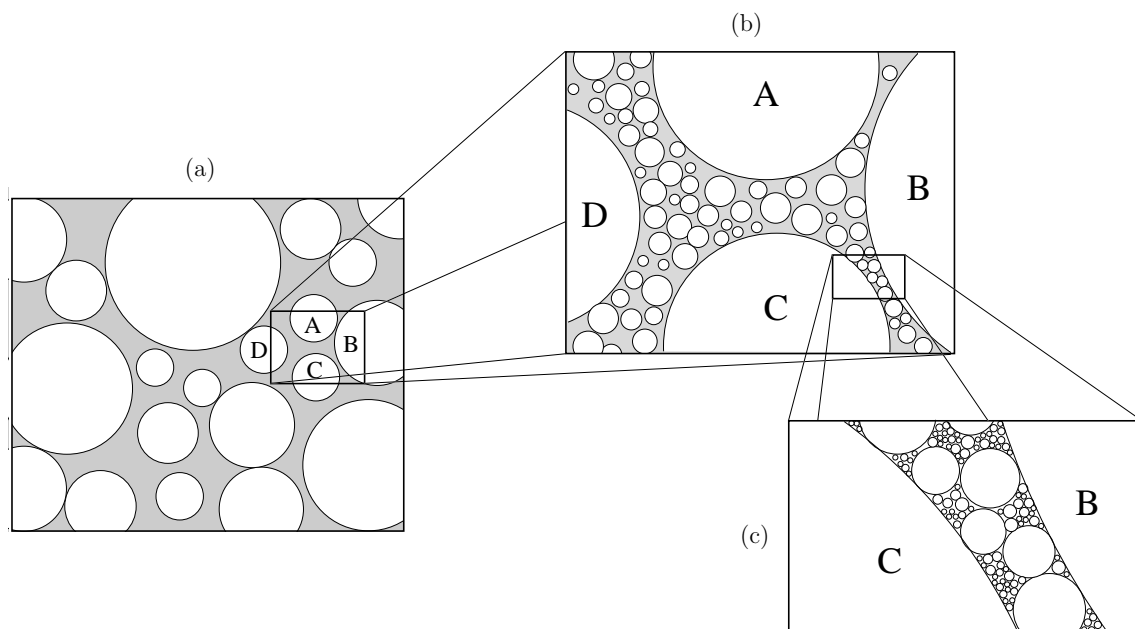


Abbildung 5.1: Unterschiedlichen Detailstufen einer Packung.

Das hier präsentierte Modell zeichnet sich durch eine Hierarchisierung der Fraktionen aus, die durch die Betrachtung unterschiedlicher Detailstufen einer Packung motiviert ist. Abbildung 5.1 verdeutlicht dies, dabei lässt sich jede Detailstufe einer Fraktion zuordnen: In Detailstufe a) ist die Fraktion der größten Partikel als diskrete Packung zu erkennen, während die in der Hierarchie darunterliegenden feineren Fraktionen nur als „graue Masse“ zu erkennen sind. Dieses Kontinuum wird in Detailstufe b) aufgelöst in diskrete Partikel der mittleren Fraktion und wiederum ein Kontinuum der feinsten Fraktion. In Detailstufe c) sind schließlich auch die kleinsten Partikel individuell erkennbar.

In jeder Detailstufe sind zudem einzelne Partikel aus allen in der Hierarchie höher-

liegenden Fraktionen zu sehen, z. B. Partikel C in Stufe b) und c). Diese wirken als interpartikulärer Rand (vgl. Abbildung 4.1) auf die Partikel der betrachteten Fraktion.

Die Hierarchie der Fraktionen führt auf eine rekursive Berechnung im Modell: Seien die n Fraktionen nach aufsteigender Partikelgröße sortiert und mit F_1, \dots, F_n bezeichnet. Dabei repräsentiert F_i eine Mischung der Partikel mit Durchmessern aus $\left[d_{\min}^{(i)}, d_{\max}^{(i)} \right]$. Die Raumauffüllung der Gesamtpackung der Fraktionen F_1, \dots, F_n kann berechnet werden, wenn die Raumauffüllung der Fraktion F_n per Simulation bestimmt wird und die Raumauffüllung der Mischung der Fraktionen F_1, \dots, F_{n-1} bekannt ist. Letztere lässt sich wiederum aus der Raumauffüllung für F_1, \dots, F_{n-2} und der simulierten Raumauffüllung für F_{n-1} berechnen; diese Rekursion setzt sich bis zur Fraktion F_1 der kleinsten Partikel fort. Die Interaktion (interpartikulärer Randeﬀekt) mit Partikeln höherer Fraktionen fließt in das Modell mit ein, indem in der Simulation der Fraktion F_i , $i < n$, neben einem Sample von Partikeln aus F_i ebenfalls ein Sample von **Randpartikeln** aus $\bigcup_{j=i+1}^n F_j$ berücksichtigt wird. Für Letzteres kann die Anforderung der Repräsentativität sogar abgeschwächt werden: Je stärker der Unterschied zwischen den Durchmessern d_i der Partikel aus F_i und der Korngröße d_j eines Randpartikels ist, desto weniger Einfluss hat der exakte Durchmesser d_j auf den durch den Randeﬀekt entstehenden Leerraum; für $d_j \gg d_i$ kann die Krümmung des großen Partikels in der Nähe der kleinen Partikel durch eine Gerade approximiert werden.

Der von der Packung einer einzelnen Fraktion F_i eingenommene Raum soll als Volumen eines die Packung umschließenden Containers aufgefasst werden und beträgt

$$C(F_i) := V(F_i) + L(F_i),$$

wobei $V(F_i)$ das (Netto-)Volumen der Partikel dieser Fraktion sein soll. $L(F_i)$ bezeichnet das zwischen den Partikeln vorhandene Leervolumen, also den Porenraum.

Sukzessives Hinzufügen der Fraktionen (in der Reihenfolge der aufsteigenden Durchmesser) zu einer Mischung führt zu zwei unterschiedlichen potenziellen Strukturen (Abbildung 5.2), die den benötigten Raum $C(F_1, \dots, F_i)$ einer gemeinsamen Packung der Fraktionen F_1, \dots, F_i bestimmen:

- Die Partikel der zuletzt hinzugefügten Fraktion F_i bilden ein dichtes Packungs-skelett, in dessen Lücken die Partikel aller vorherigen Fraktionen Platz finden (Abbildung 5.2 links), oder
- die Partikel der vorherigen Fraktionen F_1, \dots, F_{i-1} beanspruchen mehr Platz

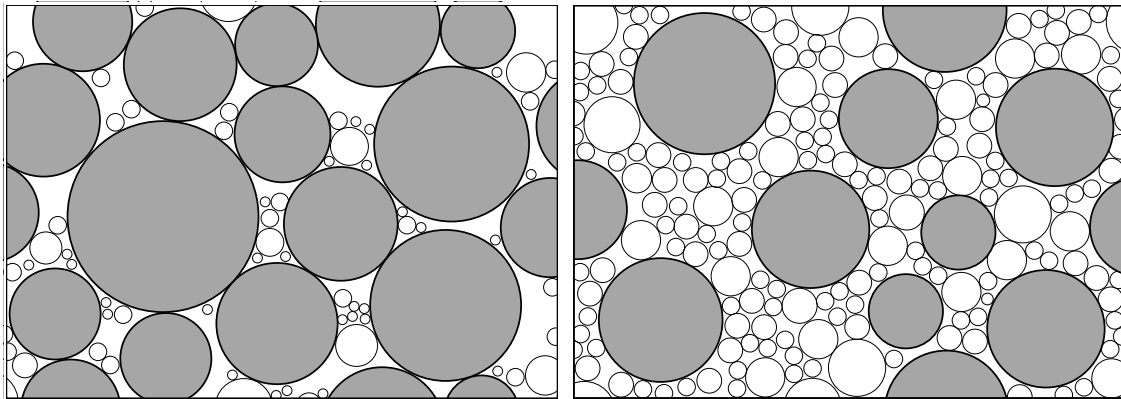


Abbildung 5.2: Links: Die Kugeln der Fraktion F_i dominieren die Packung und bestimmen den benötigten Platz $C(F_1, \dots, F_i)$. Rechts: Die Kugeln der Fraktion F_i werden durch die Kugeln der Fraktionen F_1, \dots, F_{i-1} auseinandergedrückt.

als das Leervolumen $L(F_i)$ bietet und drängen daher das Packungsskelett von F_i auseinander. Die Partikel aus F_i „schwimmen in der Matrix“ der vorherigen Fraktionen (Abbildung 5.2 rechts).

Damit greift das hierarchische Modell die Überlegungen von Furnas auf (vgl. Abschnitt 4.1.1). Diese möglichen Varianten führen auf die Fallunterscheidung

$$C(F_1, \dots, F_i) = \begin{cases} C(F_i) & \text{für } C(F_1, \dots, F_{i-1}) \leq L(F_i) \\ C(F_1, \dots, F_{i-1}) + V(F_i) & \text{für } C(F_1, \dots, F_{i-1}) > L(F_i) \end{cases} \quad (5.1)$$

für $i = 2, \dots, n$. So lässt sich rekursiv das benötigte Volumen $C(F_1, \dots, F_n)$ der Gesamtpackung und damit die Raumausfüllung

$$\phi = \frac{V(F_1, \dots, F_n)}{C(F_1, \dots, F_n)} = \frac{\sum_{j=1}^n V(F_j)}{C(F_1, \dots, F_n)} \quad (5.2)$$

bestimmen.

Noch einmal zu betonen ist die Tatsache, dass bei diesem Ansatz im Gegensatz zu den meisten in Kapitel 4 vorgestellten Modellen keine empirisch zu bestimmenden Parameter erforderlich sind, da die von der Eigenpackungsdichte abhängigen Werte $C(F_i)$ und $L(F_i)$ ausschließlich durch die Simulation ermittelt werden.

5.1 Interaktion zwischen den Fraktionen

Die Simplizität des Furnas-Modells birgt den Nachteil, die Interaktionseffekte an den Fraktionsgrenzen zu vernachlässigen. Darum werden diese im hierarchischen Modell wieder eingeführt.

5.1.1 Wandeffekt

Bislang schließt dieses Modell keinen Wandeffekt mit ein, der durch die großen Partikel auf die kleineren wirkt. Um ihn zu berücksichtigen, muss die Bestimmung von $C(F_i)$ modifiziert werden, indem die Packung um Partikel aus den Fraktionen F_{i+1}, \dots, F_n erweitert wird. Dann liefert

$$\begin{aligned} C^*(F_i) &:= C(F_i, \dots, F_n) - V(F_{i+1}, \dots, F_n) \\ &= V(F_i, \dots, F_n) + L(F_i, \dots, F_n) - V(F_{i+1}, \dots, F_n) \\ &= V(F_i) + L(F_i, \dots, F_n) \end{aligned}$$

das benötigte Volumen der Fraktion F_i unter Berücksichtigung des Wandeffekts, der hier durch das veränderte Leervolumen repräsentiert wird; i. A. ist $L(F_i, \dots, F_n) > L(F_i)$.

Eine geringe Raumausfüllung der Fraktionen F_{i+1}, \dots, F_n untereinander vergrößert somit $C^*(F_i)$. Dieses mag auf den ersten Blick verwundern, doch muss $C^*(F_i)$ nicht nur als Eigenschaft der Fraktion F_i betrachtet werden, sondern als Teil des Ausdrucks $V(F_i)/C^*(F_i)$, der die Raumausfüllung der Fraktion F_i im für sie vorgesehenen Zwickelvolumen $L(F_{i+1}, \dots, F_n)$ beschreibt. Ein großes Porenvolumen in einer Packung der Fraktionen F_{i+1}, \dots, F_n ist somit nur dann auch ein Defizit, wenn die Fraktionen F_1, \dots, F_i diese Poren nicht auszufüllen vermögen.

In der praktischen Anwendung des Modells kann ein Sample aus **aktiven Kugeln** der Fraktion F_i und **Wandkugeln** der Fraktionen F_{i+1}, \dots, F_n erzeugt werden, die genaue Zusammenstellung wird in Abschnitt 5.2 beschrieben. Die Packungssimulation dieses Samples liefert dann $C(F_i, \dots, F_n)$, wovon noch das Volumen der Wandkugeln subtrahiert werden muss, um $C^*(F_i)$ zu erhalten. Dieses ersetzt schließlich $C(F_i)$ in Gleichung (5.1).

5.1.2 Keilung

Neben dem interpartikulären Wandeffekt wird durch die zusätzliche Inkludierung von Kugeln höherer Fraktionen ebenfalls die Keilung (vgl. Abschnitt 4.1 und Abbildung 4.1) berücksichtigt, wenn auch indirekt: Angenommen, die (größeren) Kugeln einer Fraktion F_j bilden eine dichte Packung, zu der dann die Fraktionen F_1, \dots, F_{j-1} hinzugefügt werden. So drängen nun die (kleineren) Kugeln aus F_1, \dots, F_{j-1} diese dichte Anordnung nur auseinander, wenn sie mehr Volumen $C(F_1, \dots, F_{j-1})$ benötigen als Platz in den Lücken des Packungsskeletts geboten wird. Dabei hängt $C(F_1, \dots, F_{j-1})$ von den Leervolumina ab, die zuvor in den sukzessiven Packungen dieser Fraktionen entstanden sind. Dort waren Partikel der Fraktion F_j als Wandkugeln vorhanden, und – falls sie aufgrund der Anteilsverhältnisse dort ebenso ein dichtes Packungsskelett bildeten – evtl. dem Keileffekt unterworfen.

So erhöhen (als Resultat der Interaktion mit den Wandkugeln) sowohl der Wand- als auch der Keileffekt das Leervolumen bzw. den benötigten Raum einer Fraktion F_i . Diese Information wird über die $C(F_1, \dots, F_i, \dots, F_k)$ mit $i < k < n$ weitergetragen bis hin zum finalen $C(F_1, \dots, F_n)$, was mit Gleichung 5.2 die Raumausfüllung bestimmt.

5.2 Einteilung der Fraktionen und Samples

Dieser Abschnitt erläutert das Vorgehen zur Festlegung der – für das hierarchische Modell essenziellen – Fraktionen. Deren exakte Umfänge im Korngrößenspektrum und ihre gegenseitigen Abgrenzungen untereinander lassen sich nicht direkt vorgeben, sondern werden aus den Modellparametern berechnet. Es zeigt sich, dass ein Sample (außer in der letzten Fraktion) immer aus zwei Komponenten besteht, um sowohl aktive Kugeln der zugehörigen Fraktion als auch Wandkugeln aus weiteren Fraktionen zu enthalten.

Im Folgenden sei die KGV durch die Verteilungssummenfunktion $Q_0(x)$ bestimmt. Der Anteil der Partikel aus der Fraktion F_i an der Gesamtsumme aller Partikel sei $h_0(F_i)$, und unter Benutzung von Definition 2.1.0.3 damit durch

$$h_0(F_i) := h_0(d_{\min}^{(i)}, d_{\max}^{(i)}) = Q_0(d_{\max}^{(i)}) - Q_0(d_{\min}^{(i)})$$

gegeben. Unter der Annahme, dass die Packungssimulation Kugeln als Modelle der Partikel verwendet, seien k_i aktive Kugeln mit Radien r_1, \dots, r_{k_i} aus der Fraktion F_i

im Sample S_i enthalten, deren Gesamtvolumen mit

$$V_{\text{akt}}(S_i) = \sum_{j=1}^{k_i} \frac{4}{3} \pi r_j^3 \quad (5.3)$$

bezeichnet werden soll. Ferner besteht jedes Sample S_i mit $i < n$ aus weiteren K_i Wandkugeln aus F_{i+1}, \dots, F_n mit Radien R_1, \dots, R_{K_i} und Gesamtvolumen

$$V_{\text{Wand}}(S_i) = \sum_{j=1}^{K_i} \frac{4}{3} \pi R_j^3. \quad (5.4)$$

Die Samplegröße $s_i = k_i + K_i$ bestimmt maßgeblich die Laufzeit der Simulation und sollte daher als Modellparameter frei wählbar sein. Meist ist es wünschenswert, durch Festlegung einer konstanten Samplegröße $s = s_i, 1 \leq i \leq n$, eine gleichartige Performanz in den Simulationen der Samples S_1, \dots, S_n zu erzielen. Im vorgeschlagenen hierarchischen Modell gilt $k_i = k \forall i < n$ und $K_i = K \forall i < n$ sowie im letzten Sample $k_n = s$ und $K_n = 0$. Der Anteil der aktiven Kugeln (in den Samples S_1, \dots, S_{n-1}) sei

$$a = \frac{k}{s}.$$

An dieser Stelle muss noch einmal der Kontext zwischen Fraktionen und Samples betont werden: Eine typische (und durchaus valide) Vorgehensweise könnte darin bestehen, von vornherein die Fraktionsgrenzen festzulegen, um anschließend zu jeder Fraktion ein Sample zu erzeugen. Im hier präsentierten Modell der hierarchischen Fraktionierung wird ein umgekehrter Weg beschritten: Aus den Modellparametern werden Fraktionsgrenzen ermittelt, und ein Sample wird immer für ein Intervall ab dem einem Fraktionsbeginn zugeordneten Durchmesser bis zum Größtkorn der gesamten Mischung erzeugt, sodass das Sample einerseits eine Fraktion repräsentiert, andererseits aber auch Wandkugeln weiterer Fraktionen umfasst.

Abbildung 5.3 skizziert die Einteilung der Kugeln für die Fraktionen.

Die Auswahl der Kugeldurchmesser für S_1 gestaltet sich simpel: Mittels eines Samplingverfahren werden s Durchmesser aus der gesamten Korngrößenverteilung (KGV) der Mischung erzeugt. Kapitel 6.1 beschreibt hierfür geeignete Methoden, die die Repräsentativität des Samples über das komplette Korngrößenintervall gewährleisten können. Von den so bestimmten Durchmessern werden die kleineren $a \cdot s$ den aktiven Kugeln und die größeren $(1 - a) \cdot s$ den Wandkugeln zugewiesen. Die gemeinsame Erzeugung der Durchmesser ist wichtig, um die korrekten Anteile beider Kugeltypen

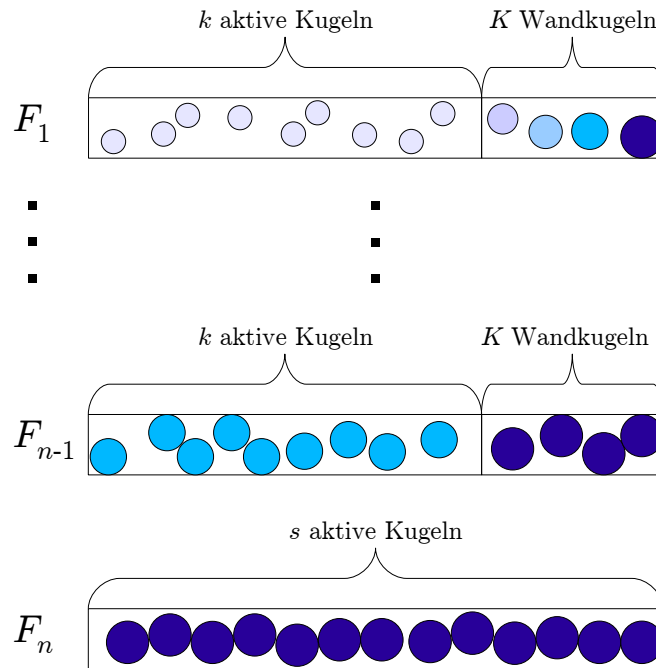


Abbildung 5.3: Einteilung der Kugeln für n Fraktionen.

innerhalb des Samples zu garantieren.

Die Durchmesser eines Samples S_i mit $1 < i \leq n$ werden nur aus einem mit der Fraktion F_i beginnenden Teilbereich der KGV erzeugt, nämlich aus dem Intervall $[Q_0^{-1}(p_i), Q_0^{-1}(1)]$ mit

$$p_1 = 0 \quad \text{und} \quad p_i = p_{i-1} + a(1 - p_{i-1}). \quad (5.5)$$

Die aktiven Kugeln umfassen darin den Bereich $[Q_0^{-1}(p_i), Q_0^{-1}(p_{i+1})]$ für $i < n$ bzw. $[Q_0^{-1}(p_n), Q_0^{-1}(1)]$ für das letzte Sample; Abbildung 5.4 zeigt ein Beispiel für $n = 3$ Fraktionen.

Partikel mit Durchmesser $d < Q_0^{-1}(p_i)$ werden schon in vorherigen Samples S_j mit $j < i$ durch aktive Kugeln abgebildet.

Vergleicht man die Mischung, deren Raumauffüllung bestimmt werden soll, mit den in einer Simulation realisierbaren Kugelanzahlen, so ist schnell klar, dass $V_{\text{akt}}(S_i) \neq V(F_i)$. Trotzdem können die auf F_i bezogenen Werte in Formel (5.1) durch die jeweiligen simulativ für die Samples S_i ermittelten Entsprechungen ersetzt werden, wenn sich die Verhältnisse zwischen den Fraktionen untereinander für die F_i und die korrespondierenden S_i gleichen, denn die Raumauffüllung einer Mischung ist (innerhalb gewisser Grenzen) unabhängig von deren Umfang, sofern die KGV nicht

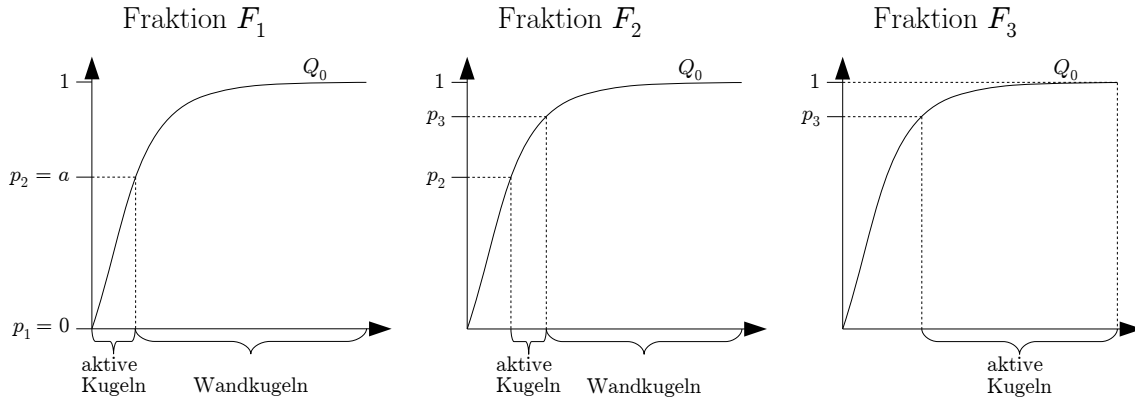


Abbildung 5.4: Die Samplingintervalle bei $n = 3$ Fraktionen. Das Verhältnis aus aktiven Kugeln zu Wandkugeln ist für F_1 und F_2 gleich.

verändert wird. So genügt für die Verwendung der Samples die Forderung

$$\frac{V_{\text{akt}}(S_i)}{\sum_{j=1}^n V_{\text{akt}}(S_j)} = \frac{V(F_i)}{\sum_{j=1}^n V(F_j)}, \quad 1 \leq i \leq n. \quad (5.6)$$

Anhand Formel (5.5) und der angegebenen Intervalle wird jedoch deutlich, dass die Fraktionen mit aufsteigender Nummerierung einen immer geringeren Anteil an der Gesamtmischung ausmachen, der Aufwand aber mit $k = a \cdot s$ aktiven Kugeln im Sample konstant bleibt bzw. in der letzten Fraktion sogar $k_n = s$ beträgt. Die Anzahl der Stichproben pro Fraktion ist somit nicht proportional zum Anteil der Fraktion an der Mischung, die vorgegebene KGV kann nicht realisiert werden.

Um dies zu vermeiden, muss die Gewichtung der Samples bzw. Fraktionen angepasst werden. Das Gewicht w_i eines Samples S_i soll der Anteil sein, den S_i an der Gesamtmischung repräsentiert, also der Anteil des Intervalls $[Q_0^{-1}(p_i), Q_0^{-1}(1)]$. Mit Gleichung 5.5 ist

$$w_i = 1 - p_i = (1 - a)^{i-1}, \quad 1 \leq i \leq n. \quad (5.7)$$

Im Modell aus Gleichung (5.1) werden nun die Größen $V(F_i)$, $L(F_i)$ und $C^*(F_i)$ durch die aus S_i geschätzten Größen ersetzt:

$$\begin{aligned} V(F_i) &= w_i V_{\text{akt}}(S_i), \\ L(F_i) &= w_i (C^*(S_i) - V_{\text{akt}}(S_i) - V_{\text{Wand}}(S_i)) \\ \text{sowie } C^*(F_i) &= w_i (C^*(S_i) - V_{\text{Wand}}(S_i)) = V(F_i) + L(F_i), \end{aligned} \quad (5.8)$$

wobei $C^*(S_i)$ das benötigte Volumen des Samples S_i ist. Seine Ermittlung erfordert das Ausführen der Packungssimulation, was den Hauptaufwand im gesamten Modell

verursacht.

Wie zuvor gilt

$$C(F_1, \dots, F_i) = \begin{cases} C^*(F_i) & \text{für } C(F_1, \dots, F_{i-1}) \leq L(F_i), \\ C(F_1, \dots, F_{i-1}) + V(F_i) & \text{für } C(F_1, \dots, F_{i-1}) > L(F_i) \end{cases} \quad (5.9)$$

und $\phi = \frac{\sum_{i=1}^n V(F_i)}{C(F_1, \dots, F_n)}$.

Sollte statt $C^*(S_i)$ nur die Raumausfüllung $\phi(S_i)$ als Simulationsergebnis zur Verfügung stehen, so kann das benötigte Volumen mittels

$$C^*(S_i) = \frac{V_{\text{akt}}(S_i) + V_{\text{Wand}}(S_i)}{\phi(S_i)} \quad (5.10)$$

berechnet werden.

Die Einteilung der Fraktionen legt ihren Schwerpunkt auf eine gute Repräsentation einer Fraktion durch ihre aktiven Kugeln, während die Wandkugeln in der Regel einen enormen Bereich der Korngrößenverteilung umfassen müssen, der mit realisierbaren Samplegrößen keine feine Granularität der Durchmessern zulässt. Jede einzelne Wandkugel steht daher für einen teilweise beträchtlichen Ausschnitt der tatsächlichen Partikel aus größeren Fraktionen, für die Interaktion der Fraktionen genügt dies jedoch, um Wandeffekt und Keilung approximiert im Modell zu berücksichtigen, wie die empirischen Ergebnisse in den Abschnitten 5.5 bis 5.7 zeigen.

5.3 Abkürzung des Simulationsvorgangs

Gewisse Konstellationen im hierarchischen Packungsmodell können ausgenutzt werden, um den vom Packungsprozess einer Fraktion verursachten Aufwand zur Ermittlung von $C^*(S_i)$ (abhängig vom Typ der verwendeten Simulation) zu reduzieren oder (unabhängig von der Simulation) sogar zu vermeiden.

5.3.1 Vorzeitiger Simulationsabbruch

Die Gelegenheit zum vorzeitigen Abbruch des Simulationsvorgangs ergibt sich nur bei Verwendung von Packungsalgorithmen, die bereits während der Erzeugung der dichten Packung eine untere Abschätzung der Raumausfüllung und damit auch eine

obere Abschätzung des benötigten Containervolumens erlauben. Dies ist etwa bei einigen Varianten des Collective Rearrangement (siehe Kapitel 6.3.2) der Fall.

Sei $\tilde{C}_t(S_i)$ das während der Simulation zum Zeitpunkt $t \geq 0$ bekannte obere Limit des benötigten Volumens $C^*(S_i)$ eines Samples S_i . Mit Gleichung (5.8) und $V_{\text{akt}}(S_i)$ sowie $V_{\text{Wand}}(S_i)$ aus den Gleichungen (5.3) bzw. (5.4) ergibt dann

$$\tilde{L}_t(F_i) = w_i(\tilde{C}_t(S_i) - V_{\text{akt}}(S_i) - V_{\text{Wand}}(S_i)), \quad t \geq 0$$

die zum Zeitpunkt t aktuelle Obergrenze des Leervolumens der Packung. Sollte es nun ein t geben, sodass in der Rekursion (Gleichung (5.9)) der Fall $C(F_1, \dots, F_{i-1}) > \tilde{L}_t(F_i)$ eintritt, dann kann die Packungssimulation des Samples S_i zu diesem Zeitpunkt abgebrochen werden, da das tatsächliche Resultat der Simulation $C^*(F_i)$ nicht in der Berechnung benötigt wird. Es steht dann bereits vor Simulationseende fest, dass das Leervolumen dieser Fraktion F_i zu klein sein wird, um die vorherigen Fraktionen F_1, \dots, F_{i-1} zu beherbergen. Werden die Samples der Fraktionen sequenziell mit aufsteigender Fraktionsnummer simuliert, so ist der Wert $C(F_1, \dots, F_{i-1})$ zu Beginn der Simulation von S_i bekannt und kann als Abbruchkriterium in den Simulationsalgorithmus einfließen.

5.3.2 Präemptive Fraktionsberechnung

Die im vorhergehenden Absatz beschriebene Situation bietet darüberhinaus die Möglichkeit, die Simulation einer Fraktion präemptiv auszusetzen. Wenn nämlich für ein Sample S_i einer gegebenen Fraktion F_i schon vor Durchführung der Simulation klar ist, dass die Raumauffüllung von S_i mindestens $\tilde{\phi}$ beträgt, dann kann auch ohne explizite Kenntnis des maximal benötigten Volumens $\tilde{C}(S_i)$ mit Hilfe von Gleichung (5.10) durch die Umformungen

$$\begin{aligned} \tilde{L}(F_i) &= w_i(\tilde{C}(S_i) - V_{\text{akt}}(S_i) - V_{\text{Wand}}(S_i)) \\ &= w_i \left(\frac{V_{\text{akt}}(S_i) + V_{\text{Wand}}(S_i)}{\tilde{\phi}} - V_{\text{akt}}(S_i) - V_{\text{Wand}}(S_i) \right) \\ &= \frac{1 - \tilde{\phi}}{\tilde{\phi}} w_i (V_{\text{akt}}(S_i) + V_{\text{Wand}}(S_i)) \end{aligned}$$

das maximal mögliche Leervolumen einer Packung dieses Samples bestimmt werden. Für den Fall $C(F_1, \dots, F_{i-1}) > \tilde{L}(F_i)$ kann dann von einer Simulation des Samples S_i abgesehen werden.

Die präemptive Berechnung ist – im Gegensatz zum vorzeitigen Simulationsabbruch – unabhängig vom verwendeten Simulationsalgorithmus einsetzbar. Für polydisperse Kugelpackungen liefert – unter Berücksichtigung eines Toleranzbereichs – $\tilde{\phi} = 50\%$ einen sicheren Wert, unter Umständen kann $\tilde{\phi}$ jedoch deutlich höher angesetzt werden, da die Raumausfüllung polydisperser Packungen in der Regel diejenige monodisperser Packungen (ca. 64%, siehe Kapitel 2.2.1) übersteigt.

5.4 Wahl der Parameter

Für praxisrelevante Korngrößenverteilungen ist der Anteil der größten Partikel an der Gesamtpartikelzahl zwar äußerst gering, aufgrund des Volumenanteils sind diese Korngrößen jedoch kritisch für die Bestimmung der Packungsdichte, vgl. Abbildung 2.4. In diesem Abschnitt soll aufgezeigt werden, wie die Parameter n , s und a zu wählen sind, damit sichergestellt ist, dass genügend Kugeln aus dem Durchmesserintervall $\left[d_{\min}^{(n)}, d_{\max}^{(n)} \right]$ der letzten Fraktion F_n verwendet werden, um den kritischen Bereich hinreichend genau zu simulieren.

Das letzte Sample S_n besitzt nach Gleichung (5.7) das Gewicht

$$w_n = (1 - a)^{n-1},$$

wobei a der zu spezifizierende Anteil der aktiven Kugeln in den Samples S_1, \dots, S_{n-1} ist.

S_n wird aus s aktiven Kugeln gebildet, wegen der Abwesenheit der Wandkugeln gilt für den Anteil der Fraktion $h_0(F_n) = w_n$.

Für typische Bindemittel- oder Betonmischungen (in denen große Partikel aus F_n sehr selten sind) ist $h_0(F_n) < h_0(F_i) \forall i = 1, \dots, n-1$. Wegen dieses geringen Anteils und der Tatsache, dass aufgrund fehlender Wandkugeln $k_n = s > k_i \forall i = 1, \dots, n-1$, verkörpert jede der s Kugeln aus dem Sample S_n ein Korngrößenintervall $I_i, i = 1, \dots, s$, dessen Anteil

$$h_0(I_i) = \frac{w_n}{k_n} = \frac{(1 - a)^{n-1}}{s} \quad (5.11)$$

kleiner ist als der Anteil eines jeden Intervalls, das von einer Kugel aus einem Sample irgendeiner anderen Fraktion repräsentiert wird. Die Granularität dieser Einteilung kann als Qualitätsmerkmal der Approximation der Original-KGV betrachtet werden, denn ein kleinerer zu repräsentierender Anteil pro Kugel bedeutet im Umkehrschluss

eine größere Anzahl an Kugeln, die den am oberen Ende der Korngrößenskala liegenden Bereich abbilden. Dies erlaubt eine genauere Approximation der vorgegebenen Mischung, wobei gerade der Bereich nahe des Größtkorns kritisch ist: Diese Partikel üben aufgrund ihres deutlichen Volumenanteils an der Mischung großen Einfluss auf die Packungsstruktur aus, kommen zahlenmäßig jedoch so selten vor, dass eine Abbildung in der Simulation unter Beibehaltung der realen Mischungsverhältnisse äußerst schwierig ist.

Wie aus Gleichung 5.11 zu erkennen ist, wirkt sich die Anzahl s der Kugeln in der Simulation linear auf die Qualität aus (die Verdopplung von s bewirkt eine Halbierung des Anteils, den eine Kugel der letzten Fraktion repräsentiert), während die Anzahl der Fraktionen n wegen $0 < 1 - a < 1$ sogar exponentiell zu ihrer Steigerung beiträgt. Trotzdem sollte an dieser Stelle nicht vergessen werden, dass mit jeder zusätzlichen Fraktion auch der Fehler im Modell ansteigt, da die Simulation und insbesondere die Behandlung von Wandeffekt und Keilung nur Approximationen der Realität darstellen.

Es kann nun von außen eine Größe β vorgegeben werden, die den maximalen Anteil an der Gesamtmischung angibt, den eine einzelne Kugel im Sample repräsentieren soll (es gilt $0 < \beta \leq 1$). β spiegelt damit die (Mindest-)Anforderung an die Granularität wieder und kann z. B. durch den gemessenen (Anzahl-)Anteil der Partikel in der größten Siebklasse motiviert sein (wie im Beispiel in Abbildung 5.5).

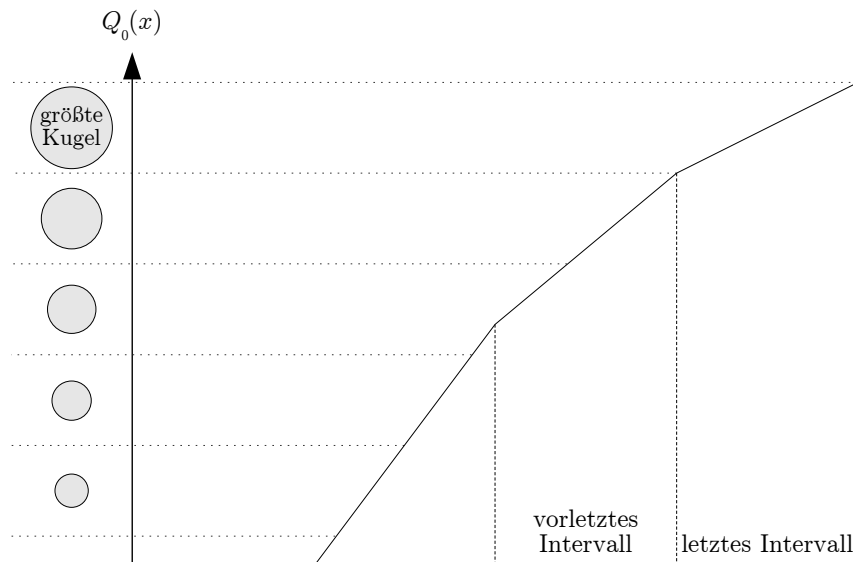


Abbildung 5.5: Zuordnung der s Kugeln in einem Ausschnitt der Verteilungssummenkurve. Das letzte Korngrößenintervall wird hier durch genau eine Kugel repräsentiert, auf die anderen Intervalle entfallen mehr Kugeln.

Damit jede Kugel aus S_n also höchstens einen vorgegebenen Anteil β an der Gesamt-

mischung verkörpert, muss

$$\frac{(1-a)^{n-1}}{s} \leq \beta$$

gelten. Daraus folgt für die erforderliche Anzahl Kugeln in diesem und damit in allen Samples

$$s \geq \left\lceil \frac{(1-a)^{n-1}}{\beta} \right\rceil.$$

Ein durch die spätere Anwendung des Modells bestimmtes Erfordernis ist die Limitierung der Kugeln pro Sample aufgrund der verfügbaren Rechenleistung. Wenn s fest vorgegeben ist, dann werden bei außerdem gegebenem a mindestens

$$n \geq \left\lceil 1 + \frac{\log(s\beta)}{\log(1-a)} \right\rceil$$

Fraktionen benötigt.

Andererseits können sowohl s als auch n als laufzeitbestimmende Faktoren vorgegeben sein, dann ergibt sich für den Anteil der aktiven Kugeln

$$a \geq 1 - (s\beta)^{\frac{1}{n-1}}. \quad (5.12)$$

5.5 Empirische Untersuchung des Modells und der Parameter

Der Einfluss der Modellparameter auf die Gesamtdauer der Simulationen aller Fraktionen einer Mischung zum einen und auf die Ergebnisqualität der berechneten Raumausfüllung zum anderen soll anhand einer Versuchsreihe mit verschiedenen Parameterkombinationen aufgezeigt werden.

Einbezogen in diesen Vergleich wird außerdem die Raumausfüllung einer KGV, die durch nur eine einzelne Simulation einer großen Stichprobe gewonnen wird, im Gegensatz zur Simulation mit mehreren Samples aus verschiedenen Fraktionen, wie sie das vorgestellte Modell vorsieht. Auf diese Weise soll gezeigt werden, dass die Simulationen der hierarchisierten Fraktionen gleichwertige Ergebnisse liefern wie eine einzelne Simulation der kompletten KGV, und das mit einer deutlichen Zeitersparnis. Ein Vergleich mit ausgewählten empirisch-analytischen Modellen wird in Abschnitt 5.6 aufgeführt, gefolgt von einer Gegenüberstellung mit experimentellen Ergebnissen in Abschnitt 5.7.

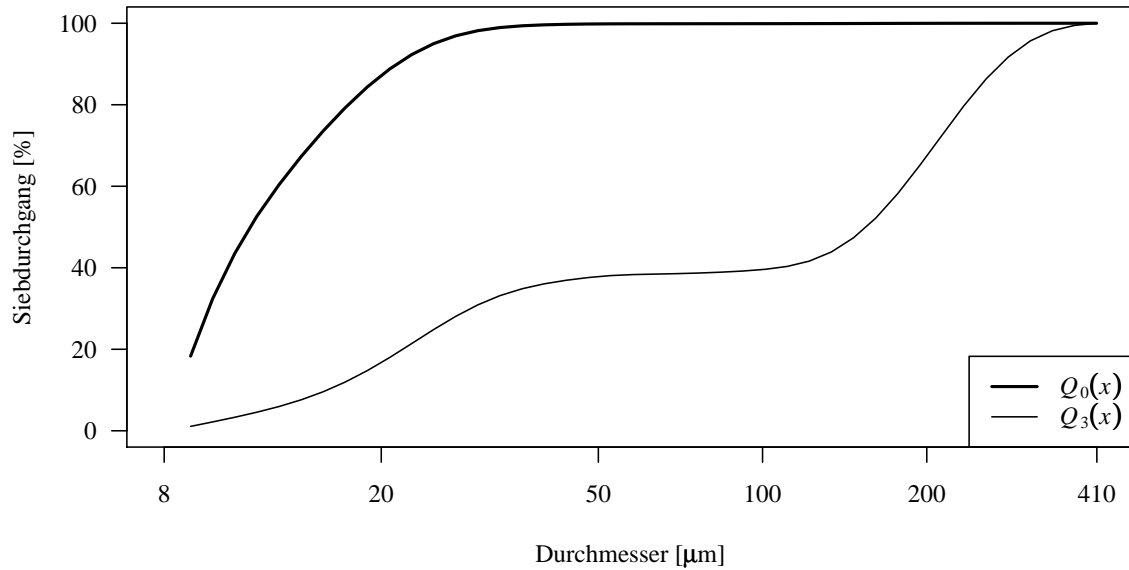


Abbildung 5.6: Die Korngrößenverteilung der in den Testreihen verwendeten Mischung.

Die KGV der zu untersuchenden Mischung ist in Abbildung 5.6 als Verteilungssumme sowohl der Partikelhäufigkeiten als auch der Volumenanteile dargestellt. Sie ist ein Ausschnitt der in Abbildung 2.4 vorgestellten Mischung und ist so aufgrund ihrer moderaten Breite noch als Ganzes durch ein umfangreiches Sample auf dem Rechner umsetzbar. Die Simulation benutzte $s^* = 1.073.850$ Kugeln und dient dem Vergleich als Referenz bzgl. Raumausfüllung und Ermittlungsdauer. Aus dieser Kugelanzahl ergibt sich $\beta = 1/s^* \approx 0,000000931$, dieser Wert soll auch mittels geeigneter Parameterwahl (siehe Abschnitt 5.4) im hierarchischen Modell erreicht werden. Die simulierte Packung entstand unter periodischen Randbedingungen (Erläuterung siehe Kapitel 6.2), um einen Wandeffekt an den Containerbegrenzungen zu vermeiden; einen visuellen Eindruck vermittelt Abbildung 5.7. Die gleiche Variante der Simulation wurde in dieser Versuchsreihe ebenfalls im hierarchischen Modell benutzt (sie wird später in Kapitel 7 diskutiert), die Resultate sollten jedoch qualitativ auch auf andere Simulationsverfahren übertragbar sein.

Der Anteil der aktiven Kugeln a steuert das Verhältnis zwischen Aufwand und Genauigkeit des Modells: Ein niedriger Wert sorgt für viele Wandkugeln, was eine genaue Approximation der Interaktionen der Partikel über Fraktionsgrenzen hinweg erlaubt. Ein hoher Anteil a hingegen ermöglicht es, mit einer geringen Anzahl an Samples S_i auszukommen, nimmt jedoch eine ungenauere Repräsentation der Wandkugeln in Kauf. Für die durchgeführten Versuche wurde jeweils das minimale a bestimmt, das Gleichung (5.12) erfüllt und damit in der letzten Fraktion den Anteil

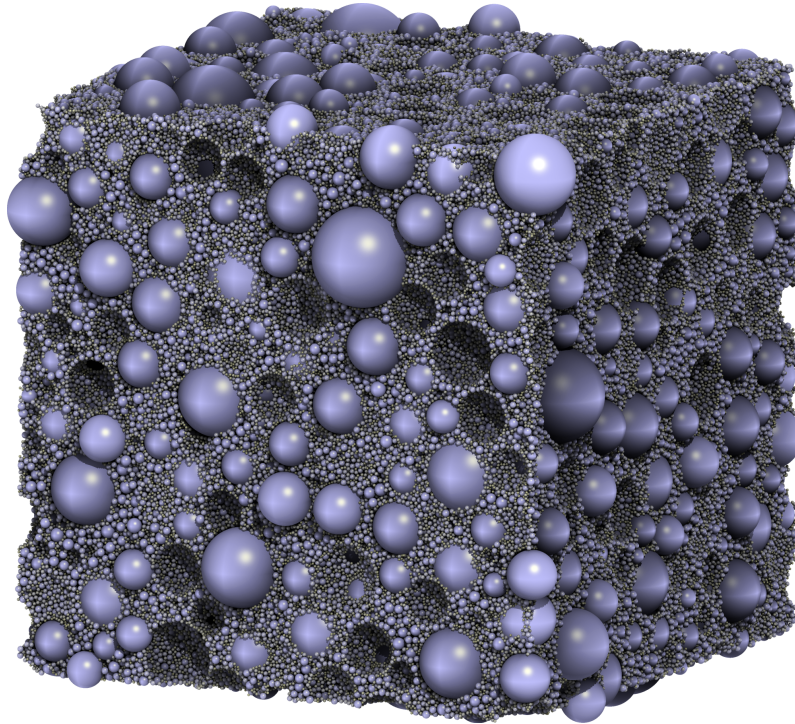


Abbildung 5.7: Die aus 1.073.850 Kugeln bestehende Packung³ der in den Testreihen verwendeten Mischung.

β pro Kugel gewährleistet, während s und n variiert wurden. Es ist hier also

$$a = 1 - (s \cdot 0,000000931)^{\frac{1}{n-1}}.$$

Abbildung 5.8 zeigt die aus jeweils 10 Versuchen ermittelten Durchschnittswerte der Testreihen. Die horizontale Gerade im Diagramm stellt dabei die Referenzraumausfüllung des kompletten Samples dar, sie beträgt $\phi = 79,8309\%$. Die Testreihe mit $s = 1.000$ erzielt Ergebnisse im Bereich 82,0–82,5% und weicht damit am deutlichsten von der Referenz ab. Damit scheint eine solch geringe Kugelanzahl pro Sample ungeeignet, um Mischungen mit hoher Polydispersität zu simulieren.

Überraschenderweise genügen bereits Kugelanzahlen ab 5.000 Kugeln, um dicht an die Raumausfüllung des einzelnen Samples heranzureichen. Wie der Abbildung 5.8 zu entnehmen ist, trägt eine Erhöhung von s über diese Anzahl hinaus lediglich zu einer Absenkung der Abweichungen zwischen den Ergebnissen für verschiedene Fraktionsanzahlen n bei. Die in dieser Hinsicht „konstantesten“ Ergebnisse erzielt im Vergleich die Testreihe mit $s = 50.000$ Kugeln pro Sample.

³Dieses und weitere in dieser Arbeit verwendete Packungsbilder wurden mit einer modifizierten Version von QuteMol [TCM06] erstellt.

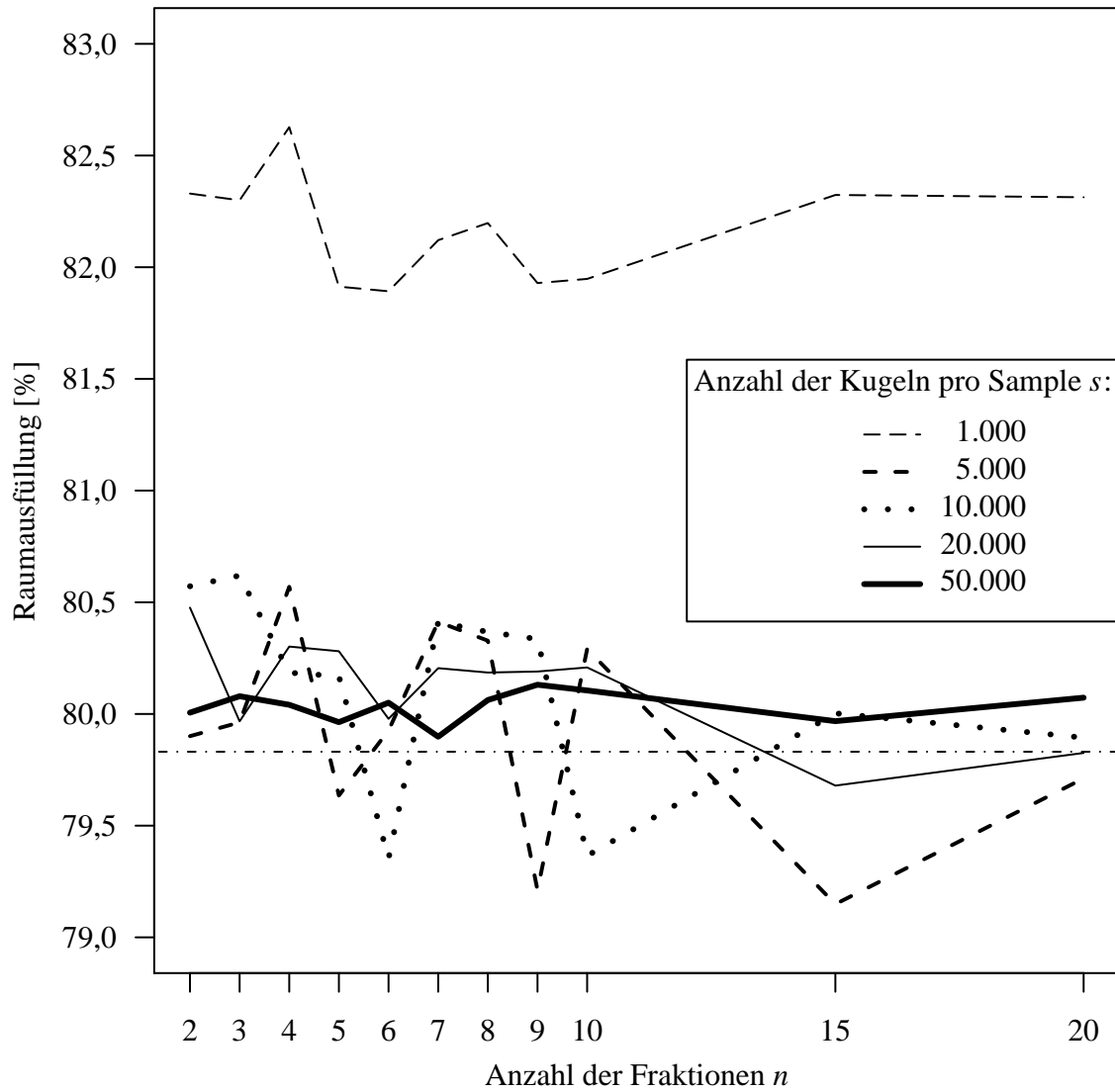


Abbildung 5.8: Vergleich der Modellergebnisse für unterschiedliche Fraktions- und Kugelanzahlen. Die horizontale Gerade markiert die Referenzraumausfüllung.

Auffällig ist außerdem, dass das hierarchische Modell die Raumausfüllung der Mischung – verglichen mit der Referenz – zumindest für große s meist leicht zu überschätzen scheint. Eine mögliche Erklärung liegt in der limitierten Anzahl an Wandkugeln und damit in der Approximation von Wandeffekt und Keilung (siehe Abschnitt 5.2) begründet.

Anzahl der Fraktionen n	Anzahl der Kugeln je Sample s	aktive Kugeln a [%]	Raumausfüllung \pm Standardabweichung [%]	rel. Laufzeit [%]
1	1.073.850	100,00	79,8309 \pm 0,0594	100,00
20	50.000	14,91	80,0729 \pm 0,2837	31,80
20	20.000	18,91	79,8255 \pm 0,5087	10,22
6	50.000	45,85	80,0505 \pm 0,2748	9,92
10	20.000	35,76	80,2083 \pm 0,5267	6,16
7	20.000	48,52	80,2050 \pm 0,4916	4,37
2	50.000	95,34	80,0059 \pm 0,2816	4,21
4	20.000	73,49	80,3017 \pm 0,4058	2,83
9	10.000	44,26	80,3352 \pm 1,2633	2,82
15	5.000	31,86	79,1486 \pm 1,6778	2,27
4	5.000	83,30	80,5692 \pm 1,9639	0,73
2	10.000	99,07	80,5716 \pm 1,0208	0,69
9	1.000	58,20	81,9291 \pm 1,6667	0,27
5	1.000	82,53	81,9130 \pm 1,1028	0,14

Tabelle 5.1: Vergleich der Performanz des Modells für verschiedene Parameter, die $\beta = 0,000000931$ gewährleisten.

Ausgewählte Zusammenstellungen der Parameter sind in Tabelle 5.1 aufgelistet, die Einträge liegen dabei nach absteigender Laufzeit vor, relativ zur Dauer der Simulation mit $s = 1.073.850$ gemessen. Die Laufzeit setzt sich jeweils aus den separaten Simulationszeiten der Fraktionen zusammen; häufig konnte die Simulation einzelner Fraktionen, wie in Abschnitt 5.3 dargestellt, abgebrochen oder übersprungen werden, daher steigt die relative Laufzeit bei gleicher Kugelanzahl s nicht linear mit der Anzahl der Fraktionen n an.

Die übrigen durch die in den Gleichungen 5.8 und 5.9 bzw. 5.10 gegebenen Berechnungsschritte des Modells tragen im Gegensatz zu den Simulationsprozessen nur unmerklich zur Gesamtzeit bei.

Die Tabelle führt außerdem die jeweils aus 10 Läufen ermittelte Raumausfüllung mitsamt Standardabweichung auf. Dabei weisen – wie schon innerhalb der Versuchsreihen für ein festes s und variables n , so auch hier für eine feste Kombination aus s und n – diejenigen Parameterkonstellationen die geringsten Abweichungen auf,

die die meisten Kugeln pro Sample benutzen. Die Parameter n und a hingegen spielen für diesen Aspekt nur eine untergeordnete Rolle. Allerdings sollte er nur als Nebeneffekt betrachtet werden, denn das eigentliche Ziel des hierarchischen Modells ist die Reduzierung der benötigten Samplegröße, da dies den größten Einfluss auf die Laufzeit ausübt.

Wie die Daten insgesamt zeigen, erlaubt das hierarchische Modell die Bestimmung der Raumauffüllung einer polydispersen Mischung in deutlich kürzerer Zeit als mit der Simulation der kompletten Mischung möglich ist. Dies wird durch eine Aufteilung der Mischung in Fraktionen erreicht, die separat voneinander und mit einer deutlich geringeren Kugelanzahl simuliert werden können. Da die Simulationszeit für die relevanten polydispersen Mischungen bei N Kugeln in der Komplexitätsklasse $O(N \log N)$ liegt, kann diese Fraktionierung den Aufwand drastisch reduzieren. Für Korngrößenverteilungen mit vergleichbarer Polydispersität wie die der Testmischung empfiehlt sich eine Kugelanzahl von mindestens 5.000 Kugeln pro Sample, zur Reduktion der Varianz sollten jedoch 50.000 Kugeln oder mehr benutzt werden.

Um Hinweise auf die Wahl der Parameter n und a zu erlangen, wurde ebenfalls die Raumauffüllung der kompletten KGV aus Abbildung 2.4 berechnet. Für diese Mischung ist

$$a = 1 - (s \cdot 4,55 \cdot 10^{-15})^{\frac{1}{n-1}}.$$

Die Ergebnisse in Tabelle 5.2 sind nach absteigendem a geordnet. Die unfraktionierten Simulation kann eine Mischung dieser Breite nicht verarbeiten, daher sind keine Referenzwerte angegeben. Die Ergebnisse legen jedoch nahe, dass $89\% \leq \phi \leq 90\%$ gilt. Für eine gute Schätzung der Raumauffüllung ϕ werden demnach $s \geq 50.000$ Kugeln je Fraktion benötigt, eine geringere Menge kann jedoch durch eine hohe Fraktionsanzahl $n \geq 30$ kompensiert werden. Auch sollten die Parameter so gewählt werden, dass $a \leq 0,6$, damit die die Korngrenzen überschreitenden Effekte in der Packung durch Wandkugeln abgebildet werden können.

5.6 Vergleich mit weiteren analytischen Modellen

Letztendlich muss sich das vorgestellte Verfahren auch gegen andere analytisch-empirische Modelle beweisen. Für einen weiteren Vergleich wurden daher das Linear-Mixture Packing Model (LMPM, siehe Kapitel 4.1.8) und das Compressible Packing Model (CPM, siehe Kapitel 4.1.9) als zwei populäre Vertreter dieser Klasse ausgewählt. Da die Simulation ideale Kugeln betrachtet, wurde im CPM der Kompaktionsin-

Anzahl der Fraktionen n	Anzahl der Kugeln je Sample s	aktive Kugeln a [%]	Raum- ausfüllung [%]	Standard- abweichung [%]
5	50.000	99,61	91,9206	0,5165
10	75.000	91,12	89,0896	2,9363
10	100.000	90,83	88,7505	1,4711
12	80.000	86,13	88,6712	2,2938
15	50.000	79,52	89,5927	1,7021
17	30.000	75,81	88,1085	3,0481
20	20.000	70,37	88,2667	3,1024
25	25.000	61,47	90,2040	0,8127
25	60.000	60,04	89,1384	1,5998
30	30.000	54,30	89,5088	1,7761
34	20.000	50,36	89,1305	1,5545
33	50.000	50,03	89,2460	1,0105

Tabelle 5.2: Vergleich der ermittelten Raumaufüllung der kompletten KGV für verschiedene Parameterkombinationen.

dex $K = \infty$ gewählt. Beide Methoden wurden so implementiert, dass sie statt auf experimentelle Vorarbeiten ebenfalls auf die Simulation zurückgreifen, um die Eigenpackungsdichten der Komponenten zu bestimmen. Zur Bestimmung der n Komponenten wurde das Korngrößenintervall der jeweiligen Mischung in n Fraktionen eingeteilt, die alle die gleiche Polydispersität $P_i = P^* = \sqrt[n]{P}$, $i = 1, \dots, n$ aufweisen, mit P als der Polydispersität der Gesamtmischung (siehe Definition 2.1.2.1). Jede Fraktion wurde mit $s = 50.000$ Kugeln simuliert. Auf diese Weise wird durch die Festlegung der Kugel- und Fraktionsanzahlen sichergestellt, dass allen Modellen ein vergleichbarer zeitlicher Aufwand für die Simulationen zu Verfügung steht.

Modell	beschränkte KGV		komplette KGV	
	Anzahl der Fraktionen n	Raum- ausfüllung [%]	Anzahl der Fraktionen n	Raum- ausfüllung [%]
unfraktioniert	1	79,8309	—	—
hierarchisch	6	80,0505	33	89,2460
LMPM	6	81,6694	33	88,7871
LMPM	42	79,0546	108	89,5217
CPM	6	82,6924	33	89,6559
CPM	42	82,7020	108	89,5493

Tabelle 5.3: Vergleich des hierarchischen Modells mit weiteren analytisch-empirischen Modellen.

Der Aufwand der Berechnung ergibt sich aus der Anzahl der Fraktionen n . Anhand vorheriger Ergebnisse wurde zunächst für die beschränkte KGV $n = 6$ und für die komplette KGV $n = 33$ festgelegt. Für diesen Aufwand liefert die vorgestellte hierarchische Methode gute Ergebnisse, während sowohl das LMPM als auch das CPM für die beschränkte KGV größere Abweichungen liefern und lediglich das CPM im Fall der kompletten KGV überzeugen kann. Für diese beiden Modelle wurde die Anzahl der Komponenten anschließend auf $n = 42$ (beschränkte KGV) bzw. $n = 108$ (komplette KGV) gesetzt, womit die Fraktionen dann den durch die Lasergranulometrie vorgegebenen Korngrößenintervallen entsprachen und somit die feinste gemessene Auflösung der KGV verarbeitet wurde. Zwar berechneten nun beide Modelle die Raumauffüllung der kompletten KGV innerhalb des Intervalls 89–90 %, doch bei der beschränkten KGV unterschätzte das LMPM die Raumauffüllung (bezogen auf den Referenzwert der unfraktionierten Simulation), während das CPM diese immernoch so deutlich überschätzte wie zuvor mit weniger Fraktionen. Aus diesen Ergebnissen wird ersichtlich, dass die präsentierte hierarchische Fraktionierung mit einem geringeren Aufwand auskommt, um die Raumauffüllung einer stark polydispersen Mischung zu ermitteln.

Als Einschränkung muss hier jedoch auf die Eignung der Simulation hingewiesen werden. Kommen für eine reale Mischung Effekte in Betracht, deren Auswirkungen nicht genügend quantifizierbar und somit nicht in der Simulation nachbildbar sind (z. B. Agglomeration, Auswirkungen der Kornform), so können möglicherweise deutlich bessere Ergebnisse durch den Einsatz analytisch-empirischer Modelle erzielt werden. Die von diesen verwendeten Eigenpackungsdichten spiegeln dann bereits die nicht exakt bekannten Effekte wider, ohne diese den einzelnen Einflussgrößen zuordnen zu können. Durch die dem jeweiligen Modell zugrundeliegenden Formeln wird dieser Einfluss indirekt bis zur Packungsdichte der resultierenden Mischung weitergereicht. Allerdings sind auch in diesem Fall Ausnahmen zu bedenken: Faktoren, die sich auf die Einzelkomponenten anders auswirken als auf deren Mischungen, können auch von den analytisch-empirischen Modellen nicht adäquat berücksichtigt werden. Ein Beispiel dafür wären zwei Komponenten, die gegensätzlich aufgeladen sind.

5.7 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

Die Eignung des hierarchischen Modells soll auch anhand der Übereinstimmung mit experimentell ermittelten Raumauffüllungen verifiziert werden. Hierfür standen Glaskugeln in 6 diskreten Größen zur Verfügung. Ihr Vorteil liegt in der runden

Gestalt, sodass mit keiner Diskrepanz zwischen Experiment und Simulation bezüglich der Partikelform gerechnet werden muss. Außerdem unterliegen Glaskugeln dieser Größen nicht der Agglomeration, die – wenn nicht in der Simulation berücksichtigt – ebenfalls zu größeren Abweichungen führen kann (siehe Kapitel 11).

Aus den Glaskugeln wurden verschiedene Mischungen zusammengestellt und die Raumausfüllungen von Palm mittels Pyknometerverfahren bestimmt [Pal09]. Drei der Mischungen folgen der Fuller-Verteilung, die anderen drei stellen Ausfallkörnungen dar und weisen Größenverhältnisse von 1:3,5 (Bidispers1) und 1:6,4 (Bidispers2) sowie 1:2,1:6,7 (Tridispers) auf. Die Korngrößenverteilungen sind in Tabelle 5.4 und Abbildung 5.9 aufgeführt, wobei die angegebenen Durchmesser Durchschnittswerte aus einer Stichprobe von jeweils 25 manuell nachgemessenen Glaskugeln darstellen und daher von den nominellen Kugelgrößen 0,5 mm, 1 mm, 1,5 mm, 3 mm, 6 mm und 10 mm abweichen.

Durchmesser [mm]	Masseanteile [%]						
	Fuller4	Fuller5	Fuller6	Bidispers1	Bidispers2	Tridispers	
0,444	37,95	26,59	20,56	34,41	—	34,05	
0,940	18,06	12,65	9,78	—	40,36	50,94	
1,552	16,13	11,30	8,74	65,59	—	—	
2,963	27,86	19,52	15,09	—	—	15,01	
6,003	—	29,94	23,18	—	59,64	—	
10,022	—	—	22,66	—	—	—	

Tabelle 5.4: Zusammensetzung der verwendeten Glaskugelmischungen.

Im Labor fanden jeweils 7 Messungen pro Mischung statt, die gleiche Anzahl wurde für die Simulationsläufe im Modell gewählt. Die Modellparameter sind in diesem Fall $s = 50.000$, $n = 6$ und $a = 0,510821$. Die in Abbildung 5.10 gegenübergestellten Ergebnis-Mittelwerte (mitsamt Indikatoren der Standardabweichungen) zeigen eine gute Übereinstimmung und belegen so die Tauglichkeit des Modells für die simulationsbasierte Bestimmung der Raumausfüllung.

Ein nicht unbedeutende Eigenschaft des hier entwickelten Modells ist die Austauschbarkeit der angekoppelten Simulation. Bislang wurden in diesem Zusammenhang keine weiteren Simulationsalgorithmen getestet, doch es ist leicht einzusehen, dass das hierarchische Modell für zwei unterschiedliche Simulationskomponenten die gleichen Ergebnisse liefert, sofern auch diese für jede Fraktion eine übereinstimmende Raumausfüllung ermitteln. Die bisher einzige implizierte Voraussetzung ist die Verwendung eines quaderförmigen Containers mit periodischen Randbedingungen, damit der Wandeffekt des Containers keinen Einfluss auf die Packung ausübt.

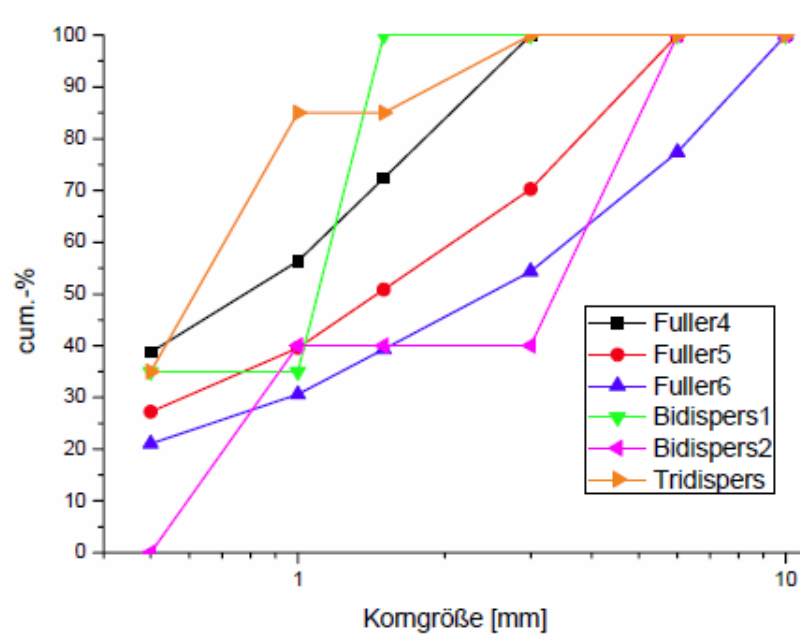


Abbildung 5.9: Korngrößenverteilungen der Glaskugelmischungen (aus [Pal09]).

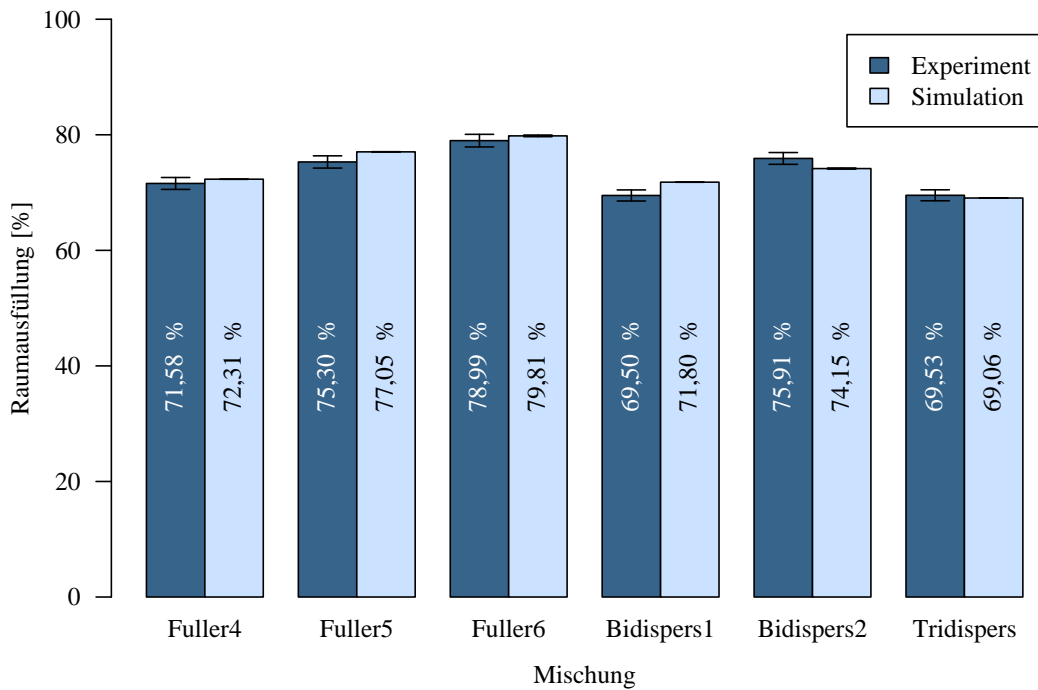


Abbildung 5.10: Vergleich der Raumausfüllung von Glaskugelmischungen im Experiment und in der Simulation.

Kapitel 6

Erzeugung von Kugelpackungen per Simulation

In den bislang in Kapitel 4 beschriebenen empirisch-analytischen Modellen wird eine Partikelmischung (bzw. deren Packung) als ein Kontinuum betrachtet, das aus mehreren Komponenten zusammengesetzt wurde und Teile der Eigenschaften dieser Ausgangsstoffe übernommen hat. Abgesehen vom erwähnten Defizit der starken Abhängigkeit von labortechnischen Voruntersuchungen sind diese Modelle durchaus sinnvoll, wenn ausschließlich die Raumauffüllung der Mischung von Interesse ist. Tiefere Einblicke in die Struktur einer Packung erlangt man jedoch erst, wenn die Betrachtungsweise vom Kontinuum auf die Partikelebene wechselt. In der Simulation wird jedes Partikel als eigenständiges Objekt modelliert. Die individuelle Bewegung jedes Objekts und seine Interaktion mit anderen Objekten lässt die Packung entstehen, ist aber auch der Grund dafür, dass die Laufzeit dieser Simulationsverfahren deutlich von der Anzahl der verwendeten Partikel abhängt.

Dieses Kapitel stellt verschiedene Methoden vor, mit denen Kugelpackungen simulativ erzeugt werden können. Am Ende des Packungsprozesses existiert eine dichte, überlappungsfreie Packung, die makroskopischen Eigenschaften der Packung (z. B. Raumauffüllung) sowie die mikroskopischen Eigenschaften aller Kugeln (Positionen und Radien) sind zugänglich.

Dem für Kugelpackungen nicht unwichtigen Aspekt des umschließenden Behälters widmet sich Abschnitt 6.2, die Vorstellung und Klassifikation der Simulationsverfahren folgt anschließend in Abschnitt 6.3. Zunächst werden jedoch in Abschnitt 6.1 Methoden vorgestellt, um trotz einer beschränkten Anzahl „virtueller“ Kugeln eine möglichst repräsentative Stichprobe der zu simulierenden Mischung zu gewinnen.

6.1 Sampling

Das Sampling der Korngrößen ist die nach bestimmten Regeln erfolgende Auswahl von Durchmessern aus der KGV mit dem Ziel, diese Durchmesser einer begrenzten Anzahl von Kugeln in der Simulation zuzuweisen. Das Problem besteht darin, diese Stichprobe so auszuwählen, dass sie möglichst repräsentativ für die zugrunde liegende KGV ist, d. h. dass sich die Verteilungen hinsichtlich ihrer statistischen Maßzahlen (Mittelwerte, Streuungen, etc.) in Sample und Ausgangsmenge nicht zu sehr unterscheiden, vor allem jedoch, dass von der Raumauffüllung der virtuellen Packung der Stichprobe auf die Raumauffüllung der realen verdichteten Schüttung geschlossen werden kann.

6.1.1 Simple Random Sampling With Replacement

Die einfache Zufallsauswahl, realisiert als Ziehen mit Zurücklegen (Simple Random Sampling With Replacement), gewährt jeder Korngröße x die Wahrscheinlichkeit $q_0(x)$ gezogen zu werden. Der Erwartungswert für die Anzahl der im Sample vorhandenen Kugeln mit Durchmessern aus einem Intervall $[x_u, x_o]$ beträgt $N \cdot q_0(x_u, x_o)$ bei einer Samplegröße von N Kugeln. Für genügend große N kann auf diese Weise ein repräsentatives Sample erzeugt werden. In der Praxis sind jedoch die sehr geringen Anzahlanteile großer Partikel in stark polydispersen Mischungen problematisch (vgl. Kapitel 2.1.2), die Varianz ist daher mit auf heutigen Computern realisierbaren Kugelanzahlen relativ hoch, so dass es vorkommen kann, damit nur feine und keine groben Partikel im Sample abzubilden.

6.1.2 Stratifizierung

Als varianzreduzierende Maßnahme bietet sich eine geschichtete Ziehung an: Die Stratifizierung unterteilt die Grundgesamtheit G (das Korngrößenintervall der Mischung) in verschiedene Schichten (Strata) $S_1 = [x_1, x_2], \dots, S_m = [x_m, x_{m+1}]$. Anschließend wird aus jeder Schicht eine separate Stichprobe gezogen. Diese Stichproben werden dann entsprechend des Anteils

$$\gamma_i = \frac{|S_i|}{|G|} = q_0(x_i, x_{i+1})$$

der jeweiligen Schicht an der Grundgesamtheit gewichtet. Auf diese Weise kann gewährleistet werden, dass auch Kugeln aus Intervallen großer Durchmesser im Sample vorkommen.

Bei gleich großem Umfang aller Stichproben $n_i := n$ für $i = 1, \dots, m$ spricht man von Gleichaufteilung. Bei einer proportionalen Allokation entsprechen die relativen Größen der Stichproben den Anteilen der zugeordneten Schichten an der Grundgesamtheit, damit gilt

$$n_i = N \cdot \gamma_i, \quad N = \sum_{i=1}^m n_i. \quad (6.1)$$

Betrachtet man polydisperse Korngrößenverteilungen, dann liegen zwei Varianten für die Einteilung der Schichten auf der Hand:

Stratifizierung nach den Durchmessern: Das Intervall $[x_{\min}, x_{\max}]$ der Korngrößen wird in m gleich große Abschnitte der Länge $(x_{\max} - x_{\min})/m$ eingeteilt, welche jeweils durch n_i Kugeln repräsentiert werden. Das i . Intervall lautet dann

$$[x_i, x_{i+1}] = \left[x_{\min} + (i-1) \cdot \frac{x_{\max} - x_{\min}}{m}, x_{\min} + i \cdot \frac{x_{\max} - x_{\min}}{m} \right],$$

sein Anteil an der Partikelanzahl der Gesamtmischung ist

$$\gamma_i = q_0 \left(x_{\min} + (i-1) \cdot \frac{x_{\max} - x_{\min}}{m}, x_{\min} + i \cdot \frac{x_{\max} - x_{\min}}{m} \right).$$

Eine proportionale Aufteilung nach Gleichung 6.1 liefert mit $n_i = N \cdot \gamma_i$ nicht notwendigerweise eine natürliche Zahl als Stichprobenumfang. Daher sollte N entsprechend groß gegenüber m gewählt werden, um an dieser Stelle Rundungsfehler zu minimieren.

Stratifizierung nach den Anteilen: Jede Kugel repräsentiert den gleichen Anteil an der Häufigkeitsverteilung der Partikel. Daher kann Gleichaufteilung mit $n = 1$ erfolgen und es gilt für jede Schicht $\gamma_i := \gamma = N^{-1}$. Die i . Kugel ($i = 1, \dots, N$) ist somit der Repräsentant des Intervalls

$$[x_i, x_{i+1}] = \left[Q_0^{-1} \left(\frac{i-1}{N} \right), Q_0^{-1} \left(\frac{i}{N} \right) \right].$$

Im Folgenden wird die Stratifizierung nach den Anteilen vorausgesetzt, da diese Methode keine Anforderungen an die Kugelanzahl N stellt.

Systematic Sampling

Das Systematic Sampling [MM44, Yat48] beruht auf der in einem wiederkehrenden Intervall durchgeführten Auswahl der Elemente aus einer geordneten Liste der Grundgesamtheit und entspricht damit einem Spezialfall der Stratifizierung mit $n_i := n = 1$ für $i = 1, \dots, m$. Bei einer Samplegröße von N Kugeln liefert die Stratifizierung $m = N$ Schichten, für das Systematic Sampling wird nun innerhalb des ersten Stratum ein „Startpunkt“ $p_1 \in [0, 1/N]$ gewählt. Die weiteren $N - 1$ Punkte sind damit gleichfalls festgelegt auf

$$p_i = p_1 + \frac{i-1}{N}, \quad i = 2, \dots, N.$$

Die Kugeldurchmesser d_i für $i = 1, \dots, N$ ergeben sich nun aus $d_i = Q_0^{-1}(p_i)$.

Das Systematic Sampling kann sich im Allgemeinen als problematisch erweisen, wenn die Anordnung der Elemente in der Grundgesamtheit ein wiederkehrendes Muster aufweist. Dies ist für eine Korngrößenverteilung, bei der die Partikeldurchmesser aufsteigend angeordnet sind, nicht offensichtlich. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Raumauffüllung eines so mit p_1 erzeugten Samples eine signifikante Differenz zur Raumauffüllung eines mit $\tilde{p}_1 \neq p_1$ erzeugten Samples aufweist, hängt von der Größe der Strata im Bereich großer Korndurchmesser ab, da diese Schichten einerseits die breitesten Durchmesserintervalle umfassen, und andererseits der Kugeldurchmesser mit der 3. Potenz zur Packungsstruktur und zur Berechnung der Raumauffüllung beiträgt.

Zur Bestimmung von p_1 kann entweder gleichverteilt aus dem Intervall $[0, 1/N]$ gezogen werden, so dass jedem dieser Durchmesser die gleiche Wahrscheinlichkeit gegeben ist, das Intervall mit einer Kugel im Gesamtsample zu repräsentieren; oder es kann eine Normalverteilung eingesetzt werden, sodass Durchmesser nahe des Medians der Korngrößen dieses Intervalls bevorzugt werden. In diesem Fall muss die Normalverteilung $N(\mu, \sigma^2)$ allerdings auf das angegebene Intervall eingeschränkt werden. Für die Parameter bieten sich $\mu = \frac{1}{2N}$ und $\sigma = \frac{1}{6N}$ an.

Individuelles Sampling in den Strata

Im Gegensatz zum Systematic Sampling werden die Samples der Schichten nun unabhängig voneinander gewählt. Damit sorgt diese Methode für eine stratifizierte Stichprobe im ursprünglichen Sinn von Abschnitt 6.1.2. Es gilt weiterhin der Spezialfall der Gleichaufteilung mit $n_i := n = 1$ für $i = 1, \dots, m$.

Das Sampling innerhalb der Schichten sollte für alle p_i identisch sein. Es bieten sich wiederum die Gleichverteilung und eine (wie für Systematic Sampling angegeben modifizierte) Normalverteilung auf jedem Intervall an.

Deterministisches Sampling

Dieser Sonderfall des Systematic Sampling verzichtet auf eine zufällige Auswahl des Startpunktes p_1 und setzt stattdessen ein präeterminiertes Quantil an. Hier kann z. B. der Median der Korngrößen im Intervall $S_1 = [x_{\min}, Q_0^{-1}(1/N)]$ gewählt werden, dann gilt

$$p_1 = \frac{1}{2N}.$$

Ein deterministisches Sampling kann aber auch auf unterschiedlichen, fest vorgegebenen Quantilen in allen Schichten basieren. Es bildet dann einen Spezialfall der Stratifizierung, gilt jedoch nicht als Systematic Sampling. Wird etwa aus jedem Intervall der charakteristische Durchmesser nach Goltermann (s. Kapitel 4.1.4) gewählt, also der Lageparameter einer entsprechenden RRSB-Verteilung (s. Kapitel 2.1.1), dann ist

$$d_i = Q_3^{-1}(Q_3(x_i) + 0,632 \cdot h_3(x_i, x_{i+1})).$$

Jeder Kugel wird auf diese Weise ein Durchmesser aus dem durch sie repräsentierten Intervall zugewiesen; auf einen Generator zur Erzeugung von Zufallszahlen kann während des Samplings verzichtet werden.

6.1.3 Vergleich der Samplingvarianten

Die beschriebenen Samplingmethoden wurden implementiert, um die Repräsentativität der Samples zu untersuchen, als Grundgesamtheit dient eine auf der Fullerkurve basierende KGV mit der Polydispersität $P = 684,75$ (siehe Kapitel 2). Die Abbildungen 6.1 bis 6.4 zeigen die Verteilungssummenkurven Q_3 einer Auswahl von je $N = 50.000$ Kugeln umfassenden Stichproben, die mit Hilfe unterschiedlicher Methoden gewonnen wurden: Simple Random Sampling With Replacement (SRSWR), deterministisches Sampling (DET), Stratifizierung (mit unabhängiger, auf Gleichverteilung basierender Auswahl in den Strata, STRAT) und Systematic Sampling (mit Gleichverteilung, SYS). Für Vergleichszwecke ist zudem in jedem Diagramm die Verteilungssummenkurve der Originalmischung aufgetragen.

Offensichtlich bestehen bei Verwendung der einfachen Zufallsauswahl (mit Zurückle-

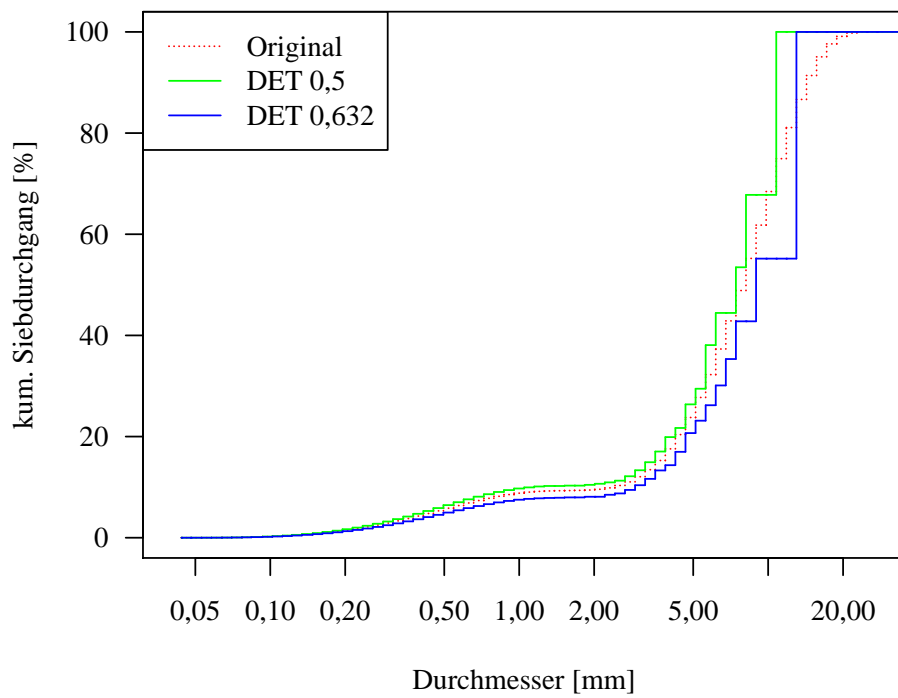


Abbildung 6.1: Deterministisches Sampling mit Median sowie 0,632-Quantil.

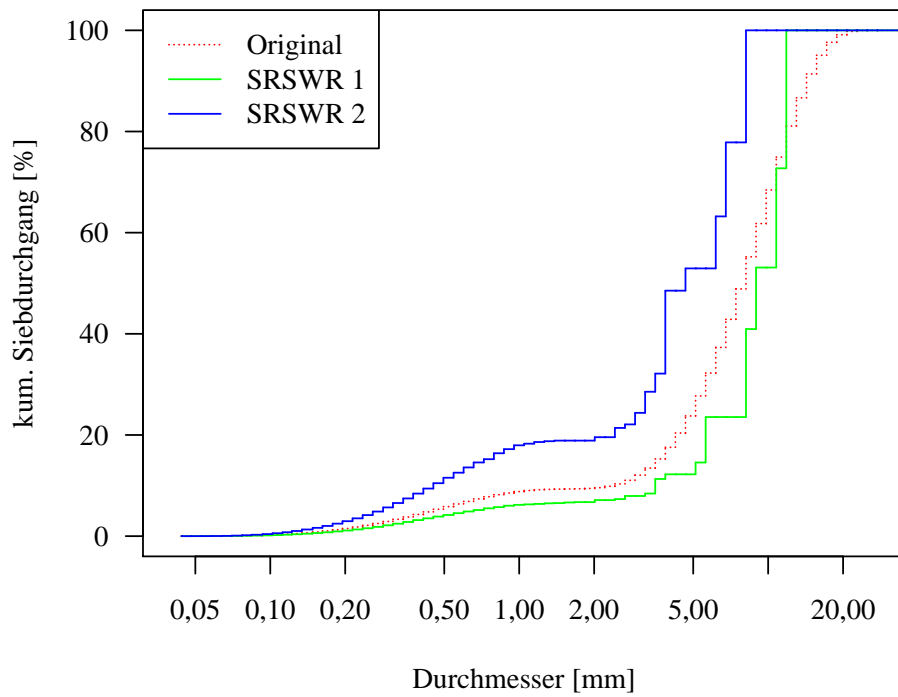


Abbildung 6.2: Zwei Realisierungen der einfachen Zufallsauswahl mit Zurücklegen.

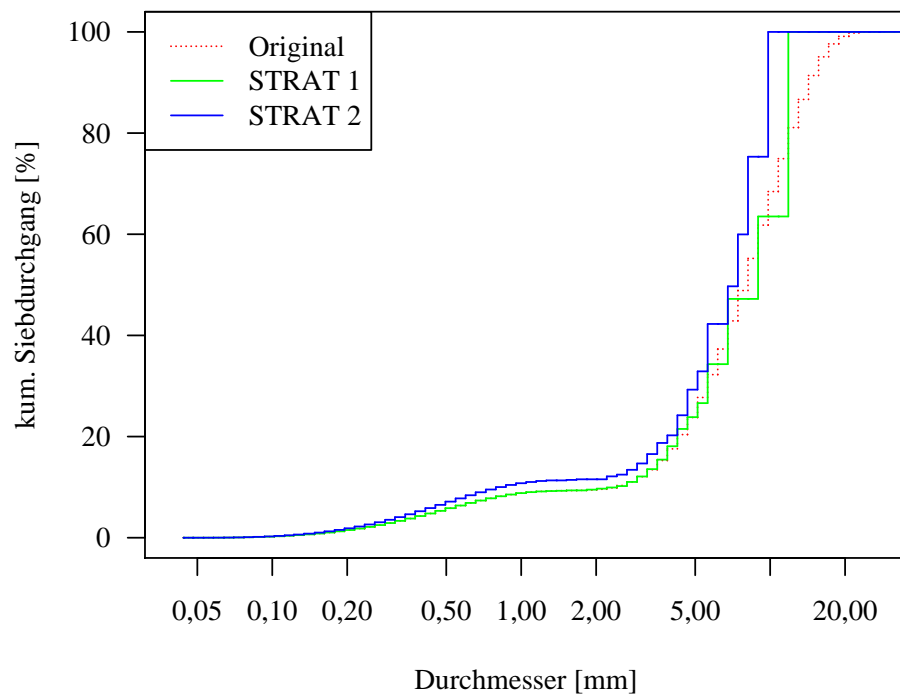


Abbildung 6.3: Zwei Realisierungen der Stratifizierung mit Gleichverteilung.

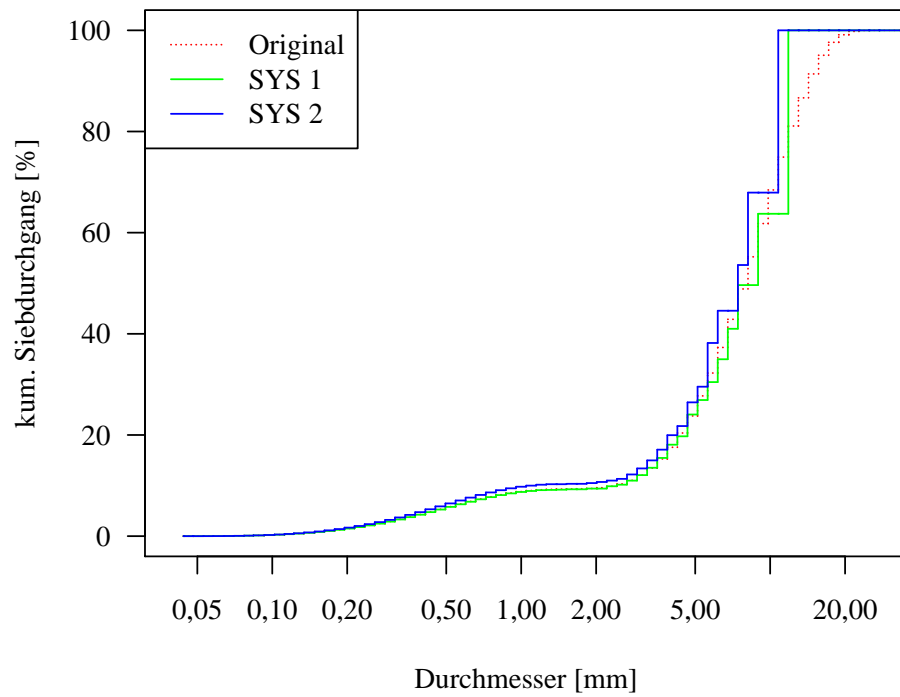


Abbildung 6.4: Zwei Realisierungen des Systematic Samplings mit Gleichverteilung.

gen) die größten Risiken für signifikante Abweichungen des Samples von der Originalmischung. Alle anderen vorgestellten Methoden sind zur Varianzreduktion geeignet, insbesondere auch das deterministische Sampling.

Die Diagramme zeigen außerdem die mit zunehmender Korngröße höhere Abweichung auf, dies gilt ausnahmslos für alle Varianten und deutet darauf hin, dass die Kugelanzahl $N = 50.000$ für diese Mischung nicht ausreicht; teilweise bildet nur eine einzelne Kugel den groben Korngrößenbereich > 10 mm ab.

Zur empirischen Untersuchung der Qualität der Samples wurden mit jeder Variante $M = 1.000$ Stichproben (Ausnahme DET: $M = 1$) erstellt und jeweils die Summen der relativen quadratischen Abweichungen in den Volumenanteilen mittels

$$T_i = \sum_{j=1}^k \frac{(s_{ij} - o_j)^2}{o_j}, \quad i = 1, \dots, M$$

erfasst. Dabei ist $k = 70$ die Anzahl der durch die $k + 1$ Siebgrößen vorgegebenen Durchmesserintervalle $[D_j, D_{j+1}]$, o_j der Anteil $h_3(D_j, D_{j+1})$ in der Originalmischung und s_{ij} der Anteil $h_3(D_j, D_{j+1})$ in der i . Stichprobe. In Tabelle 6.1 sind die Mittelwerte

$$\bar{T} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M T_i$$

für die Sampling-Varianten angegeben, die Versuche wurden jeweils mit $N = 50.000$ und $N = 1.000.000$ Kugeln in den Stichproben durchgeführt.

Sampling-Methode	\bar{T}	
	$N = 50.000$	$N = 1.000.000$
SRSWR	332,56	58,44
DET (0,5)	162,90	7,09
DET (0,632)	324,43	21,01
STRAT (gleichverteilt)	349,45	41,80
STRAT (normalverteilt)	185,86	9,87
SYS (gleichverteilt)	357,64	53,05
SYS (normalverteilt)	175,45	9,57

Tabelle 6.1: Empirische Untersuchung der Stichprobenqualität.

Neben der einfachen Zufallsauswahl schneiden auch die beiden mit Gleichverteilung arbeitenden Varianten sowie das deterministische Sampling mit dem charakteristischen Durchmesser schlecht ab. Durch Letzteres werden die feinen Partikel in der Stichprobe der Simulation unterrepräsentiert, während die beiden anderen Methoden

aufgrund der Gleichverteilung auch etliche Stichproben produzierten, in denen sehr starke Abweichungen zur Originalmischung auftraten. Am schlimmsten wirkt sich dies bei Verwendung des Systematic Sampling aus, da ein verhältnismäßig kleiner oder großer Wert für p_1 dort gleichzeitig alle anderen p_i negativ beeinflusst. Die auf Normalverteilung basierenden Varianten liefern im Gegensatz dazu Stichproben mit einer sehr guten Repräsentativität, für das Systematic Sampling kehrt sich der beschriebene Effekt ins Positive um, sodass in vielen der Stichproben eine Korngröße nahe des Medians in allen Strata als Kugeldurchmesser ausgewählt wurde, wodurch diese Samples sehr stark denen mit der Median-Methode des deterministischen Samplings gewonnenen ähneln.

6.2 Container

Als Container für simulierte Kugelpackungen sind prinzipiell alle geometrisch beschreibbaren Körper möglich, obwohl die Literatur nahezu ausschließlich Würfel oder Zylinder erwähnt. Letztere sind dann sinnvoll bzw. erforderlich, wenn die reale Entsprechung der zu simulierenden Packung ebenfalls in einem zylinderförmigen Behältnis existiert, etwa bei der Modellierung von Festbettreaktoren [AMSTC99, Lim02].

Die Benutzung eines Containerwürfels birgt den Vorteil, dass die enthaltene Packung als Volumenelement in Richtung aller drei Koordinatenachsen vervielfältigt werden kann, um so eine weitaus größere Packung darzustellen. Einem nahtlosen Übergang zwischen den würfelförmigen Packungskopien steht einzig der Wandeffekt entgegen. Dieser kann in der Simulation jedoch mittels **periodischer Randbedingungen** vermieden werden. Hierbei werden Überlappungen der Kugeln mit dem Containerrand zugelassen. Solche Randkugeln ragen auf der gegenüberliegenden Seite von außen wieder in den Container hinein. Sind die Kugeln beweglich, so können sie den Rand überqueren – sobald der Kugelmittelpunkt auf einer Seite den Container verlässt, gelangt er auf der gegenüberliegenden Seite wieder in diesen hinein. Abbildung 6.5 zeigt dies in einer schematischen zweidimensionalen Darstellung.

Können keine periodischen Randbedingungen vorgenommen werden, so existiert eine weitere Möglichkeit zur Vermeidung der vom Wandeffekt verursachten regelmäßigen Strukturen am Rand der Packung: Eine Schicht unregelmäßig platzierter und/oder verschieden großer Kugeln zur Bedeckung des eigentlich glatten Containerrandes dient dazu, den Innenseiten des Containers ein Profil zu verleihen, sodass sich zum Containerinneren hin keine Regelmäßigkeit in der Packungsstruktur aufbauen kann (siehe z. B. in [VB72, JPM92, Sto02]). Die Randkugelschicht zählt dabei zum

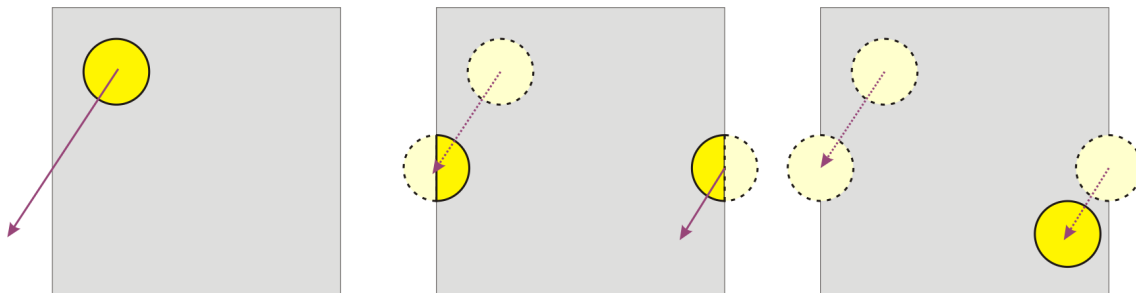


Abbildung 6.5: Verschiebung einer Kugel unter periodischen Randbedingungen über den Rand hinaus.

Containerrand, wird also in der Berechnung der Raumausfüllung nicht berücksichtigt.

6.3 Methoden zur Erzeugung von Kugelpackungen

Dieser Abschnitt gibt eine Übersicht über die verschiedenen Algorithmen zur simulativen Erzeugung von Kugelpackungen; der Fokus liegt auf solchen Methoden, die eine gegebene Vorschlagsverteilung realisieren können – zumindest im Rahmen der Möglichkeiten, die die beschriebenen Samplingmethoden für eine begrenzte Stichprobe bieten. Da es hier vornehmlich um den Prozess der Packungsentstehung geht, wird davon ausgegangen, dass die Simulation (polydisperse) Kugeln als Modell der realen Partikel einsetzt. Als Eingabe benötigen die Algorithmen die Korngrößenverteilung, die Ausgabe ist die dichte, zufällige Packung, d. h. die Kugelpositionen und -radien. Auf Basis dieser Daten lassen sich dann Eigenschaften wie Koordinationszahl und Raumausfüllung berechnen.

Neben den zahlreichen Beschreibungen einzelner Simulationsmethoden finden sich in der Literatur auch einige Übersichten, hier sei auf [NK92, AC95, Lim02, Sto02, Bag05] verwiesen.

6.3.1 Random Sequential Addition

Algorithmen des Typs Random Sequential Addition (RSA) zeichnen sich durch eine sequentielle Abarbeitung der Kugeln aus. Eine einmal platzierte Kugel kann später nicht mehr von ihrer Position weichen, was bedeutet, dass sich der Aufwand immer nur auf die jeweils aktuelle Kugel konzentriert. Eine weitere typische Eigenschaft dieser Methoden ist der sukzessive, konstruktive Aufbau der Packung, die sich zu jedem Zeitpunkt in einem überlappungsfreien Zustand befindet.

Das bereits in Kapitel 3.5 vorgestellte Random Sequential Adsorption kann als das einfachste und erste RSA-Modell betrachtet werden. Eine weitere, bereits 1968 von Tory et al. [TCW68] entwickelte Methode begründete die Sedimentationsalgorithmen (auch mit „Drop and Roll“ beschrieben). Hier werden Kugeln sukzessive über einem meist zylinderförmigen Container fallen gelassen. Stößt eine Kugel auf ein oder mehrere zuvor platzierte Kugeln, so rollt sie an diesen herab. Herabfallen und Rollen sind beendet, sobald die Kugel eine stabile Position erreicht; als solche dienen der Containerboden, drei unterstützende Kugeln oder zwei unterstützende Kugeln und die Containerwand. Abbildung 6.6 verdeutlicht die Methode im zweidimensionalen Fall. Soll dem Container keine Bedeutung zukommen, kann der Zylinder durch einen Quader mit periodischen Randbedingungen an den vertikalen Wandflächen ausgetauscht werden, siehe [VB72]. Sedimentationsalgorithmen werden in verschiedenen Variationen von etlichen Forschern benutzt [JT79, AC95, JM00, BBS02], in [SS95] wird ein Einblick in verschiedene Erweiterungen des „Drop and Roll“ gegeben.

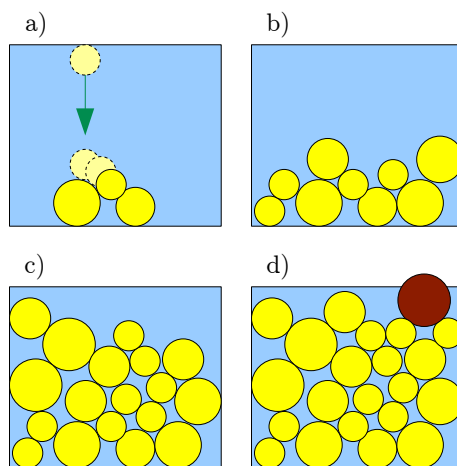


Abbildung 6.6: Sedimentationsalgorithmus: Eine Kugel trifft auf die Packung und rollt in eine stabile Lage (a). Die Packung wächst an (b-c), bis schließlich keine weiteren Kugeln mehr in den Container passen (d).

Adams und Matheson [AM72] entwickelten eine „Methode des kugelförmigen Wachstums“, bei der einem im Zentrum des Containers existierenden Kugelcluster (anfangs nur aus sehr wenigen Kugeln bestehend) genau an der Position eine neue Kugel hinzugefügt wird, die dem Zentrum am nächsten liegt und zugleich der neuen Kugel drei Kontakte zu existierenden Kugeln beschert. Der Cluster wächst so in alle Richtungen, allerdings weist die Packung eine inhomogene Verteilung der Raumauffüllung auf. Sie variiert mit dem reziproken Wert des Clusterradius und strebt für eine unendlich große Packung gegen 61 % [Ben72]. Matheson [Mat74] schlägt daher vor, die Packung nicht kugelförmig, sondern ausschließlich vertikal nach oben im Zylinder wachsen zu lassen, indem nur die oberste Schicht auf mögliche Positionen für neue Kugeln

geprüft wird. Auf diese Weise lassen sich mit der angegebenen Methode homogene Packungen erzielen, der Autor gibt eine Packungsdichte von 60,6 % für monodisperse Kugeln an, was auf eine lockere Packung (RLP, siehe Kapitel 2.2.1) schließen lässt. Auch weitere Autoren benutzen diese Idee [Pow80, JPM92, LO06]. Zudem wurde die oben genannte „Drop and Roll“-Methode in einigen Arbeiten ebenso auf kugelförmig wachsende Cluster angewandt, siehe z. B. [KI90, LS94b].

Eine andere RSA-Methode schlagen Feng und Owen [FHO03] vor: Das „Advancing Front“ genannte Verfahren beginnt ebenfalls mit einer zentralen Anordnung von drei Kugeln. Weitere Kugeln werden der Oberfläche dieses Clusters hinzugefügt, indem spiralförmig vorgegangen wird, zugleich muss eine neue Kugel genau zwei bereits platzierte berühren. Der Nachteil dieses Verfahrens (und in ähnlicher Form auch der bereits beschriebenen, vgl. Abbildung 6.6 d) besteht in einer möglicherweise nur geringen Raumauffüllung an den Wänden des Containers, da dort gegen Ende des Konstruktionsprozesses Lücken entstehen können, die zu klein für die zu platzierenden Kugeln sind. Aus diesem Grund entwickelte Bagi [Bag05] das von ihr als „Inwards Packing Method“ bezeichnete Verfahren. Es handelt sich gewissermaßen um eine rückwärts ablaufende „Advancing Front“-Variante. Die Kugeln werden zunächst an den Containerwänden positioniert, wobei wiederum spiralförmig vorgegangen wird. Schicht für Schicht wächst die Packung somit nach innen, das Problem des nicht durch Kugeln auffüllbaren Restvolumens beschränkt sich auf eine meist kleine Lücke im Zentrum des Containers. Ein Nachteil besteht allerdings in der a-priori-Festlegung der Containergröße. Ohne Vorkenntnis der Raumauffüllung ist es quasi unmöglich, ein definiertes Sample im Container unterzubringen, ohne die am Ende entstehende Lücke zu groß werden zu lassen. Eingesetzt werden kann diese Methode folglich immer dann, wenn keine exakten Vorgaben über die Anzahl und individuellen Radien der zu platzierenden Kugeln bestehen, sondern diese ad-hoc gemäß der Vorschlagsverteilung während der Packungskonstruktion generiert werden.

Die ebenfalls in die RSA-Klasse fallende Variante von Anishchik und Medvedev [AM95] verfolgt nicht das Ziel, eine Vorschlagsverteilung zu realisieren. Vielmehr geben die Autoren einen Algorithmus an, um sukzessive die Lücken zwischen initial platzierten Kugeln zu füllen, sodass die Raumauffüllung beliebig hoch getrieben werden kann (vgl. Apollonische Packungen in Kapitel 2.2.3). Eine ähnliche Methode beschreiben Sobolev und Amirjanov [SA04a, SA04b, SAHL04], jedoch erfolgt die Platzierung hier zufällig nach dem Random-Sequential-Adsorption-Prinzip.

Bedingt durch das sequenzielle Hinzufügen der Kugeln können durch RSA keine Brückenstrukturen entstehen (siehe Abbildung 6.7), die in der Realität die Raumauffüllung

füllung mindern. Dennoch zeigt sich anhand der in der Literatur angegebenen Ergebnisse, dass RSA-Algorithmen Kugelanordnungen mit typischer RLP-Packungsdichte erzeugen, dichtere Packungen lassen sich damit nicht realisieren. Dies begründet sich durch einmal entstandene Lücken, die unterhalb der anwachsenden Packungsoberfläche liegen und nicht mehr für nachfolgend hinzugefügte Kugeln zugänglich sind. Allerdings benötigen RSA-Verfahren im Vergleich zu den weiteren, nachfolgend vorgestellten Algorithmenklassen in der Regel die kürzeste Zeit.

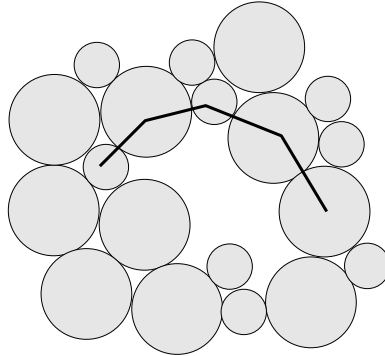


Abbildung 6.7: Brückenbildung in einer Scheibenpackung.

6.3.2 Collective Rearrangement

Wird die Anordnung aller Kugeln in jedem Iterationsschritt eines Algorithmus immer wieder (leicht) verändert, indem Kugeln bewegt werden, so handelt es sich um das Collective Rearrangement (CR). Im Gegensatz zum RSA kann bis zum Ende des Packungsprozesses jede Kugel bewegt werden, sodass die Möglichkeit besteht, auch zwischenzeitlich auftretende Lücken durch hineindrängende Kugeln wieder zu füllen. Diese hohe Dynamik erfordert jedoch einen deutlich höheren Rechenaufwand als bei RSA-Verfahren. Typisch für CR-Algorithmen ist die Relaxation bestimmter Anforderungen der Packung während des Packprozesses; so sind zunächst meist Überlappungen erlaubt, die dann sukzessive abgebaut werden.

Zur Erzeugung einer monodispersen Packung stellten Jodrey und Tory 1985 einen der ersten CR-Algorithmen vor [JT85]: Beginnend mit einer zufälligen, überlappenden Platzierung der Kugeln wird in jedem Iterationsschritt die größte Überlappung beseitigt. Diese kann durch Ermittlung des am dichtesten liegenden Paares aller Kugelmittelpunkte gefunden werden. Die beiden betroffenen Kugeln werden sodann entlang der durch die beiden Mittelpunkte laufenden Geraden in entgegengesetzte Richtungen um $l/2$ bewegt, wobei l die Weite der Überlappung angibt; damit ist diese Überlappung beseitigt. In jedem Iterationsschritt erfolgt außerdem eine leichte

Verkleinerung aller Kugelradien, sodass tatsächlich eine überlappungsfreie, dichte Packung entstehen kann. Eine für polydisperse Kugeln geeignete und auf die Benutzung auf Parallelrechnern erweiterte Variante dieser Methode stammt von Hlushkou [Hlu04, HSMT05, HKA⁺07].

Der Lubachevsky-Stillinger-Algorithmus [LS90, LSP91] verfolgt einen anderen Ansatz – hier existieren die Kugeln zunächst nur als Punkte im Container. Während des Packungsprozesses wachsen diese langsam an, ohne sich jedoch zu überlappen. Stattdessen drängen sich die in Kontakt tretenden Kugeln gegenseitig beiseite und nehmen so auch den noch freien Raum ein. Abbildung 6.8 stellt diesen Vorgang schematisch dar. Um eine beliebige Vorschlagsverteilung zu realisieren, müssen die Kugeln mit individuellen Wachstumsraten vergrößert werden, die proportional zu den gewünschten Durchmessern sind. Die finale Packung, in der kein Kugelwachstum mehr möglich ist, ohne eine Überlappung hervorzurufen, kann schließlich mit einem passenden Faktor skaliert werden, um die benötigte Korngrößenverteilung zu erreichen. Diese Methode wird auch von Meier et al. verwendet [MKS08].

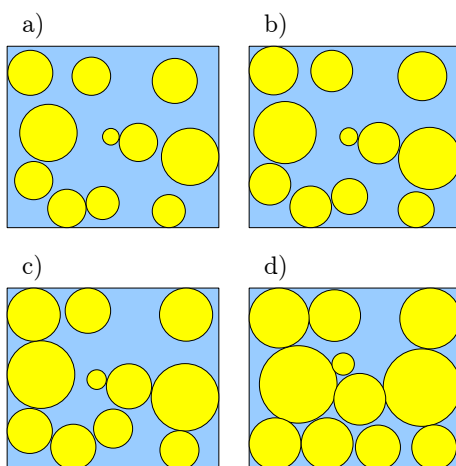


Abbildung 6.8: Zwischenschritte im Lubachevsky-Stillinger-Algorithmus.

Eines der meistverwendeten CR-Verfahren lässt wiederum Überlappungen bei der initialen Kugelplatzierung zu und nutzt diese, um Abstoßungen zwischen den Kugeln zu motivieren. Anders als bei Jodrey und Tory wird in einem Iterationsschritt nicht die größte Überlappung gesucht, sondern es werden nacheinander (in zufälliger Reihenfolge) alle Kugeln besucht und verschoben. Die betrachtete Kugel wird dabei soweit verschoben, dass ihre bisherige Überlappung beseitigt wird und sie die bisher überlappte Kugel exakt berührt. Sollte sie mehrere Kugeln gleichzeitig überlappen, so wird der Mittelwert der Verschiebevektoren verwendet. Auf diese Weise werden die Überlappungen nach und nach verringert und der Freiraum der Packung gefüllt (siehe Abbildung 6.9). Es können jedoch auch neue Überlappungen entstehen. Wenn

kein Fortschritt bei der Beseitigung der Überlappungen mehr erkennbar ist, dann schrumpfen die Kugeln ein wenig [HE98, BBS02, BS06], oder aber der Container wird vergrößert und jede Kugelposition mitskaliert [HEC99, LZZ08, ZL08]. Diese Iterationen werden so lange fortgesetzt, bis die Packung schließlich einen (nahezu) überlappungsfreien Zustand einnimmt.

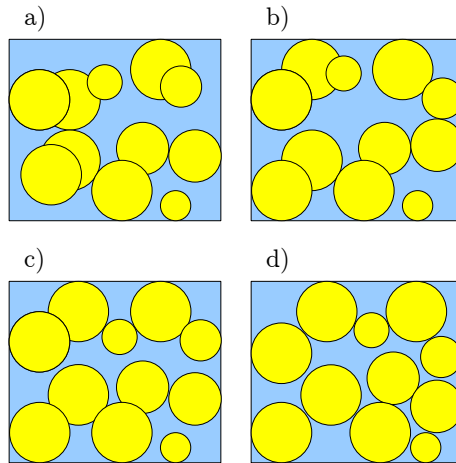


Abbildung 6.9: Entstehung einer dichten Packung beim Collective Rearrangement durch Beseitigung der Überlappungen.

Eine interessante Variante dieses Vorgehens geben Liu und Thompson [LT00] an, die der Überlappung an der Zielposition einer Kugel mehr Bedeutung beimessen: Die vorgesehene Verschiebung wird nur gestattet, wenn die Gesamtüberlappung dadurch tatsächlich verringert wird. Eine Verschlechterung (im Sinne der Überlappungsfreiheit) wird mit dieser Methode nicht akzeptiert.

Wu et al. [WFL03] benutzen ebenfalls das Prinzip der Überlappungsbeseitigung durch Translationen sowie in den Packungsprozess eingestreute Kugelverkleinerungen. Allerdings wird eine Kugel mit Radius r hier nicht aufgrund ihrer vorhandenen Überlappungen verschoben, sondern es wird innerhalb einer Distanz von $2r$ von ihrem aktuellen Mittelpunkt mittels eines Optimierungsverfahrens eine neue Position gesucht, die das überlappte Volumen der Kugel minimiert.

Bei Zhang [Zha06] wird ein CR-Algorithmus für die Generierung dichter Zylinderpackungen eingesetzt, der die Verschiebung eines Zylinders nicht durch seine Überlappungen motiviert. Stattdessen wird jeder Zylinder um einen kleinen, zufälligen Vektor verschoben. Dieses Vorgehen vermeidet zwar die für Zylinder im Vergleich zu Kugeln komplexere Kalkulation der Überlappung, die ungezielte Störung der Partikelposition sorgt jedoch dafür, dass dieser Prozess deutlich langsamer konvergiert als andere CR-Verfahren.

Clarke erweitert das Prinzip des variablen Größenverhältnisses von Container und Kugeln [CW87, CJ93]: Zunächst werden die Kugeln mit einer Raumauffüllung von $\phi = 50\%$ überlappend platziert, um anschließend die Überlappungen durch Verschiebungen der Kugeln zu beseitigen. Nach einer gewissen Anzahl an Iterationen wachsen die Kugeln jedoch an. Der durch die Überlappungen erzeugte Druck steigt an, die Kugeln drängen sich gegenseitig in noch dichtere Anordnungen. Nach einigen Iterationen werden die Kugelradien schließlich wieder verringert, und der Zyklus aus Verschiebungen, Radienvergrößerung, Verschiebungen und Radienverkleinerung wiederholt sich, wobei der Betrag der Radienänderung tendenziell verringert wird, sodass die Packung auch hier in einen überlappungsfreien, dicht gepackten Zustand konvergiert.

Ein gänzlich anderer Ansatz wird von Rouille et al. verfolgt [RMT90]: Eine Kugel ist im Ursprung positioniert, alle anderen liegen auf einer Kugelschale in einem Abstand zum Ursprung, der groß genug ist, um Überlappungen zu vermeiden. Dann wird eine vom Zentrum ausgehende Anziehungskraft simuliert, sodass sich die Kugeln geradewegs auf den Ursprung zubewegen. Trifft eine Kugel dabei auf eine weitere, so kann sie um diese herumrollen. In jedem Iterationsschritt wird jede Kugel nur eine kurze Distanz bewegt, der Prozess endet mit einer finalen Packung, wenn keine Kugel mehr (der zentralen Anziehungskraft folgend) bewegt werden kann. Die Autoren wenden den Algorithmus nur auf zweidimensionale Scheibenpackungen an, doch die Ergebnisse sind mit denen anderer Methoden vergleichbar.

6.3.3 Diskrete Elemente Methode

Die Diskrete Elemente Methode (DEM) wurde in den 70er Jahren von Cundall und Strack [CS79] entwickelt, um Probleme der Felsmechanik zu lösen. Sie beruht auf einem Vielteilchenmodell diskreter Körper und deren Translation, Rotation und Kontaktberechnung während eines Zeitschrittverfahrens. Ein großes Teilgebiet bildet die von Allen und Tildesley [AT89] begründete Molekulardynamik (MD), mit deren Hilfe Wechselwirkungen auf Atom- und Molekülebene simuliert werden können; MD-Simulationen werden in der Chemie und angrenzenden Gebieten zur Modellierung komplexer Systeme verwendet.

DEM-Verfahren können strenggenommen auch als Teilbereich der CR-Algorithmen aufgefasst werden, denn sie bilden einen dynamischen Prozess nach, was die mögliche Neuordnung bzw. Bewegung sämtlicher Partikel während der kompletten Laufzeit der Simulation mit sich bringt. Im Gegensatz zum CR sind hier jedoch

keine Relaxationen (wie Partikelüberlappungen) erlaubt, aus denen unrealistische Zwischenzustände folgen. Das Ziel ist vielmehr eine realistische Simulation des Packungsprozesses, was die Einbeziehung möglichst aller wirkenden Kräfte bedingt. Damit eignen sich DEM-Verfahren gut für die Abbildung interpartikulärer Kräfte (siehe Kapitel 11).

Die DEM ermöglicht zu jedem Zeitpunkt einen validen Packungszustand. Erkauft werden Realismus und Genauigkeit durch sehr kurze Zeitschritte, weshalb der Simulationsaufwand schon für kleine Packungen und wenige Sekunden simulierter Realzeit enorme Ausmaße annehmen kann. Dies schränkt die Eignung zur simulativen Bestimmung der Raumauffüllung enorm polydisperser und umfangreicher Partikelpackungen stark ein.

Von diesen Einschränkungen abgesehen ist die DEM ein veritables Werkzeug zur Simulation von diskreten Partikelmodellen etwa bei der Betrachtung von Partikelströmen oder Verdichtungsprozessen [Yu04]. In der Literatur finden sich zahlreiche Anwendungen [MLH00, LY00, FD00, FD03, Yu04, FDB⁺06, Hof06, SY07, XZ07, Faz07, VC07b], und auch einige kommerzielle Programmsysteme nutzen diese Technik [EDE09, PFC08]. Eine weitere Übersicht gibt Yu [Yu04].

6.3.4 Weitere Methoden

Neben den verschiedenen vorgestellten Verfahren gibt es noch weitere, weniger gebräuchliche Methoden, die nicht in die obige Klassifikation passen.

Anordnungsoptimierung

Das Problem der optimalen (also möglichst dichten) Anordnung dreidimensionaler Objekte ist das Pendant zu zweidimensionalen Zuschnittproblemen (engl.: Nesting), deren Ziel die Minimierung des Verschnitts ist [MC02]. Die Lösungsverfahren bedienen sich verschiedenster Optimierungsstrategien und können mitunter sehr aufwändig und damit langsam im Vergleich zu anderen Methoden sein, bieten dafür aber die Chance, sehr dichte, teils optimale Packungen zu erzeugen; allerdings sind die betrachteten Probleminstanzen eher klein. Außerdem geht durch die forcierte dichte Anordnung der Zufallscharakter der Packung verloren, sodass diese Methoden zur Simulation von Betonpackungen wenig geeignet zu sein scheinen.

Eine Übersicht der heuristischen Optimierungsverfahren zur Lösung dieser Probleme bieten Cagan et al. [CSY02], konkrete Beispiele liefern Sachdev et al. [SPGT98] mit

dem Einsatz asynchroner autonomer Agenten, Ikonen et al. [IBK⁺97], die einen Genetischen Algorithmus verwenden, sowie Georgalli und Reuter [GR08] mit dem Packen per Simulated Annealing. In den beiden erstgenannten Fällen sind die zu platzierenden Objekte von komplexer Gestalt, Konvexität ist keine Voraussetzung. Anwendungen mit polydispersen Kugelpackungen finden sich hingegen in [SYS03, ARA07], während sich Szabó et al. [SMC⁺07] der optimalen Anordnung monodisperser Kreispackungen widmen.

Tetraedernetze

Cui und O’Sullivan [CO03] benutzen Tetraedernetze, um eine überlappungsfreie Kugelpackung zu generieren, die dann als Ausgangspunkt einer DEM-Simulation dient. Der Algorithmus beginnt mit der zufälligen Erzeugung von Punkten im Container, für die dann eine Triangulation durchgeführt wird. Danach werden zunächst Inkugeln in die so erzeugten Tetraeder gesetzt, und schließlich weitere Kugeln an den ursprünglichen Punkten so platziert, dass sie die Inkugeln berühren. Abbildung 6.10 zeigt ein Beispiel in zwei Dimensionen.

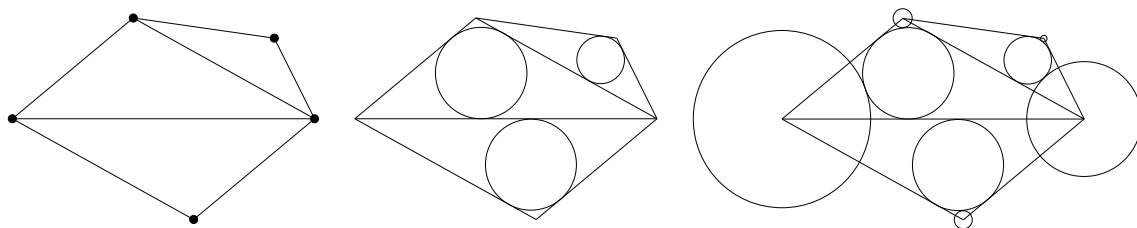


Abbildung 6.10: Erzeugung einer Scheibenpackung mit Hilfe eines Dreiecksnetzes (nach [CO03]).

Die Autoren stellen nach einem Vergleich mit einem Random Sequential Adsorption sowie dem CR-Algorithmus von Jodrey und Tory fest, dass die mit Tetraedernetzen generierten Kugelpackungen eine geringere Raumausfüllung erzielen als die mit den konkurrierenden Methoden erzeugte Packungen. Zu beachten ist außerdem, dass mit dem vorgestellten Verfahren keine Vorschlagsverteilung realisiert werden kann.

Eine neuere Arbeit von Jerier et al. [JIDD09] stellt eine Weiterentwicklung dieses Verfahrens vor. Hier werden die Kugeln nacheinander auf den Kanten, Ecken, Seitenflächen und in der Mitte der Tetraeder platziert, anschließend werden verbleibende Lücken mit Kugeln aufgefüllt, solange dies mit Kugelradien möglich ist, die innerhalb eines vom Benutzer angegebenen Intervalls liegen. So lassen sich zwar minimaler und maximaler Kugelradius festlegen, die resultierende Verteilung kann jedoch nicht vorausgesagt werden. Durch Vergleiche zeigen die Autoren, dass dieses Verfahren deutlich

schneller eine überlappungsfreie Kugelpackung liefert als ein CR-Algorithmus, aber erst ab einer gewissen Polydispersität ($P > 5$) an dessen resultierende Packungsdichte heranreicht. Dagegen ist die Koordinationszahl in mit Tetraedernetzen generierten Packungen recht hoch, da der Algorithmus die Kugeln explizit in Kontakt zueinander platziert.

Anwendungsmöglichkeiten dieses Verfahrens bieten sich dann an, wenn keine Vorschlagsverteilung angegeben ist und die Kugelradien lediglich innerhalb eines Intervalls liegen sollen. Jerier et al. geben als Beispiel das Füllen von Körpern beliebiger Geometrie durch Kugeln an, was zum einen die Benutzung solcher Körper in Simulationsumgebungen ermöglicht, die nur mit Kugeln umzugehen vermögen, oder zum anderen auch die Kollisionserkennung beschleunigen kann [WZ09].

Zellularautomaten

Ein zellulärer Automat (auch: Zellularautomat) besteht aus einem aus Zellen zusammengesetzten regulären Gitter, einer endlichen Zustandsmenge Z und einer Überföhrungsfunktion $f: Z^n \mapsto Z$. Außerdem ist für jede Zelle eine Nachbarschaft (der Größe n) definiert, üblicherweise besteht diese aus Zellen in der unmittelbaren Umgebung. Der Status einer Zelle ändert sich in diskreten Schritten durch Anwendung der Übergangsfunktion und in Abhängigkeit vom Status der Zellen in der Nachbarschaft.

Zelluläre Automaten eignen sich gut für dynamische Simulationen, etwa zur Beschreibung und Analyse der Durchströmung einer Partikelpackung; andere Beispiele umfassen die Verkehrssimulation oder Reaktions-Diffusions-Systeme [Wei98]. Insgesamt lässt sich mit ihnen ein sehr breites Feld an Aufgabenstellungen modellieren, solange die Probleme räumlich und zeitlich diskret behandelt werden können.

Zur Erzeugung von Partikelpackungen sind zelluläre Automaten dagegen nur bedingt geeignet. Gerade die hohe Polydispersität macht eine Eins-zu-Eins-Umsetzung der Partikel auf Gitterzellen unmöglich, sodass nur noch die Möglichkeit verbleibt, Partikel wachsen zu lassen, indem die Partikelsamen in verschiedene Zellen eingepflanzt werden (Generation der Startkonfiguration) und von dort jeweils immer mehr angrenzende Nachbarzellen vereinnahmen. Stoppt dieser Vorgang für alle so verbundenen Zellen, sobald eine der Zellen eine mit einem anderen Samen verbundene Nachbarzelle besitzt, dann modelliert der Zellularautomat den Wachstumsprozess des Lilypond-Modells.

Hybride Ansätze

Hybride Ansätze vereinen mehrere der obigen Verfahren, entweder als sukzessive, in sich abgeschlossene Phasen [FD03, LO09], oder abwechselnd in jedem Iterationsschritt [NK92, YMT96]. Das „Rampage“-Programm von Alberts [Alb05] gehört letzterer Variante an und sei stellvertretend für diese Klasse hier vorgestellt: Zunächst werden die Kugeln zufällig im Container positioniert, Überlappungen sind zugelassen und spielen bei der Platzierung keine Rolle. In den anschließenden Iterationsschritten folgt die Beseitigung der Überlappungen, indem für jede Kugel eine aus ihren eventuellen Überlappungen resultierende Kraft berechnet wird, die eine kurze Kugelbewegung bewirkt. Unmittelbar danach folgt eine Überprüfung der Stabilität der neuen Kugelposition. So kann eine Kugel fallen oder aber an Oberflächen anderer Kugeln abrollen, bis schließlich eine stabile Position (d. h. Unterstützung durch drei tieferliegende Kontakte) gefunden wird. Dieser Vorgang wird sukzessive für jede Kugel durchgeführt, bevor der nächste Iterationsschritt folgt. Zwischen den Iterationsschritten kann ein Vergrößern oder Kompaktieren des Containers erfolgen, um Schütteln zu simulieren. Die Beendigung der Simulation erfolgt bei Unterschreiten einer Schwelle für die Überlappungen.

6.4 Anwendungen

Neben der Erzeugung eines Modells für trockene Betonschüttungen sind die obigen Methoden auch für weitere Anwendungen von Nutzen. Die Geometrie einer zufälligen, dichten Kugelpackung ist u. a. in Festbettreaktoren zu finden. Hier strömt ein Fluid – etwa aus Substraten, Gasen oder in Bioreaktoren aus Mikroorganismen bestehend – durch eine partikuläre Packung aus Glas, Keramik, Kunst- oder Naturstoffen, die als Katalysator dient. Dieser Prozess kann mittels der lattice-Boltzmann-Methode in einer dynamischen Strömungssimulation abgebildet werden [Hlu04]. Die Struktur der Packung bleibt dabei konstant und muss vor Simulationsbeginn vorhanden sein bzw. generiert werden, wozu die in diesem Kapitel vorgestellten Algorithmen dienen können.

6.5 Aus der Literaturlauswertung resultierende Entscheidungen für die Implementierung

Aus der Bewertung des in den vorangegangenen Kapiteln dargestellten umfassenden Literaturüberblicks zur rechnergestützten Bestimmung der Raumauffüllung von Partikelpackungen erschließt sich die Simulation als geeignetste Methode. Zum einen kann sie dank des hier entwickelten RESOS-Algorithmus als Bewertungsmodul einer Fraktion im hierarchischen Ansatz eingesetzt werden, um so den Aufwand experimenteller Laborarbeit drastisch zu reduzieren. Zum anderen steht die Packungssimulation aber auch für sich allein als eine praktikable Lösung zur konstruktiven Ermittlung der Eigenschaften einer Partikelpackung.

Das nächste Kapitel berichtet ausführlich über die Implementierung der Packungssimulation in Form eines CR-Algorithmus. Diese Klasse von Simulationsverfahren birgt – wie oben beschrieben – den Vorteil, dichte Packungen und somit realistische Raumauffüllungen zu erzeugen. Die Komplexität und somit Ausführungsdauer der Simulation liegt zwar höher als bei RSA-Algorithmus, aber im Allgemeinen noch deutlich niedriger als für DEM-Anwendungen.

Eine für die Packungssimulation überaus wichtige Containerform ist der Würfel, ermöglicht er doch in Verbindung mit periodischen Randbedingungen die Simulation eines Volumenelementes, das in alle Achsenrichtungen hintereinandergereiht werden kann, wodurch die räumliche Beschränkung entfällt. In der Praxis wird hingegen sehr häufig ein (Mess-)Zylinder verwendet, um darin eine granulare Packung zu verdichten. Das in dieser Arbeit implementierte Simulationsprogramm unterstützt beide Containerformen. Für den Zylinder kann das Verhältnis von Höhe zu Durchmesser über eine Konfigurationsdatei (siehe Anhang A.1) vorgegeben werden. Periodische statt harter Randbedingungen können auf die gleiche Weise für alle Seiten des Würfels sowie für Grund- und Deckfläche des Zylinders konfiguriert werden.

Bei der Auswahl der in der Implementierung zu verwendenden Samplingmethode ist die Entscheidung zu Gunsten des deterministischen Samplings getroffen worden, wobei insbesondere die varianzreduzierende Eigenschaft von Vorteil ist. Aus bereits in Abschnitt 6.1.3 genannten Gründen wird hier der Median-Variante der Vorzug gegeben. Da die weiteren, oben beschriebenen Samplingmethoden für verschiedene Testfälle nützlich sein können, wurde für sie ebenfalls Programmcode entwickelt. Über Präprozessoranweisungen lässt sich die gewünschte Methode im Quellcode vor dem Kompilieren auswählen, voreingestellt ist jedoch das deterministische Sampling.

Kapitel 7

Implementierung der Packungssimulation

Dieses Kapitel beschreibt zum einen die Struktur des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationsprogramms sowie die Wechselwirkung seiner Komponenten, und gibt zum anderen über implementierungstechnische Details einiger der in den vorherigen Kapiteln eingeführten Methoden und Eigenschaften Auskunft.

7.1 Struktureller Aufbau des Simulationssystems

Das Simulationssystem ist objektorientiert modelliert und in der Programmiersprache C++ umgesetzt worden, daher finden sich einige Begriffe der realen Welt in den Klassennamen des Programmcodes wieder. Die aus Anwendersicht wichtigsten Objekte **Mischung**, **Fraktion** und **Packung** bilden das Rückgrat des Systems, ihre jeweilige Rolle im Gesamtkontext ist im Übersichtsdiagramm in Abbildung 7.1 dargestellt.

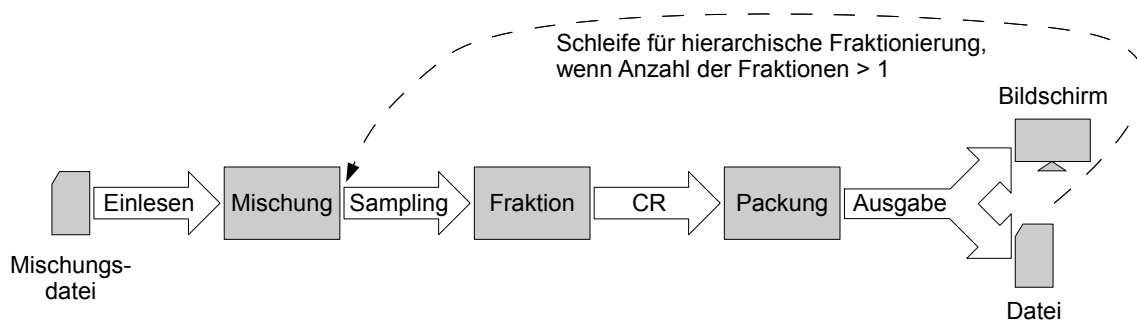


Abbildung 7.1: Die Hauptkomponenten des Programms im Zusammenspiel.

Nach dem Programmstart und der Verarbeitung der Konfigurationsdatei wird das

Objekt **Mischung** erzeugt, welches zu diesem Zweck Daten einer Mischungsdatei verarbeitet. Anschließend folgt die Konstruktion eines Objekts vom Typ **Fraktion**, es repräsentiert immer die aktuell betrachtete Fraktion – zu Beginn also die erste. Nach Ausführung eines Sampling-Algorithmus enthält dieses Objekt alle relevanten Daten über die Fraktion und hat den enthaltenen Kugeln zudem konkrete Durchmesser zugeordnet. Sobald diese vorbereitenden Maßnahmen abgeschlossen sind, können die Kugeln im Container platziert und mittels Collective Rearrangement zu einer dichten Packung angeordnet werden. Die Kugelmenge ist jetzt mit dem **Packung**-Objekt assoziiert, das außerdem sämtliche Kennzahlen der Packung verwaltet. Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt schließlich auf dem Bildschirm sowie optional in einer Datei. Sollte die gewünschte Anzahl der Fraktionen noch nicht erreicht worden sein, so wird die Fraktionsnummer inkrementiert und ein Sprung zum Beginn des Samplings lässt die gesamte Prozedur auf die nächste Fraktion wirken.

Eine andere Betrachtungsweise für das Grundgerüst stellt sich in Algorithmus 7.1 dar, der als Ausschnitt der äußeren Kontrollstruktur, also gewissermaßen des Hauptprogramms, zu verstehen ist. Die angegebenen Variablen haben die gleiche Bedeutung wie in Kapitel 5.

Algorithmus 7.1 Ausschnitt aus der äußeren Kontrollstruktur.

Benötigt: $n =$ Anzahl der Fraktionen

```

 $V_{\text{gesamt}} \leftarrow 0$ 
for  $i = 1, \dots, n$  do
    Fraktion  $F_i$  mit Sample  $S_i$  erzeugen
    if  $i > 1 \wedge C(F_1, \dots, F_{i-1}) > \bar{L}(F_i)$  then // keine Simulation nötig
         $C(F_1, \dots, F_i) \leftarrow C(F_1, \dots, F_{i-1}) + V_{\text{akt}}(S_i)$ 
    else
        Simulation initialisieren (Phase 1: Kugelplatzierung)
        Simulation starten mit Abbruchparameter  $C(F_1, \dots, F_{i-1})$  (Phase 2: CR)
        Packung auswerten
        Daten der Packung ausgeben bzw. in Datei schreiben
    end if
     $V_{\text{gesamt}} \leftarrow V_{\text{gesamt}} + V_{\text{akt}}(S_i)$ 
end for
 $\phi \leftarrow V_{\text{gesamt}} / C^*(F_1, \dots, F_n)$ 
Ausgabe der Ergebnisse

```

7.2 Ermittlung der Eigenschaften von CR-Prozess und Packung

Die folgenden Abschnitte dienen zur Erläuterung der Implementierung einiger – teils bereits eingeführter – Kennzahlen, die zur Bewertung sowohl des Simulationsverlaufs als auch der fertigen Packung dienlich sind.

7.2.1 Überlappungsrate

Definition 7.2.1.1 *Die Überlappungsrate gibt die relative Stärke der gegenseitigen Überlappung zweier Kugeln an, indem die Überlappung zur Radiensumme der Kugeln ins Verhältnis gesetzt wird. Sie beträgt*

$$o_{ij} = \begin{cases} \frac{r_i + r_j - |\vec{x}_i - \vec{x}_j|}{r_i + r_j}, & \text{für } r_i + r_j > |\vec{x}_i - \vec{x}_j| \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit den Kugelradien r_i und r_j und den Mittelpunkten \vec{x}_i und \vec{x}_j . Seien $o = \langle o_{ij} \rangle$ und $o_{\max} = \max o_{ij} \forall i \neq j$ die mittlere bzw. die maximale Überlappungsrate der Packung.

Das Unterschreiten einer gewissen Toleranzschwelle o_{Ziel} der (mittleren oder maximalen) Überlappungsrate dient als Abbruchkriterium der Packungssimulation; die Packung wird zu diesem Zeitpunkt als quasi überlappungsfrei angesehen. Um den Fehler bezüglich der erreichten Packungsdichte abzuschätzen, kann ermittelt werden, welche Auswirkungen die verbleibenden Überlappungen haben. Hierfür lässt sich folgende Überlegung anstellen: Zur Beseitigung der Überlappungen kann der Container vergrößert werden, oder – analog dazu – jede Kugel schrumpfen. Dazu muss jeder Kugeldurchmesser mit dem Faktor $1 - o_{\max}$ multipliziert werden. Dies wirkt in der dritten Potenz auf das Volumen, sodass

$$\phi^* = \phi(1 - o_{\max})^3 \quad (7.1)$$

die Raumauffüllung einer überlappungsfreien Packung ergibt. Für große Packungen ist es sinnvoller, o statt o_{\max} für das Abbruchkriterium zu betrachten. Eingesetzt in Gleichung 7.1 ergibt sich dann die Raumauffüllung einer Packung, bei der die meisten Überlappungen beseitigt sind, siehe Abb. 7.2.

Uri et al. wählen für das Rampage-Modell eine Toleranzschwelle von $o_{\text{Ziel}} = 0,005$ für eine monodisperse Packung [UWA+06], He et al. betrachten eine Packung mit

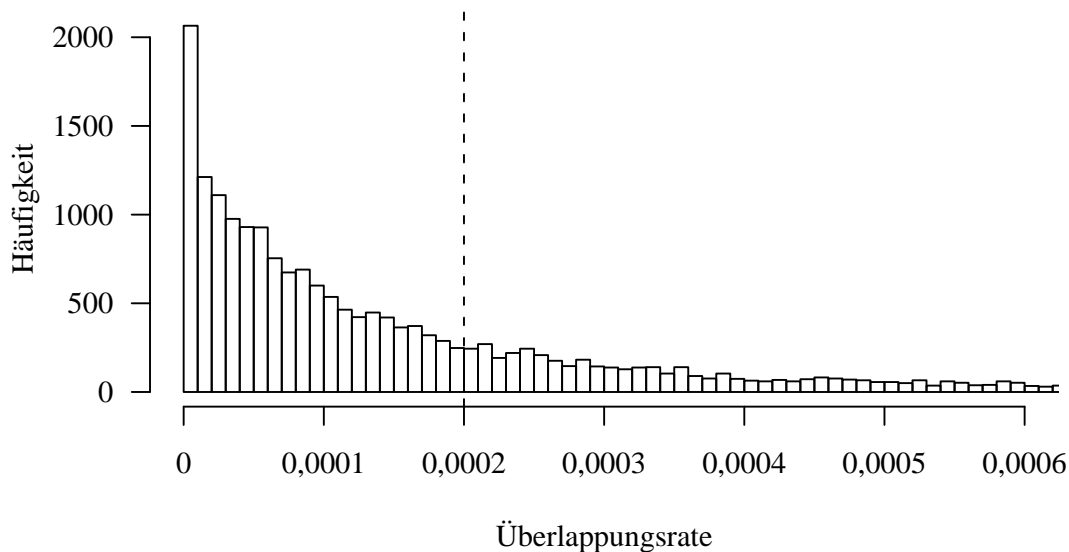


Abbildung 7.2: Ausschnitt aus dem Histogramm der Überlappungsraten einer Packung mit 10 000 Kugeln und 19 277 Überlappungen. Die maximale Überlappungsrate beträgt $o_{\max} = 0,0076696$, die gestrichelte Linie markiert die Schwelle $o_{\text{Ziel}} = 0,0002$.

$o_{\text{Ziel}} = 0,0005$ [HE98] bzw. $o_{\text{Ziel}} = 0,0002$ [HEC99] als überlappungsfrei, bei Nolan und Kavanagh gilt $o_{\text{Ziel}} = 0,002$ [NK92]. In in dieser Arbeit entwickelten Simulationsprogramm ist die Zielüberlappungsrate über die Konfigurationsdatei (siehe Anhang A.1) frei wählbar, der voreingestellte Wert beträgt $o_{\text{Ziel}} = 0,0002$. Damit ist $\phi^* \approx 0,9994\phi$ und wegen $0 < \phi < 1$ wird die Raumauffüllung um maximal 0,06 Prozentpunkte überschätzt, was angesichts möglicher Messfehler bei der Bestimmung der Korngrößenverteilung und vorgenommener Modellvereinfachungen (Kugel als Kornform) nicht ins Gewicht fällt.

7.2.2 Koordinationszahl

Die Koordinationszahl einer simulierten Kugelpackung ist abhängig von der Definition von „Kontakt“, also dem maximalen Abstand zweier Kugeln D_ϵ , bis zu dem man unter Berücksichtigung der Modellvereinfachungen von einer Berührung der Kugeln spricht. In der Theorie ist $D_\epsilon = 0$, doch für die Simulation mittels CR muss ein größerer Wert gewählt werden, da der Algorithmus in der Regel statt echter Kontakte leichte Überlappungen produziert; allerdings kommen ebenso minimale Abstände vor, die numerischen Ungenauigkeiten geschuldet sind. In der Literatur werden darüber

nur wenige Angaben gemacht, Yang et al. etwa werten für monodisperse Packungen mit Kugeldurchmesser d einen Abstand bis $D_\epsilon = 0,005d$ als Kontakt [YZY03]. Im vorliegenden Simulationsprogramm ist $D_\epsilon = 0,006(r_i + r_j)$ für zwei Kugeln mit Radien r_i bzw. r_j implementiert.

7.2.3 Paarkorrelationsfunktion

Die Paarkorrelationsfunktion (siehe Kapitel 2.2.2) kann für eine simulierte Packung bestimmt werden, indem ein Histogramm der Mittelpunktsabstände aller Kugelpaare (k_j, k_l) mit $j \neq l$ angelegt wird. Ein Parameter s bestimmt die Klassenbreite bezogen auf den kleinsten Durchmesser aller Kugeln d_{\min} , zugleich sind die Klassenmittelpunkte r_i der K Klassen so auf $0, s, 2s, \dots, (K-2)s, (K-1)s$ festgelegt. Die i . Klasse enthält somit die Anzahl aller Kugelmittelpunktpaare mit Abstand δ , für die

$$r_i - \frac{s}{2} \leq \delta < r_i + \frac{s}{2} \iff (i-1,5)s \leq \delta < (i-0,5)s, \quad i = 1, \dots, K$$

gilt. Mit der so bestimmten Klassenhäufigkeit $n(r_i)$ ergibt die relative Häufigkeit der einzelnen Mittelpunkte der mit r_i identifizierten Klasse dann $n(r_i)/(N/2) = 2n(r_i)/N$, und das Volumen der zugehörigen Kugelschale mit Dicke s beträgt

$$V_S(r_i) = \frac{4}{3}\pi \left(r_i + \frac{s}{2}\right)^3 - \frac{4}{3}\pi \left(r_i - \frac{s}{2}\right)^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\left(r_i + \frac{s}{2}\right)^3 - \left(r_i - \frac{s}{2}\right)^3\right)$$

für $i = 2, \dots, K$. Als Ausnahme gilt für die Kugelschale der 1. Klasse $V_S(r_1) = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{s}{2}\right)^3$, da negative Abstände zwischen den Kugelmittelpunkten nicht existieren. Ihre tatsächliche Klassenbreite beträgt also $s/2$.

Aus der Gleichung (2.2) zusammen mit der Anzahl der Mittelpunkte pro Container-volumen $a = N/V_C$ kann die Paarkorrelationsfunktion durch

$$g(r_i) = \frac{\frac{2n(r_i)}{N \cdot V_S(r_i)}}{a} = \frac{n(r_i)}{N \cdot \frac{2}{3}\pi \left(\left(r_i + \frac{s}{2}\right)^3 - \left(r_i - \frac{s}{2}\right)^3\right) \cdot a}$$

an den Punkten r_i bestimmt werden, diese Daten exportiert das Simulationsprogramm in eine csv-Datei. Ein externes Tool kann dann eine Kurve wie in Abb. 2.6 oder Abb. 7.3 erzeugen, die Werte zwischen den r_i sind per Interpolation bestimmt.

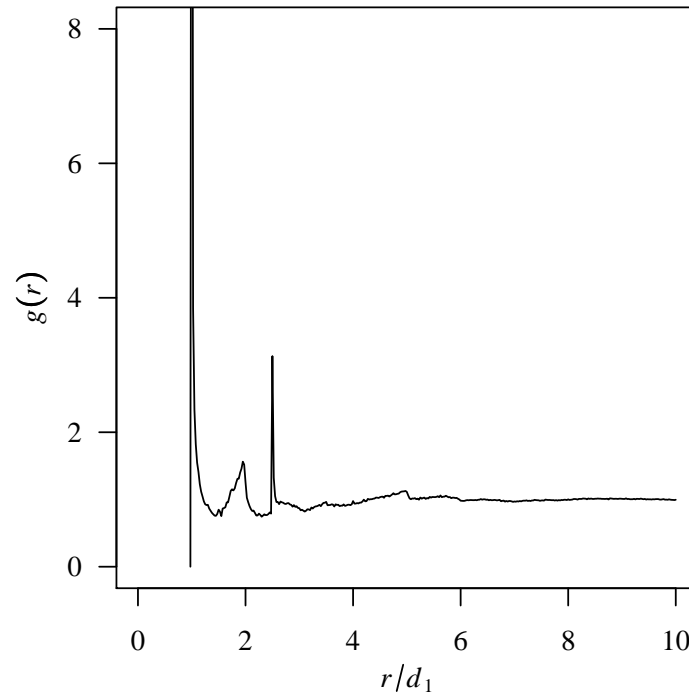


Abbildung 7.3: Beispiel einer Paarkorrelationsfunktion, hier für eine bidisperse Packung mit $d_1 = 1$ und $d_2 = 4$.

7.2.4 Weitere Eigenschaften

Zur Berechnung der Oberfläche O_i einer Kugel k_i wird die Formel

$$O_i = \pi d_i^2$$

benutzt, dabei ist d_i der Durchmesser von k_i . Die **volumenbezogene spezifische Oberfläche** der Packung wurde bereits in Definition 2.2.1.4 vorgestellt und kann wie dort angegeben ermittelt werden.

Für die Bestimmung der **Packungsdichte** einer Kugelpackung gilt die in Definition 2.2.1.1 angegebene Berechnungsvorschrift.

Die Berechnung des **gewichteten durchschnittlichen Mittelpunktes** erfolgt mit der in Definition 2.2.2.2 angegebenen Formel.

7.3 Ablauf der Simulation

Nachdem in Abschnitt 7.1 die Einbettung der eigentlichen Simulation in das Gesamtsystem dargestellt wurde, folgt nun eine Beschreibung der für die Kugeln

relevanten Vorgänge „Erzeugung“, „Platzierung“ und „Neuanordnung“. Abbildung 7.4 zeigt diese als Teil ihrer Klassen.

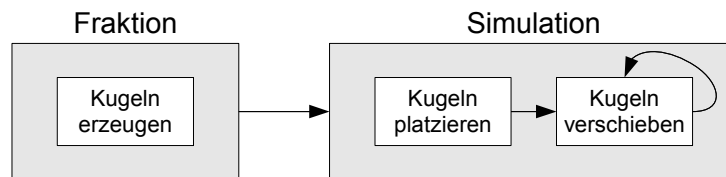


Abbildung 7.4: Einbettung der für die Kugeln relevanten Aktionen in die Klassen **Fraktion** und **Simulation**.

7.3.1 Erzeugung der Kugeln

Bei Verwendung von Einzelkugeln werden diese durch die Klasse **Fraktion** generiert, die Spezialklasse **FraktionMult** ist hingegen für die Schaffung von Partikeln vorgesehen, die aus mehreren Kugeln aufgebaut sind.

Die für die Erzeugung notwendigen Kugeldurchmesser gewinnt die **Fraktion**-Klasse aus den im **Mischung**-Objekt enthaltenen Mischungsdaten unter Anwendung eines der in Kapitel 6.1 beschriebenen Samplingverfahren. Voreingestellt ist hier das deterministische Sampling (Abschnitt 6.1.2), über Präprozessoranweisungen kann ebenso eines der anderen vorgestellten Verfahren eingesetzt werden. Nach vollendetem Sampling muss die im Folgenden beschriebene Anpassung berücksichtigt werden.

Beschränkung der maximalen Randkugelgröße

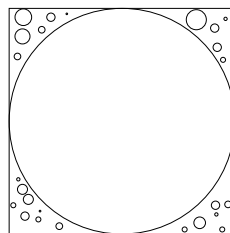


Abbildung 7.5: Einzig die größte Kugel bestimmt die Containergröße, der verbleibende Raum ist größer als das für die restlichen Kugeln tatsächlich benötigte Volumen.

Die Einbettung der Simulation in das hierarchische Verfahren aus Kapitel 5 erfordert eine eventuelle Anpassung des größten Kugeldurchmessers. Da sich keine Kugel selbst überlappen darf, kann der Container zu Beginn der Simulation und auch während der CR-Iterationen nicht weiter verkleinert werden, als es die größte Kugel (mit Durchmesser d_{\max} und Volumen V_{\max}) zulässt. Die Containerseitenlängen gleichen

dann d_{\max} , und das Containervolumen beträgt $V_C = d_{\max}^3$. In einem solchen Fall passiert es häufig, dass die übrigen Kugeln das Restvolumen im Container nicht ausfüllen können – die Raumausfüllung der aktiven (kleinen) Kugeln wird wegen dieser Limitierung fälschlicherweise zu niedrig bewertet (siehe Abb. 7.5). Abhilfe schafft eine Beschränkung des Durchmessers der größten Kugel, sodass das benötigte Volumen der weiteren Kugeln C_a garantiert ausreicht, um das restliche Volumen zumindest auszufüllen. Sei im Folgenden

$$V_a = \sum_{i=1}^N (V_i) - V_{\max}$$

das Gesamtvolumen aller Kugeln abgesehen von der größten, und $\phi_a = V_a/C_a$ die Raumausfüllung dieser Kugeln. Gefordert wird

$$\begin{aligned} C_a &\geq d_{\max}^3 - V_{\max} \\ \Leftrightarrow C_a &\geq d_{\max}^3 - \frac{\pi}{6} d_{\max}^3 \\ \Leftrightarrow d_{\max}^3 &\leq \frac{C_a}{1 - \frac{\pi}{6}} \end{aligned}$$

Zusammen mit der Definition der Raumausfüllung ergibt sich

$$d_{\max}^3 \leq \frac{V_a}{\phi_a(1 - \frac{\pi}{6})}. \quad (7.2)$$

Nun besteht eine Abhängigkeit der maximalen Kugelgröße von der Raumausfüllung ϕ_a der übrigen Kugeln. Da diese nicht im Voraus bekannt ist, hilft nur die sehr allgemeine Abschätzung

$$0 < \phi_a < 1.$$

Eingesetzt in Gleichung 7.2 ergibt dies für die maximale Kugelgröße

$$\begin{aligned} d_{\max}^3 &\leq \frac{V_a}{1 - \frac{\pi}{6}} < \frac{V_a}{\phi_a(1 - \frac{\pi}{6})} \\ \Leftrightarrow d_{\max} &\leq \sqrt[3]{\frac{V_a}{1 - \frac{\pi}{6}}}. \end{aligned}$$

Die Anpassung des Durchmessers erfolgt somit durch

$$d_{\max}^{(\text{neu})} := \min \left(d_{\max}^{(\text{alt})}, \sqrt[3]{\frac{V_a}{1 - \frac{\pi}{6}}} \right).$$

Diese Maßnahme verändert selbstverständlich die Korngrößenverteilung des Samples und darf daher nicht in der letzten Fraktion angewendet werden, da dort eine aktive Kugel die größte Kugel darstellt. In allen anderen Fraktionen bilden Randkugeln hingegen eine Approximation der Umgebung für die aktiven Kugeln und werden in nachfolgenden Fraktionen exakt als aktive Kugeln eingeführt. Die Größenbeschränkung einer einzelnen Randkugel ist somit unproblematisch, zumal sie in einem Größenbereich erfolgt, in dem die Kugel auf die deutlich kleineren aktiven Kugeln ohnehin wie ein glatter Rand (mit vernachlässigbarem Krümmungsgrad) wirkt.

Sollte andererseits die zu simulierende Mischung zu wenig feines Material aufweisen, um die Lücken zwischen den großen Partikeln zu füllen, so ist eine Situation wie in Abb. 7.5 tatsächlich repräsentativ und die oben beschriebene Korrektur der maximalen Kugelgröße verursacht einen Fehler: die Raumausfüllung der aktiven Kugeln der betreffenden Fraktion wird fälschlicherweise zu hoch angesetzt. Dass dieser Fehler jedoch keine Auswirkungen auf das Endresultat hat, zeigt Abb. 7.6. Der Container in der letzten Fraktion wird in diesem Fall nur durch die aktiven großen Partikel bestimmt; inwieweit die kleineren Fraktionen den Leerraum auffüllen, ändert nichts an der absoluten Größe des Containers. Die Gesamtraumausfüllung berechnet sich aus dem Quotienten aus der Summe aller Kugelvolumina und diesem kleinsten Containervolumen, das allen Kugeln Platz bietet.

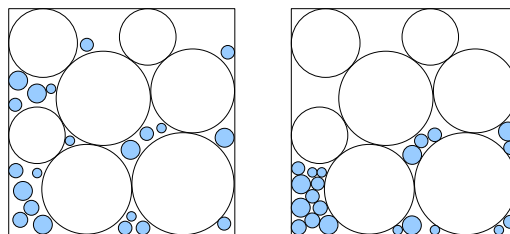


Abbildung 7.6: Seltener Fall sich berührender Kugeln in der letzten Fraktion. Die geringere (links) oder höhere (rechts) Packungsdichte der Kugeln vorheriger Fraktionen hat keine Auswirkungen, der Container wird nur durch die großen Kugeln bestimmt.

7.3.2 Initiale Kugelplatzierung

Der verwendete CR-Algorithmus sorgt iterativ für eine Angleichung der Überlappungsraten und für eine gleichmäßige Verteilung des Leerraums innerhalb der Packung. In diesem Kapitel wird dargestellt, wie solche Bestrebungen schon durch eine intelligente Anfangsplatzierung der Kugeln im Container unterstützt werden können. Deshalb wird eine **1. Phase der Kugelplatzierung** vor die **2. Phase der CR-Iteration** gesetzt. Allerdings darf der in dieser ersten Phase betriebene Aufwand nicht außer

Acht gelassen werden.

Naive Anfangsplatzierung

Das naive Vorgehen in dieser Phase wäre eine rein zufällige Positionierung der Kugeln innerhalb des Containers. Dazu wird die Menge der Kugeln in beliebiger Reihenfolge durchlaufen, und ein Zufallsgenerator erzeugt nacheinander die Koordinaten des Mittelpunktes jeder Kugel, sodass die Kugeln gleichverteilt im Container platziert werden. Der Algorithmus 7.2 zur Platzierung einer einzelnen Kugel unterscheidet zwischen periodischen und harten Randbedingungen an der Containerwand, eingesetzt in den Pseudocode des Algorithmus 7.3 ergibt dies die naive Anfangsplatzierung.

Algorithmus 7.2 Zufällige Platzierung einer Kugel im würfelförmigen Container.

Benötigt: l = halbe Seitenlänge des im Ursprung zentrierten Containerwürfels

Benötigt: r = Radius der Kugel

```
if periodische Randbedingungen then
   $x \leftarrow$  gleichverteilte Zufallszahl aus  $[-l, l]$ 
   $y \leftarrow$  gleichverteilte Zufallszahl aus  $[-l, l]$ 
   $z \leftarrow$  gleichverteilte Zufallszahl aus  $[-l, l]$ 
else // harte Randbedingungen
   $x \leftarrow$  gleichverteilte Zufallszahl aus  $[-l + r, l - r]$ 
   $y \leftarrow$  gleichverteilte Zufallszahl aus  $[-l + r, l - r]$ 
   $z \leftarrow$  gleichverteilte Zufallszahl aus  $[-l + r, l - r]$ 
end if
return  $x, y, z$ 
```

Algorithmus 7.3 Naive zufällige Platzierung der Kugeln.

Benötigt: N = Anzahl der Kugeln

Generiere zufällige Permutation $p(1), \dots, p(N)$ der Kugelindizes

```
for  $i = 1, \dots, N$  do
  platziere Kugel  $k_{p(i)}$ 
end for
```

Überlappungsreduzierende Anfangsplatzierung

Eine Anfangsplatzierung, die von Beginn an für eine deutlich homogenere Packungsstruktur sorgt, kann durch eine Kombination aus dem Simple Sequential Inhibition-Modell (SSI-Modell, siehe Abschnitt 3.5) und einer Threshold-Accepting-Methode erzielt werden. Es empfiehlt sich, die Kugeln dafür zunächst in eine nach absteigendem Durchmesser sortierte Reihenfolge zu bringen, da große Kugeln zu Beginn nahezu

überlappungsfrei platziert werden können, wogegen es am Ende schwierig wird, für sie eine günstige Position mit wenigen Überlappungen zu vorhandenen Kugeln zu finden, während dies für kleinere Kugeln weniger problematisch ist. Im Folgenden bezeichnet k_1 die größte und k_N die kleinste Kugel, für die Radien r_1, \dots, r_N gilt also $r_i \geq r_j$ wenn $i < j$.

Das ursprüngliche SSI-Modell gestattet keine Überlappung bei der Positionierung einer Kugel. Findet sich für eine Kugel nicht genug freier Raum, so wird diese nicht in die Packung aufgenommen. Dies ist für die Realisierung des Samples nicht wünschenswert, daher soll diese Bedingung hier relaxiert werden: Eine zufällig ausgewählte Position für die Kugel k_i wird genau dann akzeptiert, wenn keine der Überlappungsraten o_{ij} von k_i und einer Nachbarkugel k_j einen Schwellwert s_i übersteigt, und somit $\max\{o_{ij} : k_j \text{ ist Nachbar von } k_i\} \leq s_i$ gilt. Andernfalls werden die s_i übersteigenden Überlappungsraten aufsummiert zu

$$\hat{o}_i = \sum_{j \neq i} \hat{o}_{ij} \quad (7.3)$$

mit

$$\hat{o}_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{wenn } o_{ij} \leq s_i \\ o_{ij}, & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.4)$$

und es wird für diese Kugel k_i eine neue zufällige Position ermittelt. Um der mit zunehmender Kugelanzahl steigenden Schwierigkeit, eine gültige Position zu finden, entgegenzuwirken, ist ein langsamer, streng monotoner Anstieg des Schwellwertes vorgesehen, d. h. $s_i > s_j$ für $i > j$. Da es vorkommen kann, dass eine Kugel auch unter Berücksichtigung des Schwellwertes keine gültige Position findet, wird die maximale Anzahl der Platzierungsversuche pro Kugel auf einen fixen Wert m beschränkt. Gelingt innerhalb dieser Versuche keine Platzierung mit $\max\{o_{ij} : k_j \text{ ist Nachbar von } k_i\} \leq s_i$, so wird die beste der m getesteten Positionen gewählt, d. h. diejenige, für die \hat{o}_i minimal ist. Der Algorithmus 7.4 skizziert den Platzierungsvorgang in Pseudocode.

Es ist zu beachten, dass dieser Algorithmus für $m = 1$ gerade die naive Anfangsplatzierung aus dem vorhergehenden Abschnitt realisiert, allerdings unter Anwendung einer nach absteigenden Kugelgrößen geordneten Reihenfolge.

Auswirkungen der Parameterwahl

Aus einer 30.000 Kugeln umfassenden polydispersen Mischung wurde per Collective Rearrangement eine Packung erzeugt, dabei kam die Methode der überlap-

Algorithmus 7.4 Überlappungsreduzierende Platzierung der Kugeln mit maximal 100 Versuchen je Kugel.

Benötigt: $N =$ Anzahl der Kugeln

Benötigt: $r_i \geq r_j$ für $i < j$ // Kugeln nach absteigendem Radius sortiert

$m \leftarrow 100$ // maximale Anzahl der Platzierungsversuche

for $i = 1, \dots, N$ **do**

$s_i \leftarrow 0,4 \frac{i-1}{N-1}$

$a \leftarrow 0$ // Zähler der Platzierungsversuche

$o_i^* \leftarrow \infty$

repeat

$a \leftarrow a + 1$

platziere Kugel i

$\hat{o}_i \leftarrow 0$

for all $j \neq i$ **do**

if $o_{ij} > s_i$ **then** // o_{ij} überschreitet Schwellwert und wird gezählt

$\hat{o}_i \leftarrow \hat{o}_i + o_{ij}$

end if

end for

if $\hat{o}_i < o_i^*$ **then** // neues Optimum gefunden

$o_i^* \leftarrow \hat{o}_i, x_i^* \leftarrow x_i, y_i^* \leftarrow y_i, z_i^* \leftarrow z_i$

end if

until $\hat{o}_i = 0 \vee a = m$

$x_i \leftarrow x_i^*, y_i \leftarrow y_i^*, z_i \leftarrow z_i^*$

end for

pungsreduzierenden Anfangsplatzierung zum Einsatz. Die maximale Anzahl der Platzierungsversuche wurde zwischen $m = 1$ (naive Platzierung) und $m = 1.000$ variiert.

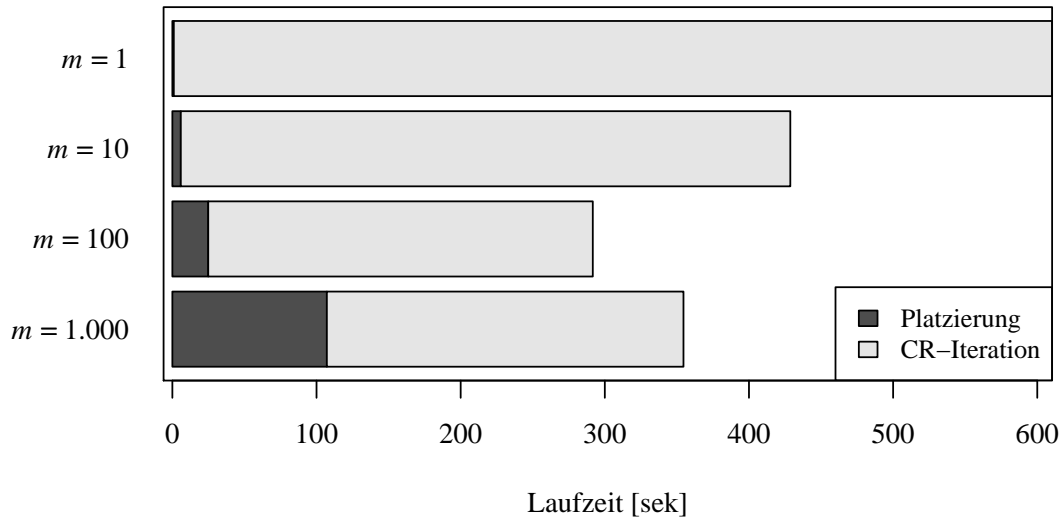


Abbildung 7.7: Aufwand der überlappungsreduzierenden Platzierung und der anschließenden Iteration mittels Collective Rearrangement für verschiedene maximale Platzierungsversuche.

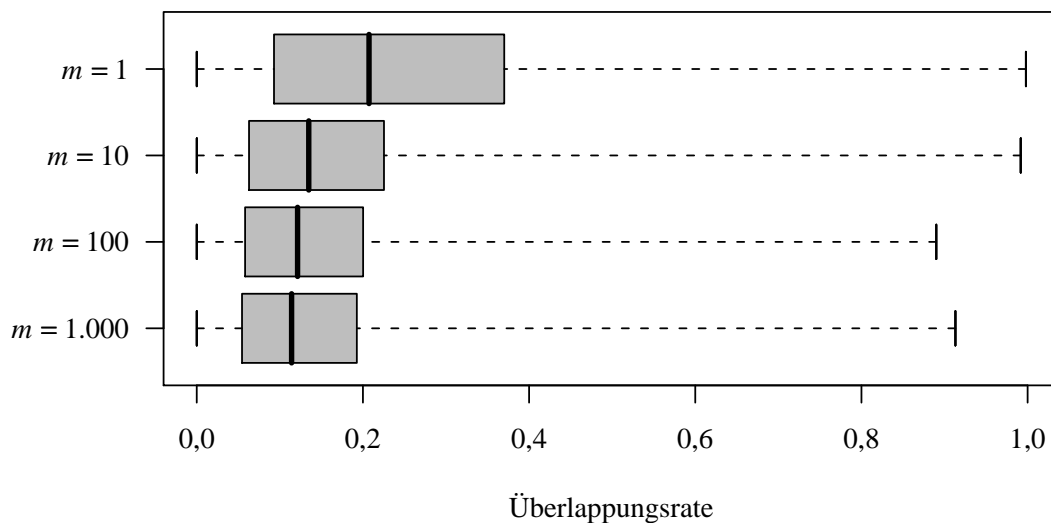


Abbildung 7.8: Boxplot der Überlappungsraten nach überlappungsreduzierender Platzierung mit verschiedenen maximalen Platzierungsversuchen. 50% der Raten liegen in der grauen Box, der schwarze Balken gibt jeweils den Median an.

Abbildung 7.7 zeigt die Auswirkungen des Parameters m auf die Rechenzeit. Ein höherer Wert steigert zwar den Aufwand der Platzierung, verkürzt aber dafür auch die nachfolgende Iteration der Collective Rearrangement-Methode. Für die vier untersuchten Werte liefert $m = 100$ die minimale Gesamtdauer. Auch die Boxplots der Überlappungsrate in Abbildung 7.8 bestätigen für diesen Wert eine gegenüber

der naiven Platzierung gleichmäßigere Verteilung, was selbst durch $m = 1.000$ nur unwesentlich verbessert werden kann.

Einen visuellen Eindruck vermitteln die Schnittebenen in den Abbildungen 7.9 a)–7.9 d), aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden hier bidisperse Packungen aus jeweils 10.000 Kugeln erzeugt. Mit steigender Anzahl der Platzierungsversuche nimmt die Homogenität der Packungsstruktur sichtbar zu, die Verbesserung gegenüber der naiven Platzierung in Abbildung 7.9 a) ist deutlich erkennbar.

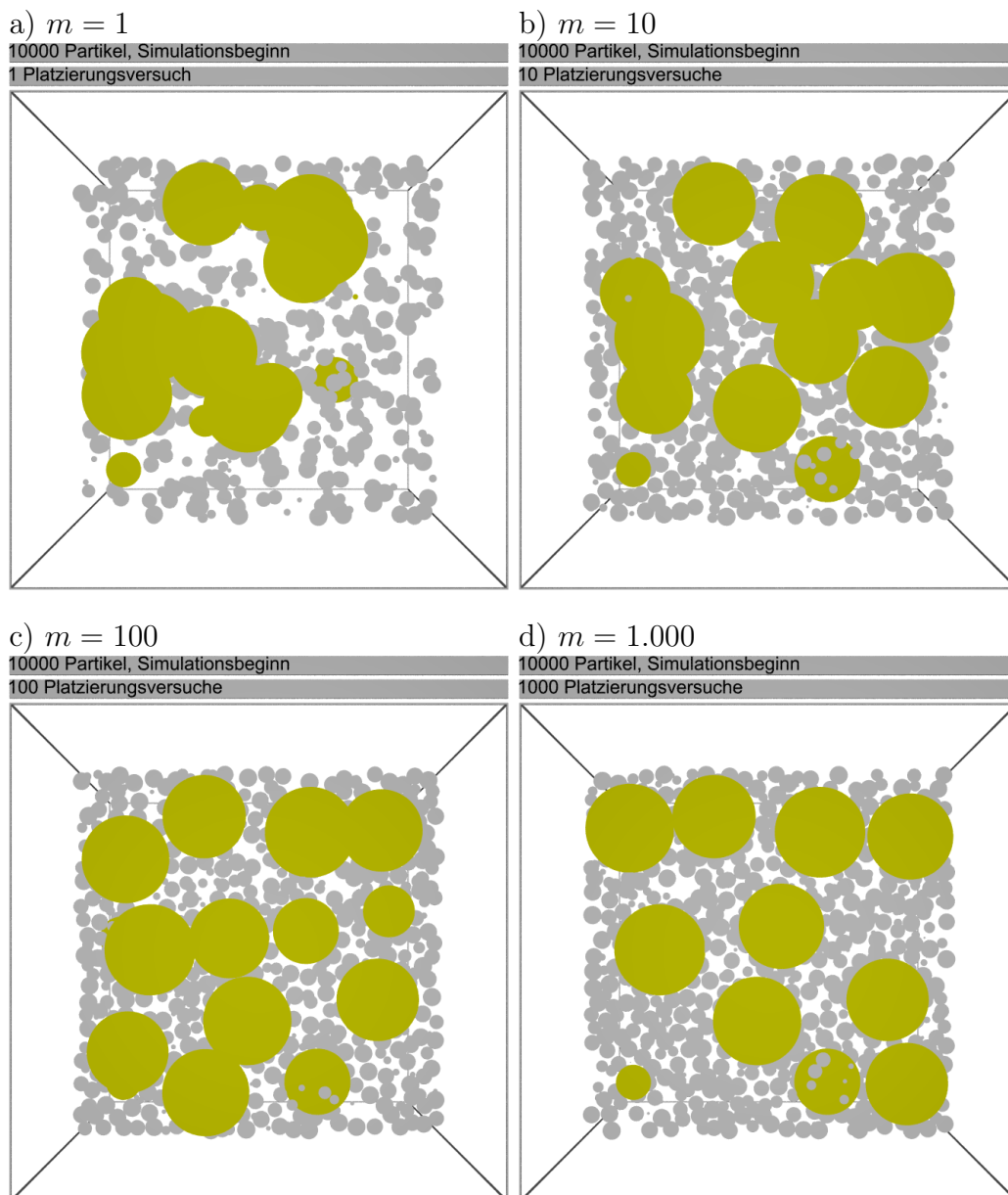


Abbildung 7.9: Schnittebenen durch eine bidisperse Kugelpackung nach erfolgter Anfangsplatzierung mit unterschiedlicher maximaler Anzahl der Platzierungsversuche m .

Einen guten Kompromiss zwischen Aufwand und Ergebnis bietet die Beschränkung

auf maximal 100 Versuche, weshalb im Simulationsprogramm Algorithmus 7.4 mit $m := 100$ eingesetzt wird.

7.3.3 Collective Rearrangement

Die implementierte Methode des Collective Rearrangements orientiert sich am Algorithmus von He et al. [HEC99], enthält jedoch zahlreiche Variationen und Neuerungen. Ein wichtiges Merkmal des Algorithmus besteht darin, dass dieser die Kugeldurchmesser während des kompletten Ablaufs konstant hält, sodass neue Impulse für das Collective Rearrangement nur über Größenänderungen des Containers erfolgen können, was in diesem Kapitel noch genauer beschrieben wird. Zunächst soll jedoch die Neuordnung der Kugeln dargestellt werden.

Der Algorithmus behandelt in einem Iterationsschritt nacheinander jede Kugel, dabei wird die Reihenfolge, in der die Kugeln besucht werden, stets zufällig variiert, um (zumindest theoretisch mögliche) Endlosschleifen bei der Kugelverschiebung nach Möglichkeit zu vermeiden. Nach jedem Iterationsschritt wird geprüft, ob die zur Beendigung der Simulation führende Ziel-Überlappungsrate erreicht wurde (siehe Abschnitt 7.2.1) und falls nicht, so wird mit der Iteration fortgefahren.

Ein Iterationsschritt besteht in der Verschiebung jeder einzelnen der N Kugeln, wobei sich die Verschiebungen in Richtung und Stärke unterscheiden. Eine Verschiebung einer Kugel k kann entweder (wie in den meisten Fällen) durch die Überlappung mit anderen Kugeln motiviert sein, oder – falls k weder Überlappungen noch Kontakte mit anderen Kugeln besitzt – dafür sorgen, dass k in Richtung der nächstliegenden Kugel verschoben wird, um anschließend einen Kontakt zu besitzen. Kugeln mit Kontakten und ohne Überlappungen verbleiben an ihrer Position; da jedoch exakte Kontakte während des Simulationslaufs sehr selten vorkommen und wegen der ständigen Neuordnung nicht lange erhalten bleiben, kann davon ausgegangen werden, dass tatsächlich jede Kugel in jedem Iterationsschritt bewegt werden muss.

Das Heranrücken einer Kugel k_i (mit Radius $r_i = d(k_i)/2$) an ihren nächsten Nachbarn k_j (mit Radius $r_j = d(k_j)/2$) ist in Abbildung 7.10 dargestellt. Die neue Position $\vec{x}_i^{(\text{neu})}$ des Kugelmittelpunktes kann mit

$$\vec{x}_i^{(\text{neu})} = \vec{x}_i + \vec{v}_{ij}$$

berechnet werden, dabei wird der Verschiebungsvektor

$$\vec{v}_{ij} = \vec{s}_{ji} \frac{|\vec{s}_{ji}| - r_i - r_j}{|\vec{s}_{ji}|} \quad \text{mit } \vec{s}_{ji} = \vec{x}_j - \vec{x}_i$$

benutzt.

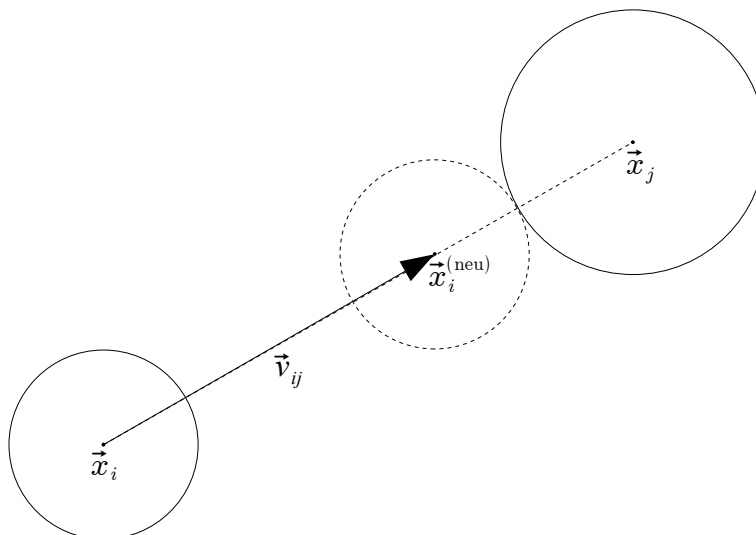


Abbildung 7.10: Verschieben einer freien Kugel, sodass ein neuer Kontakt entsteht.

Die Beseitigung einer einzelnen Überlappung kann auf ähnliche Weise vollzogen werden, wie Abbildung 7.11 zeigt. Es ist

$$\vec{x}_i^{(\text{neu})} = \vec{x}_i + \vec{v}_{ij}$$

unter Benutzung des Verschiebungsvektors

$$\vec{v}_{ij} = \vec{s}_{ij} \frac{r_i + r_j - |\vec{s}_{ij}|}{|\vec{s}_{ij}|} \quad \text{mit } \vec{s}_{ij} = \vec{x}_i - \vec{x}_j.$$

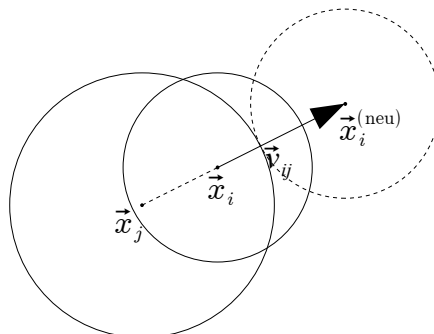


Abbildung 7.11: Verschieben einer Kugel, um eine einzelne Überlappung zu beseitigen.

Wenn eine Kugel durch mehrere Nachbarkugeln überlappt wird (was häufig der Fall ist), muss ein Kompromiss für die neue Position gefunden werden. Seien die Indizes der k_i überlappenden Kugeln in der Menge \mathcal{I}_i gesammelt. Es soll also ein Gesamtverschiebungsvektor \vec{v}_i bestimmt werden, der jeden einzeln berechneten Verschiebungsvektor \vec{v}_{ij} mit $j \in \mathcal{I}_i$ angemessen berücksichtigt. He et al. benutzen dazu den Mittelwert

$$\vec{v}_i = \frac{1}{|\mathcal{I}_i|} \sum_{j \in \mathcal{I}_i} \vec{v}_{ij},$$

jedoch entstehen durch diesen Ansatz Probleme bei der Vergrößerung des Containers, wie später noch beschrieben wird.

Eine Aktualisierung der Kugelposition wird immer sofort vorgenommen, sodass eine unterschiedliche Reihenfolge bei der Behandlung der Kugeln tatsächlich zu verschiedenen Konfigurationen führen kann. Diese Vorgehensweise erlaubt eine schnellere Simulation als die Alternative, welche darin besteht, die Verschiebungen nur vorzumerken, jedoch nicht auszuführen, bevor in einem Iterationsschritt nicht für alle Kugeln eine neue Position berechnet wurde.

Variante: Bei Überlappung nur kleinere Kugeln verschieben

Neben der von He et al. vorgesehenen Prozedur, jede einzelne Kugel basierend auf allen ihren Überlappungen und unabhängig von der Art ihrer überlappenden Nachbarn zu verschieben, wurde auch eine Variante getestet, bei der die k_i überlappenden Kugeln mit kleinerem Radius als k_i bei der Berechnung des Verschiebungsvektors unberücksichtigt blieben. Dies sollte in gewisser Weise die Trägheit größerer Kugeln abbilden: größere Partikel verschieben kleinere Partikel.

Im Ergebnis zeigt sich jedoch kein Vorteil dieser Variante. Das Gegenteil ist der Fall: Die Packungsdichte konvergiert nicht, sondern stagniert auf sehr niedrigem Niveau, dabei zeigen sich zu Beginn der Simulation im Vergleich deutlich höhere Bewegungsweiten.

Das Scheitern dieser Variante kann als Beispiel dafür angesehen werden, dass es keinesfalls notwendig und teilweise sogar hinderlich ist, den Packprozess realistisch abzubilden, um ein zufriedenstellendes Endergebnis zu erzeugen, das als realitätsnahes Modell dienen kann.

Variante: Störung der Verschiebung bei der Überlappungsbeseitigung

He et al. schlagen in ihrem Algorithmus eine kleine Störung der Position einer Kugel mit weniger als 4 Kontakten vor. Diese „Vibration“ sollte in jedem Iterationsschritt auf alle in Frage kommenden Kugeln angewandt werden; als Motivation dient die Annahme, dass solche Kugeln Brücken bilden (vgl. Abbildung 6.7), die für eine dichte Packung hinderlich sind und auf diese Weise beseitigt werden können.

Im vorliegenden Simulationsprogramm hat diese Methode jedoch keine messbare Verbesserung der Packung oder des Packprozesses bewirkt, sodass darauf verzichtet wird. Zusätzlich wurde eine noch radikalere Vorgehensweise getestet: Die Störung der Position ausnahmslos jeder Kugel in jedem Iterationsschritt. Wie leicht einzusehen ist, kann diese Strategie durch einen gestörten Verschiebungsvektor umgesetzt werden, implementiert wurde jedoch wie bei He et al. eine ungestörte Verschiebung mit einer daran anschließenden, separaten Störung der Zielposition. Sei \vec{x}_i der Ortsvektor der ungestörten Zielposition und r_i wieder der Kugelradius, dann bildet der Vektor

$$\vec{x}'_i = \vec{x}_i + \begin{pmatrix} s_{i,1} \\ s_{i,2} \\ s_{i,3} \end{pmatrix}$$

die gestörte Position, wobei $s_{i,j}$ für $j = 1, 2, 3$ per Zufallsgenerator unabhängig und gleichverteilt aus dem Intervall $[-0,01r_i, 0,01r_i]$ bestimmt wird.

Die Hoffnung hinter dieser radikalere Lösung besteht darin, einer Kugel so eine Verschiebung zu ermöglichen, die zu einer weniger stark überlappten Zielposition führt, z. B. dadurch, dass eine Kugel auf diese Weise durch eine andere hindurch bewegt wird und im dahinter liegenden Porenraum Platz findet.

Aber auch mit dieser Variante ist keine offensichtliche Verbesserung möglich. Da die Störungen zufallsbedingt ebenso Verschlechterungen in der Packungskonfiguration hervorrufen, erhöhen sich die Bewegungsweiten der Kugeln im Mittel, sodass die während der Iteration bestehende räumliche Kohärenz schlechter ausfällt, was schließlich auf Grund der implementierten Nachbarschaftssuche (siehe Kapitel 8) zu einer Verlangsamung der Simulation führt. Außerdem steht diese Variante der Konvergenz der Packungsstruktur entgegen, sodass weitaus mehr Iterationen benötigt werden, um zu einem Ergebnis zu gelangen.

Expansionspolitik für den Container

Obwohl die Veränderung des den Kugeln zur Verfügung stehenden Raumes für diesen Algorithmus essenziell ist, geben He et al. keine exakten Regeln für die Zeitpunkte der Containervergrößerung an; lediglich die Abhängigkeit der Vergrößerung von der aktuellen durchschnittlichen Überlappungsrate o (siehe Definition 7.2.1.1) ist dokumentiert. In der vorliegenden Arbeit wird darum eine eigene, mehrschichtige Strategie vorgestellt.

Jede Veränderung der Containergröße stellt einen Eingriff in die Packungsstruktur dar und unterbricht den Vorgang der Überlappungsbeseitigung durch gegenseitiges Verschieben der Kugeln. Aus diesem Grund sollte der Container nicht in jedem Iterationsschritt expandiert werden – grundsätzlich bieten sich zwei weitere Möglichkeiten an:

1. Vergrößerung in einem festen Intervall, d. h. nach einer konstanten Anzahl an Iterationsschritten, oder
2. Vergrößerung des Containers immer dann, wenn die Überlappungsrate stagniert.

Hier sollen diese beiden nachfolgend erläuterten Strategien miteinander kombiniert werden.

Reguläre Vergrößerung: In einem festen Intervall von S Iterationsschritten wird der Container vergrößert, also immer dann, wenn für die aktuelle Iterationsnummer i die Bedingung $i \bmod S = 0$ gilt. Allerdings wird diese Aktion nur durchgeführt, wenn $o^{(i)} > 0,97 \cdot o^{(i-10)}$, d. h. wenn sich die durchschnittliche Überlappungsrate innerhalb der letzten 10 Iterationsschritte um weniger als 3% verbessert hat. Andernfalls deutet dies auf eine momentan gut fortschreitende Verdichtung hin, sodass kein Bedarf für eine Containervergrößerung besteht.

Adaptive Vergrößerung: Stagniert die durchschnittliche Überlappungsrate oder wächst sie sogar an, so muss mit einer Vergrößerung des Containers interveniert werden, um einen effizienten Ablauf des Simulationsprozesses zu gewährleisten. Diese Situation wird erkannt, wenn sich die durchschnittliche Überlappungsrate 7 mal in Folge jeweils nicht um mindestens 0,1% zum vorherigen Iterationsschritt verbessert hat.

Die Wahl der angegebenen Parameter sowie von $S = 200$ erwies sich im Vergleich mit weiteren getesteten Werten als günstig, stellt jedoch keinen Anspruch auf ein

Optimum dar, denn die Vielzahl der beschriebenen Einstellmöglichkeiten sowie potenzieller Erweiterungen dieser Steuerung erlauben keine systematischen Tests. Mit der Kombination der beiden vorgestellten Strategien wurde jedoch ein System gefunden, das gleichermaßen für einen geregelten und effizienten Ablauf des Collective Rearrangements sorgt.

Stärke der Vergrößerung: Soll eine Containervergrößerung erfolgen, so besteht eine sinnvolle Vorgehensweise darin, die Stärke dieser Vergrößerung nicht fest vorgeben, sondern in Abhängigkeit von der durchschnittlichen Überlappungsrate zu wählen. Auf diese Weise werden einerseits zu große Schritte verhindert, welche die Kugeln zu sehr auseinanderzerren und somit eine dichte Anordnung umgehen, und andererseits entstehen so keine zu kleinen Schritte, die ohne Wirkung bleiben.

Sei $d_{ij}^{(\text{alt})} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j|$ der bisherige Abstand der Mittelpunkte zweier überlappender Kugeln vor einer Containervergrößerung. Nach Definition 7.2.1.1 ist

$$o_{ij} = \frac{r_i + r_j - d_{ij}^{(\text{alt})}}{r_i + r_j} = 1 - \frac{d_{ij}^{(\text{alt})}}{r_i + r_j}$$

die Rate der Überlappung zwischen den Kugeln k_i und k_j . Nach der Vergrößerung gleicht der Abstand der Mittelpunkte $d_{ij}^{(\text{neu})}$ idealerweise der Radiensumme, sodass ein echter Kontakt ohne Überlappung entsteht; es gilt somit

$$\begin{aligned} d_{ij}^{(\text{neu})} &= d_{ij}^{(\text{alt})} \cdot a_{ij} \\ &:= r_i + r_j \\ &= \frac{d_{ij}^{(\text{alt})}}{1 - o_{ij}}. \end{aligned}$$

Da die Vergrößerung mit dem gleichen Skalierungsfaktor a auf alle Kugeln wirkt, wird statt der individuellen Überlappungsraten o_{ij} die durchschnittliche Überlappungsrate o verwendet, wodurch der Skalierungsfaktor dann

$$a = \frac{1}{1 - o}$$

beträgt. Mit diesem werden die Seitenlänge des Containerwürfels sowie sämtliche Mittelpunktsvektoren der Kugeln multipliziert. Wegen des in der Containermitte befindlichen Koordinatenursprungs sorgt diese Skalierung sowohl für eine Reduzierung der Überlappungen als auch für eine Beibehaltung der relativen Packungsstruktur (vgl. Abbildung 7.13).

Verkleinerungen des Containers

Anders als bei He et al. ist im präsentierten Simulationssystem neben der Containervergrößerung außerdem eine Reduzierung der Packungsgröße und somit des Containers vorgesehen. Die Zeitpunkte für eben diese Verkleinerungen sind einfach zu bestimmen: So ist eine Verringerung des von den Kugeln nutzbaren Raumes immer dann sinnvoll, wenn eine eigentlich fertiggestellte, d. h. überlappungsfreie Packung noch weiter verdichtet werden soll. Daher wird immer dann, wenn die Überlappungsrate o unter den eingestellten Akzeptanzwert o_{Ziel} sinkt, eine Abfrage durchgeführt, ob die gewünschte Anzahl an Phasen der Containerverkleinerung bereits erreicht wurde. Falls dem so ist, kann die Simulation beendet werden, andernfalls erfolgt eine Verkleinerung nach dem Schema in Algorithmus 7.5, bevor die Simulation mit der Iteration fortgesetzt wird.

Algorithmus 7.5 Verkleinerung des Containers.

Benötigt: V_K = Volumen der Kugeln

Benötigt: s_C = Seitenlänge des Containers

Benötigt: k_{max} = vorgegebene Anzahl der Verkleinerungsphasen

Benötigt: k = Anzahl bereits durchgeführter Verkleinerungen

if letzte Containeränderung war eine Vergrößerung **then**

$k \leftarrow k + 1$ // dann geht es in die nächste Verkleinerungsphase

end if

$\Delta\phi \leftarrow 0,4 \cdot 0,5^k$

$\phi \leftarrow \phi + \Delta\phi$

$V_C \leftarrow V_K / \phi$ // Volumen des Containers

$s_C^{(\text{alt})} \leftarrow s_C$

$s_C \leftarrow \sqrt[3]{V_C}$

 Kugelpositionen skalieren mit $s_C / s_C^{(\text{alt})}$

Nach diesem Algorithmus nimmt die Stärke der Containerverkleinerung mit jeder Verkleinerungsphase ab. Eine Verkleinerungsphase besteht gewöhnlich aus einer einzelnen Verkleinerung, jedoch kann es vorkommen, dass die Kugeln schnell im nun engeren Container überlappungsfrei angeordnet werden können, ohne dass eine erneute Vergrößerung nötig wird. Dann verbleibt die Simulation in dieser Phase und die nächste Verkleinerung wird mit der gleichen Stärke ausgeführt.

Abfragen nach jedem Iterationsschritt

Wie zuvor beschrieben, müssen nach Abschluss eines Schrittes der Iteration diverse Abfragen getätigt werden. Sie betreffen

- Abbruchkriterien wie die zu erreichende Raumausfüllung ϕ_{Ziel} und die akzeptierte Überlappungsrate α_{Ziel} ,
- Bedingungen, die eine Containervergrößerung auslösen und
- Bedingungen, die eine Containerverkleinerung auslösen.

Diese Abfragen sind zur Übersicht im Ablaufdiagramm in Abbildung 7.12 dargestellt.

Anpassung der Kugelpositionen bei Containergrößenänderung

Bisher wird davon ausgegangen, dass die Kugeln nach einer Größenänderung des Containers ebenfalls bewegt werden, damit sie den kompletten zur Verfügung stehenden Containerraum wie zuvor nutzen. Die Anpassung der Kugelpositionen erfolgt durch eine einfache Skalierung. Sei $s_C^{(\text{alt})}$ die Seitenlänge des würfelförmigen Containers vor einer Größenänderung, und $s_C^{(\text{neu})}$ das gleiche Attribut nach erfolgter Vergrößerung oder Verkleinerung. Aus der bisherigen Position $\vec{x}_i^{(\text{alt})}$ lässt sich mit

$$\vec{x}_i^{(\text{neu})} = \frac{s_C^{(\text{neu})}}{s_C^{(\text{alt})}} \vec{x}_i^{(\text{alt})}$$

die neue Position bestimmen.

Alternativ zu einer solchen Skalierung der Positionen kann nach einer Containervergrößerung eine Sortierung der Kugeln nach ihrem Abstand vom Containerzentrum stattfinden, um dann die äußersten Kugeln zuerst zu verschieben. Auf diese Weise sollten die Kugeln schnell in den hinzugewonnenen Porenraum drängen. Einen möglichen Flaschenhals stellt jedoch die für das Sortieren benötigte Zeit dar, was anhand von Testläufen verifiziert werden konnte.

Aus diesem Grund gibt es für die Skalierung der Kugelpositionen keine wirkliche Alternative. Diese Vorgehensweise zeigt sich in Versuchen als gut geeignet, um die Kugeln unter Beibehaltung ihrer relativen Packungsstruktur ohne Zeitverzug gleichmäßig im Container zu verteilen. Für Containerverkleinerungen sorgt diese Anpassung für ein ebenfalls gleichmäßiges Zusammenrücken der Kugeln.

Als problematisch erweist sich diese Variante allerdings im Zusammenhang mit sehr polydispersen Mischungen. Wie Abbildung 7.13 zeigt, wirkt die Skalierung nicht nur proportional auf die absoluten Positionen der Kugeln (Bezugspunkt ist hier der Ursprung), sondern auch auf die Abstände der Kugelzentren untereinander. Da mit konstanten Kugelradien gearbeitet wird, besteht der Abstand von Zentrum \vec{x}_i zu

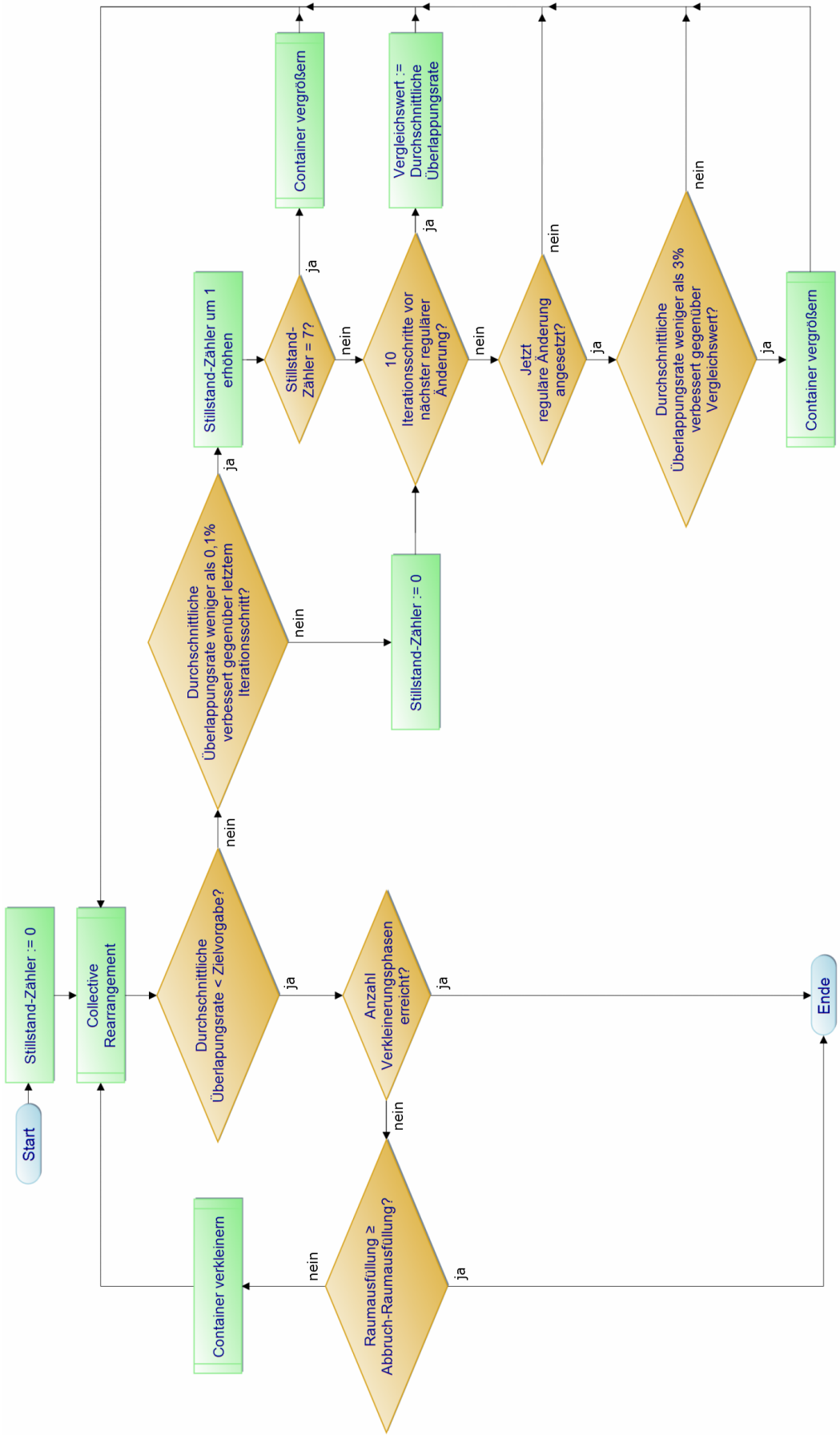


Abbildung 7.12: Ablaufdiagramm für das Prüfen verschiedener Bedingungen nach Abschluss jedes Iterationsschrittes.

Zentrum \vec{x}_j zum einen Teil aus den unveränderlichen Radien r_i und r_j , und zum anderen aus einem variablen (bei Überlappungen sogar negativen) Abstand. Sehr große Kugeln rücken so stärker von anderen Kugeln ab als kleinere, weil größere Abstände – absolut betrachtet – stärker vergrößert werden als kleinere. Diese Schalen von Hohlraum rund um die größten Kugeln herum können oft nicht durch die nachfolgenden Iterationsschritte beseitigt werden und senken somit die Raumauffüllung in der finalen Packung. Eine Möglichkeit zur Vermeidung bzw. schnellen Auffüllung dieser Hohlraumschalen wird im übernächsten Abschnitt beschrieben.

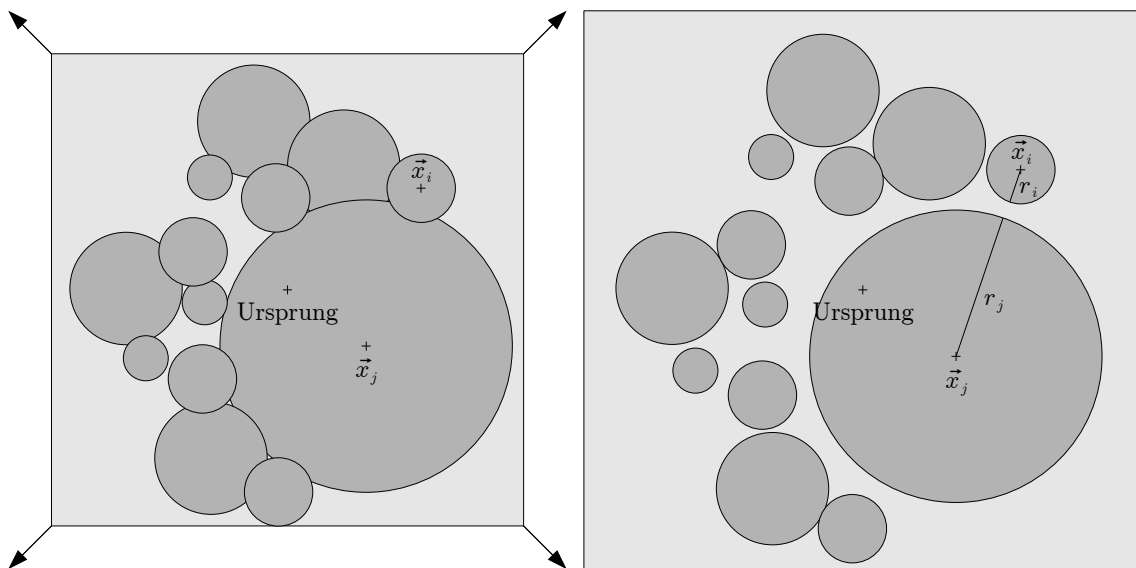


Abbildung 7.13: Container vor (links) und nach der Vergrößerung (rechts). Die Kugelpositionen werden zum Bezugspunkt im Ursprung skaliert, ihre Radien bleiben konstant.

Variante: Störung der Positionen nach Skalierung

Zu Testzwecken wurde außerdem eine Störung der Kugelpositionen implementiert, die jeweils nach einer Containergrößenänderung stattfand. Die Störung erfolgt ähnlich wie in Abschnitt 7.3.3 durch einen Vektor \vec{s}_i , dessen Komponenten $s_{i,1}$, $s_{i,2}$ und $s_{i,3}$ zufällig, unabhängig und gleichverteilt aus dem Intervall $[-s_i, +s_i]$ bestimmt werden, dabei soll in diesem Fall $s_i = 80 \cdot r_i$ gelten, sodass die Stärke sowohl von der durchschnittlichen Überlappungsrate als auch von der individuellen Kugelgröße abhängt. Aber auch diese zufällige Störung konnte weder die Hoffnung auf neue Impulse im Anordnungsprozess erfüllen noch die erwähnten Hohlraumschalen verhindern, stattdessen zeigte sich erneut ein langsamerer Ablauf der Simulation mit deutlich mehr benötigten Iterationsschritten als ohne die zufälligen Positionsstörungen, auch die Raumauffüllung erreichte nur niedrigere Werte.

Gewichtung der Verschiebungsvektoren

Die nach einer Containervergrößerung vorhandenen Hohlraumschalen lassen sich von vornherein reduzieren, indem Überlappungen mit großen Kugeln weniger stark beseitigt werden als Überlappungen mit kleineren Kugeln, sodass die Überlappungen nach einer Kugelpositionenskalierung zwar reduziert werden oder verschwinden, aber keine größeren Abstände zwischen den Kugeln hervorrufen. Zu diesem Zweck wurden drei verschiedene Varianten der Bestimmung des resultierenden Verschiebungsvektors getestet, die zusammen mit den Beobachtungen in Tabelle 7.1 aufgeführt sind.

Die Standardmethode von He et al. gewichtet die einzelnen Verschiebungsvektoren nicht, jedoch gibt die Länge jedes dieser Vektoren bereits implizit eine Gewichtung für eine Verschiebungsrichtung vor. Neben dieser impliziten Gewichtung mit der Verschiebungsweite wurden außerdem eine proportionale und eine überproportionale (quadratische) Gewichtung mit der Überlappungsrate getestet. Da hierbei durch die Radiensumme der betroffenen Kugeln dividiert wird, erhält die Verschiebung bei Beteiligung einer großen Kugel ein deutlich geringeres Gewicht als bei einer Überlappung zwischen ausschließlich kleinen Kugeln.

Durch verschiedene Testläufe hat sich die in der Tabelle als drittes aufgeführte Formel als beste Lösung erwiesen. Mit dieser Gewichtung bleiben Überlappungen mit großen Kugeln während der Iteration lange bestehen, um dann nach einer Containervergrößerung durch die Kugelpositionenskalierung aufgelöst zu werden.

Kugelverkleinerung statt Containervergrößerung

Betrachtet man den CR-Algorithmus, dann ist das Vergrößern des Containers äquivalent zum Verkleinern der Kugeln. Die Raumauffüllung selbst ist unabhängig von den absoluten Kugelgrößen, lediglich das Größenverhältnis der Kugeln untereinander sowie zum Container ist relevant. Daher kann die Festlegung auf die Änderung der Containergröße statt der Kugelgrößen in gewisser Weise als willkürliche Entscheidung betrachtet werden. Bezieht man jedoch die Datenstrukturen für eine Nachbarschaftsverwaltung in die Überlegungen mit ein, so erweisen sich konstante Kugelgrößen als dienlich für die Effizienz der Simulation, da hier keine Anpassung optimierter Zellen- oder Knotengrößen während der Iteration erfolgen muss.

Formel	Gewichtung	Beschreibung/Beobachtung	Überlappungsrate	
			Mittelwert	Varianz
$\vec{v}_i = \frac{1}{ I_i } \sum_{j \in I_i} \vec{v}_{ij}$	proportional zur Überlappungsweite	zu Beginn gute Reduzierung der Überlappungen großer Kugeln, nach Skalierung dicke Hohlräume schalen um große Kugeln, nach Containervergrößerung ist die Überlappungsrate für etliche Iterationsschritte höher als zuvor	sinkt mäßig	sinkt sehr langsam
$\vec{v}_i = \frac{\sum_{j \in I_i} \vec{v}_{ij} r_i + r_j}{\sum_{j' \in I_i} \frac{1}{r_i + r_{j'}}}$	proportional zur Überlappungsrate	gleicht Überlappungsrate aus, starke Überlappungen zwischen großen Kugeln werden nur langsam ausgeglichen (wegen kleiner Kugeln auf der Gegenseite), späte Bewegung großer Kugel hinterlässt nicht-füllbare Lücken, nach Containervergrößerung ist die Überlappungsrate für etliche Iterationsschritte höher als zuvor	sinkt zunächst schnell, später langsam	sinkt mäßig
$\vec{v}_i = \frac{\sum_{j \in I_i} \vec{v}_{ij} \frac{ \vec{v}_{ij} }{(r_i + r_j)^2}}{\sum_{j' \in I_i} \frac{ \vec{v}_{ij'} }{(r_i + r_{j'})^2}}$	überproportional zur Überlappungsrate	hohe Gewichtung großer Überlappungsraten, Laufzeit und Packungsdichte leicht besser als 1. Methode, nach Containervergrößerung ist die Überlappungsrate nur für sehr kurze Zeit höher als zuvor	sinkt schnell	sinkt schnell

Table 7.1: Vergleich verschiedener Varianten für die Berechnung des resultierenden Verschiebungsvektors.

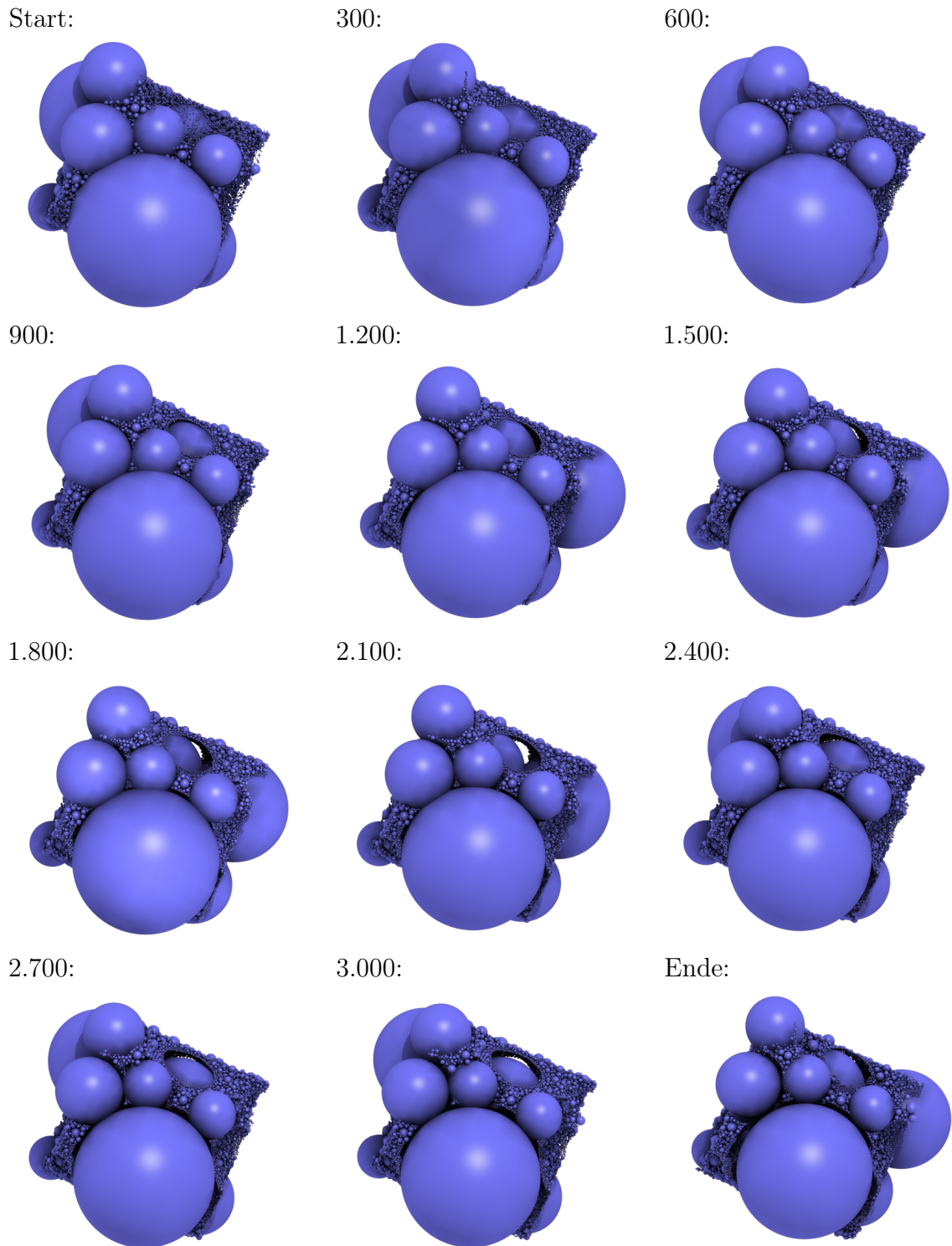


Abbildung 7.14: Visualisierung der verschiedenen Entwicklungsstufen der Packung unter Angabe des jeweiligen Iterationsschrittes im Collective Rearrangement.

Visuelle Darstellung

Abbildung 7.14 zeigt den Zustand einer Packung aus 30.000 Kugeln während der fortschreitenden CR-Iteration. Gestartet wird mit einer Struktur, die durch die Anfangsplatzierung erzeugt wurde; die Überlappungen sind vor allem zwischen den großen Kugeln deutlich erkennbar. Die folgenden Kugelverschiebungen dienen dem Zweck der Überlappungsbeseitigung, sie können jedoch ebenso Leerräume verursachen, wie auf den Bildern nach 1.800 und 2.100 Iterationsschritten zu sehen ist. Gerade große Kugeln hinterlassen bei der Verschiebung oftmals Lücken, die – wenn überhaupt – nur ganz allmählich von kleineren Kugeln wieder befüllt werden können. Dieses Problem wird durch die Skalierung nach der Containervergrößerung noch verstärkt. Umso wichtiger ist daher die wiederholte Verkleinerung des Containers nach Entstehung einer überlappungsfreien Struktur, denn nur so können iterativ höhere Packungsdichten erzielt werden.

7.3.4 Veränderung der Kennzahlen während der Simulation

Nach jedem Iterationsschritt berechnet das Simulationsprogramm diverse Kennzahlen, deren Verläufe während der Iteration Aufschluss über den Packprozess geben. Für die Erstellung der nachfolgenden Diagramme wurde eine an die Fullerkurve angelehnte Mischung aus 15.000 Kugeln in einer Fraktion gepackt. Die Weite der Containervergrößerung wurde nach oben begrenzt, sodass die Raumausfüllung um maximal 5 % je Vergrößerung sinken konnte; gestartet wurde mit einer nominellen Packungsdichte von 100 %, um genügend anfängliche Überlappungen zu produzieren.

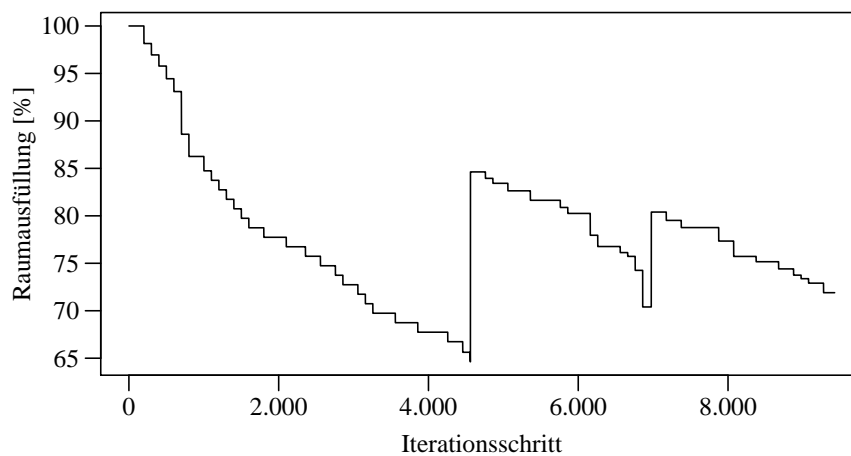


Abbildung 7.15: (Nominelle) Packungsdichte während der Iteration.

Am Diagramm des zeitlichen Verlaufs der Raumausfüllung in Abbildung 7.15 sind

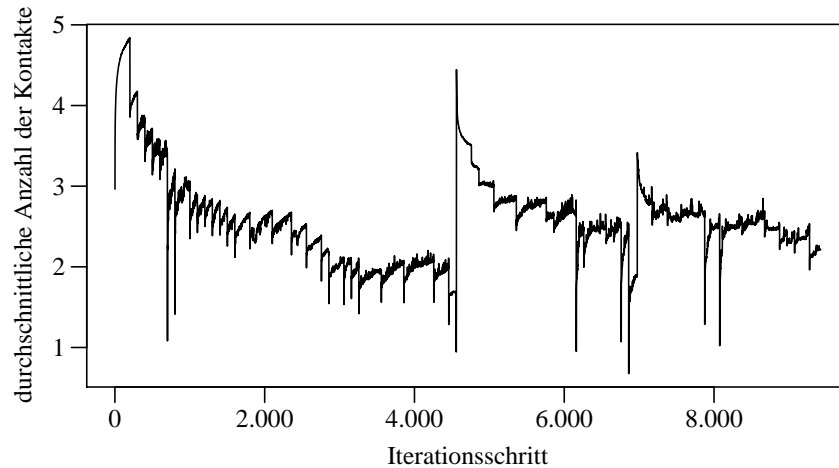


Abbildung 7.16: Koordinationszahl während der Iteration.

die Zeitpunkte der Containergrößenänderungen sehr schön anhand der Stufen zu erkennen. Die resultierende Änderung der Packungsdichte während der Iteration ist keine stetige Funktion, sondern geschieht zu diskreten Zeitpunkten, wenn sich die Containergröße und somit der zur Verfügung stehende Raum ändert. Im vorliegenden Fall wurde die Packung zweimal verdichtet (Aufwärtssprünge im Diagramm), indem genau zwei Verkleinerungen des Containers vollzogen wurden. Diese Anzahl lässt sich über die Konfigurationsdatei (siehe Anhang A.1) festlegen.

Die durchschnittliche Koordinationszahl (Abbildung 7.16) sinkt bei jeder Containervergrößerung ab, um daraufhin während der anschließenden Iterationsschritte wieder anzusteigen. Dies erklärt sich durch die Balancierung der Überlappungsraten in der Packung durch den CR-Algorithmus. Bei einer Containervergrößerung fallen etliche Kontakte abrupt weg, die anschließend durch Verschieben der Kugeln im CR als neue Überlappungen wiederkehren können, wogegen vorhandene Überlappungen (und damit Kontakte) während des regulären CR-Vorgangs nur selten verschwinden, sondern lediglich reduziert werden. Der umgekehrte Fall tritt bei Verkleinerung des Containers ein: Hier steigt die Koordinationszahl sofort stark an und sinkt in den unmittelbar folgenden Iterationsschritten wieder ab.

Die Überlappungsrate o ist während der Iteration starken Schwankungen unterworfen (Abbildung 7.17), eine absteigende Tendenz kann aber festgestellt werden. Dies gilt ebenso für die maximale Überlappungsrate o_{\max} (Abbildung 7.18) sowie die absolute Weite der maximalen Überlappung, dargestellt in Abbildung 7.20.

Die Varianz der Überlappungsrate (Abbildung 7.19) und die durchschnittliche Bewegungsweite der Kugeln (Abbildung 7.21) zeigen häufige Ausreißer in Richtung der höheren Beträge. Dies belegt die Dynamik des Packprozesses – auch im fortgeschrit-

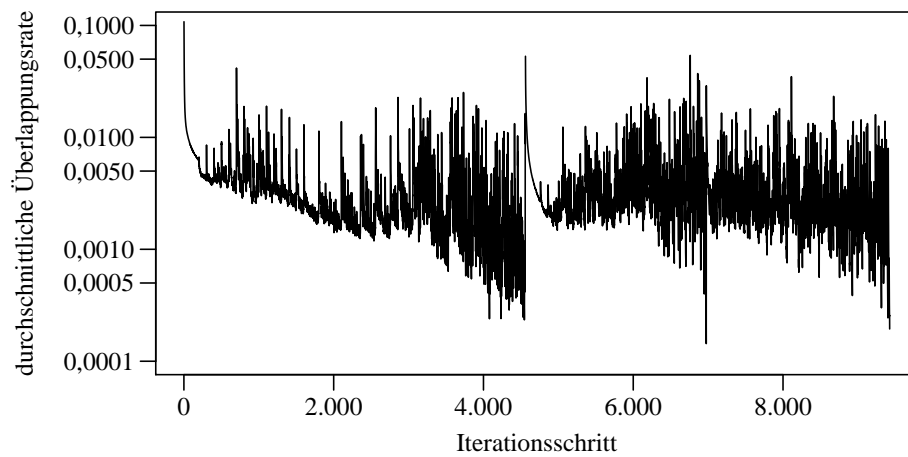


Abbildung 7.17: Durchschnittliche Überlappungsrate o während der Iteration.

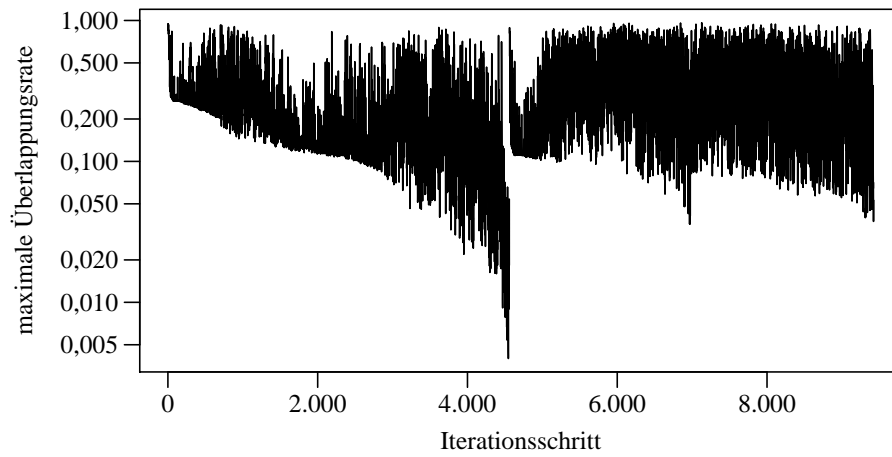


Abbildung 7.18: Maximale Überlappungsrate o_{\max} während der Iteration.

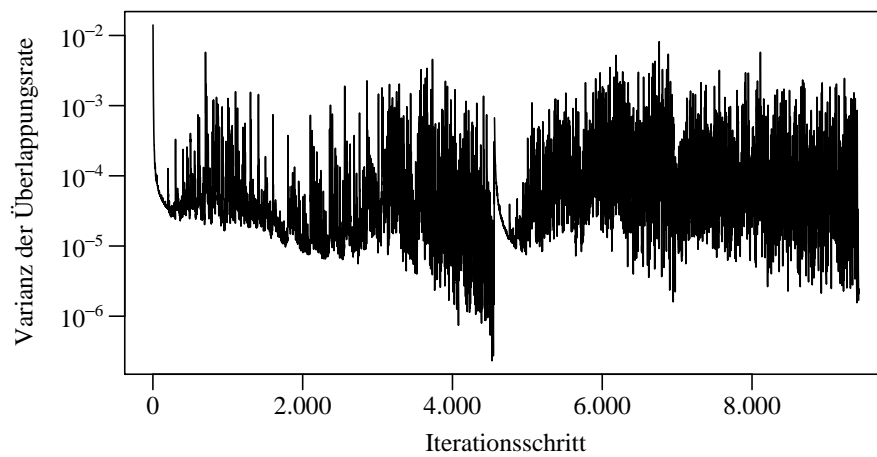


Abbildung 7.19: Varianz der Überlappungsrate während der Iteration.

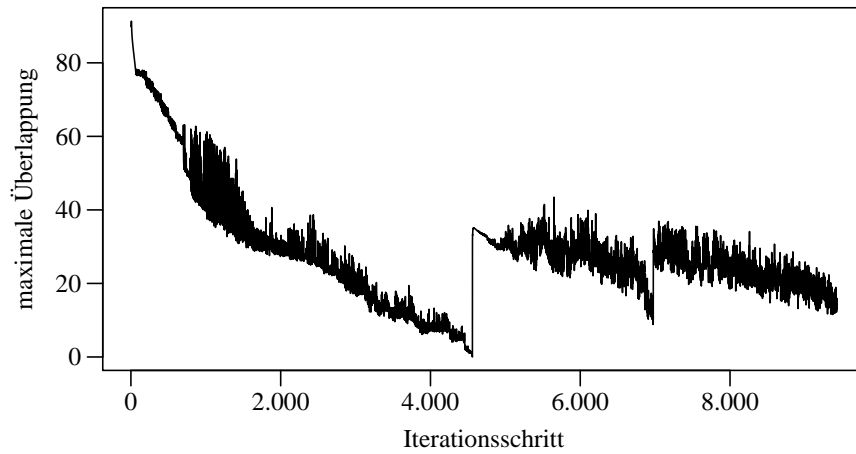


Abbildung 7.20: Weite der maximalen Überlappung während der Iteration.

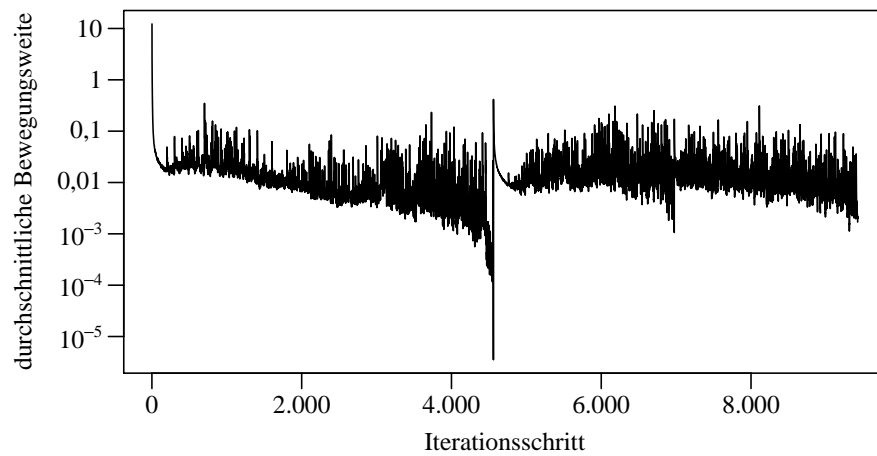


Abbildung 7.21: Durchschnittliche Bewegungsweite pro Kugel während der Iteration.

tenen Packstadium ergeben sich noch Strukturänderungen, die stärkere Bewegungen bei mehreren Kugeln auslösen, wodurch weitere Fortschritte in Richtung einer dichten Packung erfolgen können.

7.4 Simulationsergebnisse

Ein wichtiger Teil der Entwicklung des Programms umfasst die Verifikation der Simulationsergebnisse. Zu diesem Zweck wurden die Raumauffüllungen diverser Mischungen experimentell im Labor bestimmt und den Simulationsergebnissen gegenübergestellt. Um Auswirkungen der Partikelform sowie der Agglomeration auf die Packungsdichte auszuschließen, wurden zunächst Mischungen aus Glaskugeln erzeugt, die sowohl das Mischungsverhältnis als auch die absoluten Kugelanzahlen betreffend eins zu eins in die Simulation übertragen werden konnten. Um die Übereinstimmung mit dem experimentellen Verfahren zur Ermittlung der Packungsdichte (siehe [Pal09]) weiter zu erhöhen, wurde in der Simulation ein Zylinder mit Durchmesser 95 mm als Containergeometrie verwendet, dabei kamen harte Randbedingungen zum Einsatz. Die 6 untersuchten Mischungen wurden bereits in Kapitel 5.7 vorgestellt, Tabelle 7.2 informiert über die jeweils verwendeten Kugelanzahlen.

Kugelanzahl					
Fuller4	Fuller5	Fuller6	Bidispers1	Bidispers2	Tridispers
1.400.000	1.050.000	850.000	1.250.000	156.910	1.350.000

Tabelle 7.2: Umfang der verwendeten Glaskugelmischungen.

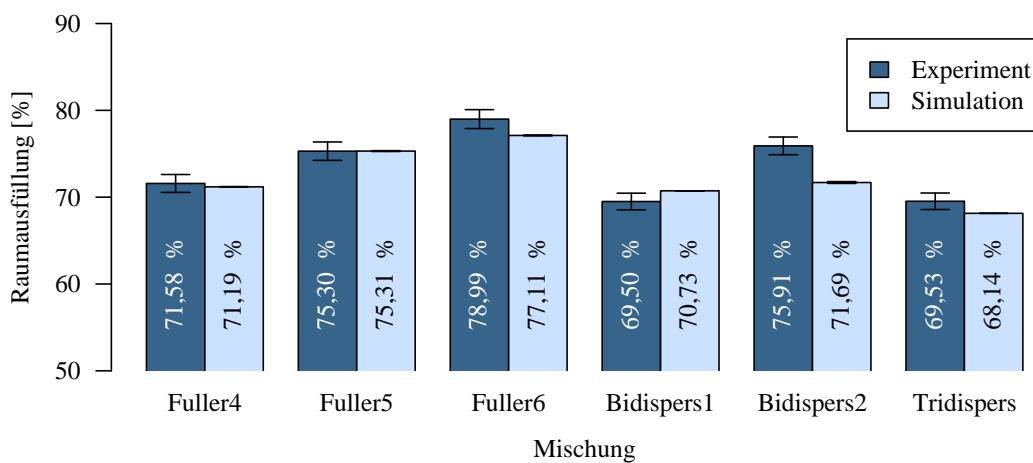


Abbildung 7.22: Gegenüberstellung der Ergebnisse aus Experiment und Simulation.

Abbildung 7.22 zeigt sowohl die experimentell als auch die simulativ ermittelten

Ergebnisse in einer Gegenüberstellung. Wie zuvor in Kapitel 5.7 wurden pro Mischung 7 Messungen bzw. Simulationsläufe durchgeführt und daraus Mittelwert sowie Standardabweichung bestimmt. Die Fuller-Verteilung erzielt (zumindest in den untersuchten Mischungen) offensichtlich eine umso höhere Raumausfüllung, je mehr Kugelgrößen involviert sind, was auch durch die gut übereinstimmenden Resultate aus Experiment und Simulation belegt werden kann. Insgesamt betrachtet ist lediglich die Diskrepanz der Ergebnisse für die Mischung „Bidispers2“ unbefriedigend. Eine durch die Simulation erzeugte Packung dieser Mischung ist in Abbildung 7.23 zu sehen. Sie weist im Vergleich zu den Packungen der weiteren Mischungen keine Auffälligkeiten auf. Ein möglicher Grund für die Abweichung bei dieser Mischung könnte in den leicht schwankenden Durchmessern und Materialdichten der Glaskugeln zu suchen sein.

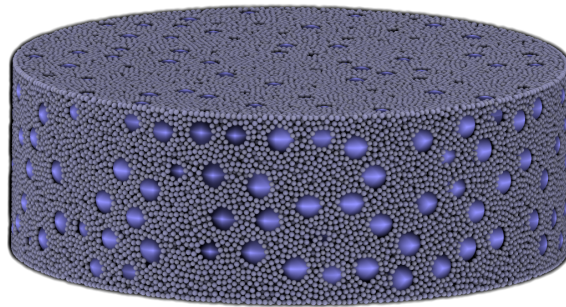


Abbildung 7.23: Packung der Glaskugelmischung „Bidispers2“.

Weitere Gegenüberstellungen von aus Experiment und Simulation gewonnenen Resultaten finden sich in Kapitel 5.7 (hierarchische Fraktionierung) und Kapitel 11 (Mörtelmischungen unter dem Einfluss der Agglomeration).

7.5 Möglichkeiten der Parallelisierung des Programms

Das Simulationssystem verursacht insbesondere bei sehr großen Partikelanzahlen einen hohen Berechnungsaufwand, sodass eine Aufteilung der Arbeitslast auf parallelisierten Architekturen nahe liegt. Generell ist eine Parallelisierung auf verschiedenen Ebenen möglich, die in diesem Abschnitt vorgestellt werden sollen.

7.5.1 Parallelisierung auf globaler Ebene

Zur Bestimmung der Raumausfüllung können (unter sonst gleichbleibenden Parametern) Wiederholungen mehrerer Simulationsläufe mit unterschiedlichem Startwert des Zufallsgenerators (engl. *random seed*) durchgeführt werden. Die Gesamtraumausfüllung ergibt sich dann aus dem Mittelwert dieser Simulationen, welche vollständig unabhängig voneinander ablaufen. Da der jeweilige Aufwand (d. h. die Anzahl der Iterationen) nicht vorhersehbar ist, kann in heterogenen Rechnernetzen kein optimiertes Scheduling geplant werden.

Eine weitere Einsatzmöglichkeit bietet die parallele Bewertung mehrerer Lösungskandidaten in der Optimierung von Mischungen (siehe Kapitel 12); auf verteilten Systemen kann dies – mit jeweils einer Mischungssimulation pro CPU – zeitgleich durchgeführt werden.

7.5.2 Parallelisierung auf Fraktionsebene

Es ist ohne großen Aufwand möglich, die Simulation der einzelnen Fraktionen in eigenständige Prozesse zu gliedern und verteilt zu bearbeiten. Jedoch gehen dabei die Möglichkeiten der präemptiven Fraktionsberechnung und des vorzeitigen Simulationsabbruchs (vgl. Kapitel 5.3) verloren, d. h. sämtliche Fraktionen müssen tatsächlich vollständig simuliert werden. Aufgrund dieses Umstands fällt der Performanzgewinn durch Parallelisierung auf Fraktionsebene in der Regel nur gering aus, daher bietet sich diese Methode vor allem dann an, wenn genug Prozessoren zur Verfügung stehen, um alle Fraktionen gleichzeitig bearbeiten zu können.

7.5.3 Parallelisierung im Collective Rearrangement

Die Realisierung dieser Art der Parallelisierung erfordert den größten Eingriff in die vorhandene Programmstruktur: Die Kugelmenge wird in mehrere Untermengen partitioniert, welche in getrennten Prozessen der Überlappungsbehandlung unterzogen werden. Ergibt sich bislang aus der Verschiebung einer Kugel k_i eine neue oder veränderte Überlappung mit einer ihrer Nachbarn k_j , so wirkt sich dieser neue Zustand noch im gleichen Iterationsschritt auf die Verschiebung von k_j aus, sofern k_j noch nicht bewegt wurde. Solche Zustandsänderungen während eines Iterationsschritts nach jeder Kugelverschiebung zwischen mehreren Prozessen zu propagieren ist sehr aufwändig, daher könnte diese Aktualisierung vereinfachend auf eine Synchronisierung

am Ende jedes Iterationsschritts beschränkt werden. Des Weiteren ist die Aufteilung der Kugelmenge kritisch, da jederzeit Zugriff auf die räumlichen Nachbarn einer Kugel gewährleistet sein muss. Wird die Parallelisierung ohne gemeinsamen Speicher ausgeführt, so sollte die Lokalität der Kugeln bei der Partitionierung die vorrangige Rolle spielen. Beispielsweise ließe sich der würfelförmige Container in seine 8 Oktanten aufteilen, deren enthaltene Kugeln dann in 8 eigenen, miteinander kommunizierenden Prozessen bewegt werden könnten.

Eine Parallelisierung eines CR-Algorithmus findet sich bei Hlushkou [Hlu04]. Jedoch handelt es sich dort um eine Modifizierung des Jodrey-Tory-Algorithmus [JT85], bei der die Suche nach dem kleinsten Abstand zwischen zwei Kugeln parallel ausgeführt wird; zwischen den einzelnen Prozessen bestehen daher keine Interdependenzen. Eine andere Entwicklung jüngster Zeit ist die Ausnutzung von Grafikprozessoren zur massiven Parallelisierung, die durch Bibliotheken wie CUDA (NVIDIA) und ATI Stream als Allzweckprozessoren dienen können. Hier wurden bereits viele Anwendungen aus der Molekulardynamik [ALT08] sowie Multi-Body-Probleme [BBZ08] umgesetzt, sodass ebenfalls eine Packungssimulation via CR in Reichweite scheint.

Kapitel 8

Effiziente Nachbarschaftsbestimmung

Im Gegensatz zu Simulationen der Molekulardynamik beschränkt sich die Paarwirkung im Simulationsprogramm für Kugelpackungen auf den direkten Kontakt zweier Kugeln. Dennoch dominiert die Identifizierung von Überlappungen die Laufzeit des gesamten Simulationsvorgangs. Dabei ist der Test auf Überlappung zwischen zwei Kugeln im Grunde einfach und im Vergleich zu komplexeren Partikelformen geradezu trivial. Daher ist es die schiere Menge der zu testenden Kugelpaare, die bei einem naiven Vorgehen für N Kugeln einen Aufwand von $O(N^2)$ in jedem Iterationsschritt verursacht, da dann jedes der $\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2}$ Kugelpaare überprüft werden muss.

Glücklicherweise ist eine Reduzierung des Aufwands möglich, denn für einen Kontakt bzw. eine Überlappung mit einer Kugel k kommen nur diejenigen Kugeln in Frage, die in unmittelbarer räumlicher Nähe zu k positioniert sind, die also in der Nachbarschaft von k liegen (der Nachbarschaftsbegriff umfasst in diesem Zusammenhang eine größere Menge als nur die in Definition 3.0.3.1 (c) betrachteten, in Kontakt befindlichen Kugeln). In diesem Kapitel werden spezielle Datenstrukturen präsentiert, die eine effiziente Nachbarschaftsverwaltung ermöglichen. Die diese Nachbarschaftsverwaltung betreffenden Operationen sind

- das Einfügen von Kugeln zu Beginn bzw. die Aktualisierung immer dann, wenn eine Kugel bewegt wurde sowie
- das Finden von Nachbarn einer gegebenen Kugel.

Da beides in jedem Iterationsschritt wiederholt angewandt wird, muss die Nachbarschaftsverwaltung dafür schnelle Methoden bereitstellen.

Die Nachbarschaftsverwaltung soll sich an der (typischerweise verwendeten) Geometrie des würfelförmigen Containers orientieren, andere Containerformen (Zylinder)

können in eine würfelförmige Umgebung eingebettet werden und bekommen hier der Einfachheit halber keine gesonderte Nachbarschaftsstruktur zugewiesen.

8.1 Ausnutzen von Kohärenz durch Verlet-Listen

Während des CR-Prozesses in der Simulation kann beobachtet werden, dass die Kugeln nur in kleinen Schritten bewegt werden, sodass sich die Menge der zu einer Kugel k benachbarten Kugeln über wenige Iterationsschritte hinweg kaum verändert. Diese Kohärenz über Ort und Zeit kann mit einer Listentechnik ausgenutzt werden, die von Loup Verlet eingeführt wurde [Ver67] und seitdem – als Verlet-Liste bezeichnet – häufig in der Molekulardynamik eingesetzt wird [DTS05a]. In ihrer Funktionsweise kann man Verlet-Listen als Cache verstehen, da sie stets eine valide Nachbarmenge für die Suche nach überlappenden Nachbarn zur Verfügung stellen und so Speicherplatz eintauschen, um Zugriffszeit zu sparen.

Vor Beginn der CR-Iteration wird für jede Kugel k_i (mit Radius $r_i = d(k_i)/2$) eine Verlet-Liste $L_V(k_i)$ erstellt, die alle Kugeln enthält, die die Verlet-Kugel $V(k_i)$ schneiden (siehe Abbildung 8.1 a)). $V(k_i)$ besitzt den gleichen Mittelpunkt wie k_i und den Radius $r_i + \delta_V$; die Verlet-Distanz δ_V ist für alle Kugeln gleich. Zusammen mit der Verlet-Liste wird außerdem die Position $m_V(k_i)$ der Verlet-Kugel zum Zeitpunkt der Erzeugung bzw. der letzten Aktualisierung der Liste gespeichert.

Die Aktualisierung der Verlet-Listen erfolgt unabhängig voneinander, denn lediglich die Entfernung des Mittelpunkts der Kugel k_i von $m_V(k_i)$ ist relevant: Nur wenn nach einer Verschiebung der Kugel dieser Abstand größer als $\delta_V/2$ ist, muss diese Verlet-Liste erneut bestimmt werden, siehe Abbildung 8.1 b). Um anschließend alle k_i betreffenden Kugelbeziehungen auf den aktuellen Stand zu bringen, muss k_i aus allen Verlet-Listen gelöscht werden, die zu Kugeln gehören, welche ihrerseits nach der Aktualisierung nicht mehr in $L_V(k_i)$ enthalten sind. Zu den Verlet-Listen aller neu in $L_V(k_i)$ vorkommenden Kugeln muss k_i ebenfalls hinzugefügt werden, um die Symmetrie der paarweisen Nachbarschaftsrelation zu erhalten. Auf diese Weise ist die Validität aller Verlet-Listen zu jedem Zeitpunkt gewährleistet.

Die Wahl des einzigen Parameters, der Verlet-Distanz δ_V , ist kritisch in Bezug auf die Leistung dieser Technik: Ein zu geringer Betrag (im Vergleich zu den Kugelbewegungen) sorgt für häufige Aktualisierungen der Listen, während ein zu hoher Betrag ein Aufblähen der Listen verursacht, denn die Anzahl der Kugelnachbarn in der Verlet-Liste wächst mit δ_V^3 . So sind u. a. zu berücksichtigen: Die mittlere

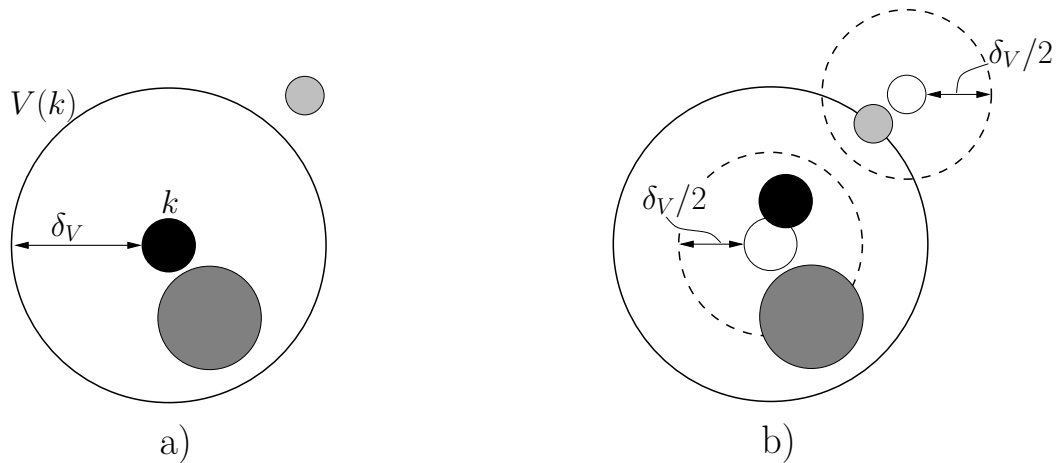


Abbildung 8.1: a) Die Verlet-Liste der schwarzen Kugel k enthält alle Kugeln, die innerhalb der Verlet-Kugel $V(k)$ liegen. b) Nach Wegbewegen von k bleibt die Verlet-Liste gültig, da sich jede Kugel um weniger als $\delta_V/2$ von ihrer ursprünglichen Position entfernt hat.

Weite der Kugelbewegungen, die Durchmesser- und die Verteilung der Kugeln, die anfänglich vorhandenen Überlappungen und natürlich der Aufwand für die Aktualisierung einer Verlet-Liste. Dieser kann – ähnlich der zu Beginn des Kapitels beschriebenen naiven Suche nach Überlappungen – $O(N)$ für jede Verlet-Liste betragen, oder aber durch die in den nachfolgenden Abschnitten beschriebenen Nachbarschaftsstrukturen weiter reduziert werden.

Im Simulationsprogramm hat sich nach einigen Tests [RK09] der Anfangswert $\delta_V = r_{\min} = \min_i d(k_i)/2$ als günstig erwiesen. δ_V wird im Laufe der Simulation weiter abgesenkt, um den sich verringernden Bewegungsweiten der Kugeln Rechnung zu tragen. Bei jeder Containerverkleinerung wird die Verlet-Distanz auf $\frac{2}{3}\delta_V$ gesetzt.

8.2 Datenstrukturen für die Bestimmung der Nachbarn

Die hier aufgeführten Datenstrukturen sind speziell an polydisperse Kugelmischungen angepasst und erlauben damit eine effiziente Verwaltung der Nachbarschaftsbeziehungen. Sie können einzeln eingesetzt werden, um während der Überlappungsuntersuchung eine Anfrage nach benachbarten Kugeln zu beantworten; von größerem Vorteil ist aber die Verwendung in Kombination mit den Verlet-Listen: Die CR-Routine sucht die Nachbarn einer Kugel und bekommt deren Verlet-Liste geliefert, und eine Aktualisierung der Verlet-Liste greift auf die Nachbarschaftsverwaltung zurück.

8.2.1 Adaptives Gitter

Zunächst wird das einfache Gitter erläutert, das eine verbreitete Datenstruktur für monodisperse Kugeln darstellt. Anschließend werden Varianten beschrieben, die für polydisperse Mischungen geeignet sind, bevor die Einteilung der Gitterzellen in Sektoren vorgeschlagen wird, was die Effizienz noch einmal steigert. Schließlich erfolgt die Berechnung der optimalen Zellengröße, um das Gitter adaptiv an die Kugelmischung anzupassen.

Gitter als Nachbarschaftsstruktur

Als Nachbarschaftsstruktur in Simulationen der Molekulardynamik hat sich die Aufteilung des Simulationscontainers in gleich große Zellen durchgesetzt [AW59]. Ist der Container ein Würfel, kann dazu ein orthogonales **Gitter** benutzt werden, so dass die Zellen ebenfalls Würfel sind. Jede Zelle enthält als Datenstruktur eine Liste mit Kugeln, deren Mittelpunkte in dieser Zelle liegen. Daher wird diese Nachbarschaftsstruktur in der angelsächsischen Literatur als „*cell-linked list*“ oder „*link-cell*“-Methode bezeichnet [HGE74]. Verwendung finden Gitter sowohl in zahlreichen DEM/MD-Simulationen (z. B. [GDK89, Wac06, SY07]) als auch in CR-Verfahren [BM91, YMT96].

Für die Bestimmung der Nachbarn einer Kugel werden sämtliche Kugeln aus den in Frage kommenden Zellen herangezogen, daher ist für die Effizienz dieser Methode die Größe der Zellen entscheidend: Zu große Zellen enthalten unnötig viele Kugeln, die als potenzielle Nachbarn geprüft werden müssen, obwohl sie tatsächlich weiter entfernt liegen könnten, während zu kleine Zellen das Absuchen einer großen Zellenanzahl nötig machen. Für gleich große Kugeln bietet es sich an, die Seitenlänge z der Zellen auf den Kugeldurchmesser festzulegen. Dadurch sind in D Dimensionen nur 3^D Zellen zu berücksichtigen, wie Abbildung 8.2 illustriert.

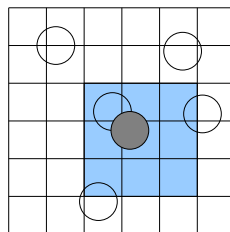


Abbildung 8.2: Gitter für monodisperse Kugeln. Die markierten Zellen können überlappte Nachbarn enthalten.

Die Komplexität für das Einfügen einer Kugel in diese Nachbarschaftsstruktur liegt

in $O(1)$, da aus den Mittelpunktskoordinaten der Kugel in konstanter Zeit die betreffende Zelle errechnet werden kann. Für die oben geschilderte Zellengröße z bei N monodispersen Kugeln in einem würfelförmigen Container mit Seitenlänge C sind immer 3^D Zellen mit jeweils durchschnittlich

$$n = \frac{N}{\left(\frac{C}{z}\right)^D} = \frac{N \cdot z^D}{C^D}$$

Kugeln als Nachbarn zu untersuchen. Das Containervolumen C^D wächst proportional zur Kugelanzahl N . Daher ist in diesem Fall auch das Durchsuchen des Gitters in konstanter Zeit möglich. Bei Betrachtung polydisperser Kugeln gestaltet sich das Finden der optimalen Zellengröße weitaus schwieriger, insbesondere unter Verwendung Bindemittel-typischer Korngrößenverteilungen. Würde die Zellengröße auf die Summe der beiden größten Kugelradien gesetzt, so wäre es wahrscheinlich, dass die Nachbarschaft jeder Kugel aus allen anderen Kugeln bestünde; das Gitter wäre zu einer einzelnen Zelle degeneriert. Wäre die Zellengröße kleiner, dann würden für eine Kugel k keine Kugeln gefunden, deren Mittelpunkte zwar außerhalb der 3^D Nachbarzellen liegen, die jedoch einen so großen Radius besitzen, dass sie deshalb dennoch k überlappen.

Varianten für polydisperse Mischungen

Eine mögliche Alternative besteht darin, polydisperse Kugeln nicht nur bezüglich ihres Mittelpunktes in einer einzigen Zelle, sondern in allen Zellen zu speichern, die von ihnen überlappt werden. Dann müssen für eine Kugel k mit Radius r nur die Zellen im Abstand r um den Mittelpunkt von k herum (= die k enthaltenden Zellen) durchsucht werden (siehe Abbildung 8.3), häufig wird dabei nicht die Kugelform ausgenutzt, sondern vereinfachend auch auf die eigentlich nicht überlappten Zellen an den Ecken zurückgegriffen (in Abbildung 8.3 heller dargestellt). Aus der so gewonnenen Kugelliste sind anschließend noch die Mehrfacheinträge zu entfernen, was ebenso einen Mehraufwand verursacht wie die höhere Anzahl der zu speichernden Verweise auf die Kugeln, insbesondere bei einem feinen Gitter. Das Einfügen einer Kugel in diese Variante der Nachbarschaftsstruktur ist immer noch in $O(1)$ möglich, jedoch langsamer als in der ursprünglichen Version, da jede Kugel in viele Zellen eingefügt werden muss. Das Durchsuchen der Struktur nach benachbarten Kugeln besitzt hier ebenso eine Laufzeit in $O(1)$, ist aber auf Grund der Dublettenverwaltung und des Speicherbedarfs ebenfalls langsamer.

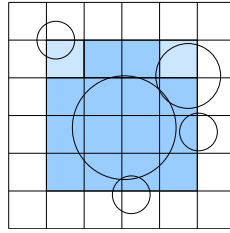


Abbildung 8.3: Mehrfache Speicherung der Kugel in allen überlappten Zellen.

Da Bindemittel-typische Korngrößenverteilungen relativ wenige Partikel mit sehr großem Durchmesser aufweisen, ist es hier ineffizient, die Zellengröße diesen großen Durchmessern anzupassen. Stattdessen bietet es sich an, die Kugeln aufzuteilen: Nur **kleine Kugeln** mit den Durchmessern $d(k) \leq z$ werden in den Zellen gespeichert, während eine separate Liste alle **großen Kugeln** mit den Durchmessern $d(k) > z$ enthält, die grundsätzlich zur Nachbarschaft *jeder* Kugel hinzugefügt werden. Dabei ist die Zellengröße z erneut entscheidend: Ist sie zu groß bemessen, so verkürzt sich zwar die Liste der großen Kugeln und senkt damit den konstanten Beitrag zu jeder Nachbarschaft, jedoch enthält eine Zelle dann zu viele Kugeln, was die Nachbarschaft wiederum unnötig vergrößert. Eine zu kleine Zellengröße versagt zu vielen Kugeln eine Speicherung in einer Gitterzelle, so dass diese dann in der separaten Liste zu jeder Nachbarschaft hinzugefügt werden müssen.

Sei $a(k)$ die Anzahl der in Zellen enthaltenen Kugeln in der Nachbarschaft einer kleinen Kugel k , und G die Anzahl der großen, separat gespeicherten Kugeln. Dann besitzt k insgesamt

$$n(k) = a(k) + G - 1$$

Kugeln in ihrer Nachbarschaft. Es ist zu beachten, dass die Anzahl der Zellen für die Berechnung von $a(k)$ nur für kleine Kugeln 3^D beträgt. Eine große Kugel mit Durchmesser $d(k) > z$ überspannt in jeder Achsenrichtung mindestens $\lceil \hat{d} \rceil$ Zellen, wobei $\hat{d} = d(k)/z$. Wie Abbildung 8.4 zeigt, kann dies jedoch abhängig von der Position jeweils eine Zelle mehr betreffen, also $\lceil \hat{d} + 1 \rceil$ überlappte Zellen. Hinzu kommen noch die angrenzenden Zellen, in denen sich kleine Kugeln befinden können, die k möglicherweise ebenfalls überlappen. Daher sind insgesamt $(\lceil \hat{d} \rceil + 2)^D$ Zellen zu berücksichtigen. Diese Anzahl gilt unabhängig davon, ob es sich bei k um eine kleine oder große Kugel handelt. Zu erwähnen ist weiterhin, dass hier wieder vereinfachend die Kugelform vernachlässigt bzw. durch eine – parallel zu den Koordinatenachsen ausgerichtete – *Bounding Box* (kleinster Quader, der k enthält) approximiert wird, sodass auch Zellen gezählt werden, die eigentlich in einer Ecke dieser Nachbarschaft liegen und von der Kugel nicht überlappt werden.

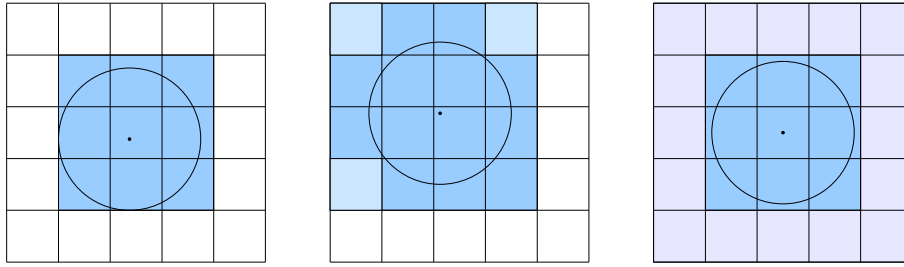


Abbildung 8.4: Die große Kugel besitzt einen Durchmesser von weniger als 3 Zellenlängen (links), kann aber – je nach Position (mitte) – in jeder Richtung bis zu 4 Zellen berühren. Diese Anzahl der zu berücksichtigenden Zellen erhöht sich auf 5, da Kugeln aus angrenzenden Zellen (rechts) die große Kugel überlappen. können.

Zur Bestimmung der genauen Anzahl überlappter Zellen soll ein Beispiel diskutiert werden. Seien der Durchmesser $d(k)$ einer Kugel k und die Zellenlänge z so gewählt, dass $d(k) = 2,75z$ gilt. In Zellenlängen gemessen beträgt der Durchmesser damit $\hat{d} = d(k)/z = 2,75$. Es gibt nun unendlich viele Positionen des Kugelmittelpunktes innerhalb einer Zelle, bei denen die Kugel in Richtung der X -Achse genau 3 Zellen überlappt, doch die X -Koordinate des Mittelpunktes muss dafür innerhalb eines Intervalls der Länge $0,75z$ liegen, wie Abbildung 8.5 anhand der beiden Grenzfälle veranschaulicht. Die übrigen, auf einer Gesamtlänge von $0,25z$ befindlichen Positionen führen zu einer Überlappung von 4 Zellen in dieser Richtung.

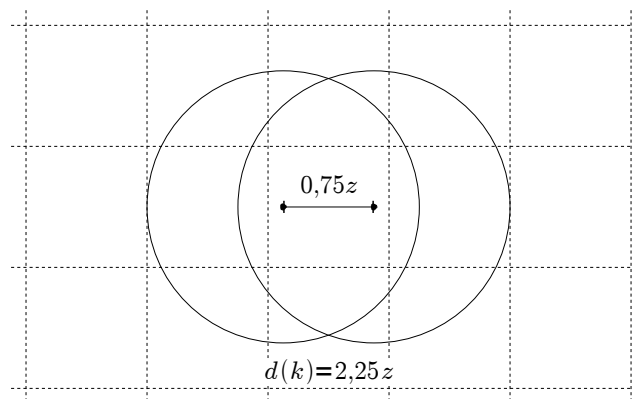


Abbildung 8.5: Beispiel einer Kugel, die in Richtung der X -Achse genau 3 Zellen überlappt, solange sich die X -Koordinate des Mittelpunktes innerhalb des eingezeichneten Intervalls befindet.

Der Anteils des Intervalls, das auf 3 überlappte Zellen (in einer Achsenrichtung) führt, an der Zellenlänge beträgt $0,75z/z = 0,75$. Die Wahrscheinlichkeit, dass dies zugleich für alle 3 Achsenrichtungen gilt, kann mit $0,75^3 \approx 0,42$ angegeben werden. In diesem Fall wären $3^3 = 27$ Zellen überlappt. Analog lässt sich diese Rechnung für alle weiteren Fälle durchführen, siehe Tabelle 8.1. Zu beachten ist lediglich, dass es jeweils 3 grundsätzlich verschiedene Kombinationen für die Kugel gibt, in zwei

Richtungen 3 und in einer Richtung 4 Zellen bzw. in einer Richtung 3 und in zwei Richtungen 4 Zellen zu überlappen, sodass die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten mit dem Faktor 3 multipliziert werden.

Wahrscheinlichkeit	# Nachbarzellen
$0,75 \cdot 0,75 \cdot 0,75 \approx 0,42$	$3 \cdot 3 \cdot 3 = 27$
$3 \cdot 0,75 \cdot 0,75 \cdot 0,25 \approx 0,42$	$3 \cdot 3 \cdot 4 = 36$
$3 \cdot 0,75 \cdot 0,25 \cdot 0,25 \approx 0,14$	$3 \cdot 4 \cdot 4 = 48$
$0,25 \cdot 0,25 \cdot 0,25 \approx 0,02$	$4 \cdot 4 \cdot 4 = 64$

Tabelle 8.1: Wahrscheinlichkeiten für verschiedene Anzahlen überlappter Zellen einer Kugel k mit $d(k) = 2,75z$.

Daraus lässt sich eine allgemeine Aussage für die erwartete Anzahl überlappter Zellen ableiten. Sei $\hat{d} = d(k)/z$ für eine beliebige Kugel k und eine frei gewählte Zellenlänge z . Die Wahrscheinlichkeit, dass in einer Richtung $\lceil \hat{d} \rceil$ Zellen überlappt werden, beträgt $\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d}$. Dem Beispiel folgend ergeben sich die in Tabelle 8.2 aufgelisteten Formeln, deren jeweiliges Argument \hat{d} aus Platzgründen eingespart wurde.

Wahrscheinlichkeit	# Nachbarzellen
$p_1 = \left(\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d} \right)^3$	$m_1 = \left(\lceil \hat{d} \rceil \right)^3$
$p_2 = 3 \left(\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d} \right)^2 \left(1 - \left(\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d} \right) \right)$	$m_2 = \left(\lceil \hat{d} \rceil \right)^2 \left(\lceil \hat{d} \rceil + 1 \right)$
$p_3 = 3 \left(\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d} \right) \left(1 - \left(\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d} \right) \right)^2$	$m_3 = \lceil \hat{d} \rceil \left(\lceil \hat{d} \rceil + 1 \right)^2$
$p_4 = \left(1 - \left(\lceil \hat{d} \rceil - \hat{d} \right) \right)^3$	$m_4 = \left(\lceil \hat{d} \rceil + 1 \right)^3$

Tabelle 8.2: Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Anzahlen überlappter Zellen einer Kugel k mit $\hat{d} = d(k)/z$.

Die resultierende Formel für die erwartete Anzahl überlappter Zellen lautet

$$m_Z(k, z) = \sum_{i=1}^4 p_i(\hat{d}) m_i(\hat{d}) \quad \text{mit } \hat{d} = \frac{d(k)}{z}. \quad (8.1)$$

Wie leicht einzusehen ist, fällt diese Anzahl deutlich niedriger aus als die oben postulierten $\left(\lceil \hat{d} \rceil + 2 \right)^3$ Nachbarzellen, allerdings sind darin auch noch nicht diejenigen angrenzenden Zellen berücksichtigt, die k selbst nicht berührt, aus denen jedoch Kugeln herausragen und so k überlappen können. Die im nächsten Abschnitt eingeführte Klassifizierung der Kugeln erlaubt es, nur den relevanten Teil der Kugeln dieser angrenzenden Zellen herauszusieben.

Einführung von Sektoren

Die Anzahl der Nachbarkugeln lässt sich reduzieren, wenn Informationen über die Lage der Kugeln innerhalb der Zellen verwendet werden: Eine kleine Kugel k mit Durchmesser $d(k)$ kann entweder komplett innerhalb einer Zelle liegen oder aus einer oder mehreren Seitenwänden der Zelle herausragen (jedoch nicht aus zwei gegenüberliegenden Seiten, da $d(k) \leq z$). Dieses Merkmal erlaubt eine weitere Unterteilung der Zelle in 3^D Sektoren. Pro Sektor wird eine Liste aller Kugeln dieser Zelle gespeichert, die auf gleichartige Weise aus der Zelle herausragen. Ein Beispiel für den zweidimensionalen Fall zeigt Abbildung 8.6, für $D = 3$ ergibt dies 6 Sektoren für jeweils eine überlappte Seitenwand, 12 Sektoren für die Kugeln, die gleich zwei Seitenwände und daher eine Kante schneiden, 8 Sektoren für die Ecken-überlappenden Kugeln sowie einen zentraler Sektor für Kugeln, die nicht aus der würfelförmigen Zelle herausragen. Wichtig ist bei dieser Einteilung der Bezug auf Position und Radius der betrachteten Kugel, d. h. die Abgrenzungen der Sektoren sind nicht als absolute Maße zu verstehen, sondern können sich von Kugel zu Kugel unterscheiden, da es sich lediglich um eine Klassifizierung handelt. Abhängig von der Lage der Kugel k müssen nun nicht mehr bis zu $3^D = 27$ Zellen betrachtet werden, sondern nur noch die kompletten u Zellen, die k enthalten bzw. überlappen sowie insgesamt v Sektoren der übrigen Zellen, aus denen Kugeln in Richtung k herausragen können. Die Tabelle 8.3 gibt Auskunft über u und v .

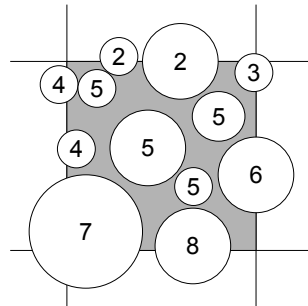


Abbildung 8.6: Klassifizierung der Kugeln nach Art ihrer Überlappung mit der Zelle.

Kleine Kugeln mit Radius $r := d(k_j)/2 \leq z/2$, die aus einer Nachbarzelle mit gemeinsamer Seitenfläche zur Zelle der kleinen Kugel k_i ($i \neq j$) stammen und durch diese Seite die Zelle von k_i überlappen, müssen ihren Mittelpunkt innerhalb eines Volumens der Größe $V_S(r) = z^2 r$ in der benachbarten Zelle besitzen. Für Kugeln aus einer mit einer Kante angrenzenden Nachbarzelle gibt $V_K(r) = zr^2$ das Volumen an, in dem sich der Kugelmittelpunkt befinden muss, und für Kugeln einer diagonal über Eck angrenzenden Zelle gilt schließlich $V_E(r) = r^3$ (siehe Abbildung 8.7). Werden diese Volumina ins Verhältnis zum Zellenvolumen z^3 gesetzt, liefert das die Anteile

Position der Kugel relativ zur Zelle	# kompl. Zellen u	# Sektoren v			
		Seiten	Kanten	Ecken	Summe
komplett innerhalb	1	6	12	8	26
überlappt Seite	2	9	12	4	25
überlappt Kante	4	12	9	2	23
überlappt Ecke	8	12	6	1	19

Tabelle 8.3: Anzahl der zu berücksichtigenden kompletten Zellen und zusätzlichen Sektoren in Abhängigkeit von der Position der Kugel in ihrer Zelle.

an einer Zelle und es lässt sich – mit der mittleren Kugelanzahl pro Zelle n_Z – eine Abschätzung der Anzahl der Kugeln angeben, die eine Kugel k_i je nach ihrer Position als Nachbarkugeln besitzt. Befindet sich k_i im zentralen Sektor und überlappt den Zellenrand somit nicht, dann beträgt die mittlere Anzahl der Nachbarn aus den Gitterzellen

$$a_1 = n_Z \left(1 + 6 \frac{\overline{V_S}}{z^3} + 12 \frac{\overline{V_K}}{z^3} + 8 \frac{\overline{V_E}}{z^3} \right) - 1, \quad (8.2)$$

hinzu kommen noch die großen, nicht ins Gitter eingefügten Kugeln aus der separat gespeicherten Liste. Für die in 2, 4 und 8 Zellen ragenden Kugeln gilt entsprechend

$$a_2 = n_Z \left(2 + 9 \frac{\overline{V_S}}{z^3} + 12 \frac{\overline{V_K}}{z^3} + 4 \frac{\overline{V_E}}{z^3} \right) - 1, \quad (8.3)$$

$$a_4 = n_Z \left(4 + 12 \frac{\overline{V_S}}{z^3} + 9 \frac{\overline{V_K}}{z^3} + 2 \frac{\overline{V_E}}{z^3} \right) - 1 \quad \text{bzw.} \quad (8.4)$$

$$a_8 = n_Z \left(8 + 12 \frac{\overline{V_S}}{z^3} + 6 \frac{\overline{V_K}}{z^3} + 1 \frac{\overline{V_E}}{z^3} \right) - 1, \quad (8.5)$$

mit den Koeffizienten aus Tabelle 8.3. $\overline{V_S}$ steht für das über alle Kugelradien ermittelte durchschnittliche Volumen, das den Aufenthaltsbereich des Mittelpunktes einer Nachbarkugel eingrenzt. Es berechnet sich durch

$$\overline{V_S} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_S(r_i) \quad \text{mit } r_i = \frac{d(k_i)}{2}.$$

Für $\overline{V_K}$ und $\overline{V_E}$ gilt Entsprechendes.

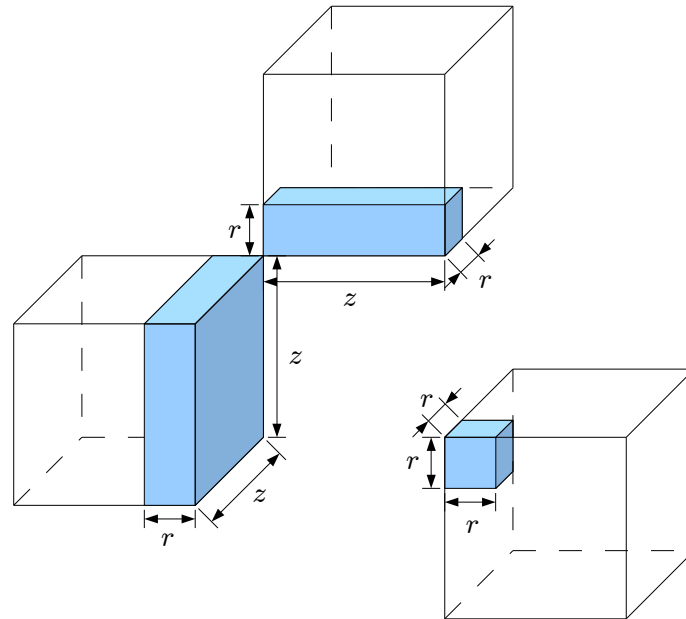


Abbildung 8.7: Beispiele der Volumina V_S , V_K und V_E in den Nachbarzellen, die den Aufenthaltsbereich des Mittelpunktes einer Nachbarkugel mit Radius r eingrenzen.

Wegen $r_i = d(k_i)/2 \leq z/2$ können mit

$$\begin{aligned} a_1 &\leq 8n_Z - 1, \\ a_2 &\leq 10n_Z - 1, \\ a_4 &\leq 12,5n_Z - 1 \quad \text{und} \\ a_8 &\leq 15,625n_Z - 1 \end{aligned}$$

obere Abschätzungen der Gleichungen 8.2–8.5 angegeben werden, sie liegen alle deutlich unter $27n_Z - 1$, was die Anzahl der Nachbarn aus den Gitterzellen bei Verzicht auf Sektoren darstellt.

Auf ähnliche Weise lässt sich die erwartete Anzahl der Nachbarkugeln für eine große Kugel bestimmen, dies soll an dieser Stelle jedoch nicht weiter ausgeführt werden.

Optimale Zellengröße

Um einen Wert für z zu finden, der die mittlere Anzahl der Nachbarn pro Kugel minimiert, muss zunächst die Abhängigkeit dieser Anzahl von Radius und Position einer Kugel bekannt sein. Dazu werden die möglichen Positionen einer kleinen Kugel k (mit Radius $r := d(k)/2$) in einer Zelle untersucht.

Sollte k komplett innerhalb der Zelle liegen, so muss ihr Mittelpunkt zu jeder Seitenwand einen Abstand $\geq r$ aufweisen. Das Volumen, in dem sich der Mittelpunkt befinden darf, betragt also $(z - 2r)^3$, und die Wahrscheinlichkeit, dass der Mittelpunkt der Kugel in diesem Bereich der Zelle liegt, ist

$$w_1(r) = \frac{(z - 2r)^3}{z^3}.$$

Die Wahrscheinlichkeiten, dass eine Kugel durch eine der 6 Seitenwande insgesamt 2 Zellen, durch eine der 12 Kanten 4 Zellen oder durch eine der 8 Ecken 8 Zellen uberlappt, sind durch

$$\begin{aligned} w_2(r) &= \frac{6r(z - 2r)^2}{z^3}, \\ w_4(r) &= \frac{12r^2(z - 2r)}{z^3} \quad \text{und} \\ w_8(r) &= \frac{8r^3}{z^3} \end{aligned}$$

gegeben. Das sind alle Wahrscheinlichkeiten, es gilt $w_1(r) + w_2(r) + w_3(r) + w_4(r) = 1$

Mit den ermittelten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten einer Kugel und den aus diesen Positionen resultierenden Nachbaranzahlen (Gleichungen 8.2–8.5) lasst sich eine Schatzung fur die zu erwartende Anzahl der Nachbarn der Kugel angeben, namlich

$$n(k) = G + w_1(r)a_1 + w_2(r)a_2 + w_4(r)a_4 + w_8(r)a_8 - 1 \quad \text{fur } d(k) \leq z$$

mit $r = d(k)/2$.

Die Aufgabe besteht nun darin, eine Zellengroe z zu finden, die die erwartete Anzahl der Nachbarn pro Kugel minimiert. Hierfur genugt es, die moglichen Werte fur z auf die Kugeldurchmesser $d(k_i)$ zu beschranken. Mit der erwarteten mittleren Anzahl Nachbarkugeln aus den Gitterzellen fur kleine Kugeln

$$a_K = \frac{1}{N - G} \sum_{r_i \leq z/2} (w_1(r_i)a_1 + w_2(r_i)a_2 + w_4(r_i)a_4 + w_8(r_i)a_8) \quad \text{mit } r_i = \frac{d(k_i)}{2}$$

sowie einem analog dazu bestimmten Wert a_G fur groe Kugeln ergibt sich die erwartete Anzahl der Nachbarn pro Kugel in Abhangigkeit von der Zellengroe zu

$$\bar{n}(z) = G + \frac{N - G}{N} a_K + \frac{G}{N} a_G - 1. \quad (8.6)$$

Die dieser Berechnung zu Grunde gelegten Daten in der Tabelle 8.3 und den Gleichungen (8.2)–(8.5) unterstellen stillschweigend, dass eine kleine Kugel k_i in allen angrenzenden Zellen überlappende Nachbarn besitzen kann. Da eine kleine Nachbar-kugel k_j , $j \neq i$, wegen $d(k_j) \leq z$ maximal bis zur Hälfte aus ihrer Zelle ragt, muss k_i den Mittelpunkt ihrer Zelle in allen Richtungen überragen, um überhaupt aus allen angrenzenden Zellen überlappt werden zu können. Dieser Fall tritt seltener ein als zunächst zu erwarten ist, da in Simulationen stark polydisperser Mischungen viele Kugeln einen Durchmesser $\leq z/2$ besitzen können. Eine akkurate Schätzung der erwarteten Anzahl der Nachbarn pro Kugel muss daher auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für jede Kugel berechnen, dass diese den Mittelpunkt ihrer Randzellen enthält und Nachbarn aus den angrenzenden Zellen besitzen kann. Diese Rechnung ist in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt worden, da schon die Berechnung von Gleichung 8.6 so komplex ist, dass im Simulationsprogramm die Bestimmung der optimalen Zellengröße

$$z^* = \operatorname{argmin} \bar{n}(z)$$

zu viel Zeit in Anspruch nimmt und beispielsweise für die Nachbarschaftsverwaltung während der Phase der Kugelplatzierung im Container länger dauert als die tatsächliche Platzierung selbst. Das liegt an der mit $O(N^2)$ aufwändigen Bestimmung von z^* durch vollständige Enumeration. Außerdem kann es bei einer Containervergrößerung passieren, dass sich – wegen des festen z^* – die Anzahl der Zellen pro Dimension ändert. Wenn dies geschieht, wird erneut ein optimales z^* ermittelt. Daher wird eine approximierende Schätzung durchgeführt, die auf Gleichung 8.1 basiert und somit die aus angrenzenden, nicht überlappten Zellen hereinragenden Kugeln vernachlässigt – bei der späteren tatsächlichen Ermittlung der Nachbarn einer Kugel werden diese selbstverständlich berücksichtigt. Die erwartete Anzahl der Nachbarn pro Kugel beträgt nun

$$\bar{n}_{\text{appr}}(z) = G - 1 + \frac{n_Z}{N} \sum_{i=1}^N m_Z(k_i, z)$$

mit $G = |\{k_i : d(k_i) > z\}|$ sowie

$$n_Z = \frac{(N - G)}{\left(\frac{c}{z}\right)^3},$$

und die bezüglich dieser Schätzung optimale Zellenlänge lautet

$$z_{\text{appr}}^* = \operatorname{argmin} \bar{n}_{\text{appr}}(z).$$

Zusammengefasst lassen sich vier Modifikationen feststellen, die das adaptive Gitter gegenüber der herkömmlich verwendeten Variante auszeichnen:

1. Die Kugelmenge ist zweigeteilt. Kleine, in die Zellen passende Kugeln sind wie gewöhnlich im Gitter einsortiert, wogegen größere Kugeln in einer separaten Liste gesammelt werden.
2. Die Position des Kugelmittelpunktes innerhalb der Zelle spielt bei der Bestimmung der Nachbarn eine Rolle, daher werden nur die von (einer Bounding Box) der Kugel überlappten Zellen betrachtet.
3. In jeder Zelle erfolgt eine weitere Unterteilung der Kugeln gemäß der Klassifizierung in 27 Sektoren. Kugeln eines Sektors besitzen den gleichen Überlappungsmodus bezüglich der Zelle.
4. Die Wahl der optimalen Zellengröße erlaubt eine Minimierung der erwarteten mittleren Anzahl an Nachbarn je Kugel.

8.2.2 Loose Octree

Zunächst wird der herkömmliche Octree vorgestellt. Im Gegensatz zum Gitter sind seine strukturellen Elemente nicht von gleicher Größe. Der Gewinn aufgrund dieser Flexibilität wird jedoch durch einen Nachteil zunichte gemacht, der im darauf folgenden Abschnitt glücklicherweise durch die Variante des Loose Octree vermieden werden kann.

Octree

Eine weitere, häufig verwendete Datenstruktur zur Verwaltung von Objekten im dreidimensionalen Raum ist der **Octree** [JT80, Mea82]. Die Elemente – Knoten genannt – dieser hierarchischen Baumstruktur können durch rekursive Aufteilung erhalten werden: Sei das Zentrum des Containers im Koordinatenursprung positioniert. Dann bildet der gesamte Container den ersten Knoten (Wurzelknoten) der Ebene 0, und die Oktanten des Koordinatensystems partitionieren den Container in 8 gleich große Teile, die Knoten der Ebene 1. Sie sind die Kinder des Wurzelknotens. Jeder dieser Knoten lässt sich seinerseits wiederum in 8 gleich große Unterknoten aufteilen (siehe Abbildung 8.8), sodass eine pyramidenförmige Hierarchie entsteht. Auf der Ebene l besitzt der Octree l^8 Knoten, wodurch die Anzahl der Ebenen (die Tiefe des Baumes) aus Gründen des Speicherplatzbedarf meist im einstelligen Bereich

anzusiedeln ist. Eine Möglichkeit zur drastischen Reduzierung dieses Speicherplatzes bietet die nur bei Bedarf durchgeführte Unterteilung der Knoten, was bedeutet, dass Knoten erst gar nicht erzeugt werden, wenn in ihnen keine Kugel abgelegt werden würde. Diese adaptive Option macht jedoch nur bei statischen Szenen Sinn, da für bewegte Objekte wiederum viele Operationen zum Löschen und Erstellen der Knoten ausgeführt werden müssen, was der Performanz schadet.

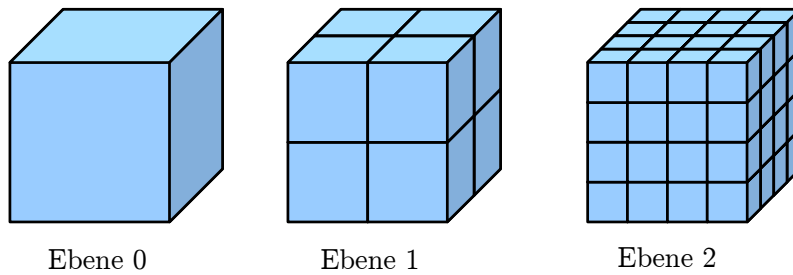


Abbildung 8.8: Die ersten drei Ebenen eines Octrees.

Eine Kugel k wird innerhalb des Octree genau im kleinsten (also in der tiefsten Ebene liegenden) Knoten gespeichert, in den sie vollständig hineinpasst. Eine Nachbarschaftsanfrage für k bekommt dann sämtliche Kugeln geliefert, die im Knoten von k oder in dessen Vorfahren- oder Nachkommenknoten enthalten sind (natürlich ohne k selbst). Kugeln weiterer Knoten können k nicht überlappen und kommen nicht in Betracht.

Die durch die hierarchische Unterteilung bedingten starken Größenunterschiede zwischen den Knoten verschiedener Ebenen scheinen einer polydispersen Mischung entgegenzukommen. Tatsächlich besitzt die Speicherung im Octree jedoch ein – bereits anderswo beschriebenes [Ulr00] – Merkmal, dass einer effizienten, nämlich möglichst tiefen Speicherung der Kugeln im Baum entgegensteht: Wie Abbildung 8.9 sichtbar macht, können Kugeln nicht nur aufgrund ihres Radius, sondern ebenso aufgrund einer ungünstigen Position in weit oben befindlichen Ebenen landen, wenn sie die Teilungsebenen berühren, wodurch sie zur Nachbarschaft sehr vieler anderer Kugeln hinzugefügt werden.

Innere und äußere Abgrenzungen der Knoten

Wie der Verfasser dieser Arbeit bereits in einer vorangegangenen Untersuchung zeigte [RK09], ist der erstmals von Ulrich [Ulr00] beschriebene **Loose Octree** dem einfachen Gitter und dem herkömmlichen Octree deutlich überlegen, wenn polydisperse Kugelmischungen verarbeitet werden. Die Bezeichnung „Loose“ ist durch die Relaxierung der Bedingung geprägt, dass eine Kugel komplett innerhalb eines Knotens

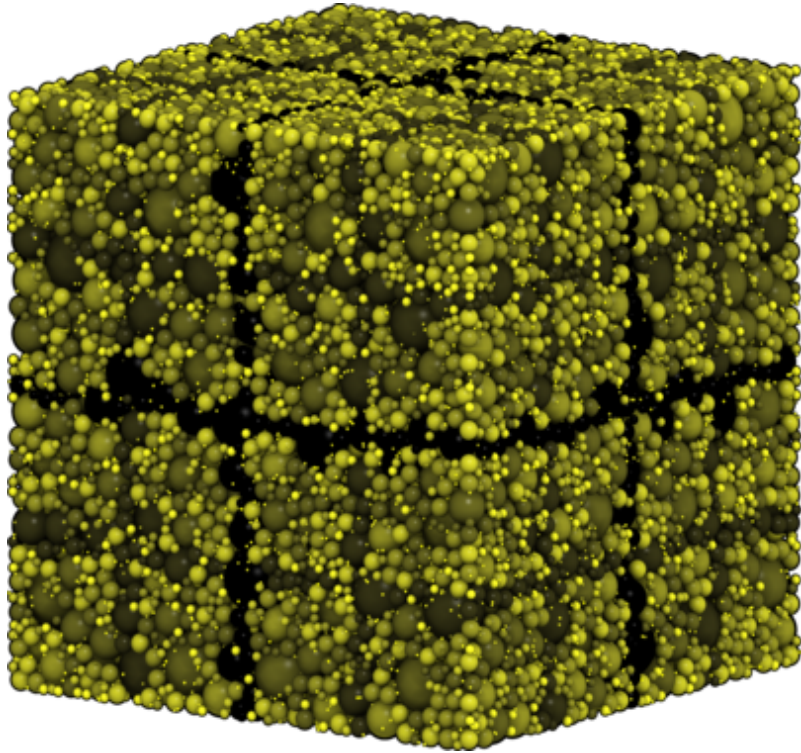


Abbildung 8.9: Kugelpackung mit visualisierter Knotenebene der Kugeln im Octree. Je heller die Kugel, desto tiefer konnte sie im Baum abgelegt werden. Viele Kugeln schneiden die Teilungsebenen und liegen damit in höheren Knoten.

liegen muss, denn die Knoten dieses Baumes besitzen eine innere und eine äußere Abgrenzung. Die innere stimmt mit der Knotengeometrie im herkömmlichen Octree überein und muss den Kugelmittelpunkt jeder Kugel enthalten, die in diesem Knoten gespeichert ist. Die Kugeln selbst dürfen jedoch diese innere Abgrenzung überlappen und müssen lediglich komplett innerhalb der durch die äußere Abgrenzung definierten Geometrie liegen (siehe Abbildung 8.10 b). Auf diese Weise sorgt eine Überlappung der inneren Knotenabgrenzung nicht mehr automatisch dafür, dass eine Kugel auf einer höher liegenden Ebene im Baum gespeichert werden muss. Das Resultat ist eine Verteilung der Kugeln auf die Knoten der tieferen Ebenen, lediglich die – in Betonmischungen nur in sehr geringen Anteilen vorkommenden – größten Partikel werden weiter oben im Baum gespeichert; Abbildung 8.11 zeigt den Vergleich zum Octree. Auch wenn durch die sich mit ihren äußeren Abgrenzungen überlappenden Knoten (siehe Abbildung 8.10 c) nun nicht mehr nur die Kugeln der Vorfahren und Nachkommen des Knotens von k als Nachbarn in Betracht kommen, sondern zusätzlich auch die Kugeln der auf der gleichen Ebene liegenden, angrenzenden Knoten, so trägt die bessere Verteilung der Kugeln im Baum insgesamt zu einer Reduzierung der Anzahl der Nachbarkugeln bei.

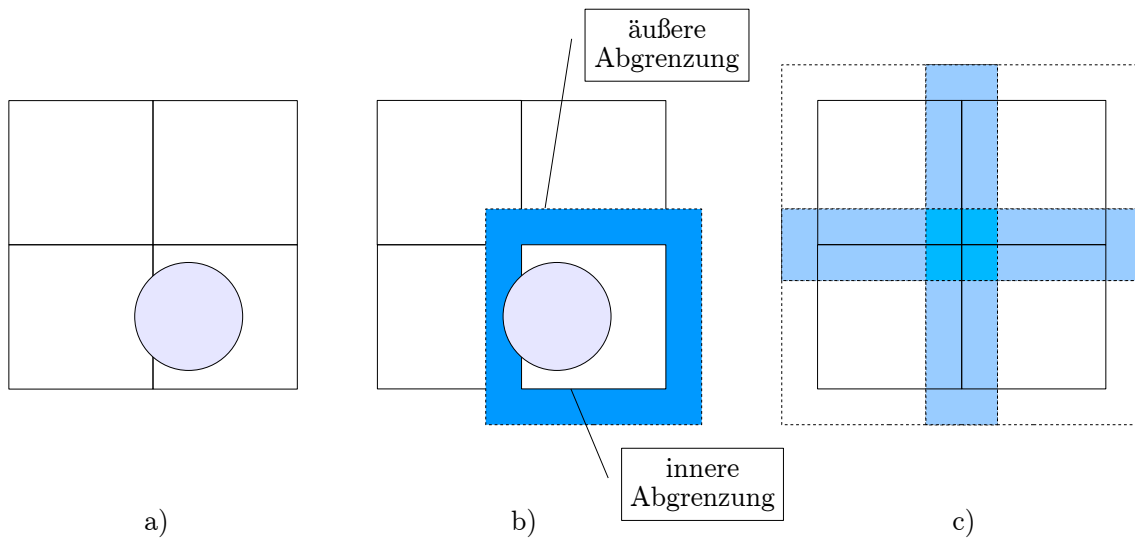


Abbildung 8.10: a) Octree: Die Kugel schneidet die Teilungsebene und wird im größeren Knoten platziert. b) Loose Octree: Die Kugel passt in die äußere Abgrenzung des Kindknotens. c) Farbliche Hervorhebung der gegenseitigen Überlappung der Knoten des Loose Octrees.

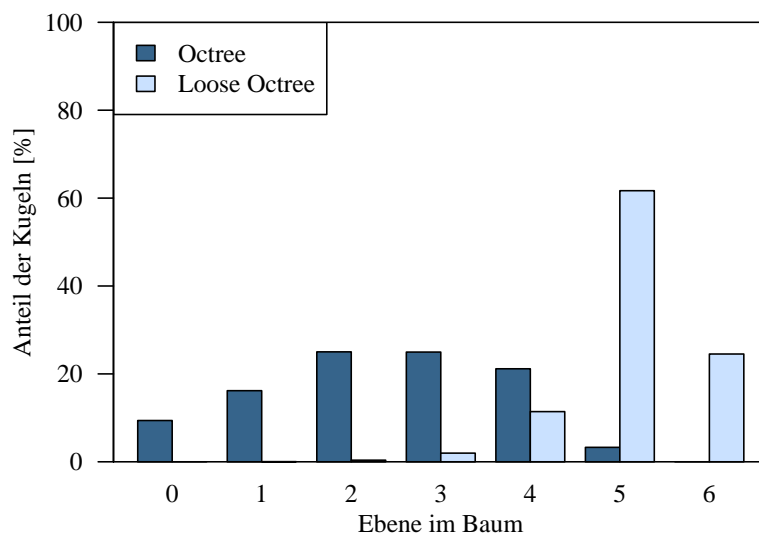


Abbildung 8.11: Beispiel für die Verteilung der Kugeln auf die Ebenen im Octree und Loose Octree für eine polydisperse Packung.

Sei C die Seitenlänge des Containers und damit auch der inneren Abgrenzung $s_0^{\text{innen}} = C$ in Ebene 0 des Loose Octrees. Die Seitenlänge der inneren Abgrenzung beträgt auf Ebene l dann

$$s_l^{\text{innen}} = \frac{s_0^{\text{innen}}}{2^l}$$

und die der äußeren Abgrenzung

$$s_l^{\text{außen}} = \lambda s_l^{\text{innen}} = \lambda \frac{s_0^{\text{innen}}}{2^l}.$$

Als Expansionsfaktor sollte – wie bereits von Ulrich [Ulr00] vorgeschlagen – $\lambda = 2$ gewählt werden. In [RK09] wurde gezeigt, dass dieser Wert günstig für das Einfügen einer Kugel in den Baum ist, welches nun in konstanter Zeit möglich ist: Die Ebene, auf der eine Kugel k aufgrund ihres Durchmessers $d = d(k)$ eingefügt werden kann, lässt sich mittels

$$l(d) := \left\lceil \log_2 \left((\lambda - 1) \frac{s_0^{\text{innen}}}{d} \right) \right\rceil$$

berechnen. Ähnlich wie beim Gitter kann der Knoten dieser Ebene, der den Mittelpunkt von k enthält, in $O(1)$ gefunden werden. Nun besteht jedoch die Möglichkeit, dass $d \leq s_{l(d)+1}^{\text{außen}}$ gilt, d. h. die Kugel könnte aufgrund ihrer Größe sogar in die äußere Abgrenzung eines Kindknotens des für die berechneten Knotens passen (siehe Abbildung 8.12), was ebenso in $O(1)$ für diesen Kindknoten überprüft werden kann. Durch $\lambda = 2$ ist sichergestellt, dass – von diesem einen abgesehen – keine weiteren Nachfahren des Knotens in Frage kommen.

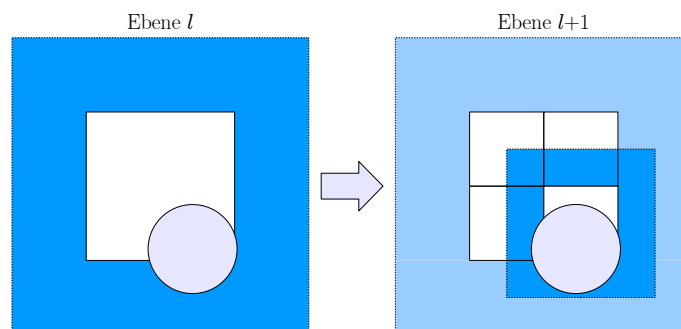


Abbildung 8.12: Die Kugel k passt in den für sie berechneten Knoten der Ebene l , aber auch in den Kindknoten, obwohl $s_l^{\text{innen}} \geq d(k) > s_{l+1}^{\text{innen}}$.

Bestimmung der Nachbarn

Für einem Baum kann durch Traversierung, also durch bei der Wurzel beginnendes, rekursives Absuchen der Kinder eines Knotens, eine Liste erstellt werden, welche

alle Kugeln der Knoten enthält, die eine Kugel k schneiden können. Die Implementierung von Algorithmus 8.1 muss daher für den Wurzelknoten mit dem Parameter $u = \text{TEILWEISE_UEBERLAPPEND}$ aufgerufen werden.

Algorithmus 8.1 *bestimmeNachbarn*: Bestimmung der Nachbarn in einem Baum.

Benötigt: *Nachbarliste* zur Zusammenstellung der benachbarten Kugeln
Benötigt: k = die Kugel, deren Nachbarn bestimmt werden sollen
Benötigt: u = Überlappungszustand zwischen Kugel k und diesem Knoten
 // falls Knoten nicht komplett von Kugel überdeckt: Überlappung prüfen
if $u \neq \text{KOMPLETT_UEBERLAPPEND}$ **then**
 $u \leftarrow \text{berechneUeberlappung}(k)$
 // bei keiner Überlappung brauchen dieser Knoten und alle Unterknoten nicht
 berücksichtigt werden
 if $u = \text{NICHT_UEBERLAPPEND}$ **then**
 return
 end if
end if
 // ab hier ist die Kugel $\text{TEILWEISE_UEBERLAPPEND}$ oder $\text{KOMPLETT_UEBERLAPPEND}$
 Kugeln des aktuellen Knotens zur *Nachbarliste* zufügen
if Kinder sind vorhanden **then**
 for $i = 0, \dots, 7$ **do** // alle Kinder traversieren
 $\text{Kind}_i \rightarrow \text{bestimmeNachbarn}(\text{Nachbarliste}, k, u)$
 end for
end if

Die für diesen Algorithmus nötige Berechnung der Überlappungsart zwischen der Kugel k und einem Knoten benutzt den Algorithmus von Arvo [Arv90], um eine (zumindest partielle) Überlappung festzustellen, und testet dann gegebenenfalls auf komplette Überlappung des Knotens durch die Kugel. In Algorithmus 8.2 wird dies dargestellt.

8.2.3 Geschachtelte Verlet-Listen

Die Idee der Verlet-Liste kann natürlich auch hierarchisch ausgebaut werden. Wenn die Verlet-Liste $L_V^{(0)}(k)$ wie in Abschnitt 8.1 beschrieben die potenziell überlappenden Nachbarn von k enthält, dann kann bei einer notwendigen Aktualisierung von $L_V^{(0)}(k)$ statt auf eine globale Nachbarschaftsstruktur ebenso auf eine weitere Verlet-Liste $L_V^{(1)}(k)$ als Referenzmenge zurückgegriffen werden, welche eine Obermenge von $L_V^{(0)}(k)$ darstellt. Diese Verschachtelung (siehe Abbildung 8.13) kann beliebig fortgesetzt werden, bis schließlich die Verlet-Liste der letzten Stufe $L_V^{(s-1)}(k)$ (bei s Listen pro Kugel) für eine Aktualisierung alle Kugeln durchsuchen muss. Nach der

Algorithmus 8.2 berechneUeberlappung: Berechnung der Überlappung zwischen Kugel und Knoten.

Benötigt: x, y, z = Koordinaten des Kugelmittelpunkts

Benötigt: $x_{\min}, x_{\max}, y_{\min}, y_{\max}, z_{\min}, z_{\max}$ = minimale bzw. maximale Koordinaten des Knotens

Benötigt: r = Radius der Kugel

$\delta \leftarrow 0$

if $x < x_{\min}$ **then**

$\delta \leftarrow (x - x_{\min})^2$

else if $x > x_{\max}$ **then**

$\delta \leftarrow (x - x_{\max})^2$

end if

if $y < y_{\min}$ **then**

$\delta \leftarrow \delta + (y - y_{\min})^2$

else if $y > y_{\max}$ **then**

$\delta \leftarrow \delta + (y - y_{\max})^2$

end if

if $z < z_{\min}$ **then**

$\delta \leftarrow \delta + (z - z_{\min})^2$

else if $z > z_{\max}$ **then**

$\delta \leftarrow \delta + (z - z_{\max})^2$

end if

if $\delta \leq r^2$ **then** // Überlappung festgestellt, liegt Knoten komplett in Kugel?

if Abstand jeder der 8 Knotenecken zum Kugelmittelpunkt $\leq r$ **then**

return KOMPLETT_UEBERLAPPEND

else

return TEILWEISE_UEBERLAPPEND

end if

else

return NICHT_UEBERLAPPEND

end if

Verschiebung einer Kugel muss für jede Verlet-Liste dieser Kugel geprüft werden, ob eine Aktualisierung erforderlich ist, dabei zieht die Aktualisierung von $L_V^{(i)}(k)$ auch immer eine Aktualisierung der Listen $L_V^{(j)}(k)$, $j = 0, \dots, i - 1$ für k nach sich.

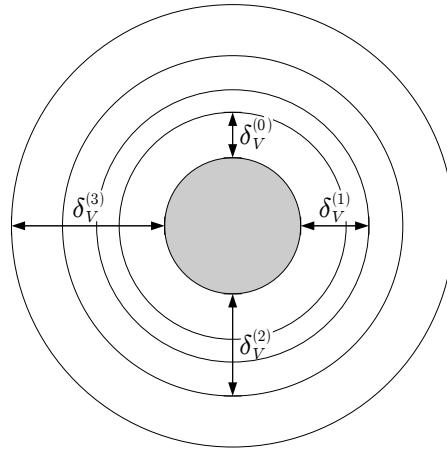


Abbildung 8.13: Geschachtelte Verlet-Kugeln.

Für die Verlet-Distanzen der unterschiedlichen Stufen gilt dann $\delta_V^{(i)} > \delta_V^{(j)} \Leftrightarrow i > j$; in der Implementierung wurde wie oben $\delta_V^{(0)} = r_{\min}$ sowie $s = 4$ und $\delta_V^{(i+1)} = 1,5\delta_V^{(i)}$ für alle i gewählt. Eine hohe Anzahl an Verlet-Stufen sorgt für höheren Verwaltungsaufwand, viel kritischer ist jedoch der Speicherplatzbedarf, da jede Kugel in sehr vielen Verlet-Listen abgelegt werden muss.

8.3 Implementierung

Das Simulationsprogramm enthält die Umsetzungen des adaptiven Gitters, des Loose Octrees und der geschachtelten Verlet-Listen, des Weiteren wurden zu Vergleichszwecken außerdem die beiden grundlegenden Datenstrukturen zur Aufteilung des Containers, Gitter und Octree, zusätzlich implementiert. Mit (der offensichtlichen) Ausnahme der geschachtelten Verlet-Listen wurden aus allen globalen Nachbarschaftsstrukturen jeweils 2 Varianten abgeleitet, zum einen eine Version, die ausschließlich die betreffende Datenstruktur umfasst, sowie zum anderen eine Version, die mit den Verlet-Listen (als lokalem Cache der Nachbarn jeder Kugel) kombiniert wurde. Abbildung 8.14 visualisiert die Klassenhierarchie am Vererbungsgraphen.

An der Spitze der Hierarchie steht eine Schnittstelle, die durch alle unterschiedlichen Datenstrukturen implementiert werden muss. Die Klasse **Nachbarschaft** ist eine abstrakte Basisklasse, welche die wichtigsten Methoden – wie das Hinzufügen der Kugeln und das Aktualisieren der Nachbarschaftsverwaltung bei Änderung der Containergrö-

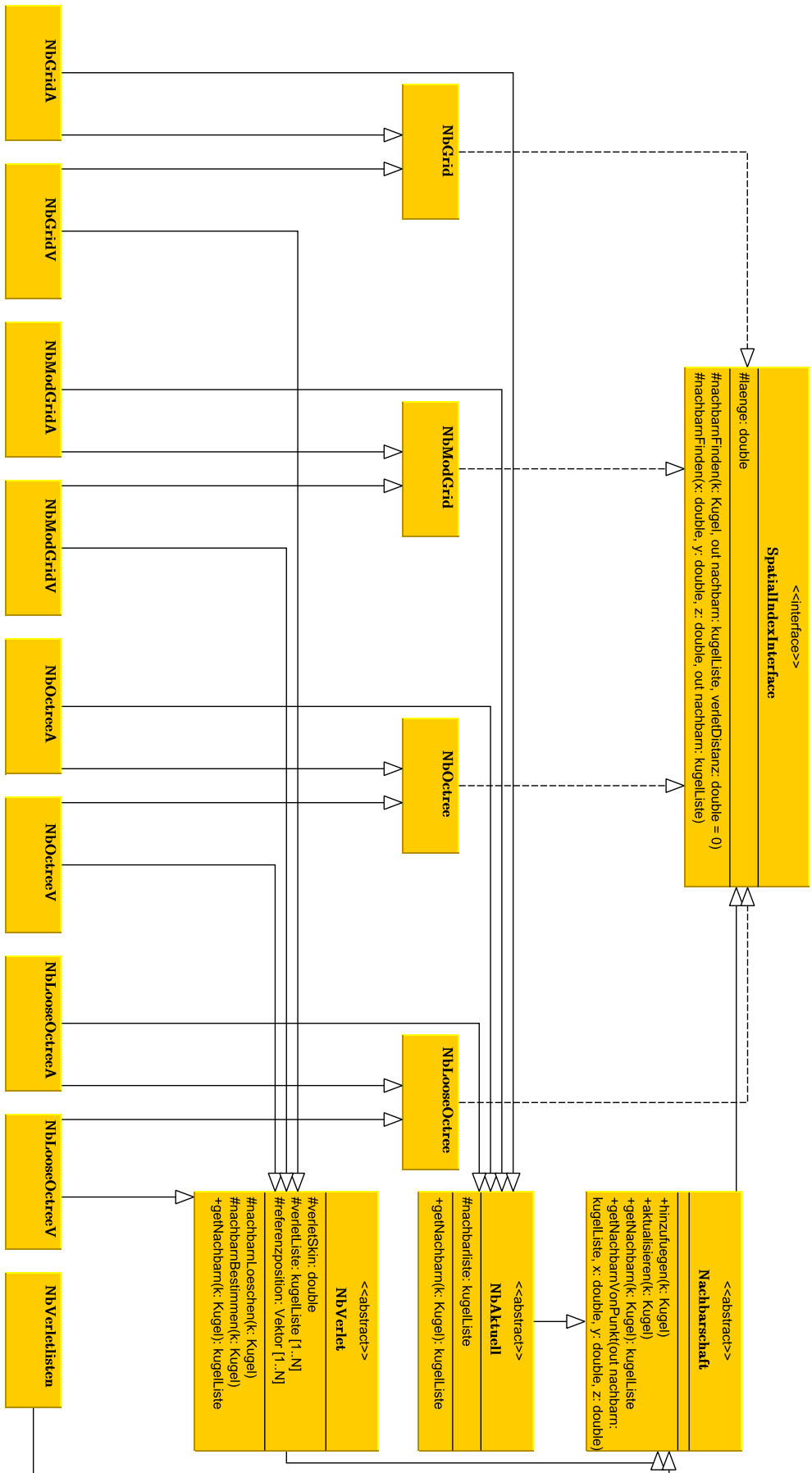


Abbildung 8.14: Die Hauptklassen der Nachbarschaftsverwaltung im UML-Diagramm.

ße – vorgibt und einige von diesen bereits implementiert. So kann ein standardisierter Aufruf aus dem Collective Rearrangement heraus erfolgen, unabhängig von der tatsächlich verwendeten Klasse zur Nachbarschaftsverwaltung. Von der Basisklasse abgeleitet sind die beiden Klassen **NachbarschaftIA** sowie **NachbarschaftUOD**, die die Unterteilung der Nachbarschaftsverwaltungen in zwei Gruppen abbilden: Die erstgenannte bildet die Basis aller Verwaltungen, die immer eine neue, aktuelle Nachbarliste generieren, während alle mit in Verlet-Listen zwischengespeicherten Nachbarn arbeitenden Verwaltungen von der letztgenannten abgeleitet sind. Sie zentralisiert die Infrastruktur der Verlet-Listen, sodass diese nicht in jeder einzelnen Nachbarschaftsverwaltung gepflegt werden muss.

Am unteren Ende der Hierarchie finden sich schließlich die nutzbaren Verwaltungen in ihren verschiedenen Varianten. In Abbildung 8.14 nicht mit aufgeführt sind Helferklassen, z. B. zur Repräsentation eines Knotens im Loose Octree.

8.4 Leistungsvergleich

Alle vorgestellten Datenstrukturen wurden in mehreren Simulationsläufen eingesetzt, um ihre Eignung in der Simulation polydisperser Mischungen unter Beweis zu stellen. Die Testumgebung bestand aus 3 Mischungen mit jeweils $N = 30.000$, $N = 50.000$ bzw. $N = 100.000$ Kugeln, welche sich an einer Fuller-Kurve orientierten. Als Plattform wurde ein Intel Core 2 Quad Q6600 Prozessor mit 4 GB Arbeitsspeicher eingesetzt.

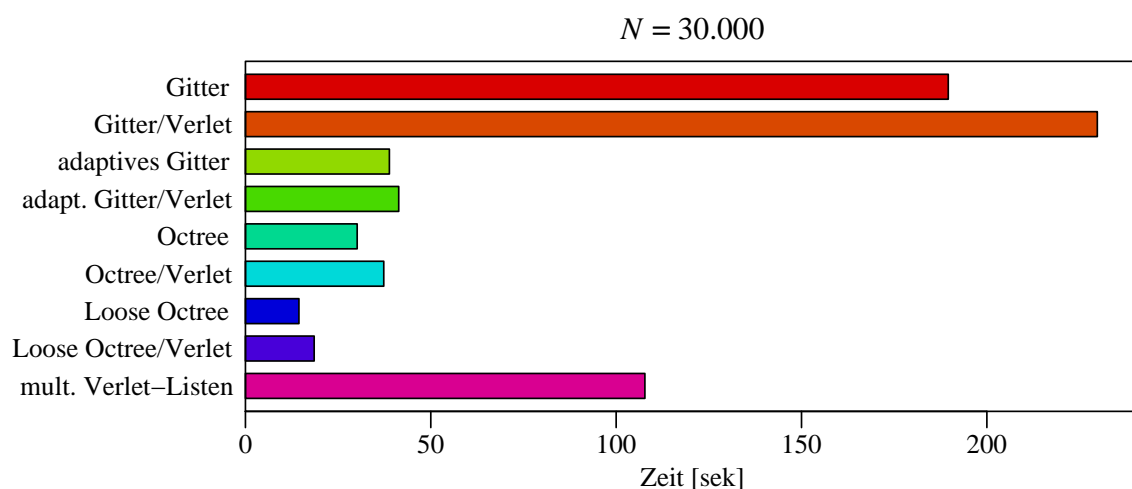


Abbildung 8.15: Zeitbedarf der initialen Kugelplatzierung von 30.000 Kugeln unter Verwendung der verschiedenen Nachbarschaftsstrukturen.

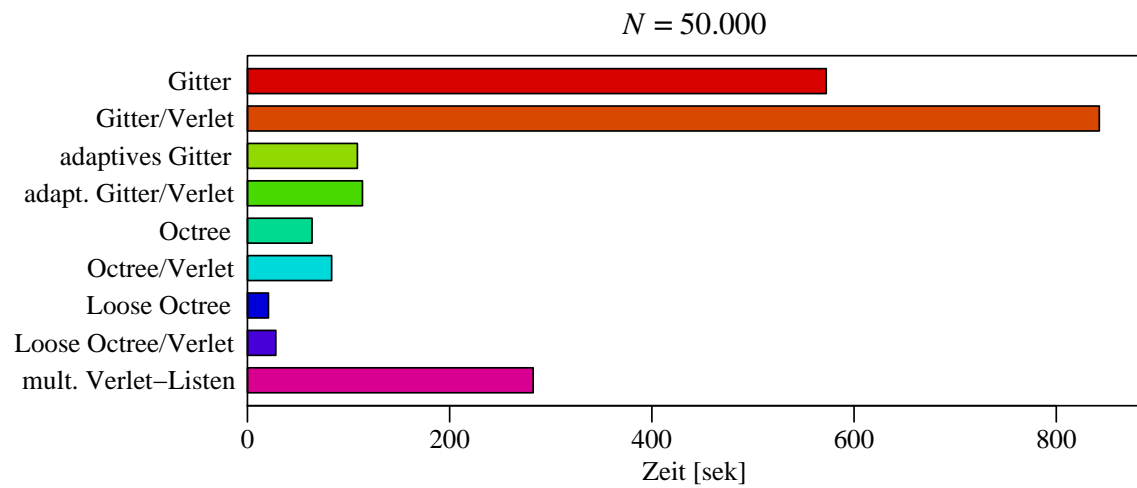


Abbildung 8.16: Zeitbedarf der initialen Kugelplatzierung von 50.000 Kugeln unter Verwendung der verschiedenen Nachbarschaftsstrukturen.

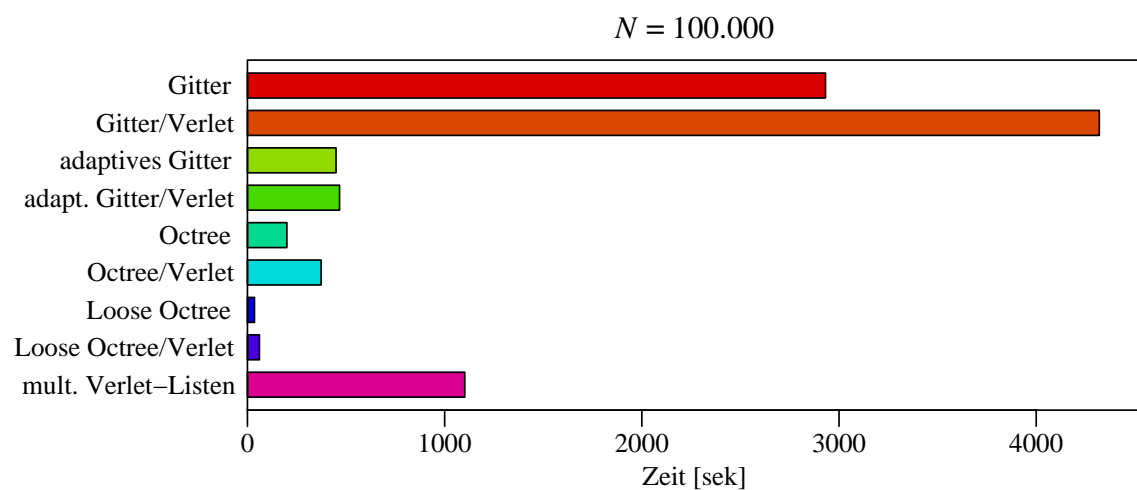


Abbildung 8.17: Zeitbedarf der initialen Kugelplatzierung von 100.000 Kugeln unter Verwendung der verschiedenen Nachbarschaftsstrukturen.

Die Balkendiagramme in den Abbildungen 8.15–8.17 (Mittelwerte aus jeweils 6 Simulationsläufen) zeigen die deutlichen Leistungsunterschiede der eingesetzten Varianten für die komplette Phase der Platzierung der Kugeln im Container. Offensichtlich ist das Gitter keinesfalls eine geeignete Datenstruktur, um sehr polydisperse Partikel zu verwalten. Auch die multiplen Verlet-Listen verursachen eine vielfach längere Bearbeitungsdauer als der Rest des Feldes. Der Grund liegt im enormen Umfang der Verlet-Listen höherer Stufen. Eine gezielte Anpassung der Parameter an die jeweilige Zusammensetzung bzw. Polydispersität der Mischung erscheint sinnvoll, um gegebenenfalls bessere Ergebnisse mit dieser Datenstruktur zu erzielen.

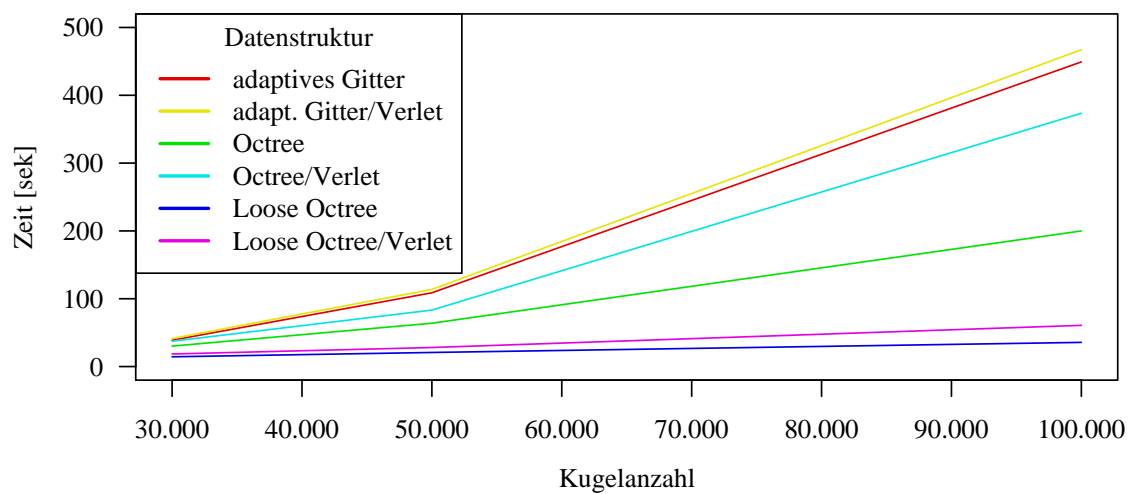


Abbildung 8.18: Abhängigkeit der Dauer der initialen Platzierung von der Kugelnanzahl unter Verwendung der verschiedenen Nachbarschaftsstrukturen.

Für die weiteren Strukturen ist die Abhängigkeit der Laufzeit dieser Phase von der Kugelnanzahl in Abbildung 8.18 ersichtlich. An die Spitze des Feldes hat sich der Loose Octree gesetzt. Mit seiner Hilfe skaliert die Dauer der Platzierung nahezu linear mit der Anzahl der Kugeln. Das adaptive Gitter leidet hingegen unter dem Handicap der relativen Kürze dieser initialen Platzierungsphase - die Optimierung der Zellengröße skaliert mit dem Quadrat der Kugelnanzahl und nimmt den Großteil der Zeit in dieser Phase in Anspruch, die anschließende Platzierung der Kugeln unter Benutzung der angepassten Gitterstruktur läuft zwar schnell ab, kann aber diesen Nachteil nicht aufwiegen.

Die Ergebnisse belegen außerdem die Tatsache, dass die Benutzung der Datenstrukturen in Verbindung mit Verlet-Listen nicht immer einen Geschwindigkeitsvorteil bringt. Wie zu erwarten, sind in dieser Phase diejenigen Varianten schneller, die ohne die Verwaltung von Verlet-Listen auskommen. Der Vorteil des beschleunigten Zugriffs auf die Nachbarn mit Hilfe der Listen kann hier nicht ausgespielt werden, da die räumliche und zeitliche Kohärenz der Kugeln nicht gegeben ist: Einer Kugel, die

in einem Schritt zu stark überlappend und somit erfolglos platziert wurde, kann im nächsten Schritt eine vollkommen andere Position im Container zugewiesen werden; die Verlet-Listen müssen dadurch in beinahe jedem Iterationsschritt aktualisiert werden.

Als Konsequenz der Resultate wird der Loose Octree als Datenstruktur in der initialen Platzierungsphase eingesetzt, auf die Kombination mit Verlet-Listen wird an dieser Stelle verzichtet. In weiteren Tests wurden anschließend die Laufzeiten der kompletten Simulation für die erwähnten Mischungen ermittelt. Eingesetzt wurden dazu jedoch nur noch das adaptive Gitter und der Loose Octree, da in Voruntersuchungen [RK09] bereits die Unterlegenheit der einfachen Varianten Gitter und Octree festgestellt worden ist und auch die multiplen Verlet-Listen ohne ausgiebige Tests und Anpassung der Parameter ungeeignet sind.

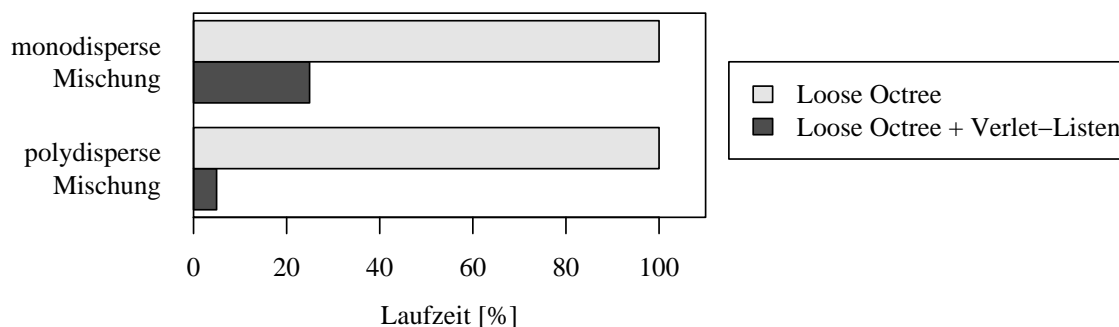


Abbildung 8.19: Vergleich der relativen Simulationslaufzeiten unter Benutzung des Loose Octree mit bzw. ohne Verlet-Listen, betrachtet für eine mono- und eine polydisperse Mischung mit jeweils 10.000 Kugeln.

Die Ergänzung der beiden untersuchten Datenstrukturen durch Verlet-Listen ist in dieser iterativen Phase unerlässlich. Abbildung 8.19 veranschaulicht den Zeitvorsprung, der gegenüber der puren, unveränderten Datenstruktur (hier der Loose Octree) erzielt werden kann. Für diesen Vergleich wurden in Vorversuchen [RK09] jeweils 10.000 Kugeln einer mono- und einer polydispersen Mischung simuliert.

Wie in Abbildung 8.20 zu sehen ist, kann die Simulation in allen betrachteten Fällen mit Hilfe des Loose Octree schneller ausgeführt werden als unter Benutzung des adaptiven Gitters. Zudem skaliert bei dieser Wahl die Leistung des Verfahrens besser mit der verwendeten Kugelanzahl. Das adaptive Gitter liefert zwar ähnlich gute Werte, kann aber betreffend der Leistung aufgrund der komplexen Optimierung der Zellengröße nicht zum Loose Octree aufschließen. Als Schlussfolgerung wird der Loose Octree als zentrale Datenstruktur zur räumlichen Organisation der Kugeln während der CR-Iterationen eingesetzt, in Kombination mit Verlet-Listen zur Zugriffsbeschleunigung sorgt diese Nachbarschaftsverwaltung für einen effizienten

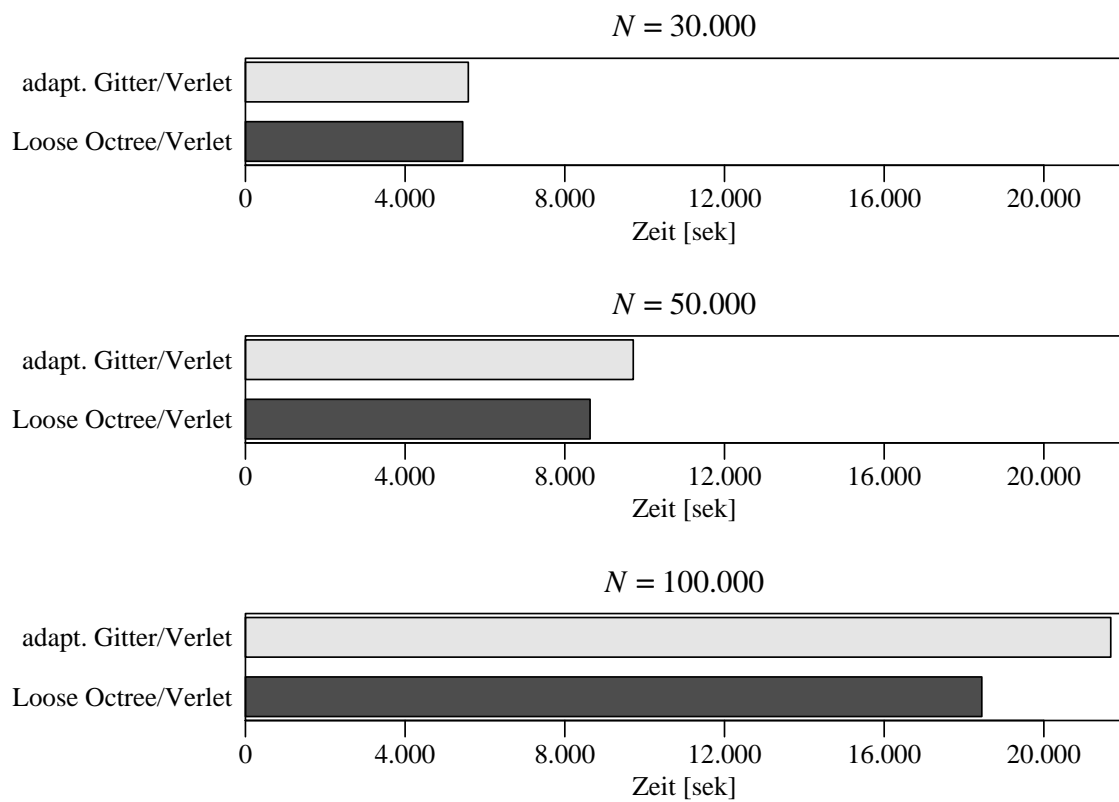


Abbildung 8.20: Zeitbedarf der Collective-Rearrangement-Phase für 30.000, 50.000 und 100.000 Kugeln unter Verwendung der in Frage kommenden Nachbarschaftsstrukturen.

Ablauf der Simulation.

Die Anzahl der von diesen Komponenten an den CR-Algorithmus übergebenen Nachbarn je Kugel ist in Abbildung 8.21 für den gesamten Simulationsverlauf dargestellt. Verwendet wurden die in Kapitel 7.3.4 angegebenen Parameter. Zu erkennen ist eine tendenzielle Abnahme der Nachbaranzahl während der Iteration, was in der fortschreitenden Beseitigung der Überlappungen begründet ist. Unmittelbar nach den beiden Containerverkleinerungen wird jeweils eine höhere Anzahl an Nachbarn übergeben, wobei dieser Anstieg nach der zweiten Verkleinerung nur gering ausfällt und diesbezüglich mit dem Ausmaß dieser Verkleinerung korreliert.

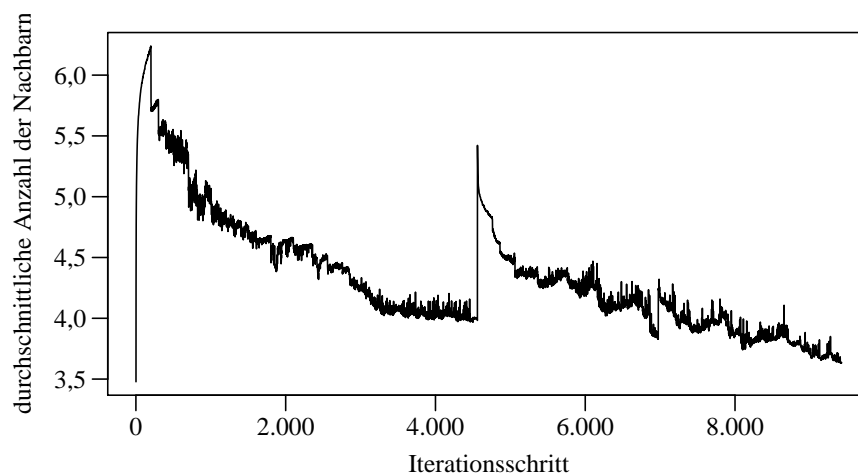


Abbildung 8.21: Anzahl der Nachbarn pro Kugel während der Iteration.

Kapitel 9

Lokale Packungsdichte

Betrachtet man die Raumauffüllung in einem Teilstück des Containers, so stellt man mitunter fest, dass sie mit der Position innerhalb der Packung variiert. Ein Grund kann bei harten Containerwänden der Wandeffekt sein, der die Struktur in den äußeren Schichten der Packung beeinflusst und die Raumauffüllung dort im Vergleich zum inneren Kern der Packung absenkt. Aber auch unter periodischen Randbedingungen existieren lokale Schwankungen der Packungsdichte. Wenn etwa ein Ausschnitt einer polydispersen Packung nahezu vollständig durch eine große Kugel ausgefüllt ist, wird die Raumauffüllung dort deutlich höher sein als im Rest der Packung.

Die Berechnung der lokalen Raumauffüllung erfordert die Kenntnis des gesamten Kugelvolumens innerhalb eines Ausschnitts der Packung und des Volumens des Ausschnitts selbst. Während Letzteres in den meisten Fällen relativ simpel zu ermitteln ist, ergibt sich für die Bestimmung des Kugelvolumens das Problem, dass etliche am Rand des Ausschnitts befindliche Kugeln teils innerhalb und teils außerhalb von diesem liegen. Dies erfordert zum einen die genaue Ermittlung der betroffenen Kugeln und zum anderen die Berechnung der Volumina der Kugelsegmente und ist daher mit einigem Aufwand verbunden.

Eine alternative Methode stellt das „Hit-or-Miss“-Verfahren dar, das im nächsten Abschnitt näher erläutert wird. Es bietet sich für Problemstellungen an, bei denen keine triviale Möglichkeit zur Ermittlung des Kugelvolumens gegeben ist. Neben der Bestimmung der lokalen Packungsdichte kann es auch zur Berechnung des Volumens und der Oberfläche sich überlappender Kugeln eingesetzt werden, siehe Kapitel 10.2.1 und 10.2.2.

9.1 Monte-Carlo-Methode zur Bestimmung der Raumausfüllung

Die „Hit-or-Miss“-Technik ist eine Monte-Carlo-Methode und ermöglicht die approximative Ermittlung der Raumausfüllung innerhalb beliebiger abgeschlossener Räume im Container. Dabei ist es unerheblich, ob der zu untersuchende Raum an den Rändern Kugelabschnitte enthält. Konvexität ist ebenso keine Voraussetzung, allerdings erleichtert eine einfache Form das Generieren von Testpunkten innerhalb des Raumes. Das Simulationsprogramm muss lediglich eine Funktion bereitstellen, die entscheidet, ob ein gegebener Punkt im freien Porenraum oder innerhalb einer Kugel liegt. Diese Entscheidung wird für eine große Anzahl T zufällig innerhalb des zu testenden Volumens generierter Punkte getroffen (siehe Abb. 9.1). Mit der Anzahl der Treffer („Hits“) innerhalb von Kugeln h ergibt sich die Raumausfüllung dann als

$$\phi_{\text{MC}} = \frac{h}{T}.$$

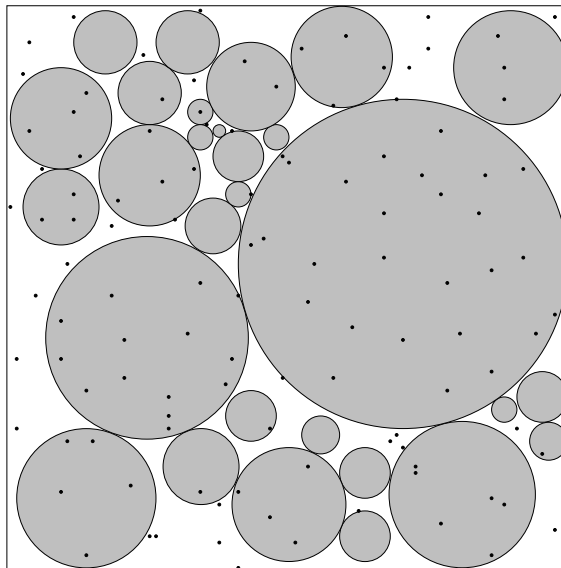


Abbildung 9.1: Bestimmung der Raumausfüllung durch Auswerten der Testpunkte.

Für die Implementierung der „Hit-or-Miss“-Methode ist zu beachten, dass die Überprüfung der Testpunkte nicht für alle Kugeln erfolgen muss, sondern unter Einbeziehung der Nachbarschaftsverwaltung auf Kugeln in der Nähe des Testpunktes beschränkt werden kann. Die Nachbarschaftsverwaltung kann einen Testpunkt zu diesem Zweck als Kugel mit Radius 0 betrachten, um dadurch bereits für die Nachbarsuche unter Kugeln vorhandene Routinen weitestgehend übernehmen zu können. Zudem kann die Überprüfung weiterer Kugeln in der „Hit-or-Miss“-Methode übersprungen werden,

sobald feststeht, dass der zu untersuchende Testpunkt innerhalb einer Kugel liegt. Für einen würfelförmigen Ausschnitt ist die Implementierung durch Algorithmus 9.1 angegeben, für Zylinder jedoch bieten sich zwei Möglichkeiten zur Erzeugung der Testpunkte an, diese werden in Abschnitt 9.1.1 vorgestellt und verglichen.

Algorithmus 9.1 „Hit-or-Miss“-Methode zur Bestimmung der Raumauffüllung.

Benötigt: T = Anzahl der Testpunkte

Benötigt: l = halbe Seitenlänge des im Ursprung zentrierten Würfels

$h \leftarrow 0$

for $t = 1, \dots, T$ **do**

$x \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-l, l]$

$y \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-l, l]$

$z \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-l, l]$

bestimme Kugeln k_1, \dots, k_n in der Nachbarschaft von $(x/y/z)$

$a \leftarrow h$

$i \leftarrow 0$

repeat

$i \leftarrow i + 1$

if Punkt $(x/y/z)$ liegt in Kugel k_i **then**

$h \leftarrow h + 1$

end if

until $h > a \vee i = n$

end for

$\phi_{MC} \leftarrow \frac{h}{T}$

return ϕ_{MC}

Um festzustellen, welche Anzahl T der Testpunkte eine gute Approximation der Raumauffüllung der gesamten Kugelpackung erlaubt, sollen Versuche mit unterschiedlichen T in einem würfelförmigen Container durchgeführt werden. Als Referenzwert der Raumauffüllung (für den kompletten Container) bietet sich der in Definition 2.2.1.1 vorgestellte Quotient ϕ von Kugelvolumen und Containervolumen an.

Da erste Vorversuche mit einfachen Mischungen mehrerer diskreter Partikelgrößen für 10 Millionen Testpunkte sehr gute Ergebnisse lieferten, soll an dieser Stelle überprüft werden, ob diese Anzahl für praxisrelevante Mischungen ausreicht oder sogar überdimensioniert ist. Dazu wurden für zwei Mischungen und verschiedene Testpunkteanzahlen je 10 Simulationsläufe durchgeführt und jeweils Mittelwerte für ϕ und ϕ_{MC} gebildet, sowie deren Differenz ausgewertet. Als Testmischungen dienten eine polydisperse Mischung mit einer der Fuller-Kurve entsprechenden Verteilung und zu Vergleichszwecken eine monodisperse Mischung. Da bei letzterer die Kugeln im Container sehr homogen verteilt sind, unterliegt die Raumauffüllung nur äußerst geringen lokalen Schwankungen. Daher dürfte hier auch bei einer deutlichen Verrin-

gerung von T die Qualität der Monte-Carlo-Approximation stabiler bleiben als bei der polydispersen Mischung.

Testpunkte	Containervolumen	Mittelwerte [%]			
		ϕ	ϕ_{MC}	Differenz	
monodispers					
10.000	24961,47	62,9289	63,2450	0,5628	
100.000	24962,30	62,9268	62,9746	0,1346	
1.000.000	24965,12	62,9197	62,9287	0,0416	
10.000.000	24964,58	62,9211	62,9293	0,0145	
polydispers (Fuller-Verteilung)					
10.000	1392,51	78,6965	78,5240	0,3516	
100.000	1403,65	78,0414	77,8308	0,2193	
1.000.000	1394,48	78,5734	78,3990	0,1745	
10.000.000	1400,29	78,2490	78,0848	0,1642	

Tabelle 9.1: Vergleich der Ergebnisqualität verschiedener Anzahlen von Testpunkten.

Tabelle 9.1 und Abbildung 9.2 geben die Mittelwerte der Simulationsläufe an, welche mit jeweils 30.000 Kugeln durchgeführt wurden. Sowohl für die mono- als auch für die polydisperse Mischung sinkt die mittlere Abweichung der beiden ermittelten Raumausfüllungswerte, wenn die Anzahl der Testpunkte erhöht wird. Bei größeren Anzahlen fällt diese Abweichung für die monodisperse Mischung wie erwartet deutlich geringer aus als im polydispersen Fall.

Aus den Simulationsergebnissen lässt sich erkennen, dass für $T \geq 1$ Million Testpunkte selbst eine Verzehnfachung dieser Anzahl keine signifikanten Verbesserungen in der Qualität der Monte-Carlo-Approximation mit sich bringt. Andererseits liegt eine mittlere Abweichung von weniger als 0,2 Prozentpunkten innerhalb der Schwankungsbreite der Simulationsergebnisse für diese Mischung und ist somit ein ausreichend guter Wert für die Abschätzung der Raumausfüllung, sodass für ähnlich polydisperse Mischungen $T = 1$ Million Testpunkte empfohlen werden können. Bei der monodispersen Mischung hingegen erlauben bereits 100.000 Testpunkte diese Qualität der Monte-Carlo-Approximation.

9.1.1 Erzeugung der Testpunkte im Zylinder

Es soll nun eine Packung in einem zylinderförmigen Container betrachtet werden, als Teilraum für die Testpunkte dient hier wie zuvor der gesamte Container. Für die Er-

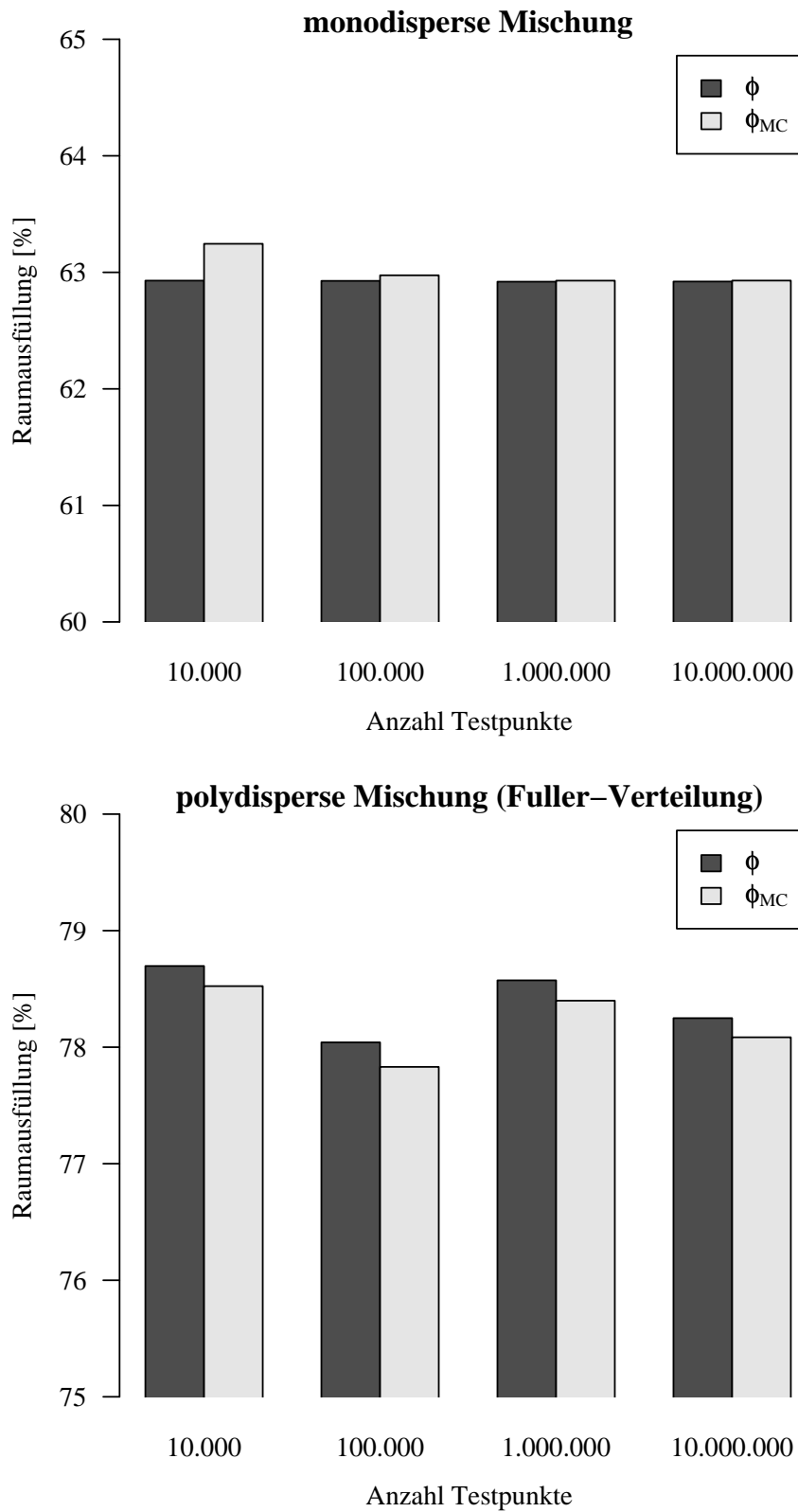


Abbildung 9.2: Tatsächliche (ϕ) und per Monte-Carlo-Methode approximierte Raumauffüllung (ϕ_{MC}) für verschiedene Anzahlen der Testpunkte im Vergleich.

zeugung der Testpunkte in einem zylinderförmigen Container mit Höhe h und Radius r kann nur eine einzige der Koordinaten aus einem Intervall gleichverteilt erzeugt werden, für einen im Ursprung zentrierten Zylinder also aus $[-h/2, h/2]$. Für die anderen beiden Koordinaten reduziert sich das Problem auf die Erzeugung eines Punktes auf einer Kreisscheibe. Dies kann entweder mit einer Annahme/Verwerfung-Methode oder durch die Transformation von mittels gleichverteilter Zufallszahlen erzeugter Polarkoordinaten in kartesische Koordinaten geschehen; die beiden Möglichkeiten sind durch die Algorithmen 9.2 und 9.3 beschrieben.

Algorithmus 9.2 Annahme/Verwerfung-Methode zur Erzeugung eines Punktes in einem Zylinder.

Benötigt: h = Höhe des im Ursprung zentrierten Zylinders

Benötigt: r = Radius des Zylinders

$y \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]$

repeat

$x \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-r, r]$

$z \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-r, r]$

until $x^2 + z^2 \leq r^2$

return $(x/y/z)$

Algorithmus 9.3 Polarkoordinaten-Methode zur Erzeugung eines Punktes in einem Zylinder.

Benötigt: h = Höhe des im Ursprung zentrierten Zylinders

Benötigt: r = Radius des Zylinders

$y \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]$

$\theta \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[0, 2\pi]$

$s \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[0, 1]$

$s \leftarrow r\sqrt{s}$

$x \leftarrow s \cdot \cos \theta$

$z \leftarrow s \cdot \sin \theta$

return $(x/y/z)$

Die Annahme/Verwerfung-Methode sortiert im Mittel

$$1 - \frac{\pi r^2}{(2r)^2} \approx 21,46\%$$

der Testpunkte aus, somit müssen im Mittel $\frac{4T}{\pi}$ Testpunkte erzeugt werden, um T gültige Punkte zu erhalten. Wie die Ergebnisse eines Vergleichs beider Verfahren in Abbildung 9.3 zeigen, ist diese Methode dennoch leicht schneller als die Transformation aus Polarkoordinaten, so dass ihr in der Implementierung der Vorzug gegeben wurde. Der Grund für diese (wenn auch nur geringe) Differenz ist in der

hohen Komplexität und somit niedrigeren Verarbeitungsgeschwindigkeit der Wurzel- sowie der trigonometrischen Funktionen zu vermuten.

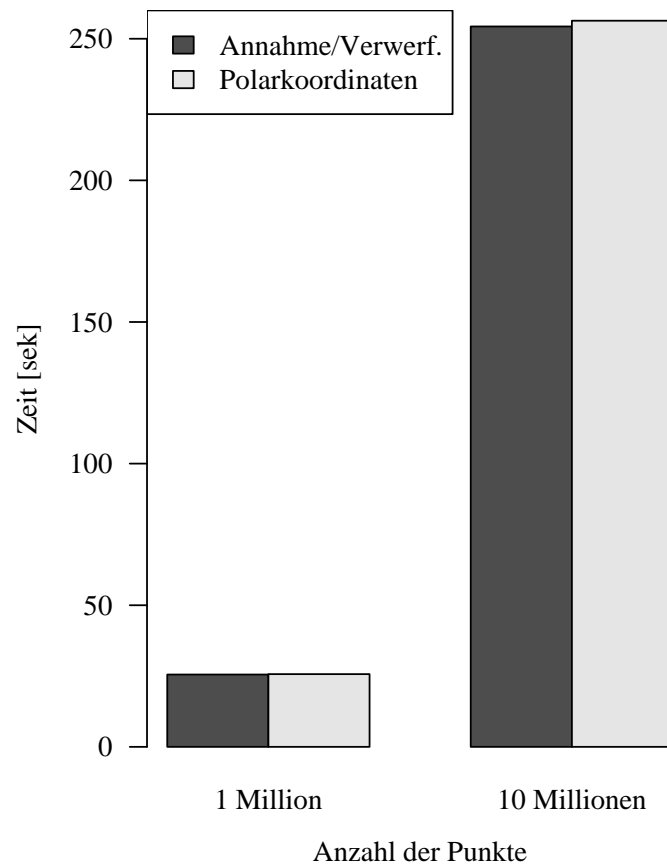


Abbildung 9.3: Performanzvergleich für Methoden zur Erzeugung von zufälligen Punkten in einem Zylinder.

9.2 Untersuchung der Verteilung der Packungsdichte

Mit der „Hit-or-Miss“-Methode steht nun ein Werkzeug zur Verfügung, das es erlaubt, die Verteilung der Raumauffüllung in abgeschlossenen Regionen eines Containers zu untersuchen. Dazu werden die erzeugten Testpunkte je nach Abstand zum Containerrand in enge Klassen eingeteilt, für die eine separate Auswertung möglich ist. Befindet sich die Packung in einem Zylinder mit periodischen Randbedingungen für den Zylinderboden und -deckel, so werden die Testpunkte ausschließlich in Bezug auf den Abstand zum Zylindermantel kategorisiert. Da im Zylinder (im Gegensatz zum Containerwürfel) keine Ecken vorhanden sind, erlaubt diese Situation die Berechnung

der **radialen Raumausfüllungsverteilung** (vgl. radiale Porositätsverteilung in [Lim02]).

Definition 9.2.0.1 Die **radiale Raumausfüllungsverteilung** $\phi_{\text{rad}}: [0, R] \mapsto [0, 1]$ gibt die lokale Raumausfüllung in einem zylinderförmigen Container mit Durchmesser $2R$ in Abhängigkeit vom Abstand zum Zylindermantel an. $\phi_{\text{rad}}(r)$ ist definiert als die Summe der Mantelanteile eines innerhalb des Containers zentrierten (Test-)Zylinders mit Radius $R - r$, die eine Kugel der Packung schneiden, ins Verhältnis gesetzt zu dessen gesamter Mantelfläche.

Abbildung 9.4 skizziert das Prinzip der radialen Raumausfüllungsverteilung.

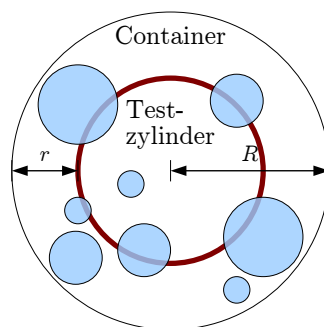


Abbildung 9.4: Schnitt durch einen zylinderförmigen Container. Durch die Schnittflächen der Kugeln mit dem innenliegenden Zylinder mit Radius r kann $\phi_{\text{rad}}(r)$ bestimmt werden.

Im Rahmen einer Dissertation über die Modellierung von Festbettreaktoren analysierte Limberg die Verteilung der Porosität innerhalb von monodispersen Kugelpackungen, die in einem Container mit harten Randbedingungen simuliert worden waren [Lim02]. U. a. betrachtete er die radiale Porositätsverteilung $\epsilon(r) = 1 - \phi_{\text{rad}}(r)$ in einen Zylinder mit Höhe $h = 250d$ und Durchmesser $D = 5d$ für eine Packung monodisperser Kugeln mit Durchmesser d . Abbildung 9.5 zeigt die in die radiale Raumausfüllung konvertierte Kurve Limbergs im Vergleich mit den Ergebnissen des vorliegenden Simulationsprogramms. Die Kurven ähneln sich, leichte Unterschiede sind auf die unterschiedlichen Simulationsverfahren zurückzuführen. Limberg benutzt einen hybriden Ansatz mit einer Kombination aus einer RSA-Methode und einer Optimierungskomponente.

Auch die radiale Raumausfüllung $\phi_{\text{rad}}(r)$ zeigt deutlich den Wandeffekt des Zylindermantels: Das absolute Minimum von $\phi_{\text{rad}}(r)$ liegt bei $r = 0d$, anschließend liefert die äußerste Kugelschicht ein Maximum bei $0,5d \leq r \leq 0,6d$. Das nächste Minimum ist noch sehr scharf und bei Limberg etwas tiefer, da in dessen Ansatz eine Zwangsbedingung dafür sorgt, dass die äußersten Kugeln den Zylinderrand berühren, was mit dem vorliegenden Simulationsprogramm nicht immer der Fall ist. Die Amplitude

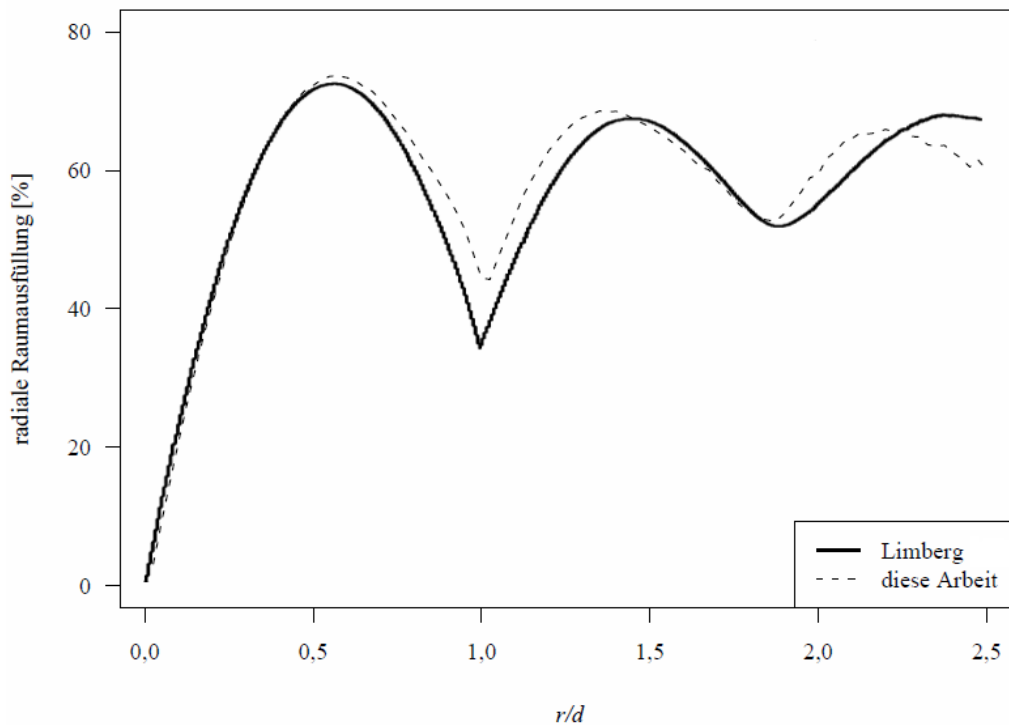


Abbildung 9.5: Radiale Raumaussfüllung in Abhängigkeit vom Abstand zum Zylindermantel für $D = 5d$.

von $\phi_{\text{rad}}(r)$ nimmt im weiteren Verlauf ab, im Zentrum der Packung ($r = 2,5d$) sind die Abweichungen am stärksten. Dort wären sogar Extrema von $\phi_{\text{rad}}(2,5d) = 0$ oder $\phi_{\text{rad}}(2,5d) = 1$ möglich, nämlich dann, wenn das innerste untersuchte Segment vollständig innerhalb des Porenraums bzw. innerhalb einer Kugel liegt.

Die „Hit-or-Miss“-Methode kann genutzt werden, um sowohl die Stärke als auch den Wirkungsbereich des Wandeffekts an harten Containerrändern zu quantifizieren. Zudem kann durch Aufsummierung der Testpunkte in den einzelnen Schichten eine kumulierte Raumaussfüllung sowohl vom Containerinneren nach außen als auch in umgekehrter Richtung gewonnen werden. Abbildung 9.6 zeigt diese beiden Kurven und die zugehörige radiale Raumaussfüllung für einen Zylinder mit Durchmesser $D = 12d$ und eine Packung aus 10.000 Kugeln mit Durchmesser d . Bis etwa $r = 5d$ lässt sich die durch den Wandeffekt erzeugte regelmäßige Struktur anhand der Schwingungen von $\phi_{\text{rad}}(r)$ verfolgen.

Markiert sind außerdem die Raumaussfüllung der Packung $\phi = 60,26\%$ sowie ein Schätzwert für eine Raumaussfüllung $\phi_{\text{exWand}} = 62,94\%$, die die Packung ohne den Einfluss des Wandeffekts erzielen würde. Diese berechnet sich aus dem Median der radialen Raumaussfüllungen in den einzelnen Schichten und bildet so eine neue und zugleich einfache Möglichkeit, den Einfluss des Wandeffekts auf die Raumaussfüllung

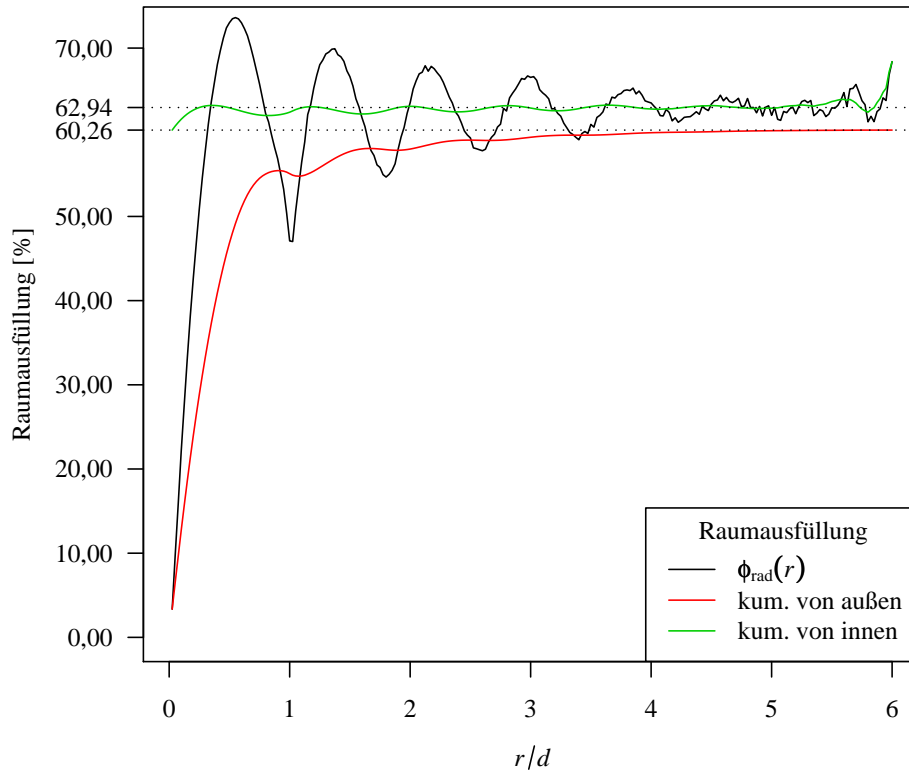


Abbildung 9.6: Radiale Raumausfüllung in Abhängigkeit vom Abstand zum Zylindermantel für $D = 12d$.

zu quantifizieren.

Für eine bidisperse Mischung mit $d_1 = 1$ und $d_2 = 4$ stellt Abbildung 9.7 die radiale Raumausfüllung in einem Zylinder mit $D = 12d_1$ dar. Die scharfen lokalen Minima liegen etwa bei $r = 1d_1$ und $r = 4d_1$, also in dem Bereich, in dem die äußersten Schichten der beiden Kugelsorten enden. In der Zylindermitte bei $r = 6d_1$ herrscht eine hohe Raumausfüllung, bedingt durch Kugeln mit $d_2 = 4$, die dort im Containerzentrum eingeklemt sind. Zum Vergleich zeigt Abbildung 9.8 schließlich eine Mischung mit zugrundeliegender Fuller-Verteilung, der Zylinder besitzt den Durchmesser $D = 12d_{\text{min}}$. Hier steigt $\phi_{\text{rad}}(r)$ über weite Strecken monoton an, eine Welle ist nicht zu erkennen, sodass eine reguläre Anordnung der Kugeln ausgeschlossen werden kann.

Abbildung 9.9 demonstriert, dass die lokale Bestimmung der Raumausfüllung auch in einem würfelförmigen Container möglich ist. Dieser besitzt an allen Seiten harte Ränder, der Kurvenverlauf ist jedoch zumindest in den Regionen bis zu einem Wandabstand von $r = 6d_1$ dem in Abbildung 9.7 sehr ähnlich. Die Definition der radialen Raumausfüllung muss für diesen Fall dahingehend modifiziert werden, dass statt der Mantelfläche eines Zylinders mit Radius r die Oberfläche eines Würfels mit

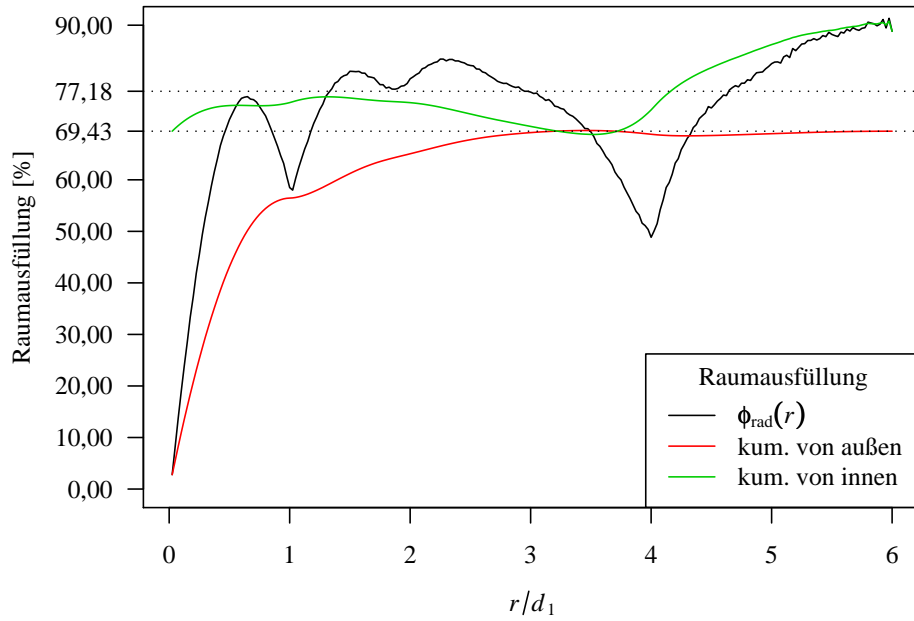


Abbildung 9.7: Verteilung der Raumausfüllung einer bidispersen Packung im Zylinder mit $D = 12d_1$.

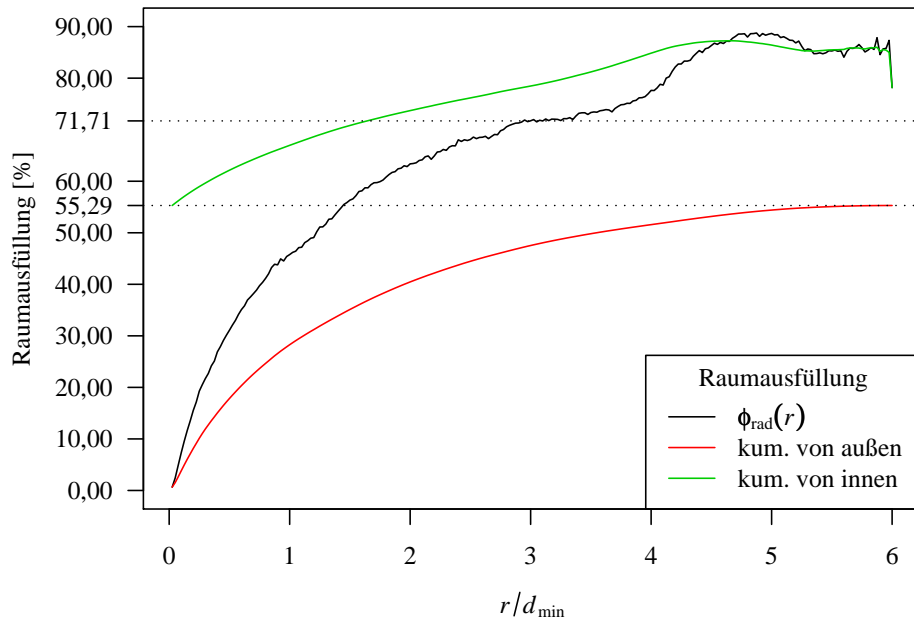


Abbildung 9.8: Verteilung der Raumausfüllung einer Fuller-verteiltern Packung im Zylinder mit $D = 12d_{\text{min}}$.

Seitenlänge $r/2$ betrachtet wird; sie sei für einen Würfel mit $\tilde{\phi}_{\text{rad}}(r)$ bezeichnet. Die im Containerwürfel enthaltene bidisperse Packung weist im Zentrum eine kleine Lücke auf (möglicherweise ein Zwickel zwischen zwei großen Kugeln), was das Absacken der Funktion für $r > 10d_1$ erklärt.

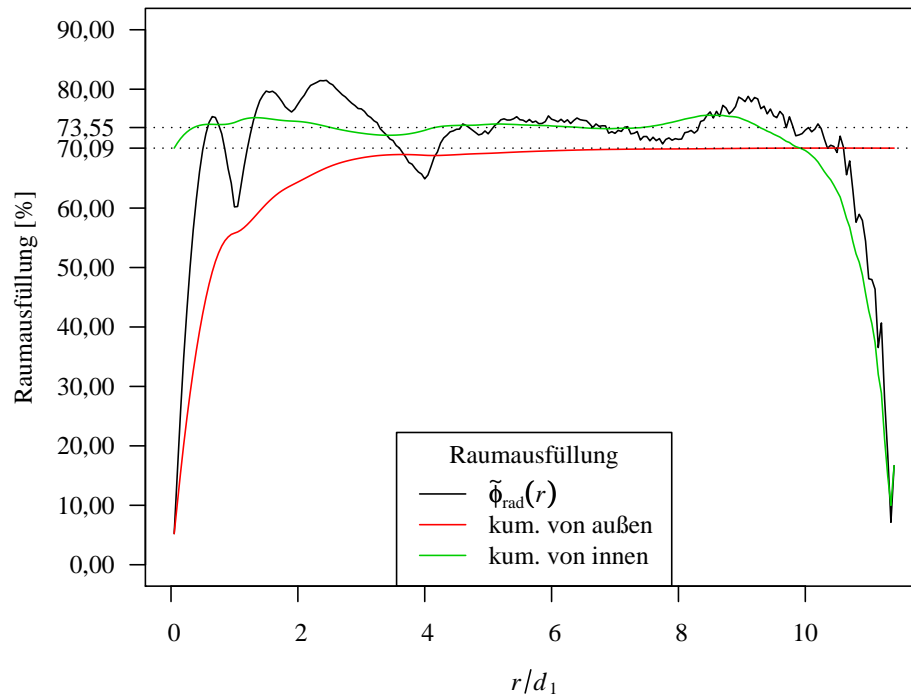


Abbildung 9.9: Verteilung der Raumausfüllung einer bidispersen Packung im Würfel mit $S \approx 22,9d_1$.

Kapitel 10

Packungen weiterer Partikelformen

Bislang wurden in dieser Arbeit Simulationen von Kugelpackungen diskutiert. Während das Kugelmodell für einige wenige Stoffe (z. B. Flugasche) eine sehr gute Approximation darstellt, so gibt es viele weitere Materialien, deren Partikel eine von der Kugelform mehr oder weniger deutlich abweichende Gestalt besitzen. Der folgende Abschnitt soll die in der Literatur beschriebenen Partikelmodelle und deren Umsetzung in der Simulation beleuchten, bevor die Realisierung komplexerer Formen im vorliegenden Simulationsprogramm vorgestellt wird. Dazu wird ein konstruktiver Ansatz befolgt, bei dem mehrere Kugeln zu einem Kugelcluster zusammengefasst werden und so gemeinsam ein Partikel bilden. Ein wichtiger Aspekt ist dabei die Unterstützung beliebiger Partikelformen, zugleich müssen Konzepte wie Nachbarschaft und überlappungsbasierte Verschiebung der Cluster angepasst werden können.

10.1 Literaturübersicht

Simulationen von dreidimensionalen Packungen mit von der Kugelgestalt abweichenden Partikelformen sind ein junges, erst innerhalb der letzten zehn Jahre aufgekommenes Forschungsgebiet, was sich mit der größeren Rechenlast solcher Modelle begründen lässt, welche erst mit leistungsfähigeren Computern bewältigt werden konnte. Entsprechend rar sind Literaturstellen zu diesem Thema.

Hilfreich für die Einordnung der im Folgenden aufgelisteten Forschungsergebnisse verschiedener Autoren ist die Kenntnis einer oberen Schranke der maximal erreichbaren Raumauffüllung ϕ_{\max} (im monodispersen Fall). Torquato und Jiao [TJ09] geben

dafür die Formel

$$\phi_{\max} \leq \phi_{\text{obere Schranke}} = \min \left(\frac{V_P}{V_K} \frac{\pi}{\sqrt{18}}, 1 \right)$$

an, wobei V_P das Volumen des Partikels kennzeichnet und V_K das Volumen der größten Kugel darstellt, die dem Partikel einbeschrieben werden kann. Die Autoren geben auch einen Beweis an: Die maximale Packungsdichte der Partikel kann durch die maximale Anzahl der Partikel im Einheitsvolumen, multipliziert mit V_P , ausgedrückt werden. Wird nun jedes Partikel durch seine größtmögliche einbeschriebene Kugel ersetzt, so erhält man eine Kugelpackung. Die Raumauffüllung dieser Kugeln ist nach oben durch die maximale Raumauffüllung $\phi_{\text{mono}}^* = \pi/\sqrt{18} \approx 0,74$ monodisperser Kugeln beschränkt (siehe Gleichung 2.3). Das Volumen der Partikel ist um den Faktor V_P/V_K größer, daher ist ϕ_{\max} von oben durch $\bar{\phi}_{\text{obere Schranke}} = (V_P/V_K) \cdot (\pi/\sqrt{18})$ beschränkt. Diese Schranke kommt nur für den Fall $\bar{\phi}_{\text{obere Schranke}} \leq 1$ zum Tragen, ansonsten bildet $\phi_{\text{obere Schranke}} = 1$ das triviale Maximum der Raumauffüllung.

10.1.1 Ellipsoide

Packungen aus Ellipsoiden können eine höhere Raumauffüllung als Kugeln aufweisen. Für monodisperse Packungen erzielten Torquato, Donev et al. Raumauffüllungen von $\phi \approx 68\text{--}71\%$, indem sie Packungen der M & M's-Schokolinsen sowohl im Experiment als auch in der Simulation untersuchten [DCS⁺04, MDS⁺05, DTS05b]. Für Ellipsoide anderer Maße konnten sie sogar $\phi \approx 74\%$ erreichen. Weitz erklärt dies mit dem Drehmoment, das Ellipsoide im Gegensatz zu den rotationsinvarianten Kugeln erfahren können [Wei04]. Dadurch seien in Ellipsoidpackungen mehr Kontakte nötig, um die Ellipsoide in ihrer Position zu fixieren, was wiederum eine höhere Raumauffüllung mit sich bringe.

Als Modell zur Optimierung der Leistung Lithium-Ionen-basierter Batterien simulierten Yi et al. Packungen verformbarer Ellipsoide [YWS06]. Vor der Verformung als Resultat des Verdichtungsdrucks konnte aufgrund des verwendeten Algorithmus nur eine Raumauffüllung von $\phi \approx 58\%$ festgestellt werden, jedoch lag auch dieser Wert höher als die Raumauffüllung, die die Autoren mit dem gleichen Verfahren für monodisperse Kugelpackungen erzielten ($\phi \approx 55\%$).

Sherwood [She97] simulierte mit Random Sequential Adsorption monodisperse Packungen aus Rotationsellipsoiden (auch: Sphäroide). Er konnte dabei zwei Maxima der Raumauffüllung feststellen, für ein Achsenverhältnis von $a = 1,4$ (prolate Sphä-

roide) und $a = 0,7$ (oblate Sphäroide). Dazwischen befand sich für die Kugelgestalt ($a = 1$) ein lokales Minimum.

Ebenfalls mit zufälligen Sphäroidpackungen befassten sich Bezrukov und Stoyan [BS06]. Sie erzeugten mit einem CR-Verfahren eine große Anzahl dieser Packungen mit variierendem Achsenverhältnis, konnten jedoch nicht die durch Donev et al. erzielte Raumausfüllung $\phi \approx 74\%$ erreichen.

10.1.2 Zylinder

Zylinder (auch: Stäbchen) wurden von Zhang sowohl in experimentellen als auch in (mittels CR) simulierten Packungen erforscht, siehe [Zha06] und darin enthaltene Literaturangaben. Unter Variation des Verhältnisses $a = l/d$ zwischen Zylinderlänge l und -durchmesser d konnte ein schwaches Maximum der Raumausfüllung monodisperser Zylinderpackungen bei $a = 1,2$ beobachtet werden.

Zylinder mit abgerundeten Enden, sog. Sphärozyylinder, betrachteten Williams and Philipse [WP03]. Das Größenverhältnis wurde von ihnen bis zu $a = 160$ variiert, die höchste Raumausfüllung einer monodispersen Packung ($\phi \approx 70\%$) erreichten sie jedoch mit sehr kurzen Spherozyindern ($a = 0,4$).

10.1.3 Würfel

Gepackte Würfel neigen zur Anordnung in regelmäßigen Strukturen, wie Zhao und Li per Simulation zeigten [ZL08]. Sie verwendeten dazu aus jeweils 64 Kugeln zusammengesetzte Cluster, die anfangs eine Kugelgestalt annahmen. Anschließend wechselten sich ein Anordnungsprozess mittels eines CR-Algorithmus und die Verformung der Cluster ab, sodass diese morphologisch in Würfel übergingen. Nach Abschluss der letzten CR-Iteration entstand so eine Würfelpackung, in der sich die Würfel teilweise an ihren Seitenflächen gemeinsam ausrichteten. Die Packungsdichte betrug $\phi \approx 77,55\%$.

10.1.4 Tetraeder

Wie Torquato und Jiao per Simulation zeigten [TJ09], können Packungen aus regulären Tetraedern eine Raumausfüllung von $\phi \approx 78,20\%$ erzielen, die bis dato höchste Raumausfüllung für monodisperse Partikel dieser Geometrie.

Li et al. simulierten Packungen aus Tetraedern [LZZ08], die sie aus Kugeln zusammensetzten. Auch diese erreichen mit $\phi \approx 68,17\%$ eine Raumauffüllung, die die monodispersen Kugeln übersteigt. Die Koordinationszahl solcher Packungen geben die Autoren mit $K \approx 7,21$ an. Für Tetraeder mit abweichenden Höhen konnten die Autoren die Packungsdichte regulärer Tetraeder nicht übertreffen.

Als Modell für Gesteinsbrocken dienten Tetraeder in der Simulation von Latham et al. [LML02]. Eine hohe Raumauffüllung konnte mit $\phi \approx 38,3\%$ jedoch nicht erzielt werden, da der verwendete Algorithmus vom Typ RSA keine Rotation der Tetraeder zuließ.

10.2 Realisierung alternativer Partikelformen

Mittels DigiPac, einem von Jia und Williams [JW01, JGW02, GGJW04, JGWR07] entwickelten System zum simulierten Packen beliebig geformter Partikel, lassen sich die Partikelgestalt sowie der Container auf Voxelbasis diskretisieren. Der Aufwand für umfangreiche Packungen komplexer Partikel kann jedoch beträchtlich werden. Um die Vorteile von Kugeln (simple Abstandsberechnung, Kollisionserkennung) beizubehalten, kann die Nachbildung komplexerer Kornformen erfolgen, indem diese aus den Kugelprimitiven zusammengesetzt werden, siehe z. B. [LZZ08, ZL08]. Lässt man dabei Überlappungen sowie unterschiedliche Kugelgrößen innerhalb eines solchen Kugel-Clusters zu, so sind praktisch alle Kornformen beliebig gut approximierbar. Dieses Verfahren wird u. a. auch in der kommerziellen DEM-Simulation (EDEM [EDE09]) eingesetzt.

Die Positionen der Kugeln innerhalb eines Partikels sind im vorliegenden Simulationsprogramm starr, d. h. es sind keine relativen Bewegungen der Kugeln untereinander vorgesehen. Ebenso ist dadurch keine Deformation der Partikel möglich, ein durch solch einen Kugel-Cluster dargestelltes Partikel verhält sich damit analog zu harten Kugeln.

In der Implementierung wird ein Cluster durch eine eigene Datenstruktur `Partikel` dargestellt. Um die Zuordnung festzuhalten, enthält jedes `Partikel` eine Liste mit Zeigern auf Objekte des Typs `Kugel`, diese ihrerseits speichern jeweils einen Zeiger auf ihr `Partikel`-Objekt.

Die Nachbarschaftsverwaltung lässt sich auf einfache Weise an diese Art der Modellierung beliebiger Partikelformen anpassen, sodass sie weiterhin mit den einzelnen Kugelprimitiven arbeiten kann. Es muss lediglich sichergestellt werden, dass sich

Kugeln, die Bestandteil desselben Partikels sind, nicht gegenseitig als Nachbarn betrachten können. Die Zugehörigkeit jeder Kugel wird daher in der Nachbarschaftsverwaltung durch Abfrage ihres Zeigers auf das `Partikel`-Objekt geprüft.

10.2.1 Bestimmung des Volumens

Die Ermittlung der Packungsdichte setzt die Bestimmung der Partikelvolumina voraus. Für viele einfache Partikelformen wie Zylinder oder Tetraeder existieren Formeln für diesen Zweck, auf die selbstverständlich auch dann zurückgegriffen werden kann, wenn diese Formen durch zusammengesetzte Partikel approximiert werden. Verallgemeinert man die Anwendungen jedoch auf beliebig komplexe Partikelgeometrien, so stößt dieses Vorgehen schnell an seine Grenzen. Die Volumenbestimmung für beliebig aus Kugeln zusammengesetzte Partikel ist nicht trivial, denn sie können sowohl Überschneidungen der einzelnen Kugeln als auch Hohlräume enthalten. Eine einfache Ermittlung ihres Volumens durch Aufaddierung der Kugelvolumina oder Berechnung einer Umkugel ist somit nicht möglich. Zwar existiert eine Formel zur Berechnung des Schnittvolumens zweier Kugeln [AM72], aber eine Adaption an die Situation mehrerer sich schneidender Kugeln ist überaus kompliziert.

Eine bessere Option ist die Volumenbestimmung mit der „Hit-or-Miss“-Methode, die im vorliegenden Simulationsprogramm auch zur Ermittlung der lokalen Raumausfüllung und Quantifizierung des Wandeffekts eingesetzt wird, siehe Kapitel 9. Dieses Monte-Carlo-Verfahren muss für jede Partikelform einmalig durchgeführt werden. Dazu wird ein zusammengesetztes Partikel zentriert im Ursprung positioniert und ein umschließender Würfel (die *bounding box*) bestimmt, dessen Seitenlänge $2s$ sei. Algorithmus 10.1 gibt an, wie das Zählen der zufällig generierten Testpunkte innerhalb („Hits“) und außerhalb („Misses“) der Kugeln des Clusters auf das Volumen des Partikels führt. Zu beachten ist die vorzeitige Beendigung der Prüfung eines Punktes, sobald klar ist, dass er innerhalb einer Kugel liegt. Dennoch kann diese Prozedur für umfangreiche Kugel-Cluster einige Zeit in Anspruch nehmen, da auch die Zahl der Testpunkte groß genug gewählt werden sollte, um die Struktur des Clusters gründlich zu erfassen. In der Implementierung wurde die Anzahl der Testpunkte auf $T = 100.000.000$ festgelegt. Für Cluster mit 100 oder mehr Kugeln wird daher eine Variante von Algorithmus 10.1 eingesetzt, die die Nachbarschaftsverwaltung miteinbezieht, um statt sämtlicher Kugeln nur die Teilmenge der Kugeln untersuchen zu müssen, die sich in der Nähe des zufälligen Testpunktes befinden.

Für die Bestimmung der **Raumausfüllung** einer Packung aus so zusammengesetzten

Algorithmus 10.1 „Hit-or-Miss“-Methode zur Bestimmung des Partikelvolumens.

Benötigt: s = halbe Seitenlänge der bounding box**Benötigt:** T = Anzahl der Testpunkte**Benötigt:** N = Anzahl der Kugeln k_1, \dots, k_N im Cluster $h \leftarrow 0$ **for** $t = 1, \dots, T$ **do** $x \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-s, s]$ $y \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-s, s]$ $z \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-s, s]$ $a \leftarrow h$ $i \leftarrow 0$ **repeat** $i \leftarrow i + 1$ **if** Punkt $(x/y/z)$ liegt in Kugel k_i **then** $h \leftarrow h + 1$ **end if****until** $h > a \vee i = N$ **end for****return** $\frac{h}{T}(2s)^3$

Partikeln gilt die in Definition 2.2.1.1 angegebene Berechnungsvorschrift, welche die oben beschriebene Methode nutzt, um das Volumen $V_P(p_i)$ jedes einzelnen Partikels p_i zu ermitteln. Die Berechnung des **gewichteten durchschnittlichen Mittelpunktes** erfolgt in Anlehnung an die in Definition 2.2.2.2 angegebene Formel, jedoch wird statt d_i^3 nun das tatsächliche Partikelvolumen $V_P(p_i)$ als Gewicht des Partikelmittelpunktes \vec{x}_i eingesetzt.

10.2.2 Bestimmung der Oberfläche

Ein ähnlicher Algorithmus lässt sich zur Bestimmung der Oberfläche eines zusammengesetzten Partikels einsetzen, die für die Berechnung der spezifischen Oberfläche der Packung nötig ist. Hier muss für jede Kugel des Clusters derjenige Anteil ihrer Oberfläche ermittelt werden, der nicht durch Überlappung in einer anderen Kugel enthalten ist. Eine bounding box ist nicht erforderlich, da die Testpunkte auf den Kugeloberflächen erzeugt werden, wie Algorithmus 10.2 im Detail beschreibt.

Auch für diesen Algorithmus existiert in der Implementierung eine Variante, die sich auf die Nachbarschaftsverwaltung stützt, um nur diejenigen Kugeln untersuchen zu müssen, die in räumlicher Nähe zum Testpunkt positioniert sind. Sie wird für Kugelanzahlen $N \geq 100$ eingesetzt. Die Anzahl der verwendeten Testpunkte beträgt $T = 1.000.000$.

Algorithmus 10.2 „Hit-or-Miss“-Methode zur Bestimmung der Partikeloberfläche.

Benötigt: T = Anzahl der Testpunkte

Benötigt: N = Anzahl der Kugeln k_1, \dots, k_N im Cluster

$O \leftarrow 0$

for $i = 1, \dots, N$ **do**

$r \leftarrow$ Radius der Kugel k_i

$\vec{m} \leftarrow$ Mittelpunkt der Kugel k_i

$h \leftarrow 0$

for $t = 1, \dots, T$ **do**

$x \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-1, 1]$

$y \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-1, 1]$

$z \leftarrow$ gleichverteilte Zufallszahl aus $[-1, 1]$

$\vec{p} \leftarrow (x/y/z)$

$l \leftarrow \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

$\vec{p} \leftarrow \vec{m} + \frac{r}{l}\vec{p}$ // Testpunkt \vec{p} auf Kugeloberfläche bringen

$a \leftarrow h$

$j \leftarrow 0$

repeat

$j \leftarrow j + 1$

if $j \neq i \wedge$ Punkt \vec{p} liegt in Kugel k_j **then**

$h \leftarrow h + 1$

end if

until $h > a \vee j = N$

end for

$O \leftarrow O + (1 - \frac{h}{T}) 4\pi r^2$

end for

return O

Die **volumenbezogene spezifische Oberfläche** (vgl. Definition 2.2.1.4) für eine Packung mit N aus Kugeln zusammengesetzten Partikeln mit jeweiligen Oberflächen $O_i, i = 1, \dots, N$, beträgt

$$S_V = \frac{\sum_{i=1}^N O_i}{V_C},$$

wenn V_C das Containervolumen der Packung darstellt.

10.2.3 Erzeugung und Platzierung

Soll ein Partikel einer bestimmten Gestalt in der simulierten Packung vorkommen, so wird es zu Beginn des Programms erzeugt. Dazu liest das Programm die Partikeldatei ein, in der die relativen Positionen und Radien der zugehörigen Kugeln gespeichert sind. Ebenso können dort vorberechnete Werte für Volumen und Oberfläche des Partikels abgelegt sein, ansonsten müssen zu deren Bestimmung die Algorithmen 10.1 und 10.2 ausgeführt werden. Um das Partikel auf eine durch das Sampling der KGV bestimmte Korngröße x zu bringen, wird jeder Kugelradius sowie der Abstand jedes Kugelmittelpunktes vom Partikelmittelpunkt mit dem Faktor $\frac{x}{d_V}$ skaliert. Dabei ist d_V der Durchmesser einer volumenäquivalenten Kugel, es gilt also

$$V_p = \frac{\pi}{6} d_V^3 \quad \Leftrightarrow \quad d_V = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} V_p},$$

wenn V_p das Volumen des Partikels kennzeichnet.

Die anfängliche Ausrichtung des Partikels wird durch den Zufall bestimmt, die Positionierung des Partikelmittelpunktes erfolgt schließlich ähnlich dem in Kapitel 7.3.2 beschriebenen Verfahren für einfache Kugeln, d. h. die Überlappungsraten \hat{o}_{ij} werden auf Kugelbasis ermittelt und pro Partikel aufsummiert. Ein bedeutender Unterschied liegt jedoch in der Gewichtung der zu kumulierenden Überlappungsraten, welche den akzeptierten Schwellwert überschreiten (siehe Gleichung (7.4)): Gleichung (7.3) wird ersetzt durch

$$\hat{o}_i = \sum_{j \neq i} r_i^3 r_j^3 \hat{o}_{ij},$$

die Größenordnungen der Volumina der betroffenen Kugeln (ausgedrückt durch die dritten Potenzen der Radien r_i und r_j) wirken sich also auf die „Bösartigkeit“ der jeweiligen Überlappung aus. Damit wird verhindert, dass für zusammengesetzte Partikel die Verletzung des Schwellwertes durch kleine Kugeln genauso stark wiegt wie die Verletzung durch große Kugeln und so evtl. eine voluminöse Überlappung

zwischen zwei großen Kugeln in Kauf genommen wird.

10.2.4 Translation und Rotation im CR

Während des Collective Rearrangements wird der Verschiebungsvektor für jede einzelne Kugel des Clusters wie bisher separat berechnet, was die Anpassung der Nachbarschaftsverwaltung darauf beschränkt, nur Überlappungen mit Kugeln außerhalb des gleichen Clusters zu berücksichtigen. Der vorgesehene Verschiebungsvektor des Partikels ist dann der gewichtete resultierende Vektor aller Kugelverschiebungen, allerdings wird die Gewichtung (analog zur Anpassung der Platzierung im vorhergehenden Abschnitt) mit dem Produkt der Volumina der betroffenen Kugeln als zusätzlichem Faktor ergänzt. Unter periodischen Randbedingungen kann die Translation ohne Weiteres ausgeführt werden, bei harten Containerrändern jedoch erfolgt sie nur maximal so weit, bis mindestens eine Kugel den Rand berührt.

Im Gegensatz zu den rotationsinvarianten Kugeln muss für clusterbasierte Partikel das Drehmoment berücksichtigt werden, nur so kann eine zufällige, dichte Packung erfolgen. Der gewichtete Verschiebungsvektor \vec{v}_i , der für jede Kugel k_i aufgrund ihrer Überlappungen mit Kugeln anderer Cluster berechnet wird, dient einerseits als Beitrag der Kugel zur Translation des Partikels p_j , andererseits aber ebenso als Kraft $\vec{F}_i = \vec{v}_i$, die am Mittelpunkt \vec{m}_i der Kugel angreift. Aus der Differenz von \vec{m}_i zum Partikelmittelpunkt \vec{p}_j ergibt sich der Hebelarm $\vec{r}_i = \vec{m}_i - \vec{p}_j$. Das durch die Überlappungen der Kugel k_i auf das Partikel p_j wirkende Drehmoment ist damit

$$\vec{M}_{ij} = \vec{r}_i \times \vec{F}_i.$$

Das Mittel der Momente über alle Kugeln liefert dann das resultierende Drehmoment

$$\vec{M}_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{M}_{ij},$$

das auf das aus N Kugeln zusammengesetzte Partikel p_j wirkt.

Die Rotation eines Partikels erfolgt im Simulationsprogramm nach der Translation, die Reihenfolge ist jedoch austauschbar, da das Partikel um seinen eigenen Mittelpunkt \vec{p}_j gedreht wird – die Operationen Rotation und Translation sind damit kommutativ. Die Rotation erfolgt mit dem Winkel $\alpha = \left| \vec{M}_j \right|$ um die durch \vec{M}_j definierte Achse und ist durch den Algorithmus 10.3 beschrieben. Wie bei der Translation auch muss hier im Anschluss sichergestellt sein, dass keine einzige Kugel des Partikels einen

harten Containerrand verletzt.

Algorithmus 10.3 Rotation eines aus Kugeln zusammengesetzten Partikels.

Benötigt: N = Anzahl der Kugeln k_1, \dots, k_N im Cluster

Benötigt: $\vec{m}_1, \dots, \vec{m}_N$ = Mittelpunkte der Kugeln

Benötigt: \vec{p} = Mittelpunkt des Partikels

Benötigt: $\vec{a} = (\vec{a}_X/\vec{a}_Y/\vec{a}_Z)$ = Vektor der Rotationsachse

Benötigt: α = Rotationswinkel

$\beta \leftarrow \text{atan2}(\vec{a}_Y, \vec{a}_Z)$

$\text{ROTX}(\vec{a}, \beta)$

$\gamma \leftarrow \text{atan2}(\vec{a}_X, \vec{a}_Z)$

for $i = 1, \dots, N$ **do**

$\vec{m}_i \leftarrow \vec{m}_i - \vec{p}$ // Translation in Richtung Ursprung

$\text{ROTX}(\vec{m}_i, \beta)$ // Rotation um X-Achse, damit \vec{a} in X-Z-Ebene liegt

$\text{ROTY}(\vec{m}_i, \gamma)$ // Rotation um Y-Achse, damit \vec{a} auf Z-Achse liegt

$\text{ROTZ}(\vec{m}_i, \alpha)$ // Rotation um Z-Achse mit Winkel α

$\text{ROTY}(\vec{m}_i, -\gamma)$ // Rück-Rotation um Y-Achse

$\text{ROTX}(\vec{m}_i, -\beta)$ // Rück-Rotation um X-Achse

$\vec{m}_i \leftarrow \vec{m}_i + \vec{p}$ // Rück-Translation

end for

Algorithmus 10.4 ROTX: Rotation eines Punktes um die X-Achse.

Benötigt: $(x/y/z)$ = Koordinaten des zu rotierenden Punktes

Benötigt: α = Rotationswinkel

$y_{\text{neu}} \leftarrow y \cos \alpha - z \sin \alpha$

$z \leftarrow y \sin \alpha + z \cos \alpha$

$y \leftarrow y_{\text{neu}}$

return $(x/y/z)$

10.3 Raumausfüllung für verschiedene Partikelformen

Abbildung 10.1 zeigt eine Packung aus 1.000 monodispersen Sphäroiden, aufgrund der periodischen Randbedingungen sind nahe der Containerränder einzelne Komponenten der Partikel zu sehen. Die Sphäroide bestehen jeweils aus 5 Einzelkugeln und besitzen ein Achsenverhältnis von $a/b = 3,8$. Ihre Packungsdichte beträgt $\phi = 66,8\%$ und liegt damit höher als die monodisperser Kugeln, was im Einklang mit den Ergebnissen in der Literatur steht (siehe Abschnitt 10.1.1).

Die Würfelpackung in Abbildung 10.2 ist ein weiteres Beispiel für das Zusammenetzen von Kugeln zu beliebigen Partikelformen. Die Partikel bestehen in diesem

Algorithmus 10.5 ROTY: Rotation eines Punktes um die Y-Achse.

Benötigt: $(x/y/z)$ = Koordinaten des zu rotierenden Punktes

Benötigt: α = Rotationswinkel

$$x_{\text{neu}} \leftarrow z \sin \alpha + x \cos \alpha$$

$$z \leftarrow z \cos \alpha - x \sin \alpha$$

$$x \leftarrow x_{\text{neu}}$$

return $(x/y/z)$

Algorithmus 10.6 ROTZ: Rotation eines Punktes um die Z-Achse.

Benötigt: $(x/y/z)$ = Koordinaten des zu rotierenden Punktes

Benötigt: α = Rotationswinkel

$$x_{\text{neu}} \leftarrow x \cos \alpha - y \sin \alpha$$

$$y \leftarrow y \cos \alpha + x \sin \alpha$$

$$x \leftarrow x_{\text{neu}}$$

return $(x/y/z)$

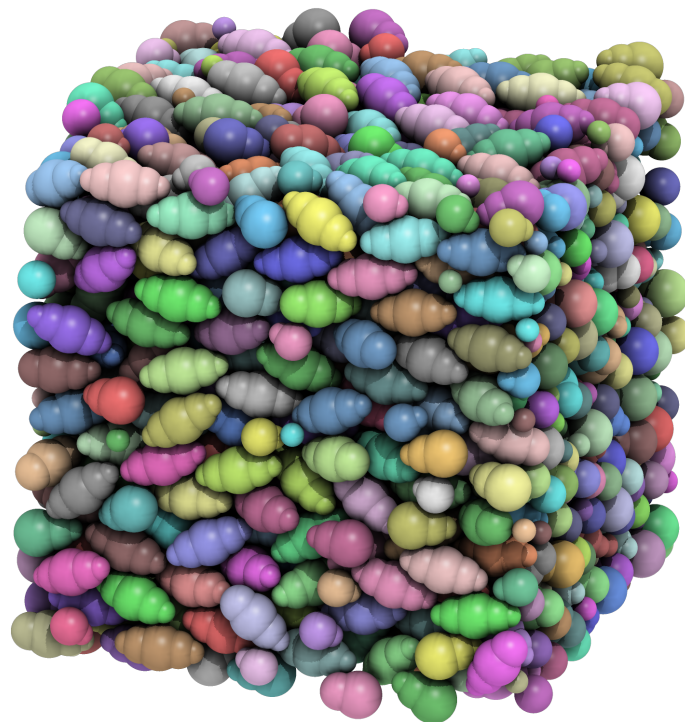


Abbildung 10.1: Packung aus Sphäroiden mit periodischen Randbedingungen.

Fall aus 64 Kugeln; eine Erhöhung dieser Anzahl verbessert die Approximation der Würfelform, sofern es die Rechnerleistung zulässt. Die Anpassung der Würfel an die Kanten und Seitenwände des Containers ist gut erkennbar, jedoch richten sie sich im Zentrum der Packung teilweise untereinander aus und bilden kleine Cluster gleicher Orientierung. Die zwischen den Clustern bestehenden Lücken sorgen für eine geringe Raumausfüllung von $\phi = 55,2\%$.

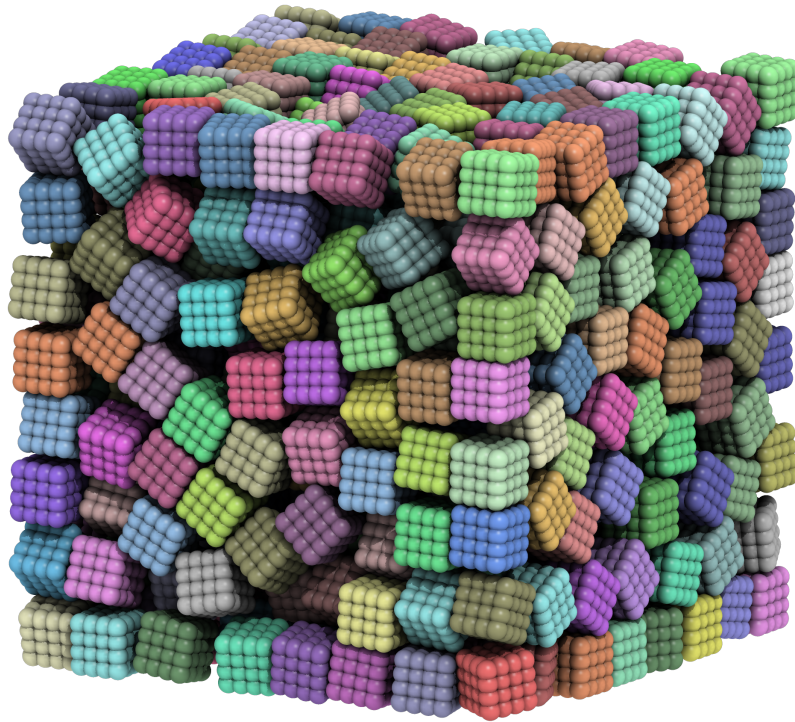


Abbildung 10.2: Packung aus 512 Würfeln.

Packungen aus Partikeln mit rauer Oberfläche weisen eine niedrigere Raumausfüllung auf als Packungen glatter Kugeln. Abbildung 10.3 zeigt eine solche Packung aus 1000 Partikeln. Jedes Partikel besteht aus einer zentralen Kugel mit Durchmesser $d = 1$ sowie 50 kleinen Kugeln mit $0,1 \leq d \leq 0,2$, die auf der Oberfläche der großen Kugel platziert sind, d. h. der Abstand des Mittelpunktes jeder Oberflächenkugel zum Mittelpunkt der zentralen Kugel beträgt 1.

Die (volumenbasierte) spezifische Oberfläche der Packung fällt mit $S_V \approx 11,75$ deutlich höher aus als die einer Packung monodisperser Kugeln ohne Oberflächenbesatz ($S_V = 6$ für $d = 1$). Mit $\phi = 50\%$ wurde eine geringe Raumausfüllung erzielt, die größtenteils auf die bereits an den Oberflächenkugeln zusammenstoßenden Partikel zurückzuführen ist. Die lokalen Maxima der PKF (Abbildung 10.4) sind daher im Vergleich zu einer monodispersen Packung glatter Kugeln (vgl. Abbildung 2.6) um ca. 0,15 nach rechts verschoben (Aufgrund der geringen Packungsgröße in einem be-

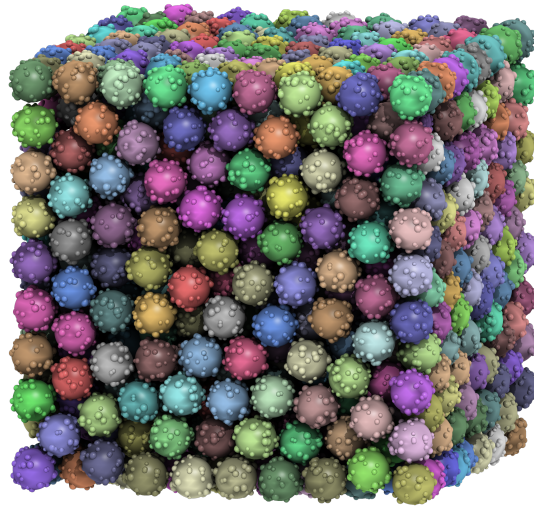


Abbildung 10.3: Packung aus Kugeln mit strukturierter Oberfläche.

schränkten Container fällt die PKF ab.). Die Verteilung der lokalen Raumauffüllung (Abbildung 10.5) zeigt außerdem den beträchtlichen Einfluss des Wandeffekts auf die Packungsstruktur. Hier sind die Extrema ebenfalls nach rechts verschoben, auch scheint das Minimum bei ca. $r = 1$ nicht so scharf auszufallen wie die Entsprechung im Graphen glatter Kugeln (vgl. z. B. Abbildung 9.6).

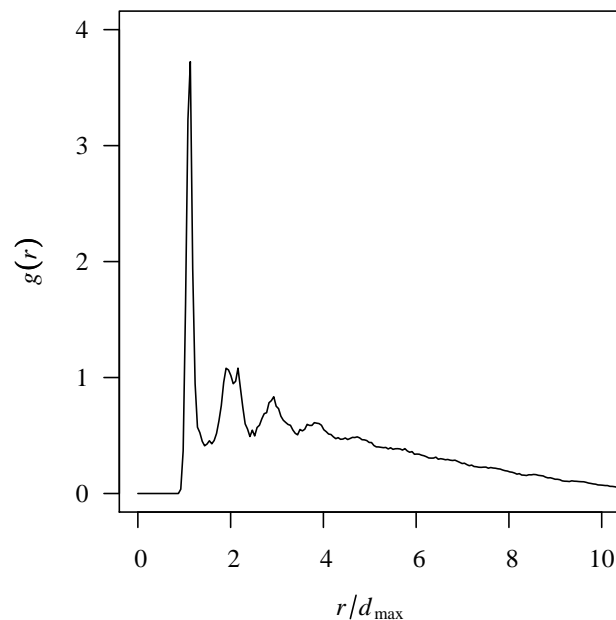


Abbildung 10.4: Paarkorrelationsfunktion für eine Packung aus Kugeln mit strukturierter Oberfläche.

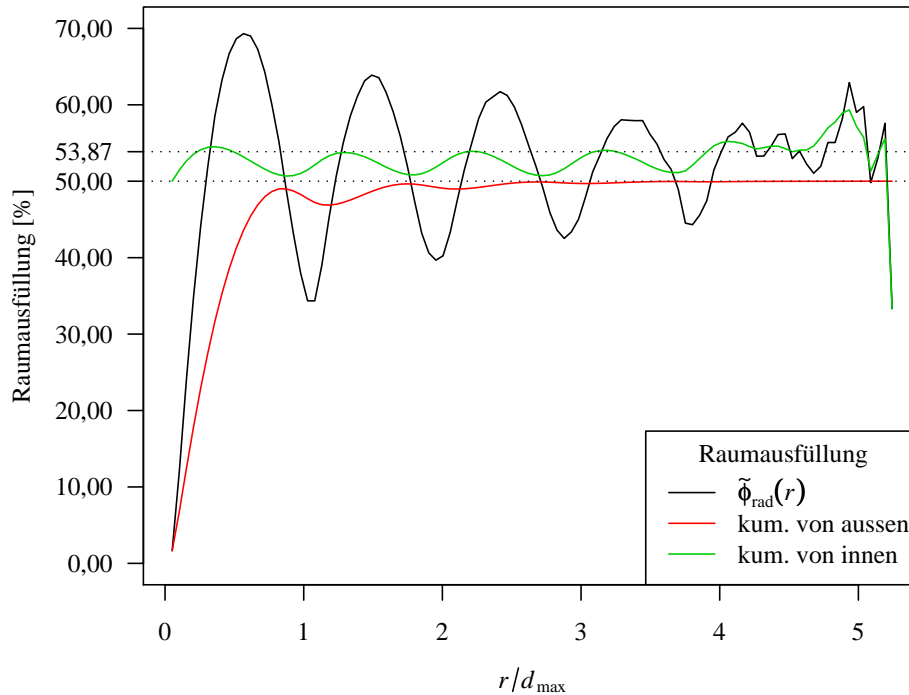


Abbildung 10.5: Verteilung der Raumausfüllung für eine Packung aus Kugeln mit strukturierter Oberfläche.

10.4 Erzeugung von polydispersen und polymorphen Packungen

Obwohl in den letzten Jahren viele Untersuchungen mit simulierten Partikelpackungen durchgeführt worden sind, in denen von der Kugelgestalt abgewichen wurde (vgl. Abschnitt 10.1), wird bislang nur von gestaltshomogenen Packungen berichtet, d. h. die Partikel unterscheiden sich evtl. in der Größe, nicht aber in der Kornform. Daher soll das Simulationsprogramm neben der Polydispersität auch die Polymorphie innerhalb einer Packung gestatten, und so in zukünftigen Arbeiten die Untersuchung der Raumausfüllung von Mischungen aus Materialien unterschiedlichster Kornform erleichtern. Die Abbildungen 10.6 bis 10.8 demonstrieren diese Möglichkeiten.

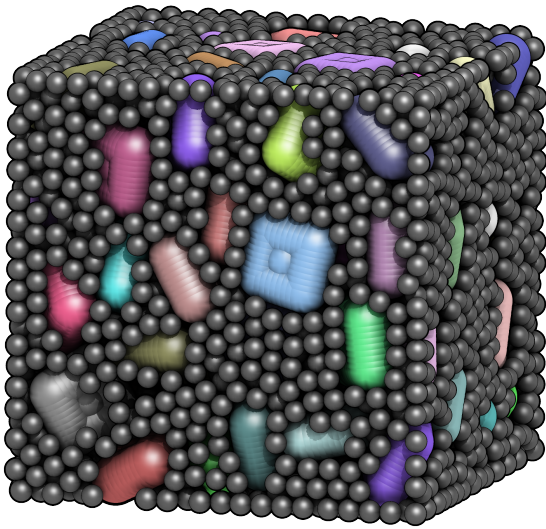


Abbildung 10.6: Bidisperse Packung aus kissenförmigen groben und kugelförmigen kleinen Partikeln.

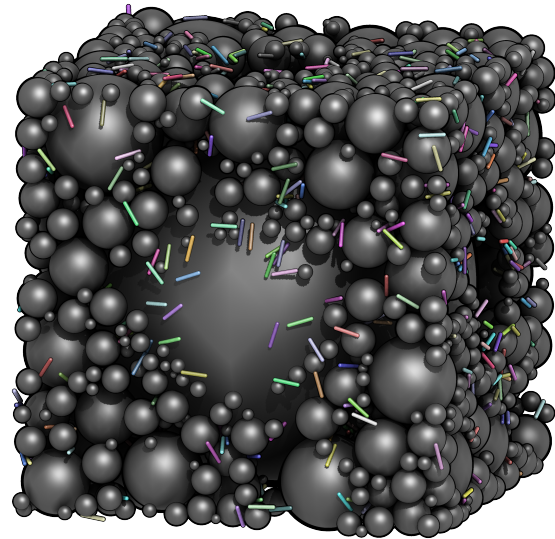


Abbildung 10.7: Packung als Modell für faserverstärkten Beton mit 0,1 Vol.-% Faseranteil.



Abbildung 10.8: Packung aus Tetris-artigen Partikeln.

Kapitel 11

Agglomeration

Betrachtet man reale Partikelpackungen, so stößt man im Feinkornbereich auf das Phänomen der Agglomeration. Grenzflächenkräfte sorgen hier für ein Zusammenballen der Partikel, sodass sogenannte Agglomerate in unregelmäßiger Form und Größe entstehen (siehe Abbildung 11.1). Teilweise sind diese Agglomerate so stabil, dass sie Verdichtungsprozesse überleben und in der finalen Packung weiterexistieren. Dort reduzieren sie die Raumausfüllung aufgrund ihrer geringen inneren Dichte und der häufig fraktalen Form, die verhindert, dass das Feinkorn die ihm zugedachte Rolle als Füllmaterial kleinster Lücken einnehmen kann.

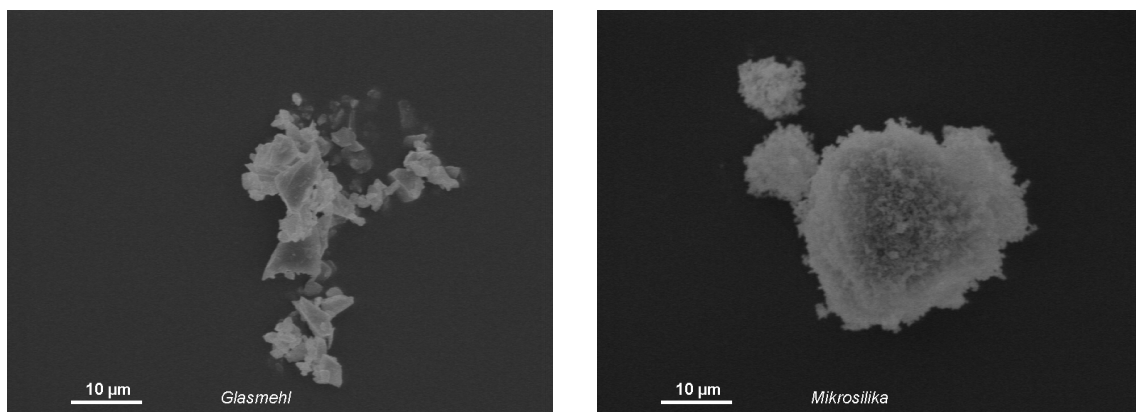


Abbildung 11.1: REM-Aufnahme von Glasmehl (links) und Mikrosilika (rechts).

Simulationen von Kugelpackungen müssen die Agglomeration (oder zumindest ihre Auswirkungen auf die Raumausfüllung) in irgendeiner Weise berücksichtigen, wenn sie als Modell für feine und feinste Partikel dienen sollen.

11.1 Ursache

Die Agglomeration wird durch interpartikuläre Kräfte verursacht. Zu diesen zählen die kohäsive Van-der-Waals-Kraft und die elektrostatische Kraft, welche für eine Abstoßung zwischen gleichartig geladenen Teilchen sorgt. Die auch London-Kraft genannte Van-der-Waals-Bindung entsteht, wenn die Elektronenbewegung zweier Partikel korreliert und sich so ein temporärer Dipol bildet, was nur im Nahbereich bis ca. 100 nm möglich ist. Innerhalb dieser Distanz fällt die Wirkung mit $1/D^2$, wobei D den Abstand der Partikel bezeichnet [Faz07]. Demgegenüber steht die elektrostatische Kraft, die über etwas größere Entfernungen wirken kann und deren Richtung von der Ladung der Partikel abhängt. In granularen Materialien sind Partikel typischerweise entweder gleichartig geladen, sodass sich die Partikel abstoßen, oder ungeladen, was dann die Vernachlässigung der elektrostatischen Kraft erlaubt. Tatsächlich hängt die Raumausfüllung feiner Partikel in erster Linie von der Van-der-Waals-Kraft ab [YZY00, YFZY03, ZZY03]. Für das Mischen mehrerer Feinstoffe kann die elektrostatische Kraft ausgenutzt werden, indem z. B. zwei Partikelfraktionen entgegengesetzt aufgeladen werden. Auf diese Weise stoßen sich die gleichnamig aufgeladenen Partikel einer Fraktion untereinander ab, und ziehen die Partikel der anderen Fraktion an, was die Durchmischung fördert [WL03].

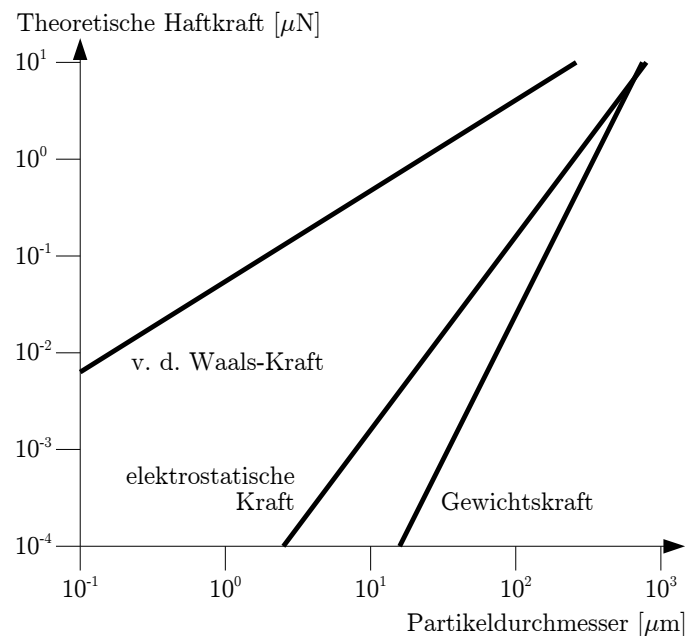


Abbildung 11.2: Interpartikuläre Kräfte für feine Partikel (nach [BPW⁺91]).

Die Van-der-Waals-Kraft und die elektrostatische Kraft wirken proportional zur Oberfläche der Partikel, wohingegen die durch die Partikelmassen bestimmte Gewichtskraft linear mit dem Volumen wächst und somit für Partikelgrößen oberhalb

des Feinbereichs den strukturbestimmenden Einflussfaktor darstellt (siehe die schematische Darstellung in Abbildung 11.2). Sie ermöglicht einige Verdichtungsverfahren (Rütteln), Agglomerate spielen für diese Partikelgrößen keine Rolle mehr. Die Raumausfüllung unter Einfluss magnetischer Kräfte wurde von Lumay und Vandewalle untersucht [LV07], in ähnlichen Experimenten wurde die Abhängigkeit vom Verhältnis aus interpartikulären magnetischen Kräften und Partikelmasse bzw. Gewichtskraft von Forsyth et al. für Packungen in einem Magnetfeld festgestellt, sie schlossen auf einen ähnlichen Zusammenhang, wenn statt magnetischer Kräfte Van-der-Waals-Kräfte wirken [FHOR01]. Auch bei Dong et al. ergab sich in der DEM-Simulation ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen diesem Kräfteverhältnis und der Raumausfüllung feiner Partikel in einer Flüssigkeit [DYZY06].

In der Literatur finden sich diverse Aussagen zu den Korngrößenintervallen, in denen dagegen mit Agglomeration zu rechnen ist: Nach Valverde und Castellanos [VC06, VC07a] agglomerieren Partikel mit Korngrößen bis etwa $50\ \mu\text{m}$, für Sand gibt Fazekas [Faz07] eine Obergrenze von $250\ \mu\text{m}$ an. Anhand dieser und ähnlicher Angaben lässt sich eine starke Varianz der Agglomerationsneigung erkennen, was der Stoffabhängigkeit zuzuschreiben ist.

11.2 Relevanz

Die Auswirkung der Agglomeration auf die Raumausfüllung lässt sich an einem Beispiel verdeutlichen: Im Experiment wurden mehrere Mörtelmischungen verdichtet und ihre Raumausfüllungen festgestellt. Mit den zuvor bestimmten Korngrößenverteilungen wurden ebenso virtuelle Kugelmischungen erzeugt und in der Simulation gepackt. Die Raumausfüllungen sind in Diagramm 11.3 gegenübergestellt, dabei geben die Ziffern in der Mischungsbezeichnung die Mischungsverhältnisse der Komponenten

- Bindemittel, aus 1 (Volumen-)Anteil Feinstzement ($< 20\ \mu\text{m}$), 3 Anteilen einer mittleren Zementfraktion ($10 - 63\ \mu\text{m}$) und 5 Anteilen grobem Hüttensand ($125 - 250\ \mu\text{m}$) zusammengesetzt,
- Normsand, feine Fraktion ($250 - 500\ \mu\text{m}$),
- Normsand, mittlere Fraktion ($0,5 - 1\ \text{mm}$) und
- Normsand, grobe Fraktion ($1 - 2\ \text{mm}$)

wieder. Die als Referenz untersuchte Normmischung besteht aus 25 % Zement (CEM I 32,5R) und 75 % Normsand.

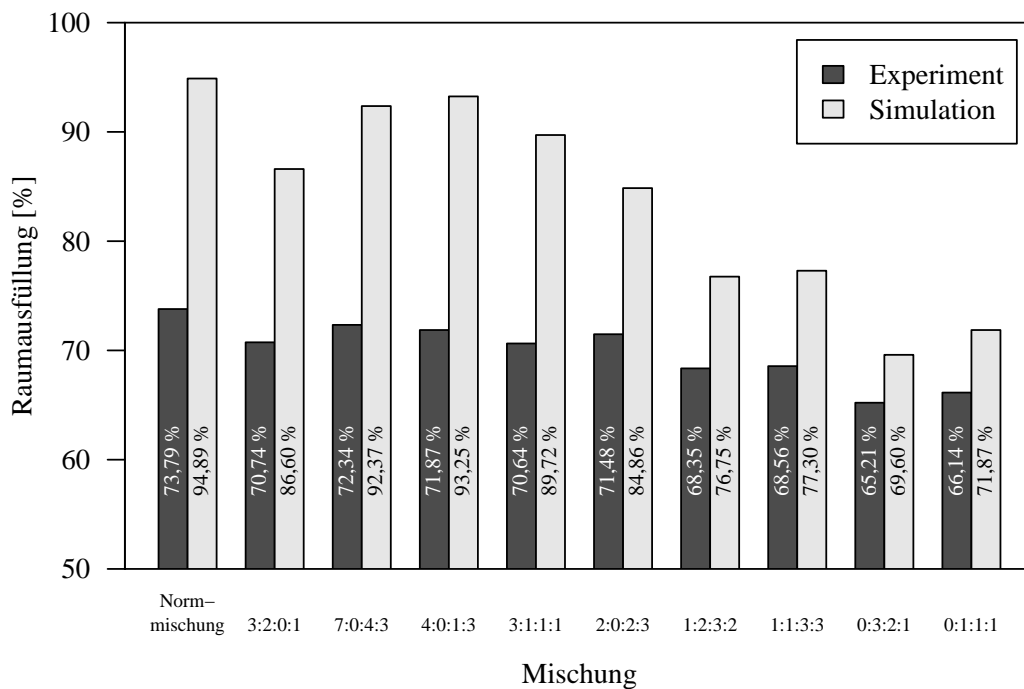


Abbildung 11.3: Experimentell und simulativ für Mörtelmischungen erzielte Raumausfüllungen im Vergleich.

Der Vergleich lässt eine deutliche Diskrepanz zwischen den Ergebnissen erkennen, die umso höher ausfällt, je mehr Feinanteil in der Mischung enthalten ist. Die simulierten Packungen stellen die Situation für ideale Kugeln dar, auf die keine interpartikulären Kräfte wirken. In der Realität ist es – neben anderen Einflussfaktoren wie der Partikelform – hauptsächlich die Agglomeration, die eine beträchtliche Verringerung der Raumausfüllung bewirkt. Wie weiter oben beschrieben agglomerieren kleine Primärpartikel zu größeren Partikelclustern, wodurch die Lückenfüllwirkung im Fein- und Feinstbereich verloren geht. Die Agglomeration verändert also de facto die Korngrößenverteilung und ersetzt kleine Korngrößen durch größere Agglomerate, die darüberhinaus eine geringe innere Raumausfüllung aufweisen. Daraus resultiert eine Reduzierung der Packungsdichte der Mischung.

Für sehr feine Ausgangsstoffe zeigt die Agglomeration zum Teil beträchtliche Auswirkungen auf die Packung, die Raumausfüllung kann ohne Weiteres bis auf 1 % absinken, wenn beispielsweise hochfeine Kieselsäure (Nanosilika) verwendet wird [VC06].

11.3 Vermeidung

Da das Auftreten von Agglomeraten dem Erzeugen einer dichten Packung entgegensteht, müssen Möglichkeiten bedacht werden, die Agglomeration zu unterbinden oder zumindest stark einzuschränken. Nur dann kann eine simulierte Kugelpackung die reale Packung hinreichend gut abbilden.

Betrachtet man Betonmischungen, so ist die Festigkeit des Endproduktes von primärem Interesse, die Packungsdichte der trockenen Schüttung ist nur ein Hinweis darauf (siehe Kapitel 1.1.2). Bereits nach der Wasserzugabe beim Betonanmischen können vorher bestehende Agglomerate zerfallen, was auf die Reduzierung der interpartikulären Kräfte in flüssiger Umgebung zurückzuführen ist [YXB1⁺08], andererseits sorgen jedoch Kapillarkräfte auch in der flüssigen Phase für eine Kohäsion der Partikel [XZY04, XZY07]. Zusatzmittel wie Superverflüssiger helfen trotzdem, die agglomerierten Partikel zu dispergieren [Kje07] (siehe auch Abbildung 11.4).

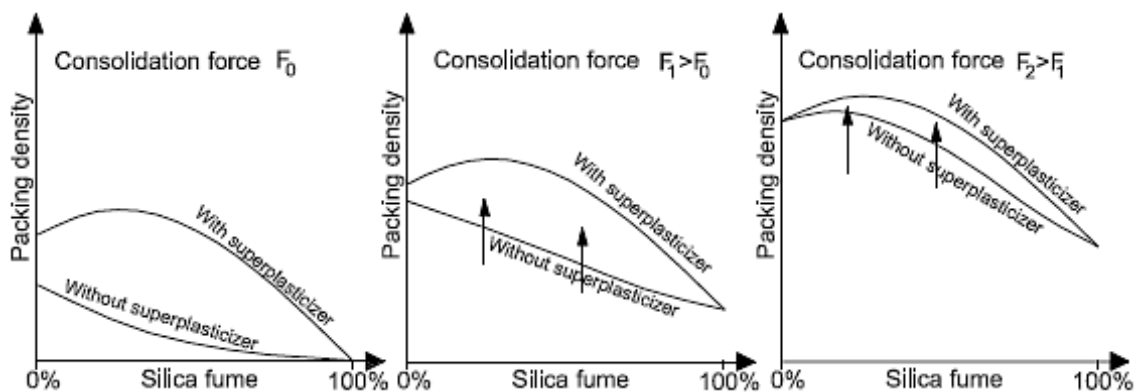


Abbildung 11.4: Die Packungsdichte einer Zementmischung in Abhängigkeit vom Mikrosilika-Anteil. Durch Zugabe von Fließmitteln kann der charakteristische Kurvenverlauf hergestellt werden, eine Erhöhung der Verdichtungskraft verschiebt die Kurve nach oben, der Einfluss der Agglomeration verschwindet (aus [Kje07]).

Das Vorhandensein der Agglomerate in einer Partikelpackung ist stark vom Verdichtungsdruck abhängig. Eine Erhöhung desselben kann die Agglomeration stark einschränken. Kjeldsen stellt für Mischungen aus Mikrosilika und Zement bei einem Verdichtungsdruck von 10 MPa eine maximale Packungsdichte fest, die als charakteristisch und von Agglomeration unbeeinflusst angesehen wird [Kje07], siehe Abbildung 11.4. Auch bei Alberts finden sich Ansätze, die die Reduzierung der Porosität durch Erhöhung des Drucks beschreiben [Alb05]. Valverde und Castellanos untersuchten die Verdichtung von Stärkemehl und geben drei Intervalle des Verdichtungsdrucks P_V an [VC07a]: Bei $1 \text{ Pa} \leq P_V \leq 10 \text{ Pa}$ ordnen sich die Agglomerate zu einer dichten, zufälligen Packung an, zwischen $10 \text{ Pa} \leq P_V \leq 10 \text{ kPa}$ zerfallen sie in

kleinere Agglomerate, und für $P_V \geq 10$ kPa sind praktisch keine Agglomerate mehr vorhanden.

11.4 Berücksichtigung in der Simulation

Kann oder soll die Agglomeration in der Realität nicht vermieden werden, dann bestehen mehrere unterschiedlich komplexe Möglichkeiten, diese auch in der Modellierung bzw. Simulation angemessen zu berücksichtigen.

11.4.1 Modifizierung der simulativ ermittelten Packungsdichte

Die einfachste Möglichkeit zur Einbeziehung der Agglomeration besteht in der Modifizierung der von der Simulation bestimmten Raumausfüllung. Sie ist gekennzeichnet durch einen Verzicht auf Eingriffe in den CR-Algorithmus bzw. den gesamten Erzeugungsprozess der Packung; es wird also zunächst die Raumausfüllung ϕ einer Packung idealer Kugeln bestimmt, deren Durchmesser der gemessenen KGV entsprechen. Anschließend erfolgt eine Reduzierung von ϕ , um dem Einfluss der Agglomeration Rechnung zu tragen.

Abhängigkeit vom Feinstoffanteil in der Mischung

Sei a der Faktor für die Abweichung der Raumausfüllung zwischen Simulation und Experiment, also

$$\phi_{\text{Exp}} = a\phi_{\text{Sim}}. \quad (11.1)$$

In der Regel gilt $0 < a < 1$. Aus der Beobachtung der in Abschnitt 11.2 vorgestellten Untersuchungen an Mörtelmischungen folgt: Je höher der Anteil des Feinstoffes und je höher dessen Agglomerationsneigung, desto niedriger ist a . Mittels Regression wurde daher der Zusammenhang zwischen dem Anteil f_j der Feinstoffe unter $100 \mu\text{m}$ und dem jeweiligen a_j für jede dieser $n = 10$ Mischungen bestimmt. Das Ergebnis lautet

$$a_j = b - c \cdot f_j, \quad j = 1, \dots, n,$$

mit $b = 0,9252$ und $c = 0,6160$. Der Umrechnungsfaktor b bezieht grundsätzliche Unterschiede zwischen Experiment und Simulation ein, etwa die Partikelform. Die

Agglomerationsneigung fließt hingegen vollständig in den Faktor c ein und ist vom Feinanteil abhängig. Mit Gleichung 11.1 ergibt dies den Zusammenhang

$$\phi_{\text{Exp},j} = (0,9252 - 0,6160f_j)\phi_{\text{Sim},j}.$$

Die mit dem entsprechenden Faktor a_j multiplizierten Simulationsergebnisse sind den gemessenen Raumauffüllungen in Abbildung 11.5 gegenübergestellt (vgl. auch die unmodifizierten Ergebnisse in Abbildung 11.3).

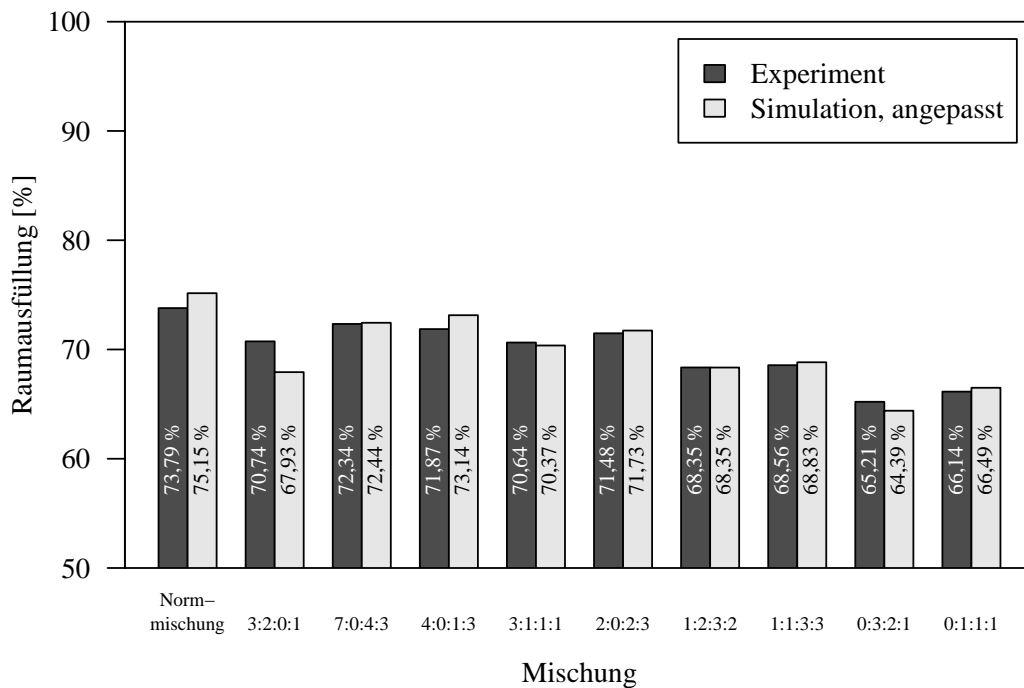


Abbildung 11.5: Vergleich der angepassten Simulationsergebnisse und der experimentell bestimmten Raumauffüllungen der Mörtelmischungen.

Die Daten belegen eine gute Übereinstimmung und erlauben damit auch realistische Ergebnisse beliebiger weiterer Kombinationen der in Abschnitt 11.2 angegebenen 4 Komponenten. Auf andere Stoffmischungen ist der ermittelte Zusammenhang zwischen f_j und a_j jedoch nicht übertragbar und muss für jeden Einzelfall neu bestimmt werden. Dies stellt für relativ simple Mischungen mit nur einer feinen Komponente (im obigen Beispiel Zement) eine nützliche Option dar, die Agglomeration in das Ergebnis einzubeziehen, sofern der experimentelle Aufwand zur Schaffung einer Datenbasis für die Regression im vertretbaren Rahmen liegt. Für Mischungen aus mehreren feinen und damit agglomerierenden Komponenten gestaltet sich dies jedoch ungleich schwieriger, da die Anzahl der benötigten Daten (Raumauffüllung einer Stoffkombination) und somit anzufertigenden unterschiedlichen Mischungen im Verhältnis zur Anzahl der Komponenten überproportional ansteigt. Daher kann

diese Methode nur für Versuchsreihen empfohlen werden, für die nur ein einziger agglomerierender Feinstoff verwendet wird.

Abhängigkeit von den Kugeldurchmessern in der Simulation

Diese Variante betrachtet das Sample der Kugeln in der Simulation. Jeder Kugel mit einem Durchmesser $d \leq d_{\text{AggGrenze}}$ wird unterstellt, ein Partikel (eigentlich alle Partikel eines Korngrößenintervalls) zu repräsentieren, dass agglomeriert und somit einen Beitrag zur Senkung der Packungsdichte leistet. Dazu muss der Agglomerationsgrenzdurchmesser $d_{\text{AggGrenze}}$ zuvor in Abhängigkeit der verwendeten Stoffmischung festgelegt werden. Der Simulationsvorgang läuft unverändert ab, nur wird am Ende für jede der betroffenen kleinen Kugeln ein Aufschlag auf den in der Packung vorhandenen Porenraum berechnet, welcher abhängig von der Kugelgröße ist. Für die Raumausfüllung ergibt sich nun

$$\phi = \frac{V_K}{V_C + b \frac{\pi}{6} \sum_{d_i \leq d_{\text{AggGrenze}}} d_i^3},$$

wobei b den Anteil des Volumens eines feinen Partikels kennzeichnet, den es über sein Nettovolumen hinaus aufgrund der Agglomeration zusätzlich benötigt.

Anmerkung: Der mit sinkender Korngröße steigenden Agglomerationsneigung kann entsprochen werden, wenn statt eines festen Wertes für b eine Variable b_i innerhalb der Summe verwendet wird, die ihrerseits ebenso für absteigende Durchmesser wächst.

11.4.2 Konzept für die Modellierung der Agglomeration durch Änderung der Korngrößenverteilung

Eine weitere Möglichkeit zur Einbeziehung der Agglomerationswirkung in der Simulation besteht in der Auswertung des Agglomerationseinflusses auf die Korngrößenverteilung. So können agglomerierende Partikel aus der KGV entfernt werden, da sie nicht mehr als Primärpartikel für die Simulation zur Verfügung stehen. Die daraus während des Packungsprozesses entstandenen Agglomerate werden als eigenständige neue Partikel angesehen. Ihnen kann jeweils ein kugeläquivalenter Durchmesser zugeordnet werden, sodass die Simulation diese als Kugeln mitsimuliert. Die Agglomerate müssen daher mit ebendem Durchmesser wiederum der Korngrößenverteilung hinzugefügt werden. Abbildung 11.6 zeigt schematisch, wie sich die Korngrößenverteilung (q_0 vor bzw. \hat{q}_0 nach der Agglomeration) durch diesen Vorgang nach rechts in den

Bereich größerer Durchmesser verschiebt. Dabei stellt g_0 die relative Häufigkeit der agglomerierenden Partikel dar, h_0 beschreibt die relative Häufigkeit der Agglomerate.

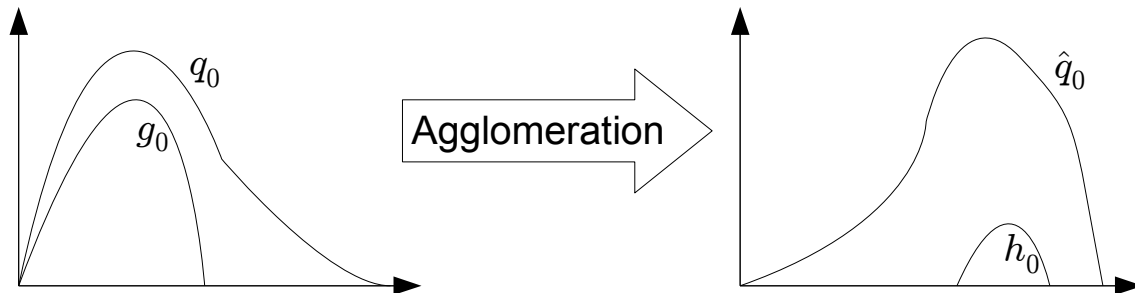


Abbildung 11.6: Dichten der Korngrößenverteilungen ohne (links) und mit Berücksichtigung der Agglomeration (rechts).

Um die Berechnung von \hat{q}_0 zu ermöglichen, müssen bestimmte, aus Experimenten gewonnene Kenntnisse über das Agglomerationsverhalten des untersuchten Stoffes vorausgesetzt werden.

Voraussetzungen

A priori bekannt seien die Funktionen q_0 und $g_0 := p \cdot q_0$ mit einer Agglomerationsfunktion $p(x) \in [0, 1]$, welche die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein Partikel mit Durchmesser x agglomeriert. Die Häufigkeitsfunktion h_0 der Agglomerate ist nicht vollständig bekannt, jedoch kann deren ungefähre Lage und Form anhand von ausgewerteten Streupräparaten geschätzt werden. In den nachfolgenden Abschnitten wird beschrieben, wie die konkreten Anteile $h_0(x)$ der Agglomerate mit Durchmesser x bestimmt werden können.

Der Prozess der Agglomeration vergrößert das benötigte Gesamtvolumen der Mischung und ändert so de facto die Korngrößenverteilung, da sich mehrere agglomerierende Primärpartikel zu größeren Agglomeraten zusammenballen, welche zusätzlichen Porenraum einschließen. Diese Agglomerate werden mit ihrem resultierenden Durchmesser in der Zielkorngrößenverteilung erfasst. Zur Vereinfachung des Modells wird weder die tatsächliche Anzahl der agglomerierenden Partikel noch die Anzahl der entstehenden Agglomerate betrachtet, auch die Anzahl der Primärpartikel in jedem Agglomerat ist hier irrelevant. Es wird jedoch davon ausgegangen, dass der Anteil des Feststoffs am Volumen eines Agglomerats für alle Agglomerate im Mittel ρ beträgt, also zwischen den Zufallsvariablen für das Volumen V_P eines Primärpartikels, die Anzahl N der Primärpartikel eines Agglomerats und das Agglomeratvolumen V_A ein Zusammenhang

$$\mathbf{E}[NV_P] = \mathbf{E}[\rho V_A], \quad 0 < \rho < 1$$

besteht und somit

$$V_{\text{ges, Prim}} = \rho V_{\text{ges, Agg}}$$

für das Gesamtvolumen aller agglomerierenden Partikel $V_{\text{ges, Prim}}$ und das Gesamtvolumen aller Agglomerate $V_{\text{ges, Agg}}$ gilt.

Ist \hat{q}_0 bestimmt, kann die Simulation dafür eine Packung erzeugen. Besonderes Augenmerk muss allerdings auf die Agglomerate gerichtet werden, die nun selbst als Kugeln mit innerer Raumauffüllung $\rho < 1$ simuliert werden. Der in den Agglomeraten enthaltene Porenraum muss also bei der Berechnung der Packungsdichte berücksichtigt werden; die notwendige Anpassung wird ab Seite 213 dargestellt.

Betrachtung der Anzahlanteile

$$A_g := \int_0^\infty g_0(x) dx = \int_0^\infty p(x)q_0(x) dx$$

ist der Anteil agglomerierender Partikel (vor Agglomeration). Zugleich ist dies die Agglomerationswahrscheinlichkeit

$$P(\text{„zufällig ausgewähltes Partikel agglomeriert“}) = \int_0^\infty g_0(x) dx.$$

$$A_h := \int_0^\infty h_0(x) dx$$

ist der Anteil der Agglomerate (nach Agglomeration).

Da sich mehrere Feinstpartikel zu größeren Agglomeraten zusammenballen, muss

$$A_g > A_h$$

gelten.

Konstruktiv lässt sich $\hat{q}_0(x)$ bestimmen, indem von $q_0(x)$ ausgehend die Häufigkeit eines Durchmessers x um $g_0(x)$ herabgesetzt und um $h_0(x)$ erhöht wird. Anschließend muss noch per Division durch das Integral normiert werden, damit wieder relative

Häufigkeiten mit Summe 1 entstehen. Somit ist

$$\hat{q}_0(x) = \frac{q_0(x) - g_0(x) + h_0(x)}{\int_0^{\infty} q_0(y) - g_0(y) + h_0(y) dy}. \quad (11.2)$$

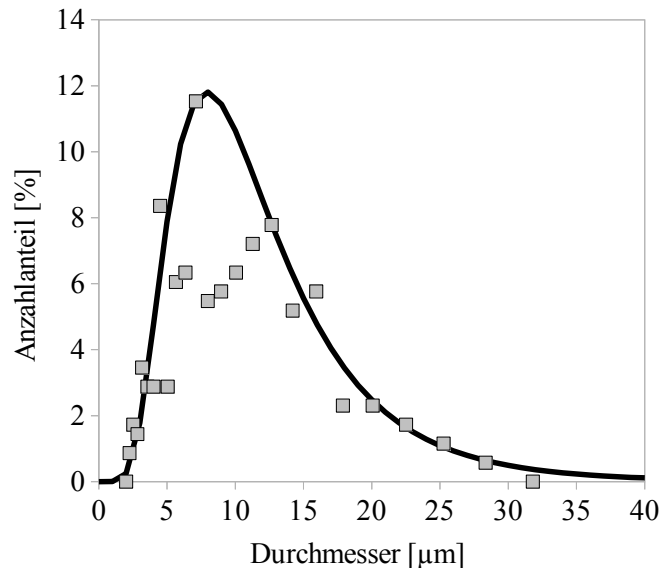


Abbildung 11.7: Die relativen Häufigkeiten der Agglomeratedurchmesser am Beispiel von Flugasche.

Die noch unbekannt Funktion h_0 der Anteile der Agglomerate kann nur ansatzweise aus den Experimenten geschätzt werden. Die Form der Anteilskurve in Abbildung 11.7 lässt auf eine logarithmische Normalverteilung der Durchmesser unter den Agglomeraten schließen, deren Lageparameter μ und σ ebenfalls aus den experimentell ermittelten Daten zu bestimmen sind. Im Gegensatz zur Dichte der Log-Normalverteilung ist das Integral von h jedoch nicht auf 1 normiert, sondern entspricht dem Anteil der Agglomerate an der Ziel-Korngrößenverteilung. Für die genaue Bestimmung von h_0 muss daher auf die Tatsache des Volumenerhalts agglomerierender Partikel zurückgegriffen werden. Ein Ansatz dazu wird im nächsten Abschnitt angeführt.

Invarianz der Volumenanteile:

$$V_g := \frac{\int_0^{\infty} \frac{\pi}{6} g_0(x) x^3 dx}{\int_0^{\infty} \frac{\pi}{6} q_0(x) x^3 dx} = \frac{\int_0^{\infty} g_0(x) x^3 dx}{\int_0^{\infty} q_0(x) x^3 dx} \quad (11.3)$$

ist der Volumenanteil der agglomerierenden Partikel.

$$V_h := \frac{\int_0^{\infty} \frac{\pi}{6} h_0(x) x^3 dx}{\int_0^{\infty} \frac{\pi}{6} \hat{q}_0(x) x^3 dx} = \frac{\int_0^{\infty} h_0(x) x^3 dx}{\int_0^{\infty} \hat{q}_0(x) x^3 dx}$$

ist der Volumenanteil der Agglomerate.

Wegen des zusätzlichen Porenvolumens innerhalb der Agglomerate muss

$$V_g < V_h$$

gelten.

Das Volumen der agglomerierenden Partikel findet sich im Volumen der Agglomerate wieder, allerdings sind die Agglomerate mit einem eingeschlossenen Porenvolumen „aufgebläht“, sodass deren innere Raumauffüllung ρ beträgt (mit $0 < \rho < 1$).

Der Volumenanteil der Agglomerate ohne deren innere Porenräume ist dann

$$\begin{aligned} V_h^- &:= \frac{\int_0^{\infty} \rho \frac{\pi}{6} h_0(x) x^3 dx}{\int_0^{\infty} \frac{\pi}{6} \hat{q}_0(x) x^3 dx - \int_0^{\infty} \frac{\pi}{6} h_0(x) x^3 dx + \int_0^{\infty} \rho \frac{\pi}{6} h_0(x) x^3 dx} \\ &= \frac{\rho \int_0^{\infty} h_0(x) x^3 dx}{\int_0^{\infty} (\hat{q}_0(x) - h_0(x) + \rho h_0(x)) x^3 dx}. \end{aligned}$$

Dieser Anteil entspricht dem Volumenanteil der agglomerierenden Partikel, somit

erhält man die Invarianz

$$\begin{aligned}
 V_g &= V_h^- \\
 \Leftrightarrow & \frac{\int_0^\infty g_0(x)x^3 dx}{\int_0^\infty q_0(x)x^3 dx} = \frac{\rho \int_0^\infty h_0(x)x^3 dx}{\int_0^\infty \hat{q}_0(x)x^3 dx - (1-\rho) \int_0^\infty h_0(x)x^3 dx} \\
 \Leftrightarrow & \int_0^\infty g_0(x)x^3 dx \int_0^\infty \hat{q}_0(x)x^3 dx \\
 &= \int_0^\infty h_0(x)x^3 dx \left(\int_0^\infty q_0(x)x^3 dx + (1-\rho) \int_0^\infty g_0(x)x^3 dx \right) \\
 \Leftrightarrow & \int_0^\infty h_0(x)x^3 dx = \frac{\int_0^\infty g_0(x)x^3 dx \int_0^\infty \hat{q}_0(x)x^3 dx}{\int_0^\infty q_0(x)x^3 dx + (1-\rho) \int_0^\infty g_0(x)x^3 dx}.
 \end{aligned}$$

Nach Einsetzen von Gleichung 11.2 verbleibt h_0 als noch einzig unbekannte Funktion, deren Bestimmung allerdings nicht einfach ist. Darum wird im nächsten Abschnitt ein alternatives Vorgehen aufgezeigt, das den Fokus auf die Volumenverteilung legt.

Betrachtung der Volumenanteile

Die Wahl der Volumenkurve als Ausgangspunkt der Kalkulation ist zum einen durch die Tatsache motiviert, dass die Daten aus den Experimenten (insbesondere die Korngrößenverteilung) als Volumenanteile vorliegen. Zum anderen vereinfachen sich die Berechnungen deutlich, wenn die Dichtefunktion \hat{q}_3 der Zielverteilung aus der Dichtefunktion der Volumenanteile q_3 bestimmt werden kann. Ähnlich wie in Gleichung 11.2 lässt sich hier \hat{q}_3 mittels

$$\hat{q}_3(x) = \frac{q_3(x) - g_3(x) + h_3(x)}{\int_0^\infty q_3(y) - g_3(y) + h_3(y) dy} \quad (11.4)$$

konstruieren. g_3 und h_3 sind die nun ebenfalls als Volumenanteile betrachteten Entsprechungen von g_0 bzw. h_0 .

Invarianz der Volumenanteile: Die Berechnung verläuft analog zur für die Anzahlanteile bereits beschriebenen Herangehensweise, führt diesmal jedoch zur

expliziten Angabe der Funktion \hat{q}_3 :

$$V_g := \frac{\int_0^{\infty} g_3(x) dx}{\int_0^{\infty} q_3(y) dy} = \int_0^{\infty} g_3(x) dx \quad (11.5)$$

ist der Volumenanteil der agglomerierenden Partikel (vor Agglomeration) an der Gesamtmischung.

$$V_h := \frac{\int_0^{\infty} h_3(x) dx}{\int_0^{\infty} \hat{q}_3(y) dy} = \int_0^{\infty} h_3(x) dx \quad (11.6)$$

ist der Volumenanteil der Agglomerate (nach Agglomeration) an der Gesamtmischung.

Für $0 < V_g < 1$ (und damit auch $0 < V_h < 1$) muss wegen des zusätzlichen Porenvolumens innerhalb der Agglomerate $V_g < V_h$ gelten. Das reine Volumen (abzüglich der Luftporen) der Agglomerate, wiederum als Anteil an der Gesamtmischung, beträgt

$$V_h^- = \frac{\rho V_h}{1 - V_h + \rho V_h}$$

und muss dem Volumenanteil der agglomerierenden Partikel entsprechen, also $V_g = V_h^-$. Aus dieser Invarianz erhält man

$$V_h = \frac{V_g}{V_g + \rho(1 - V_g)} = \frac{V_g}{\rho + (1 - \rho)V_g}. \quad (11.7)$$

Der Verteilung der Agglomeratedurchmesser kann für die Volumenkurve – wie in Abbildung 11.8 erkennbar – eine Normalverteilung $N(\mu, \sigma^2)$ (mit Parametern μ und σ aus den experimentellen Daten) zugrunde gelegt werden, d. h.

$$\varphi(x) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad \text{und} \quad \int_0^{\infty} \varphi(x) dx = 1.$$

Mit

$$V_h = \int_0^{\infty} h_3(x) dx = \frac{V_g}{\rho + (1 - \rho)V_g} \int_0^{\infty} \varphi(x) dx$$

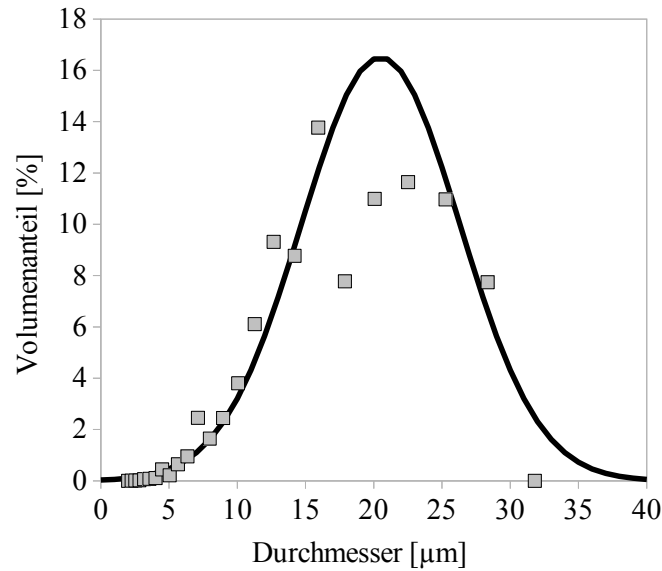


Abbildung 11.8: Die Volumenanteile der Agglomeratedurchmesser am Beispiel von Flugasche.

erhält man als mögliche Funktion für den Agglomerateanteil

$$h_3(x) = \frac{V_g \varphi(x)}{\rho + (1 - \rho)V_g}.$$

Dies kann in Gleichung 11.4 eingesetzt werden, um – zusammen mit den Gleichungen 11.5, 11.6 und 11.7 – die Dichtefunktion der Korngrößenverteilung nach Agglomeration als

$$\hat{q}_3(x) = \frac{q_3(x) - g_3(x) + \frac{V_g \varphi(x)}{\rho + (1 - \rho)V_g}}{1 - V_g + \frac{V_g}{\rho + (1 - \rho)V_g}} \quad (11.8)$$

zu bestimmen.

Bestimmung der Anzahlanteile aus den Volumenanteilen: Die Volumenanteile können auch durch Anzahlanteile ausgedrückt werden, wenn letztere mit der dritten Potenz des Durchmessers multipliziert und anschließend renormiert werden

(siehe Kapitel 2.1). So erhält man

$$q_3(x) = \frac{q_0(x)x^3}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy},$$

$$\hat{q}_3(x) = \frac{\hat{q}_0(x)x^3}{\int_0^\infty \hat{q}_0(y)y^3 dy}$$

und $g_3(x) = \frac{g_0(x)x^3}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}.$

Zusammen mit V_g aus Gleichung 11.3 können diese Ausdrücke nun in Gleichung 11.8 eingesetzt werden, um Formeln für die Bestimmung von \hat{q}_0 und \hat{q}_3 zu gewinnen, die nur von bekannten Größen abhängen:

$$\hat{q}_3(x) = \frac{\hat{q}_0(x)x^3}{\int_0^\infty \hat{q}_0(y)y^3 dy} = \frac{\frac{q_0(x)x^3}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy} - \frac{g_0(x)x^3}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy} + \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy} \varphi(x)}{\rho + (1-\rho) \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}}$$

$$= \frac{1 - \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy} + \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}}{\rho + (1-\rho) \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}}$$

$$= \frac{q_0(x)x^3 - g_0(x)x^3 + \frac{\varphi(x) \int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\rho + (1-\rho) \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}}}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy - \int_0^\infty g_0(y)y^3 dy + \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\rho + (1-\rho) \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}}}.$$

Mit

$$\beta := \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\rho + (1-\rho) \frac{\int_0^\infty g_0(y)y^3 dy}{\int_0^\infty q_0(y)y^3 dy}}$$

führt dies zu

$$\hat{q}_3(x) = \frac{(q_0(x) - g_0(x))x^3 + \beta\varphi(x)}{\int_0^\infty (q_0(y) - g_0(y))y^3 dy + \beta}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{q}_0(x) &= \frac{\hat{q}_3(x)/x^3}{\int_0^\infty \hat{q}_3(z)/z^3 dz} \\ &= \frac{\frac{q_0(x) - g_0(x) + \beta\varphi(x)/x^3}{\int_0^\infty (q_0(y) - g_0(y))y^3 dy + \beta}}{\int_0^\infty \frac{q_0(z) - g_0(z) + \beta\varphi(z)/z^3}{\int_0^\infty (q_0(y) - g_0(y))y^3 dy + \beta} dz} \\ &= \frac{q_0(x) - g_0(x) + \beta\varphi(x)/x^3}{\int_0^\infty q_0(z) - g_0(z) + \beta\varphi(z)/z^3 dz}. \end{aligned}$$

Somit lassen sich sowohl die Volumen- als auch die Anzahlanteile der Korngrößenverteilung nach Agglomeration direkt aus den Anzahlanteilen der Ausgangsverteilung berechnen. Die letzte Gleichung liefert außerdem zusammen mit Gleichung 11.2 die relative Häufigkeit der Agglomerate

$$h_0(x) = \frac{\beta\varphi(x)}{x^3}.$$

Anpassung der Simulation

Ist \hat{q}_0 (bzw. \hat{q}_3) vollständig bestimmt, kann wie bisher durch Simulation eine Kugelpackung erzeugt werden, deren Kugeldurchmesser durch diese neue Korngrößenverteilung festgelegt sind. Dabei stellt das Verfahren keine zusätzlichen Anforderungen an die Kugelanzahl oder andere Simulationsparameter.

Seien

V_{Prim} das Volumen der (nicht agglomerierenden) Primärpartikel-Kugeln,

V_{Agg} das Volumen der Agglomerate-Kugeln,

$V_{\text{Kugeln}} := V_{\text{Prim}} + V_{\text{Agg}}$ das Volumen aller Kugeln und

V_{leer} das Leervolumen im Container.

Da die Agglomerate Luftporen einschließen und nur zu einem Anteil ρ Feststoff enthalten, beträgt deren Netto-Volumen ρV_{Agg} . Daraus berechnet sich die Raumauffüllung

nach Agglomeration ϕ_A als

$$\phi_A = \frac{V_{\text{Prim}} + \rho V_{\text{Agg}}}{V_{\text{Kugeln}} + V_{\text{leer}}}.$$

Nun unterscheidet die Simulation nicht zwischen Primärpartikeln und Agglomeraten – allesamt werden als Kugeln betrachtet. Deshalb muss sowohl das Volumen der Agglomerate-Kugeln als auch das der Primärpartikel als Anteil am Volumen aller Kugeln ausgedrückt werden, was mittels des zuvor bestimmten V_h geschehen kann. So ist

$$V_{\text{Agg}} = V_h V_{\text{Kugeln}}$$

und

$$V_{\text{Prim}} = (1 - V_h) V_{\text{Kugeln}}.$$

Dadurch ergibt sich

$$\begin{aligned} \phi_A &= \frac{(1 - V_h) V_{\text{Kugeln}} + \rho V_h V_{\text{Kugeln}}}{V_{\text{Kugeln}} + V_{\text{leer}}} \\ &= \frac{V_{\text{Kugeln}}(1 - V_h + \rho V_h)}{V_{\text{Kugeln}} + V_{\text{leer}}} \\ &= \frac{V_{\text{Kugeln}}(1 - (1 - \rho)V_h)}{V_{\text{Kugeln}} + V_{\text{leer}}} \\ &= (1 - (1 - \rho)V_h) \phi_{\hat{q}_0} \end{aligned}$$

mit $\phi_{\hat{q}_0}$ als der von der Simulation einer reinen Kugelpackung berechneten Raumausfüllung, basierend auf der Korngrößenverteilung nach \hat{q}_0 . Somit kann ϕ_A durch einfache Multiplikation des Simulationsergebnisses mit einem Faktor

$$\gamma := 1 - (1 - \rho)V_h = \frac{\rho}{\rho + (1 - \rho)V_g} = \beta \frac{\rho}{\int_0^\infty g_0(x)x^3 dx}$$

ermittelt werden.

Eine Funktion für die Agglomerationsneigung

Die Funktion $p: \mathbb{R} \mapsto [0,1]$ gibt für einen Durchmesser die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Partikel dieser Größe agglomeriert. Diese Wahrscheinlichkeit ist umso größer, je kleiner der Durchmesser ist; für sehr kleine Partikel kann von einer totalen Agglomeration ausgegangen werden. Ab einer gewissen (stoffabhängigen) Partikelgröße x_α kann der Wert von p dagegen als 0 betrachtet werden, d. h. $\lim_{x \rightarrow x_\alpha} p(x) = 0$.

Die Agglomerationsneigung hängt von interpartikulären Kräften ab, die stark stoffabhängig sind. Dadurch lässt sich für eine allgemeine Agglomerationsfunktion p nur eine grobe Annahme über den Verlauf machen; auf Grundlage von Untersuchungen zur Abhängigkeit zwischen Partikelgröße und Raumausfüllung [YZYC06] kann p mit Hilfe einer logistischen Verteilung als

$$p(x) = 1 - \frac{1}{e^{-\frac{x-a}{b}}}$$

modelliert werden, was dem Zusammenhang zwischen Porosität und Korngröße in monodispersen Mischungen ähnelt [YFZY03].

Die Parameter a und b müssen für einzelne Materialien oder zumindest für Stoffgruppen individuell bestimmt werden, was einen erheblichen experimentellen Aufwand verursachen kann. Ebenso schwierig dürfte ein angemessener Wert für ρ zu finden sein, sodass die Realisierung dieses Konzeptes zur Einbeziehung der Agglomeration noch offen bleibt.

11.4.3 Konkrete Agglomerate

Eine abschließende Variante stellt die direkteste der hier präsentierten Möglichkeiten zur Einbeziehung der Agglomeration dar. Sie ist durch einen Eingriff in die Datenstrukturen der Simulation gekennzeichnet: Die Agglomerate selbst werden zusätzlich zu den Kugeln implementiert.

Modellierung der Agglomerate

Die Agglomerate der Simulation werden aus Kugeln aufgebaut, ähnlich den realen Agglomeraten, die aus Primärpartikeln bestehen. Dadurch ist klar, dass der CR-Algorithmus angepasst werden muss: Translation und Rotation der Agglomerate sind auf die gleiche Weise zu realisieren, wie schon bei der Umsetzung verschiedener Partikelformen (siehe Kapitel 10.2) beschrieben. Gleichfalls sind die Kugeln innerhalb eines Agglomerat-Clusters starr; die Agglomerate sind damit weder verformbar noch auftrennbar.

Die Überlappungen der Kugeln innerhalb eines Agglomerats betreffend gibt es zwei Alternativen:

- Überlappungen sind verboten: Ein Vorteil ist die Entsprechung der Realität, außerdem kann das Agglomeratvolumen äußerst simpel als Summe der

Kugelvolumina ermittelt werden.

- Überlappungen sind erlaubt: Es bieten sich mehr Möglichkeiten für die Agglomeratgestaltung und die Agglomerate sind u. U. schneller zu erzeugen, da eine Überprüfung der Nichtüberschneidungsbedingung der Kugeln nicht notwendig ist. Agglomeratoberfläche und -volumen sind mit der Monte-Carlo-Methode zu bestimmen, siehe Kapitel 10.2.1 und 10.2.2.

Die Idee des mehrstufigen Packens von Primärpartikeln zu Agglomerate-Clustern und schließlich zu einer Gesamtpackung wurde auch von Kim et al. benutzt, um feine keramische Pulver zu simulieren [KAM00].

Erzeugung der Agglomerate und benötigte Parameter

Die Erzeugung der Agglomerate kann zum einen durch einen „Agglomeratengenerator“ als ein Stück eigenständige Software geschehen, dem die KGV der zu simulierenden Partikelmischung übergeben wird, und der auf dieser Basis Kugelcluster zusammenstellt, welche die Agglomerate repräsentieren. Die Entstehung fraktalähnlicher Strukturen durch diffusionsbegrenztes Wachstum [Mea85, Mea95] kann dabei als Vorlage dienen.

Zum anderen können auch die Positionen der (Einzel-)Kugeln unmittelbar nach der Anfangsplatzierung zu Beginn der Simulation herangezogen werden, um jeweils mehrere lokal benachbarte Kugeln zu einem Agglomerat zu verbinden. Unabhängig von der letztendlich verwendeten Methode benötigt der Erzeugungsprozess der Agglomerate eine gewisse Anzahl konkreter Parameter:

- die Anzahl Partikel pro Agglomerat,
- die Korngrößen der beteiligten Primärpartikel,
- die Anzahl und Häufigkeit der Agglomerate,
- die innere Raumauffüllung der Agglomerate sowie
- die Größe der Agglomerate.

Diese Parameter müssen für jeden einzelnen agglomerierenden Feinstoff festgelegt werden. Die experimentelle Bestimmung derselben ist dabei leider noch weitgehend ungeklärt. Erste Aufschlüsse über einige Parameter kann die Untersuchung von Streupräparaten erbringen, allerdings ist fraglich, in wie weit dort eine Übereinstimmung mit Agglomeraten in einer verdichteten Packung gegeben ist. Vielversprechend könnte dagegen die Analyse der Mikrostruktur dichter Packungen sein, wie sie etwa durch

Computertomographie ermöglicht wird. In der vorliegenden Arbeit konnten diese Ideen jedoch nicht weiter verfolgt werden, hier sollten zukünftige Forschungsprojekte ansetzen.

Kapitel 12

Optimierung

In dieser Arbeit ist ein Simulationswerkzeug entstanden, das zu einer gegebenen KGV eine dichte, zufällige Kugelpackung generiert. Zu dieser Packung wird ebenfalls die Raumauffüllung ϕ_{Sim} berechnet, wodurch das Simulationsprogramm als Bewertungsinstrument von Korngrößenverteilungen dienen kann. Primärziel ist dabei nicht die exakte Voraussage der Packungsdichte ϕ_{Exp} einer realen Mischung, sondern die relative Bewertung einer Mischung innerhalb einer Vergleichsgruppe, daher ist die Bedingung

$$\phi_{\text{Sim}}(m_i) > \phi_{\text{Sim}}(m_j) \iff \phi_{\text{Exp}}(m_i) > \phi_{\text{Exp}}(m_j)$$

für je zwei Mischungen $m_i \neq m_j$ wünschenswert. Stimmen die Rangfolgen (bezogen auf die Raumauffüllung) der Mischungen in Simulation und Experiment überein, kann eine Optimierung auf den virtuellen Mischungen auch eine in der Realität optimale Mischung identifizieren. Allerdings muss bei der Wahl der Optimierungsstrategie auf die Unterstützung einer solchen Ordinalskala geachtet werden, bei der weder die absoluten Differenzen zweier Bewertungen noch die Absolutbeträge selbst eine Rolle spielen.

Ein naheliegendes Anwendungsbeispiel der Optimierung ist die Bestimmung der dichtesten Packung, die sich aus N Komponenten realisieren lässt. Hierfür kann eine Palette von Mischungen erzeugt werden, bei denen die Volumenanteile der Komponenten jeweils innerhalb eines Rasters variieren. Während im Labor ein Trial-and-Error-Vorgehen bei der Mischungskomposition aus Aufwandsgründen nur auf wenige Mischungen beschränkt sein kann, befähigt die rechnergestützte Simulation zur systematischen Bewertung des kompletten Rasters. Vielversprechende Mischungen können dann den weiterführenden Analysen im Labor zur Verfügung gestellt werden; hierbei wird der Simulation gewissermaßen die Rolle der Vorauslese zugeteilt, um in

späteren Schritten Arbeitsaufwand und somit Kosten niedrig zu halten.

Wenn N groß ist, steigt der Aufwand zur Bewertung aller möglicher Mischungskombinationen stark an; ein Vergrößern des Rasters kann dies nur zum Teil ausgleichen. Dann sollte mit Hilfe dedizierter Optimierungsverfahren der Aufwand der Simulation neu allokiert werden: In den Bereichen des Suchraums, die „gute“ Mischungen (bzgl. der Optimierungszielsetzung) erwarten lassen, empfiehlt sich eine verstärkte Suche, während auf Bereiche mit schlechten Packungseigenschaften möglichst wenig Aufwand entfallen soll.

Im Folgenden werden einige mögliche Anwendungsfälle der simulationsbasierten Optimierung von Betonmischungen aufgezeigt und diskutiert. Im Anschluss gibt Abschnitt 12.2 eine Kurzübersicht über geeignete Verfahren zur Realisierung der Optimierung.

12.1 Optimierungsszenarien

Die Optimierung von Betonmischungen ist nicht nur für die Forschung, sondern auch und gerade für die Industrie von besonderer Bedeutung. Drei typische, praxisrelevante Szenarien sollen die Potenziale beleuchten.

12.1.1 Szenario 1: Bestimmung einer KGV für dichteste Packungen

Seit mehr als einem Jahrhundert, seit der Arbeit von Fuller und Thompson [FT07] über optimale Sieblinien für den Zuschlag, ist die Betonindustrie auf der Suche nach immer besseren Rezepturen und insbesondere nach Korngrößenabstufungen, die die Raumauffüllung (und folglich die Festigkeit) der ihnen folgenden Mischungen maximieren. Mit Hilfe der Simulation kann zu jeder in Frage kommenden Rezeptur eine Bewertung in Form der Raumauffüllung erfolgen. Dies kann losgelöst von tatsächlich zur Verfügung stehenden Komponenten geschehen, oder beispielsweise auch auf konkrete Partikelformen abgestimmt werden.

Grundsätzlich kann die Aufgabe auf zwei Arten gelöst werden. Die einfachere Variante unterstellt, dass die KGV als Funktion modelliert werden kann, etwa als RRSB-Funktion. Dann muss der Optimierungsalgorithmus lediglich die Parameter der Funktion (Lageparameter und Steigungsmaß) variieren, und anhand der Raumauffüllung die Eignung jeder so bestimmten KGV bewerten. Allerdings besteht die

Möglichkeit der Existenz von Mischungen mit einer höheren Raumauffüllung, die nicht mit dieser Funktionenklasse modelliert werden können. Ein aufwändigeres, aber flexibleres Vorgehen zerlegt das Korngrößenspektrum in n disjunkte Teilintervalle und erzeugt für diese jeweils einen Volumenanteil. Der Vorteil dieses Ansatzes ist die Unabhängigkeit von einer spezifischen Funktion, jedoch steigt der Aufwand an, da nun n Parameter variiert werden müssen.

Wenn eine im obigen Sinne optimale KGV gefunden worden ist, stellt sich das nächste Problem: Es müssen Komponenten ermittelt werden, welche die KGV in der Praxis realisieren können. Die Lösung besteht in der Regel darin, die zur Verfügung stehenden Fraktionen durch Siebung und Rekombination in die gewünschte Abstufung zu bringen.

12.1.2 Szenario 2: Optimierung für gegebene Bestandteile

Ein noch häufiger vorkommendes Szenario ist die Optimierung der Raumauffüllung unter Verwendung bestimmter gegebener Komponenten. Als Gründe für solche Vorgaben können etwa langfristige Lieferbeziehungen, lokale Verfügbarkeit oder die Ersparnis bei Verwendung spezifischer Produkte genannt werden.

Ein Optimierungsmodul benötigt dann eine Liste der verfügbaren Komponenten und außerdem für jede einzelne Komponente die Korngrößenverteilung, die Reindichte, die Kosten (pro Masseanteil) sowie weitere indirekte, nicht notwendigerweise monetäre Kosten wie z. B. die spezifische CO₂-Emission (siehe auch nächstes Szenario). Durch Kombination verschiedener Masseanteile der Komponenten versucht die Optimierung eine bestbewertete Rezeptur zu finden. Als (zu maximierende) Zielfunktion dient hier ebenfalls die Festigkeit, die durch die Raumauffüllung bestimmt wird. Zusätzlich besteht die Möglichkeit, Nebenbedingungen anzugeben, etwa die Einhaltung einer Obergrenze für die Gesamtkosten, Beachtung der Reaktivität, usw., sodass diese Vorgehensweise insgesamt das Ziel hat, unter gegebenen Rahmenbedingungen die Festigkeit und somit Produktqualität zu verbessern, um so u. a. einen Wettbewerbsvorteil zu erreichen und neue Einsatzmöglichkeiten der Materialien zu erschließen.

12.1.3 Szenario 3: Austausch einzelner Komponenten unter Beibehaltung der Betoneigenschaften

Das dritte Szenario betrachtet schließlich den Fall, dass der hergestellte Beton – zumindest in der Wahrnehmung des Kunden – nicht verändert werden darf. Zu

konservieren sind insbesondere Eigenschaften wie Festigkeit, Beständigkeit und Dauerhaftigkeit, aber auch die Verarbeitbarkeit und damit die Einsatzmöglichkeiten des Werkstoffes. Die Korngrößenverteilung kann daher üblicherweise nicht komplett ausgetauscht werden, wohl aber einzelne Fraktionen, sodass auch in diesem Fall eine Optimierung durchgeführt werden kann. Als Optimierungsziel dienen die Herstellungskosten, und zwar sollen sowohl direkte als auch indirekte Kosten durch CO₂-Emissionen gesenkt werden.

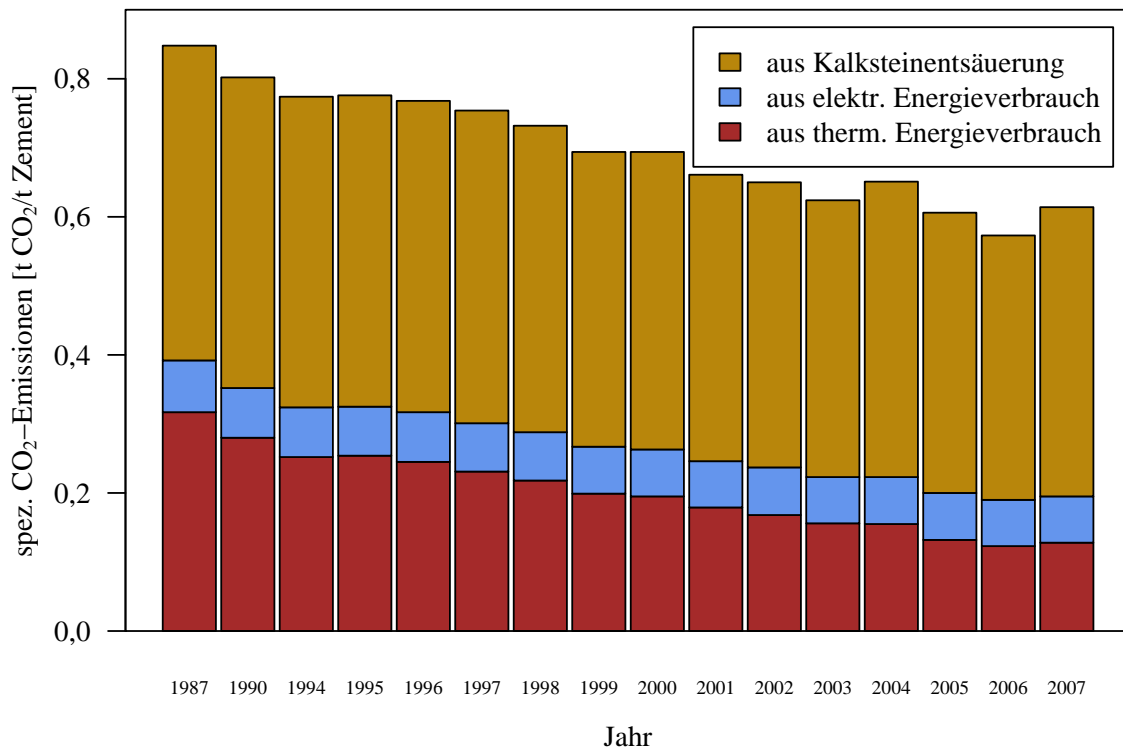


Abbildung 12.1: Spezifische CO₂-Emissionen der deutschen Zementindustrie zwischen 1987 und 2007 (nach [vdz08]).

Seit der Einführung der Emissionszertifikate hat die CO₂-Reduktion auch in der Baustoffbranche enorm an Bedeutung gewonnen. Abbildung 12.1 zeigt die spezifischen CO₂-Emissionen der deutschen Zementindustrie in den letzten 20 Jahren. Deutlich erkennbar ist die Absenkung der Emissionen aus thermischem Energieverbrauch. Dies ist auf die steigende Benutzung von Sekundärbrennstoffen (von Industrieabfällen über Tiermehl und Klärschlamm bis hin zu Altreifen) zurückzuführen, die im Rahmen der Selbstverpflichtung der Zementindustrie nicht in der CO₂-Bilanz berechnet werden [vdz08]. Die Emissionen aus elektrischem Energieverbrauch sind dagegen nur durch die Verwendung regenerativer Energien zu mindern, was bislang nicht wirtschaftlich war. Mit zwei Dritteln geht der Großteil der Emissionen allerdings auf die Kalksteinsäuerung zurück. Die deutliche Reduzierung dieses Anteils ist

ausschließlich dann möglich, wenn Klinker durch Ersatzstoffe substituiert werden kann, was wiederum die Relevanz dieses Optimierungsszenarios bestätigt.

Die Kostenreduzierung ist also in erster Linie mit der Substitution bestimmter Komponenten durch preiswertere Alternativen (z. B. Flugasche statt Klinker) umzusetzen. Dies wird in den meisten Fällen mit einer Reduzierung der Reaktivität erkaufte. Um die Betonqualität dennoch auf einem konstanten Niveau zu halten, muss die KGV optimiert werden, sodass eine höhere Raumauffüllung den Festigkeitsverlust kompensieren kann.

12.2 Methoden für die Black-Box-Optimierung

Die Packungsdichte einer Mischung mit der Korngrößenverteilung κ lässt sich leider nicht als simple Funktion

$$\phi(\kappa) = f(K_1, \dots, K_N, m_1, \dots, m_N) \quad (12.1)$$

in Abhängigkeit der verwendeten N Komponenten K_i und ihrer Volumenanteile m_i darstellen. Damit bleiben insbesondere solche Optimierungsstrategien außen vor, die die Ableitung(en) der Funktion mit einbeziehen und somit Stetigkeit und Differenzierbarkeit fordern. Der Fokus muss also auf sogenannte **Black-Box-Optimierungsstrategien** [Ang08] gelenkt werden, die Informationen lediglich durch die Bewertung der Lösungskandidaten gewinnen und auf Annahmen über das zu lösende Problem weitestgehend verzichten können. Solche problemunabhängigen Strategien arbeiten meist stochastisch und werden dann als **randomisierte Suchheuristiken** bezeichnet. Als Beispiele seien hier die lokale Suche, evolutionäre Algorithmen und Tabusuche genannt. Hermann et al. nutzen außerdem das Nelder-Mead-Verfahren [HELS07] für die Optimierung der Raumauffüllung einer 5-Komponenten-Mischung.

Ähnlich wie bei Hermann et al. ist im vorliegenden Fall die Bewertung eines Lösungskandidaten, also die Bestimmung der Raumauffüllung einer Mischung, mit einer Simulation und so mit hohem zeitlichen Aufwand verbunden, oftmals muss eine breite Mischung in mehreren Fraktionen simuliert werden. Um eine Beeinträchtigung des Ergebnisses durch Ausreißer in der Simulation weitgehend auszuschließen, wäre es außerdem vorteilhaft, mehrere Wiederholungen der Bewertung (multiple Simulationsläufe) vornehmen zu können und daraus den Mittelwert (oder einen anderen repräsentativen Wert, z. B. den Median) zu bilden. Dies bringt eine zusätzliche Erhöhung des Aufwands mit sich und engt so die Wahl eines Optimierungsverfahrens

noch weiter ein.

Einige Ansätze arbeiten mit mehreren Lösungskandidaten gleichzeitig, einer sogenannten Population. Eine individuelle Bewertung – die Fitness – muss für jede einzelne Lösung ermittelt werden, d. h. für jede KGV in der Population muss die Simulation eine Raumauffüllung bestimmen können. **Genetische Algorithmen** etwa operieren mittels Rekombination und Mutation auf dem Lösungsraum und benötigen dazu sehr viele Auswertungen der Fitnessfunktion, da sie üblicherweise mit einer mittelgroßen Population arbeiten und etliche Generationen benötigen. Sie wurden von Maruyama et al. zur multikriteriellen Optimierung von Betonmischungen eingesetzt [MKNT01], während Amirjanov und Sobolev mit ihnen sowohl eine Kostenreduzierung für Multikompositbindemittel [AS06b] als auch eine optimierte Korngrößenverteilung für gegebene Zuschlag-Komponenten erreichten [AS05]. Letztere Problemstellung der Zuschlagskomposition bearbeitete Toklu ebenfalls mit einem Genetischen Algorithmus [Tok05].

Eine weitere Optimierungsheuristik ist das **Simulated Annealing** [KGV83], das dem Abkühlungs- und Erstarrungsprozess von Metallen nachempfunden ist. Es benötigt ebenfalls eine hohe Zahl an Lösungsbewertungen und zeigt eine gute Performanz für einen Lösungsraum, bei dem sich die Ausprägung des globalen Optimums deutlich von den lokalen Optima unterscheidet, sodass die Prozedur bestenfalls alle lokalen, nicht aber den globalen Bestwert verlassen kann. Im sehr komplexen Lösungsraum der granularen Mischungen ist dies nicht gegeben.

Ameisenalgorithmen zählen wie die beiden genannten Methoden ebenfalls zu den naturanalogen Verfahren. In diesem Fall werden selbstadaptive Vorgänge bei der Futtersuche der Ameisen auf allgemeine kombinatorische Probleme übertragen. Folgen die Ameisen in der Realität einem Pfad mit einer Wahrscheinlichkeit, die mit der dort vorgefundenen Pheromonspur korreliert, so werden ein bestimmter Masseanteil einer einzelnen Komponente einer Mischung mit einer Wahrscheinlichkeit in weiteren Rezepturen bevorzugt, die der Güte der gefundenen Mischungen mit eben diesem Masseanteil entspricht. Die Anzahl der Ameisen entspricht in diesem Fall der Anzahl der Lösungsbewertungen und würde für die genannten Szenarien nicht viel geringer ausfallen als bei den bereits erwähnten Methoden.

Offensichtlich sind die beschriebenen Suchheuristiken ungeeignet, wenn die Lösungsbewertungen kostspielig sind und daher nur in sehr begrenzter Anzahl genutzt werden können; in den vorliegenden Szenarien ist der Zeitaufwand der Simulation als Kostenbeitrag zu sehen. Diese Klasse der Black-Box-Probleme lässt sich durch **Surrogate Modelling** bearbeiten: Statt der durch die Black Box verborgenen Funktion aus

Gleichung 12.1 wird eine Stellvertreterfunktion (ein „surrogate model“) bestimmt, über die vollständige Informationen vorhanden sind, sodass sie komplett analysiert und ihr Optimum bestimmt werden kann. Diese Funktion soll also das Verhalten der Black Box unter Vermeidung des Simulationsaufwands nachahmen. Folgende Prozedur setzt diese Idee um:

1. Wahl von Datenpunkten (Lösungskandidaten), an denen die Simulation durchgeführt werden soll.
2. Konstruktion des „surrogate models“ aus den bisherigen Datenpunkten und ihren Bewertungen.
3. Durchsuchen des „surrogate models“, z. B. mit einer randomisierten Heuristik.
4. Simulation an mit der Suchheuristik neu gefundenen Punkten.
5. Rückkehr zu Schritt 2, bis Abbruchkriterium erreicht ist.

Als Abbruchkriterium kann eine maximale Zeitschranke dienen, oder die Güte der bislang besten gefundenen Lösung. Das Budget der Simulationsläufe muss zweigeteilt werden: Einerseits sollten genügend Startpunkte erstellt werden, um ein erstes „surrogate model“ zu erzeugen, andererseits müssen ausreichend Simulationsläufe im Budget verbleiben, um das Modell anschließend iterativ zu erweitern. Schritt 2 ist nur mit einem vergleichsweise kleinem Aufwand verbunden, da die Stellvertreterfunktion im Gegensatz zur Black Box sehr schnell ausgewertet werden kann.

Populäre Surrogate-Modelling-Verfahren sind das aus der Geostatistik stammende Kriging sowie Response-Surface-Methoden, siehe [Kri51, Mat63, FSK08, Ang08]. Bei Beschränkung auf eine einzelne Variable kann auch das Problem der iterativen Kurvenanpassung an Datenpunkte (Fitting) als Surrogate Modelling betrachtet werden.

Kapitel 13

Fazit und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde eine klassische Fragestellung der Materialwissenschaften aufgegriffen: Die Bestimmung der Raumauffüllung einer beliebigen Partikelmischung. Komplementär zur Arbeit von Palm [Pal09], der die durch Klinkersubstitution motivierte Bindemitteloptimierung hinsichtlich der Raumauffüllung und Komponentenverteilung betrachtete, wurden in den vorangegangenen Kapiteln verschiedenste Lösungsansätze vorgestellt, um mit Hilfe von rechnerbasierten Verfahren den labortechnischen Aufwand für diese Aufgabe zu reduzieren und so den Weg für zukünftige Optimierungen der Werkstoffe zu bahnen. Dabei wurde der Fokus auf Beton- und Bindemittelmischungen (mitsamt ihren spezifischen Charakteristika wie der enormen Polydispersität) gelegt, ohne jedoch die allgemeine Anwendbarkeit der Methoden außer Acht zu lassen.

Nach einer kurzen Einführung in die Problemstellung und Motivation der Forschungsarbeit in Kapitel 1 informierte das zweite Kapitel über die Grundlagen dieses Fachgebiets, indem verschiedene Begriffe aus dem Umfeld der Stoffmischungen, ihrer Korngrößenverteilungen und der resultierenden Partikelpackungen definiert wurden.

Die folgenden beiden Kapitel befassten sich ausführlich mit existierenden Modellen und stellten ihre Vor- und Nachteile dar. Zunächst wurden in Kapitel 3 Hartkugel-Modelle beschrieben, die ein Forschungsgegenstand der stochastischen Geometrie sind. Viele von ihnen sind für eine Analyse zugänglich, jedoch darf ihre Praxisnähe für die meisten Anwendungsfälle dichter Partikelpackungen bezweifelt werden. Die im vierten Kapitel behandelten analytisch-empirischen Modelle stammen dagegen aus der Praxis der Werkstoffwissenschaften. Hier werden bereits seit vielen Jahren Modelle aus empirischen Beobachtungen abstrahiert, um Vorhersagen bezüglich der Packungsdichten von Mischungen mehrerer bekannter Ausgangsstoffe treffen zu

können. Immer komplexere Formeln bieten inzwischen eine hohe Treffsicherheit in einem breiten Feld an Zusammensetzungen. Nichtsdestotrotz bleibt der Aufwand für Laborarbeiten hoch, da neben diversen Modellparametern auch etliche Daten der Ausgangsstoffe (z. B. die Eigenpackungsdichten) bestimmt werden müssen.

Diesem Nachteil begegnet die in Kapitel 5 dieser Arbeit entwickelte Methode der hierarchischen Fraktionierung. Statt auf Experimente stützt sich dieser Ansatz komplett auf die Simulation, wobei der Algorithmus zur Erzeugung einer Partikelpackung jeder Fraktion beliebig austauschbar ist. Vergleiche mit Experimenten und analytischen Modellen zeigten einen deutlich reduzierten Aufwand bei mindestens ebenbürtiger Ergebnisqualität.

Das diversifizierte Gebiet der Simulation von zufälligen, dichten Kugelpackungen beleuchtete Kapitel 6. Dieses konstruktive Vorgehen zur Bestimmung der Raumauffüllung wird von den Klassen „Random Sequential Addition“ und „Collective Rearrangement“ dominiert. Verfahren der letzteren Methodik liefern dichtere, realistischere Packungen, weshalb in der vorliegenden Arbeit ein CR-Algorithmus adaptiert und grundlegend erweitert wurde. Die Implementierung des so entstandenen Simulationssystems (Kapitel 7) erforderte außerdem die Beurteilung und Auswahl von Samplingverfahren, Containergeometrien und Ermittlung verschiedener Packungscharakteristika.

Als Flaschenhals der Simulation stellte sich die Suche nach überlappenden Kugeln heraus, weshalb viel Anstrengung in die Entwicklung effizienter Algorithmen und Datenstrukturen zur Nachbarschaftsbestimmung geflossen ist (Kapitel 8). Der Loose Octree erwies sich letztendlich als geeignete Wahl, um den Anforderungen extrem polydisperser Mischungen gerecht zu werden.

Die weiteren Themen dieser Arbeit erstreckten sich über diverse Ergänzungen des Simulationssystems. Mit Hilfe des „Hit-or-Miss“-Verfahrens konnte in Kapitel 9 die lokale Verteilung der Raumauffüllung im Container bestimmt werden, was es erlaubt, die strukturellen Auswirkungen des Wandeffekts zu verdeutlichen und darüberhinaus einen einfachen Näherungswert für die innere, unbeeinflusste Raumauffüllung anzugeben. Die gleiche Monte-Carlo-Methode ermöglicht die Bestimmung des Volumens komplexerer Partikelgeometrien, wie sie in Kapitel 10 vorgestellt wurden. In Erweiterung der kugelbasierten Packungssimulation erlauben Cluster aus starr zueinander positionierten und möglicherweise überlappenden Kugeln die beliebig genaue Approximation komplexer Partikelformen, ohne auf die effiziente Nachbarschaftsverwaltung verzichten zu müssen.

Kapitel 11 widmete sich der Agglomeration. Nach einer Beschreibung ihrer Ursachen und Wirkungen sowie Hinweisen zur Vermeidung dieses Zusammenballens feinsten Partikel zu Clustern fraktaler Struktur wurden verschiedene Ansätze entwickelt, um die Diskrepanz zwischen den „idealen“ Simulationsergebnissen und den „agglomerationsverfälschten“ Resultaten der Laborversuche zu verringern. So konnten per Simulation erhaltene Packungsdichten mittels Regressionsrechnung an die der Experimente angepasst werden. Des Weiteren wurden Überlegungen angestellt, wie eine Modifizierung der Korngrößenverteilung die Agglomeration abbilden kann bzw. wie Kugelcluster während des Simulationsvorgangs als Modell der Agglomerate dienen können.

Das letzte Kapitel lieferte schließlich mehrere Szenarien für eine auf der Simulation aufbauende Optimierung von Betonmischungen. Eine dafür zu überwindende Schwierigkeit ist der zeitliche Aufwand für die Ermittlung der Raumausfüllung einer hohen Anzahl an Lösungskandidaten, weshalb in diesem Kontext verschiedene Methoden der Black-Box-Optimierung diskutiert wurden.

13.1 Offene Fragestellungen und Erweiterungsmöglichkeiten

Die Breite des hier bearbeiteten Themengebietes spiegelt sich in den zahlreichen möglichen Anknüpfungspunkten für weiterführende Arbeiten wider. So sind bereits in den vorherigen Kapiteln an passenden Stellen Ideen skizziert worden (z. B. zu den Themen Parallelisierung, Kapitel 7.5, und Agglomeration, Kapitel 11), deren Weiterverfolgung mehr als lohnenswert erscheint. Die im Folgenden beschriebenen Aspekte stellen – ohne Anspruch auf Vollständigkeit – zusätzliche Verbesserungs- und Erweiterungsmöglichkeiten dar.

Bei genauer Betrachtung der Simulation stellt sich schon für die Anfangsplatzierung der Kugeln die Frage, ob ein Austausch durch einen anderen, schnellen RSA-Algorithmus vorteilhaft sein kann. Prinzipiell wäre dazu jeder RSA-Ansatz geeignet, da durch die dichte Platzierung verkleinerter Kugeln und anschließendes Anwachsen derselben auf ihre normale Größe die Anforderung des CR an die in der Packung ausbalancierten Überlappungen erfüllt werden kann. So könnte das hier auf eine SSI-Variante angewendete Threshold-Accepting-Verfahren von der „Inwards Packing Method“ von Bagi [Bag05] abgelöst werden, was wegen der Vermeidung von Fehlversuchen bei der Platzierung eine Geschwindigkeitssteigerung ermöglichen könnte.

Ein noch offenes Problem wäre dann jedoch die zu wählende Containergröße, die für das erwähnte Verfahren a priori bekannt sein muss. Eine falsche Wahl kann eine große Lücke in der Containermitte verursachen oder die Platzierung sogar komplett fehlschlagen lassen.

Die Steuerung des CR, insbesondere die Wahl der Zeitpunkte der Containervergrößerungen und deren Ausmaß, bietet einen sehr guten Ansatzpunkt für weitere gezielte Tests und Optimierungen. Die Gewährleistung eines schnellen und zielführenden Ablaufs der Simulation muss dabei im Vordergrund stehen, sodass bei erfolgreicher Reduzierung der benötigten Iterationsschritte immer geprüft werden muss, ob im Mittel gleichbleibende oder höhere Packungsdichten als zuvor erzielt werden.

Eine auf Basis der Simulationsergebnisse arbeitende Optimierungskomponente wurde in dieser Arbeit nicht implementiert. Dies sollte unter Beachtung der in Kapitel 12 beschriebenen Szenarien und Einschränkungen nachgeholt werden. Besonders hervorzuheben sind hier nochmals die relativ hohen „Kosten“ (in Form der Simulationslaufzeit) zur Bewertung einer Lösung (einer Komponentenmischung). Aus diesem Grund sollten neben populationsbasierten Verfahren auch und vor allem andere Heuristiken der stochastischen Optimierung in Betracht gezogen werden. Je nach verwendeter Methode kann die eine Geschwindigkeitssteigerung erlaubende Parallelisierung dann möglicherweise in die Optimierungskomponente hereingezogen werden, da sie ihr Potenzial dort vermutlich besser ausspielen kann als eine Parallelisierung der CR-Simulation oder der Fraktionierung (siehe Kapitel 7.5).

Anhang A

Anleitung zur Benutzung des Simulationsprogramms

Dieses Kapitel erläutert den Umgang mit dem Simulationsprogramm. Die Konfiguration erfolgt über eine Textdatei, in der alle erforderlichen Einstellungen vorgenommen werden können. Für die Zukunft ist eine grafische Benutzeroberfläche geplant. Die folgenden Abschnitte erläutern die Optionen, die benötigten Dateien sowie die Bildschirmausgaben ausführlich.

A.1 Die Konfigurationsdatei

Das Simulationsprogramm wird gestartet, indem es von der Kommandozeile mit der Konfigurationsdatei als einzigem Parameter aufgerufen wird, also z. B.:

```
partikelpack Konfigurationen/standard.cfg
```

Folgendes Muster einer Konfigurationsdatei listet alle Parameter mit ihren Standard-Werten auf:

```
----- Konfigurationsdatei -----  
# *****  
# Konfigurationsdatei  
# -----  
# Autor: Steffen Raschdorf (18.06.2009)  
# *****  
  
# *****  
# * Parameter fuer die Simulation *
```

```

# *****
zufallStartwert = 0
Fraktionsgroesse = 10000
simKugelAnteil = 1
AnzahlFraktionen = 1
aequidistanteDurchmesserintervalle = 0
INITIALEPACKDICHTE = 1.00
maxDichteMinderung = 0.05
ANZAHLVERKLEINERUNGEN = 5
ZIELUEBERLAPPUNGSRATE = 0.0002
mischungsdateiname = Mischungen/default.csv
Containerform = 0
ZylinderDurchmesser = 51
periodischerRand = 1
Agglomeration = 0
alternativePartikelform = 0
PartikelDateiname = Partikel/default.par

# *****
# * Parameter fuer die Visualisierung *
# *****

PovRay = 0
QuteMol = 0

# -----
# - Einstellungen für alle Visualisierer -
# -----

ausgangsbild = 0
endbild = 0
visdateiname = Grafik/default

# -----
# - Einstellungen für POV-Ray-Visualisierung -
# -----

schnittvideo = 0
schnittbilder = 1000
bewegungsvideo = 0

```



```
bewFrameIntervall = 10
bewFrameAnzahl = 0
periodischeAnsicht = 0
schnitt = 0
schnittkoordinate = 0
schnittmodus = 0
xRotation = 0
yRotation = 1
zRotation = 0
titel = Bildtitel

# *****
# * sonstige Parameter *
# *****
verteilungsdateiAnlegen = 0
verteilungsdateiname = Ergebnisse/defaultVerteilung

ablaufdateiAnlegen = 0
ablaufdateiname = Ergebnisse/defaultAblauf

PKFDateiAnlegen = 0
PKFDateiname = Ergebnisse/defaultPKF
PKFSchrittweite = 0.2
PKFMaxWert = 10

koordinatenMittelwertBerechnen = 0
koordinatendateiAnlegen = 0
koordinatendateiname = Ergebnisse/defaultKoordinaten

wandeffektdateiAnlegen = 0
wandeffektdateiname = Ergebnisse/defaultWandeffekt
wandeffektSchrittweite = 0.2
wandeffekttestpunkte = 10000000

ergebnisdateiAnlegen = 0
ergebnisdateiname = Ergebnisse/defaultErgebnis
```

```
keineEingaben = 0
```

Mit einem „#“ beginnende Zeilen werden als Kommentare betrachtet und bei der Abarbeitung der Datei ignoriert. Sämtliche Parameter sind als Paar „Bezeichner = Wert“ anzugeben, wobei unmittelbar vor oder hinter dem Gleichheitszeichen stehende Leerzeichen ebenso wie am Zeilenanfang oder -ende platzierte Leerzeichen ignoriert werden. Ferner ist für den Bezeichner Groß- oder Kleinschreibung irrelevant, **ZufallStartwert** und **ZUFALLstartwert** bezeichnen also den selben Parameter. Wird der gleiche Parameter an verschiedenen Stellen definiert, so zählt die letzte dieser Angaben. Nicht definierte Parameter werden vom Programm auf ihre default-Werte gesetzt. Die Parameter können je nach Typ Zeichenketten, ganzzahlige, Fließkomma- und boolesche Werte annehmen; für letztere gilt 0 = NEIN und 1 = JA. Die Parameter sind im Einzelnen:

Parameter für die Simulation

zufallStartwert (Integer ≥ 0)

Gibt einen Startwert (random seed) für den Zufallsgenerator vor und ermöglicht auf diese Weise wiederholbare Folgen von Zufallszahlen bzw. wiederholbare Simulationen. **zufallStartwert** = 0 lässt einen zufälligen Startwert generieren.

Fraktionsgroesse (Integer ≥ 4)

Gibt die Anzahl der Partikel vor, die in jeder Fraktion simuliert werden sollen. Die Anzahl der Kugeln kann höher liegen als diese Zahl, wenn Kugelcluster (z. B. zur Darstellung beliebiger Partikelformen) verwendet werden.

simKugelAnteil (Fließkommawert aus dem Intervall (0, 1])

Gibt den Anteil der Kugeln/Partikel an, die als aktive Partikel der jeweiligen Fraktion gelten (im Gegensatz zu den Wandpartikeln, die die Interaktion der Fraktionen abbilden). Wird bei Verwendung nur einer Fraktion automatisch auf 1 gesetzt.

AnzahlFraktionen (Integer ≥ 1)

Gibt die Anzahl der zu verwendenden Fraktionen an. Für > 1 wird die hierarchische Fraktionierung benutzt.

aequidistanteDurchmesserintervalle (boolescher Wert)

Wenn mehrere Fraktionen verwendet werden sollen, gibt 1 für diesen Wert an, ob die Unterteilung äquidistant auf den Durchmessern erfolgt.

initialePackdichte (Fließkommawert > 0)

Gibt die nominale Raumauffüllung zu Beginn der Simulation an, und damit indirekt die Startgröße des Containers.

maxDichteMinderung (Fließkommawert > 0)

Gibt an, um wie viel Prozentpunkte die Raumauffüllung während einer Containervergrößerung maximal gesenkt werden darf.

anzahlVerkleinerungen (Integer ≥ 0)

Gibt die Anzahl der Containerverkleinerungen an.

zielueberlappungsrate (Fließkommawert > 0)

Gibt die Überlappungsrate an, die erreicht werden muss, um die Simulation erfolgreich zu beenden.

mischungsdateiname (Zeichenkette)

Gibt den Pfad und Namen der Mischungsdatei an.

Containerform (boolescher Wert)

ZylinderDurchmesser (Fließkommawert > 0)

Containerform gibt die geometrische Gestalt des Containers an: 0 steht für einen Würfel und 1 für einen Zylinder, für den dann mit **ZylinderDurchmesser** ein fixer Durchmesser spezifiziert werden muss.

periodischerRand (boolescher Wert)

Wenn 1, dann werden periodische Randbedingungen angenommen, ansonsten harte.

Agglomeration (boolescher Wert)

Wenn 1, dann werden in der Anfangsphase der Simulation Agglomerate aus benachbarten Kugeln erzeugt.

alternativePartikelform (boolescher Wert)

PartikelDateiname (Zeichenkette)

Für **alternativePartikelform**=1 wird statt der Kugelgestalt eine andere (aus Kugeln zusammengesetzte) Partikelform verwendet. Der Pfad und Name der Partikeldatei wird dann durch **PartikelDateiname** angegeben.

Parameter für die Visualisierung

PovRay (boolescher Wert)

QuteMol (boolescher Wert)

Hiermit kann die Unterstützung der einzelnen Visualisierer ein- oder ausgeschaltet

werden. Wenn 1, dann wird der entsprechende Visualisierer benutzt, wenn 0, dann nicht. Es kann mehr als ein Visualisierer aktiv sein. Für jeden Visualisierer wird jeweils eine Beschreibung der Packung gespeichert. POV-Ray [Pov04] dient als Raytracer dem Erzeugen einer statischen Ansicht einer Szene (hier einer Packung), das auf die Darstellung von Molekülen spezialisierte QuteMol [TCM06] ermöglicht dank einer Modifikation die interaktive Betrachtung der Packung.

Wird kein Visualisierer benutzt, dann haben die nachfolgenden Einstellungen zur Visualisierung keine Wirkung.

ausgangsbild (boolescher Wert)

endbild (boolescher Wert)

visdateiname (Zeichenkette)

Mit **ausgangsbild** = 1 wird für jeden der aktiven Visualisierer und für jede Fraktion eine die Packung beschreibende Visualisierungsdatei generiert, und zwar zum Zeitpunkt zwischen der initialen Platzierung und dem Beginn der CR-Iteration. Dementsprechend liefert **endbild** = 1 die Visualisierungsdatei der fertigen Packung jeder Fraktion. Der Dateiname wird jeweils aus der mit **visdateiname** angegebenen Zeichenkette gebildet, gefolgt von „_F“ und der Nummer der Fraktion. Als Dateiendung wird „.pov“ für eine POV-Ray-Datei und „.sqm“ für eine QuteMol-Datei angefügt.

Die folgenden Visualisierungsparameter sind nur relevant, wenn POV-Ray als Visualisierungsoption gewählt wurde.

schnittvideo (boolescher Wert)

schnittbilder (Integer ≥ 1)

schnittvideo = 1 weist das Programm an, POV-Ray-Beschreibungen der Einzelbilder (Frames) für einen Film bereitzustellen, der daraus später mit einem externen Videotool erzeugt werden kann. Dieser Film zeigt einen Packungsschnitt, der sukzessive parallel zur X/Y-Ebene durch die Packung wandert. Die Anzahl der Einzelbilder, aus denen dieses Video bestehen soll, gibt **schnittbilder** an.

bewegungsvideo (boolescher Wert)

bewFrameIntervall (Integer ≥ 1)

bewFrameAnzahl (Integer ≥ 0)

Mit **bewegungsvideo** = 1 liefert das Programm POV-Ray-Beschreibungen für Einzelbilder (Frames), die später mit externen Videotools zu einem Film zusammengefügt werden können. Dieser Film zeigt einen Ablauf des Simulationsvorgangs, d. h. die Bewegungen der Partikel werden visualisiert. Die Anzahl der Frames kann durch

`bewFrameAnzahl` limitiert werden; ist dieser Parameter auf 0 gesetzt, werden Frames bis zum Ende der Simulation erzeugt. `bewFrameIntervall` gibt den Intervall (in Iterationsschritten) vor, in dem jeweils ein Frame erstellt wird.

periodischeAnsicht (boolescher Wert)

Mit `periodischeAnsicht = 1` werden die periodischen Randbedingungen ebenfalls visualisiert. Dargestellt werden sie durch Weiterzeichnen der Kugeln in einer dunkleren Farbe am linken, rechten, oberen und unteren Containerrand (siehe Abbildung A.1). Die Einstellung gilt für das Ausgangs- und Endbild sowie das Bewegungsvideo. Wenn `periodischerRand = 1` gesetzt ist, wird der Parameter ignoriert.

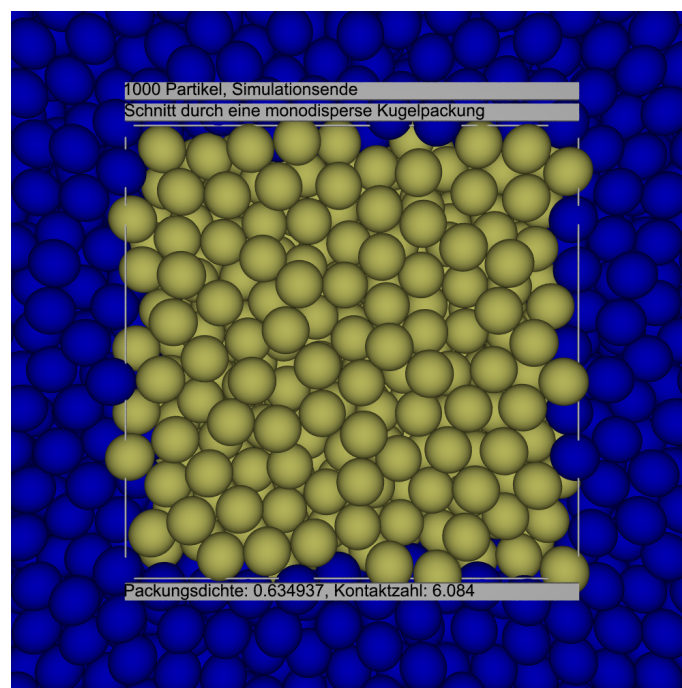


Abbildung A.1: Monodisperse Kugelpackung mit visualisierten periodischen Randbedingungen.

schnitt (boolescher Wert)

schnittkoordinate (Fließkommawert)

schnittmodus (boolescher Wert)

`schnitt` legt fest, ob ein Schnitt durch die Packung dargestellt werden soll und gilt sowohl für das Start- als auch das Endbild. Dabei gibt `schnittkoordinate` die Z-Koordinate, an der der Schnitt (parallel zur X/Y-Ebene) durchgeführt wird. Wenn `schnittmodus = 0`, dann wird ein einzelner Schnitt durchgeführt, der hinter der Schnittebene liegende Teil ist sichtbar. Für `schnittmodus = 1` hingegen erfolgt ein zweiter Schnitt dicht hinter dem ersten, sodass nur der Schnitt der Schnittebene mit der Packung als Anordnung von Kreisscheiben zu sehen ist. Abbildung A.2

verdeutlicht den Unterschied beider Schnittmodi im Vergleich.

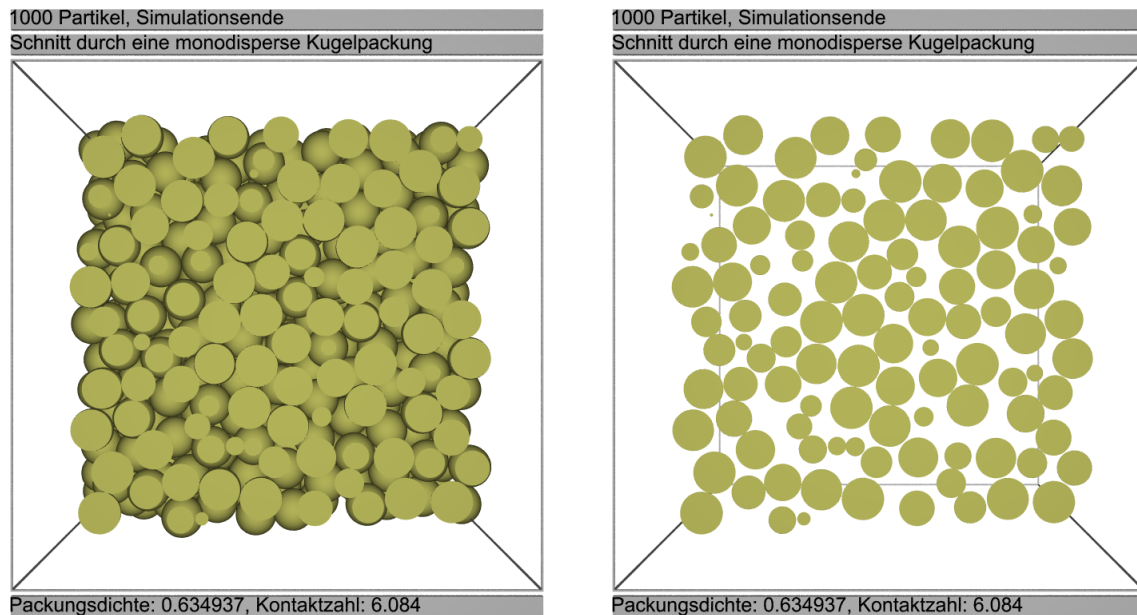


Abbildung A.2: Schnitt durch die Mitte (schnittskordinate = 0) einer Kugelpackung. Links: schnittmodus = 0. Rechts: schnittmodus = 1.

xRotation (boolescher Wert)

yRotation (boolescher Wert)

zRotation (boolescher Wert)

POV-Ray erlaubt es, ein Video einer Kamerafahrt um eine Szene (in diesem Fall die Packung) zu ermöglichen, indem die passenden Einzelbilder erzeugt werden. Für den Betrachter ändert sich somit der Blickwinkel auf die Packung, der Container scheint sich zu drehen. Mit den drei angegebenen Optionen wird gekennzeichnet, um welche Achse bzw. Achsen diese Drehung vollzogen wird. Sind alle drei Parameter auf 0 gesetzt, findet im späteren Video keine Rotation statt.

titel (Zeichenkette)

Gibt einen Titel an, der über der durch POV-Ray visualisierten Packung erscheinen soll. Der Titel erscheint im Start- und Endbild, im Ablaufvideo sowie im Schnittvideo.

Sonstige Parameter

verteilungsdateiAnlegen (boolescher Wert)

verteilungsdateiname (Zeichenkette)

Durch **verteilungsdateiAnlegen** = 1 wird pro Fraktion eine Datei mit dem durch **verteilungsdateiname** gegebenen Namen angelegt, in der die KGV gespeichert wird.

Die Datei wird als csv-Datei angelegt, die einzelnen Felder in jeder Zeile sind durch ein Semikolon voneinander getrennt.

ablaufdateiAnlegen (boolescher Wert)

ablaufdateiname (Zeichenkette)

Mittels **ablaufdateiAnlegen** = 1 wird für jede Fraktion das Anlegen einer csv-Datei mit dem durch **ablaufdateiname** gegebenen Namen veranlasst. Diese Datei enthält zu jedem Iterationsschritt des CR-Algorithmus die Daten: Iterationsnummer, durchschnittliche Anzahl der Kontakte, minimaler Abstand zwischen zwei Partikeln, durchschnittliche Überlappungsrate, Varianz der Überlappungsraten, durchschnittliche Anzahl an Nachbarn, durchschnittliche Weite der Verschiebung und Packungsdichte.

PKFDateiAnlegen (boolescher Wert)

PKFDateiname (Zeichenkette)

PKFSchrittweite (Fließkommawert > 0)

PKFMaxWert (Fließkommawert > 0)

Für **PKFDateiAnlegen** = 1 werden die Daten der Paarkorrelationsfunktion in einer csv-Datei mit in **PKFDateiname** gegebenem Namen festgehalten. **PKFSchrittweite** gibt die Schrittweite zwischen je zwei Werten r an, für die $g(r)$ berechnet wird. Mit **PKFMaxWert** kann der maximale Wert für r vorgegeben werden.

koordinatenMittelwertBerechnen (boolescher Wert)

Mit **koordinatenMittelwertBerechnen** = 1 wird der gewichtete durchschnittliche Mittelpunkt berechnet und ausgegeben.

koordinatendateiAnlegen (boolescher Wert)

koordinatendateiname (Zeichenkette)

Eine csv-Datei mit dem durch **koordinatendateiname** angegebenen Namen wird mittels **koordinatendateiAnlegen** = 1 erzeugt. In ihr sind die Koordinaten und Radien sämtlicher Kugeln festgehalten. Auch bei der Verwendung von Agglomeraten oder Partikeln aus Kugelclustern werden nur die Kugeldaten ausgegeben.

wandeffektdateiAnlegen (boolescher Wert)

wandeffektdateiname (Zeichenkette)

wandeffektSchrittweite (Fließkommawert > 0)

wandeffekttestpunkte (Integer ≥ 1)

wandeffektdateiAnlegen = 1 bestimmt, dass eine csv-Datei angelegt wird, die die lokale Raumauffüllung in Abhängigkeit vom Abstand zum Rand auflistet. Der Dateiname wird durch **wandeffektdateiname** vorgegeben. Die beiden zusätzlichen Parameter **wandeffektSchrittweite** und **wandeffekttestpunkte** regulieren die Schritt-

weite bzw. die Anzahl der zu verwendenden Punkte für die „Hit-or-Miss“-Methode zur Feststellung der Raumausfüllung.

ergebnisdateiAnlegen (boolescher Wert)

ergebnisdateiname (Zeichenkette)

Ist die Option **ergebnisdateiAnlegen** auf 1 gesetzt, dann werden die ermittelten Ergebnisse der Simulation zusätzlich in einer Datei gespeichert, deren Name durch **ergebnisdateiname** vorgegeben ist. Andernfalls erfolgt lediglich eine Ausgabe auf dem Bildschirm.

keineEingaben (boolescher Wert)

Für **keineEingaben** = 0 wird der Benutzer nach der Ausgabe einer Fehlermeldung und nach der Ausgabe des Simulationsergebnisses jeder Fraktion aufgefordert, die Eingabetaste (Enter) zu betätigen. Ist diese Option aktiviert, so unterbleiben diese Benutzerabfragen, was eine skriptgesteuerte Abarbeitung mehrerer Simulationsläufe ermöglicht.

A.2 Verwendete Dateitypen

Neben der Konfigurationsdatei kann das Programm folgende Dateien als Eingabe erfassen:

Mischungsdatei

Diese Datei gibt die Korngrößenverteilung an, für deren Packung die Raumausfüllung zu bestimmen ist. Sie beginnt mit der Angabe der Reindichte des Stoffes, in der zweiten Zeile folgt die Deklaration, ob es sich um Anzahlanteile h_0 oder Volumenanteile h_3 handelt. Diese Anteile sind anschließend für die zugehörigen Durchmesserintervalle aufgelistet, dabei können auch exakte diskrete Partikelgrößen mitsamt Anteilen angegeben werden, wie ein kleines Beispiel zeigt:

DICHTE	3.15072
ANZAHL	
5	0.5
5	0
7	0.5
8	

Eine Hälfte der Partikel besitzt den Durchmesser 5, die Größen der anderen Partikel sind zwischen 7 und 8 gleichverteilt. Partikel mit anderen Durchmessern kommen nicht in der Mischung vor. Die Durchmesserangabe x_i ist durch einen Tabulatorschritt vom nebenstehenden Anteil für das Intervall (x_i, x_{i+1}) getrennt. Davon abweichend gibt die Zahl für den Fall $x_{i+1} = x_i$ den Anteil der Partikel mit genau diesem Durchmesser an (im Beispiel der Durchmesser 5 mit zugehörigem Anteil 0,5). Die letzte Zeile enthält nur den letzten oberen Durchmesser und muss mit der Eingabetaste abgeschlossen worden sein. Wenn die Summe der Anteile nicht 1 ergibt, werden die Anteile als absolute Häufigkeiten gewertet und automatisch zu Anteilen normiert.

Partikeldatei

Diese beschreibt die Form der Partikel. Da nur eine Datei angegeben werden kann, besitzen in der Konsequenz alle Partikel der Packung diese Form; polymorphe Packungen wie in Kapitel 10.4 sind mit dem Simulationssystem grundsätzlich möglich, erfordern jedoch Modifikationen am Programmcode und werden nicht über die Konfigurationsdatei unterstützt. Die Partikeldatei besteht aus den Positionen und Radien der Kugeln, die zusammen die Partikelgestalt ergeben. Ein Beispiel lautet:

Partikeldatei	
OBERFLAECHE	37.6991
VOLUMEN	12.5664
-2 0 0 1	
0 0 0 1	
2 0 0 1	

Die Angabe von Oberfläche und Volumen ist optional und wird bei der ersten Verwendung einer Partikeldatei vom Simulationsprogramm automatisch ergänzt. Die Zahlen jeder Zeile geben jeweils die X/Y/Z-Koordinaten sowie den Radius einer Kugel an.

A.3 Bildschirmausgaben während der Simulation

Sobald das Programm gestartet und die Konfigurationsdatei verarbeitet wurde, verkündet eine Bildschirmausgabe die Simulation der aktuellen Fraktion. Zusätzlich wird der Startwert des Zufallszahlengenerators angezeigt, um durch Fixierung des Wertes in späteren Simulationen eine Reproduzierbarkeit der Zufallszahlenfolge zu

ermöglichen. Nachdem dem Container anschließend eine Ausgangsgröße zugeteilt wurde, erfolgt die Initialisierung der ersten Nachbarschaftsverwaltung. Hier kann der Status über einen Fortschrittsbalken verfolgt werden. Schließlich folgt, ebenfalls über einen Fortschrittsbalken dargestellt, die Kugelplatzierung im Container. Auf dem Bildschirm ist bis zu diesem Zeitpunkt beispielsweise Folgendes zu sehen:

```

----- Bildschirmausgabe 1 -----
Simuliere Fraktion 1 von 1
Startwert ZufGen: 1000
Setze Container-Laenge...
Alte Laenge:          0, alte Dichte:          0
Neue Laenge:    8.05996, neue Dichte:          1
Aenderung:      8.05996,                   1
Initialisiere 1. Nachbarschaftsverwaltung:
Bestimme beste Nachbarschaftsgroesse:
[00000000000000000000] 100%
Positionierung:
[00000000000000000000...] 85%
    
```

Nach Abschluss der ersten Phase der Kugelpositionierung wird die dazu benötigte Zeit angezeigt. Anschließend werden die Kugeln einer zweiten Nachbarschaftsverwaltung übergeben (wieder durch einen Fortschrittsbalken visualisiert) und die Iteration des CR-Algorithmus startet. Der folgende Ausschnitt zeigt die Bildschirmausgabe:

```

----- Bildschirmausgabe 2 -----
Positionierung:
[00000000000000000000] 100%

Anfangsplatzierung benoetigte 3.337 Sekunden.

Initialisiere Nachbarschaftsverwaltung fuer naechste Phase:
Uebergebe Kugeln der neuen Nachbarschaftsverwaltung
[00000000000000000000] 100%
I:      1 K: 8.0 UeR: 0.15867 MxUeR: 0.453 UeV: 0.0093371 N: 25.69 B: 0.1315435
I:      2 K: 8.5 UeR: 0.14220 MxUeR: 0.352 UeV: 0.0059497 N: 25.68 B: 0.0659364
I:      3 K: 8.6 UeR: 0.13768 MxUeR: 0.334 UeV: 0.0049269 N: 25.66 B: 0.0476331
I:      4 K: 8.8 UeR: 0.13453 MxUeR: 0.318 UeV: 0.0043514 N: 25.63 B: 0.0383790
I:      5 K: 9.0 UeR: 0.13237 MxUeR: 0.307 UeV: 0.0039802 N: 25.59 B: 0.0322022
I:      6 K: 9.1 UeR: 0.13038 MxUeR: 0.302 UeV: 0.0037379 N: 25.54 B: 0.0279408
I:      7 K: 9.2 UeR: 0.12886 MxUeR: 0.300 UeV: 0.0035337 N: 25.47 B: 0.0248277
I:      8 K: 9.2 UeR: 0.12758 MxUeR: 0.300 UeV: 0.0033746 N: 25.38 B: 0.0226106
    
```

```
I:    9 K: 9.3 UeR: 0.12617 MxUeR: 0.299 UeV: 0.0032693 N: 25.29 B: 0.0208660
I:   10 K: 9.4 UeR: 0.12505 MxUeR: 0.291 UeV: 0.0031755 N: 25.26 B: 0.0195197
I:   11 K: 9.5 UeR: 0.12390 MxUeR: 0.293 UeV: 0.0030987 N: 25.22 B: 0.0184019
I:   12 K: 9.5 UeR: 0.12288 MxUeR: 0.288 UeV: 0.0030264 N: 25.15 B: 0.0174748
```

Nach jedem Iterationsschritt wird ein Überblick über die Daten der Simulation und der Packung ausgegeben. Die Bedeutung der Buchstaben führt Tabelle A.1 auf.

Abkürzung	Bedeutung
I	Nummer des Iterationsschrittes
K	durchschnittliche Koordinationszahl
UeR	durchschnittliche Überlappungsrate
MxUeR	maximale Überlappungsrate
UeV	Varianz der Überlappungsraten
N	durchschnittliche Anzahl der von der Nachbarschaftsverwaltung gelieferten Nachbarn
B	durchschnittliche Bewegungsweite

Tabelle A.1: Erläuterung der Abkürzungen in der Bildschirmausgabe.

Der nächste Ausschnitt der Bildschirmausgabe zeigt die Containervergrößerung an, die damit verbundene Reduzierung der Packungsdichte wird ebenso mitgeteilt.

```

Bildschirmausgabe 3
I:   106 K: 9.9 UeR: 0.08372 MxUeR: 0.192 UeV: 0.0012015 N: 23.81 B: 0.0031041
Setze Container-Laenge...
Alte Laenge:   8.348056, alte Dichte:  0.900000
Neue Laenge:   8.508635, neue Dichte:  0.850000
Aenderung:     0.160579,                -0.050000
I:   107 K: 9.5 UeR: 0.06969 MxUeR: 0.175 UeV: 0.0010163 N: 23.80 B: 0.0052433

```

Sinkt die durchschnittliche Überlappungsrate unter den in der Konfigurationsdatei angegebenen Schwellwert, so wird auf die gleiche Weise eine Verkleinerung des Containers kenntlich gemacht:

```

Bildschirmausgabe 4
I:  2058 K: 6.0 UeR: 0.00004 MxUeR: 0.000 UeV: 0.0000000 N: 10.08 B: 0.0000026
Setze Container-Laenge...
Alte Laenge:   9.381775, alte Dichte:  0.634079
Neue Laenge:   9.261620, neue Dichte:  0.659079
Aenderung:    -0.120155,                0.025000
I:  2059 K: 6.8 UeR: 0.01134 MxUeR: 0.016 UeV: 0.0000068 N:  9.14 B: 0.0040182

```

Wurde die vorgegebene Anzahl der Containerverkleinerungen erreicht, so endet die Simulation der Fraktion nach erneutem Unterschreiten der Überlappungsrategrenze. Das Fraktionsergebnis wird aufgelistet und das Programm zeigt ebenfalls das Gesamtergebnis an, falls es sich um die letzte Fraktion handelt, wie im folgenden Ausschnitt der Bildschirmausgabe.

```
----- Bildschirmausgabe 5 -----
I: 2743 K: 6.2 UeR: 0.00019 MxUeR: 0.001 UeV: 0.0000000 N: 7.77 B: 0.0000765
Simulation abgeschlossen.
Berechne Packungsdaten
[00000000000000000000] 100%

Fraktion Nr. 01
=====
Datum & Zeit:          Tue Jun 23 08:53:14 2009

Daten der Simulation
-----
Iterationen:          2743
Ausfuehrungszeit [sek]: 48.245
Ueberlappungsrate:    0.000189634

Kugelpackungsanalyse
-----
sim. Kugelanzahl:     1000
Koordinationszahl:    6.25
spezifische Oberflaeche: 6
Kugelpackungsdichte:  0.635234
Korndurchmesser:      1 - 1
Wuerfellaenge:        9.37609
Wuerfelvolumen:       824.262

Gesamtergebnis
=====
Tats. Zufallsstartwert: 1000
simulierte Fraktionen: 1
berechnete Fraktionen: 0
Benoetigte Zeit [sek]: 61.428
Gesamt-Raumausfuellung: 0.635234
```

Literaturverzeichnis

- [AA30] A. H. M. ANDREASEN und J. ANDERSEN: *Über die Beziehung zwischen Kornabstufung und Zwischenraum in Produkten aus losen Körnern (mit einigen Experimenten)*. Colloid & Polymer Science 50 (3), S. 217–228, 1930.
- [AC95] N. D. APARICIO und A. C. F. COCKS: *On the representation of random packings of spheres for sintering simulations*. Acta Metallurgica et Materialia 43 (10), S. 3873–3884, 1995.
- [AG68] R. B. AÏM und P. L. GOFF: *Effet de paroi dans les empilements désordonnés de sphères et application à la porosité de mélanges binaires*. Powder Technology 1 (5), S. 281–290, 1968.
- [AGM99] L. ALVAREZ, Y. GOUSSEAU und J.-M. MOREL: *The size of objects in natural and artificial images*. Advances in Imaging and Electron Physics 111, S. 167–242, 1999.
- [AHM06] J. ANDERSSON, O. HÄGGSTRÖM und M. MÅNSSON: *The volume fraction of a non-overlapping germ-grain model*. Electronic Communications in Probability 11, S. 78–88, 2006.
- [AJ93] P. J. ANDERSEN und V. JOHANSEN: *A Guide to Determining the Optimal Gradation of Concrete Aggregates*. Strategic Highway Research Program, National Research Council, 1993.
- [Alb05] L. J. H. ALBERTS: *Initial Porosity of Random Packing – Computer simulation of grain rearrangement*. Dissertation, Delft University of Technology, Department of Geotechnology, 2005.
- [ALT08] J. A. ANDERSON, C. D. LORENZ und A. TRAVESSET: *General purpose molecular dynamics simulations fully implemented on graphics processing units*. Journal of Computational Physics 227 (10), S. 5342–5359, 2008.
- [AM72] D. J. ADAMS und A. J. MATHESON: *Computation of Dense Random Packings of Hard Spheres*. The Journal of Chemical Physics 56 (5), S. 1989–1994, 1972.

- [AM95] S. V. ANISHCHIK und N. N. MEDVEDEV: *Three-Dimensional Apollonian Packing as a Model for Dense Granular Systems*. Physical Review Letters 75 (23), S. 4314–4317, 1995.
- [AMSTC99] C. R. A. ABREU, R. MACIAS-SALINAS, F. W. TAVARES und M. CASTIER: *A Monte Carlo simulation of the packing and segregation of spheres in cylinders*. Brazilian Journal of Chemical Engineering 16 (4), S. 395–405, 1999.
- [Ang08] E. M. ANGÜN: *Black Box Simulation Optimization: Generalized Response Surface Methodology*. VDM Verlag Dr. Müller, Saarbrücken, 2008.
- [ARA07] R. AL-RAOUSH und M. ALSALEH: *Simulation of random packing of polydisperse particles*. Powder Technology 176 (1), S. 47–55, 2007.
- [Arv90] J. ARVO: *A simple method for box-sphere intersection testing*. In A. S. GLASSNER (Hg.), *Graphics Gems*, S. 335–339. Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, 1990.
- [AS05] A. AMIRJANOV und K. SOBOLEV: *Optimal proportioning of concrete aggregates using a self-adaptive genetic algorithm*. Computers and Concrete 2 (5), S. 411–421, 2005.
- [AS06a] A. AMIRJANOV und K. SOBOLEV: *Fractal properties of Apollonian packing of spherical particles*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 14 (4), S. 789–798, 2006.
- [AS06b] A. AMIRJANOV und K. SOBOLEV: *Genetic algorithm for cost optimization of modified multi-component binders*. Building and Environment 41 (2), S. 195–203, 2006.
- [AT89] M. ALLEN und D. TILDESLEY: *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, USA, 1989.
- [AW59] B. J. ALDER und T. E. WAINWRIGHT: *Studies in Molecular Dynamics. I. General Method*. The Journal of Chemical Physics 31 (2), S. 459–466, 1959.
- [Bag05] K. BAGI: *An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies*. Granular Matter 7 (1), S. 31–43, 2005.
- [Bal06] F. BALLANI: *Beiträge zur Theorie und Anwendung von Keim-Korn-Modellen mit konvexen Körnern*. Dissertation, TU Freiberg, 2006.
- [BBS02] A. BEZRUKOV, M. BARGIEL und D. STOYAN: *Statistical Analysis of Simulated Random Packings of Spheres*. Particle & Particle Systems Characterization 19 (2), S. 111–118, 2002.
- [BBZ08] R. G. BELLEMAN, J. BÉDORF und S. F. P. ZWART: *High performance direct gravitational N-body simulations on graphics processing units II: An implementation in CUDA*. New Astronomy 13 (2), S. 103–112, 2008.

- [BDGL00] D. W. BOLL, J. DONOVAN, R. L. GRAHAM und B. D. LUBACHEVSKY: *Improving Dense Packings of Equal Disks in a Square*. Electronic Journal of Combinatorics 7, S. R46, 2000.
- [BDS06] F. BALLANI, D. DALEY und D. STOYAN: *Modelling the microstructure of concrete with spherical grains*. Computational Materials Science 35 (4), S. 399–407, 2006.
- [Ben36] J. G. BENNETT: *Broken coal*. Journal of the Institute of Fuel 10, S. 22–39, 1936.
- [Ben72] C. H. BENNETT: *Serially Deposited Amorphous Aggregates of Hard Spheres*. Journal of Applied Physics 43 (6), S. 2727–2734, 1972.
- [Ber59] J. D. BERNAL: *A Geometrical Approach to the Structure Of Liquids*. Nature 183 (4655), S. 141–147, 1959.
- [BM60] J. D. BERNAL und J. MASON: *Packing of Spheres: Co-ordination of Randomly Packed Spheres*. Nature 188 (4754), S. 910–911, 1960.
- [BM91] M. BARGIEL und J. MOŚCIŃSKI: *C-language program for the irregular close packing of hard spheres*. Computer Physics Communications 64 (1), S. 183–192, 1991.
- [BPW⁺91] K. BORHO, R. POLKE, K. WINTERMANTEL, S. HELMAR und K. SOMMER: *Produkteigenschaften und Verfahrenstechnik*. Chemieingenieurtechnik 63 (8), S. 792–808, 1991.
- [BRW97] A. VAN BLAADEREN, R. RUEL und P. WILTZIUS: *Template-directed colloidal crystallization*. Nature 385 (6614), S. 321–324, 1997.
- [BS06] A. BEZRUKOV und D. STOYAN: *Simulation and Statistical Analysis of Random Packings of Ellipsoids*. Particle & Particle Systems Characterization 23 (5), S. 388–398, 2006.
- [BSB01] A. BEZRUKOV, D. STOYAN und M. BARGIEL: *Spatial Statistics for Simulated Packings of Spheres*. Image Analysis & Stereology 20 (3), S. 203–206, 2001.
- [CJ93] A. S. CLARKE und H. JÓNSSON: *Structural changes accompanying densification of random hard-sphere packings*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 47 (6), S. 3975–3984, 1993.
- [CO03] L. CUI und C. O’SULLIVAN: *Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations*. Granular Matter 5 (3), S. 135–145, 2003.
- [Coo88] COOPER: *Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres*. Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics 38 (1), S. 522–524, 1988.
- [CS79] P. A. CUNDALL und O. D. L. STRACK: *A discrete numerical model for granular assemblies*. Géotechnique 29 (1), S. 47–65, 1979.

- [CSY02] J. CAGAN, K. SHIMADA und S. YIN: *A survey of computational approaches to three-dimensional layout problems*. Computer-Aided Design 34 (8), S. 597–611, 2002.
- [CW87] A. S. CLARKE und J. D. WILEY: *Numerical simulation of the dense random packing of a binary mixture of hard spheres: Amorphous metals*. Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics 35 (14), S. 7350–7356, 1987.
- [DCS⁺04] A. DONEV, I. CISSE, D. SACHS, E. A. VARIANO, F. H. STILLINGER, R. CONNELLY, S. TORQUATO und P. M. CHAIKIN: *Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids*. Science 303 (5660), S. 990–993, 2004.
- [Dew99] J. D. DEWAR: *Computer Modelling of Concrete Mixtures*. E & FN Spon, London, 1999.
- [Dög01] G. DÖGE: *Perfect Simulation for Random Sequential Adsorption of d-Dimensional Spheres with Random Radii*. Journal of Statistical Computation and Simulation 69 (2), S. 141–156, 2001.
- [DIN76] *DIN 66145 – Darstellung von Korn-(Teilchen-)größenverteilungen; RRSB-Netz*. Deutsches Institut für Normung e.V., 1976.
- [DIN01] *DIN 1045-2 – Tragwerke aus Beton, Stahlbeton und Spannbeton – Teil 2: Beton – Festlegung, Eigenschaften, Herstellung und Konformität – Anwendungsregeln zu DIN EN 206-1*. Deutsches Institut für Normung e.V., 2001.
- [DSS99] D. J. DALEY, H. STOYAN und D. STOYAN: *The volume fraction of a Poisson germ model with maximally non-overlapping spherical grains*. Advances in Applied Probability 31 (3), S. 610–624, 1999.
- [DTMY04] R. DIAS, J. TEIXEIRA, M. MOTA und A. YELSHIN: *Particulate Binary Mixtures: Dependence of Packing Porosity on Particle Size Ratio*. Industrial & Engineering Chemistry Research 43 (24), S. 7912–7919, 2004.
- [DTS05a] A. DONEV, S. TORQUATO und F. H. STILLINGER: *Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. I. Algorithmic details*. Journal of Computational Physics 202 (2), S. 737–764, 2005.
- [DTS05b] A. DONEV, S. TORQUATO und F. H. STILLINGER: *Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles.: II. Applications to ellipses and ellipsoids*. Journal of Computational Physics 202 (2), S. 765–793, 2005.
- [DW02] P. S. DODDS und J. S. WEITZ: *Packing-limited growth*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 65 (5 Pt 2), S. 056108, 2002.

- [DYZY06] K. J. DONG, R. Y. YANG, R. P. ZOU und A. B. YU: *Role of Interparticle Forces in the Formation of Random Loose Packing*. Physical Review Letters 96 (14), S. 145505, 2006.
- [EDE09] *EDEM 2.1.2*. DEM Solutions Ltd., 2009.
URL: www.dem-solutions.com/edem.php.
- [EGS⁺08] W. EDEN, C. GEISENHANSLÜKE, M. SCHMIDT, A. GLAUBITT und B. MIDDENDORF: *Verdichtung von Kalk-Sand-Rohmassen – Optimierung des Kalksandstein-Gefüges – Teil 2*. Techn. Ber., Forschungsvereinigung Kalk-Sand eV, 2008.
- [Faz07] S. FAZEKAS: *Distinct Element Simulations of Granular Materials*. Dissertation, Budapest University of Technology and Economics, Department of Theoretical Physics, 2007.
- [FD00] G. FU und W. DEKELBAB: *Particle Packing by Kinematics and Dynamics Simulations*. In J. L. TASSOULAS (Hg.), *14th Engineering Mechanics Conference*. American Society of Civil Engineers, Austin, Texas, 2000.
- [FD03] G. FU und W. DEKELBAB: *3-D random packing of polydisperse particles and concrete aggregate grading*. Powder Technology 133 (1-3), S. 147–155, 2003.
- [FDB⁺06] X. FU, M. DUTT, A. C. BENTHAM, B. C. HANCOCK, R. E. CAMERON und J. A. ELLIOTT: *Investigation of particle packing in model pharmaceutical powders using X-ray microtomography and discrete element method*. Powder Technology 167 (3), S. 134–140, 2006.
- [FHO03] Y. T. FENG, K. HAN und D. R. J. OWEN: *Filling domains with disks: an advancing front approach*. International Journal for Numerical Methods in Engineering 56 (5), S. 699–713, 2003.
- [FHOR01] A. J. FORSYTH, S. R. HUTTON, C. F. OSBORNE und M. J. RHODES: *Effects of Interparticle Force on the Packing of Spherical Granular Material*. Physical Review Letters 87 (24), S. 244301, 2001.
- [FSK08] A. FORRESTER, A. SÓBESTER und A. KEANE: *Engineering design via surrogate modelling: a practical guide*. John Wiley & Sons, Chichester, 2008.
- [FT07] W. B. FULLER und S. E. THOMPSON: *The laws of proportioning concrete*. Transactions of the American Society of Civil Engineers 59, S. 67–172, 1907.
- [Fur28] C. C. FURNAS: *Relations Between Specific Volume Voids and Size Composition in Systems of Broken Solids of Mixed Sizes*. Report of Investigations 2894, 7, Bureau of Mines, Washington, D.C., USA, 1928.
- [Fur29] C. C. FURNAS: *Flow of Gases Through Beds of Broken Solids*. Bureau of Mines Bulletin 307, S. 74–83, 1929.

- [GDK89] G. S. GREY, B. DUNWEG und K. KREMER: *Vectorized link cell Fortran code for molecular dynamics simulations for a large number of particles*. Computer Physics Communications 55 (3), S. 269–285, 1989.
- [GF74] K. GOTOH und J. L. FINNEY: *Statistical geometrical approach to random packing density of equal spheres*. Nature 252 (5480), S. 202–205, 1974.
- [GGJW04] M. GAN, N. GOPINATHAN, X. JIA und R. A. WILLIAMS: *Predicting packing characteristics of particles of arbitrary shapes*. KONA 22, S. 82–93, 2004.
- [GJP97] P. GOLTERMANN, V. JOHANSEN und L. PALBØL: *Packing of Aggregates: An Alternative Tool to Determine the Optimal Aggregate Mix*. Materials Journal 94 (5), S. 435–443, 1997.
- [GR99] H. GRUBE und J. RICKERT: *Selbstverdichtender Beton - ein weiterer Entwicklungsschritt des 5-Stoff-Systems Beton*. beton 49 (4), S. 239–244, 1999.
- [Grü04] S. GRÜNEWALD: *Performance-based design of self-compacting fibre reinforced concrete*. Dissertation, TU Delft, 2004.
- [GR08] G. GEORGALLI und M. REUTER: *A particle packing algorithm for packed beds with size distribution*. Granular Matter 10 (4), S. 257–262, 2008.
- [Hal00] T. C. HALES: *Cannonballs and Honeycombs*. Notices of the American Mathematical Society 47 (4), S. 440–449, 2000.
- [Hal05] T. C. HALES: *A Proof of the Kepler Conjecture*. Annals of Mathematics 162 (3), S. 1065–1185, 2005.
- [Hal06] T. C. HALES: *Historical Overview of the Kepler Conjecture*. Discrete and Computational Geometry 36 (1), S. 5–20, 2006.
- [HE98] D. HE und N. N. EKERE: *Computer Simulation of Powder Compaction of Spherical Particles*. Journal of Materials Science Letters 17 (20), S. 1723–1725, 1998.
- [HEC99] D. HE, N. N. EKERE und L. CAI: *Computer simulation of random packing of unequal particles*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 60 (6), S. 7098–7104, 1999.
- [HELS07] H. HERMANN, A. ELSNER, K. LOCHMANN und D. STOYAN: *Optimisation of multi-component hard sphere liquids with respect to dense packing*. Materials Science and Engineering: A 449–451, S. 666–670, 2007.
- [HGE74] R. W. HOCKNEY, S. P. GOEL und J. W. EASTWOOD: *Quiet high-resolution computer models of a plasma*. Journal of Computational Physics 14 (2), S. 148–158, 1974.

- [HKA⁺07] D. HLUSHKOU, S. KHIREVICH, V. APANASOVICH, A. SEIDEL-MORGENSTERN und U. TALLAREK: *Pore-Scale Dispersion in Electrokinetic Flow through a Random Sphere Packing*. *Analytical Chemistry* 79 (1), S. 113–121, 2007.
- [HL06] M. HEVELING und G. LAST: *Existence, uniqueness, and algorithmic computation of general lilypond systems*. *Random Structures and Algorithms* 29 (3), S. 338–350, 2006.
- [Hlu04] D. HLUSHKOU: *Numerische Simulation von Strömung und Massentransport in (elektro-) chromatographischen Systemen*. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2004.
- [HM96] O. HÄGGSTRÖM und R. MEESTER: *Nearest neighbor and hard sphere models in continuum percolation*. *Random Structures and Algorithms* 9 (3), S. 295–315, 1996.
- [HMBW06] H. J. HERRMANN, R. MAHMOODI BARAM und M. WACKENHUT: *Dense packings*. *Brazilian Journal of Physics* 36, S. 610–613, 2006.
- [Hof06] R. HOFFMANN: *DEM Simulations of Toner Particles with an $O(N \log N)$ Hierarchical Tree Code Algorithm*. *Granular Matter* 8 (3), S. 151–157, 2006.
- [HSMT05] D. HLUSHKOU, A. SEIDEL-MORGENSTERN und U. TALLAREK: *Numerical Analysis of Electroosmotic Flow in Dense Regular and Random Arrays of Impermeable, Nonconducting Spheres*. *Langmuir* 21 (13), S. 6097–6112, 2005.
- [IBK⁺97] I. IKONEN, W. E. BILES, A. KUMAR, J. C. WISSEL und R. K. RAGADE: *Genetic Algorithm for Packing Three-Dimensional Non-Convex Objects Having Cavities and Holes*. In *Proceedings of the 7th International Conference on Genetic Algorithms*, S. 591–598. Morgan Kaufmann Publishers, East Lansing, Michigan, 1997.
- [IPSS08] J. ILLIAN, A. PENTTINEN, H. STOYAN und D. STOYAN: *Statistical Analysis and Modelling of Spatial Point Patterns*. *Statistics in Practice*. John Wiley & Sons, Chichester, 2008.
- [JGW02] X. JIA, N. GOPINATHAN und R. A. WILLIAMS: *Modeling complex packing structures and their thermal properties*. *Advanced Powder Technology* 13 (1), S. 55–71, 2002.
- [JGWR07] X. JIA, M. GAN, R. WILLIAMS und D. RHODES: *Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities*. *Powder Technology* 174 (1-2), S. 10–13, 2007.
- [JIDD09] J.-F. JERIER, D. IMBAULT, F.-V. DONZE und P. DOREMUS: *A geometric algorithm based on tetrahedral meshes to generate a dense polydisperse sphere packing*. *Granular Matter* 11 (1), S. 43–52, 2009.

- [JM00] R. JULLIEN und P. MEAKIN: *Computer simulations of steepest descent ballistic deposition*. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 165 (1–3), S. 405–422, 2000.
- [JPM92] R. JULLIEN, A. PAVLOVITCH und P. MEAKIN: *Random packings of spheres built with sequential models*. Journal of Physics A: Mathematical and General 25 (15), S. 4103–4113, 1992.
- [JT79] W. S. JODREY und E. M. TORY: *Simulation of random packing of spheres*. Simulation 32 (1), S. 1–12, 1979.
- [JT80] C. L. JACKINS und S. L. TANIMOTO: *Oct-trees and their use in representing three-dimensional objects*. Computer Graphics and Image Processing 14 (3), S. 249–270, 1980.
- [JT85] W. S. JODREY und E. M. TORY: *Computer simulation of close random packing of equal spheres*. Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics 32 (4), S. 2347–2351, 1985.
- [JW01] X. JIA und R. A. WILLIAMS: *A packing algorithm for particles of arbitrary shapes*. Powder Technology 120 (3), S. 175–186, 2001.
- [JZN02] M. JONES, L. ZHENG und M. NEWLANDS: *Comparison of particle packing models for proportioning concrete constituents for minimum voids ratio*. Materials and Structures 35 (5), S. 301–309, 2002.
- [KAM00] J. C. KIM, K. H. AUH und D. M. MARTIN: *Multi-level particle packing model of ceramic agglomerates*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 8 (2), S. 159–168, 2000.
- [KGV83] S. KIRKPATRICK, J. GELATT, C. D. und M. P. VECCHI: *Optimization by Simulated Annealing*. Science 220 (4598), S. 671–680, 1983.
- [KI90] Y. KONAKAWA und K. ISHIZAKI: *The particle size distribution for the highest relative density in a compacted body*. Powder Technology 63 (3), S. 241–246, 1990.
- [Kit06] C. KITTEL: *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München, 2006.
- [Kje07] A. M. KJELDTSEN: *Consolidation behavior of cement-based systems*. Dissertation, Technical University of Denmark, Department of Civil Engineering, 2007.
- [Kri51] D. G. KRIGE: *A Statistical Approach to Some Basic Mine Valuation Problems on the Witwatersrand*. Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa 52 (6), S. 119–139, 1951.
- [LAE⁺06] K. LOCHMANN, A. ANIKEENKO, A. ELSNER, N. MEDVEDEV und D. STOYAN: *Statistical verification of crystallization in hard sphere packings under densification*. The European Physical Journal B – Condensed Matter and Complex Systems 53 (1), S. 67–76, 2006.

- [Lar99] F. DE LARRARD: *Concrete Mixture Proportioning*. E & FN Spon, London, 1999.
- [Lim02] C. LIMBERG: *Computergenerierte Kugelschüttungen in zylindrischen Rohren als Basis für eine differenzierte Modellierung von Festbettreaktoren*. Dissertation, Technische Universität Cottbus, Fakultät für Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik, 2002.
- [LMH01] A. B. LEE, D. MUMFORD und J. HUANG: *Occlusion Models for Natural Images: A Statistical Study of a Scale-Invariant Dead Leaves Model*. International Journal of Computer Vision 41 (1), S. 35–59, 2001.
- [LML02] J.-P. LATHAM, A. MUNJIZA und Y. LU: *On the prediction of void porosity and packing of rock particulates*. Powder Technology 125 (1), S. 10–27, 2002.
- [LO06] F. LOMINÉ und L. OGER: *Transport of small particles through a 3D packing of spheres: experimental and numerical approaches*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2006 (7), S. P07019, 2006.
- [LO09] C. LABRA und E. OÑATE: *High-density sphere packing for discrete element method simulations*. Communications in Numerical Methods in Engineering 25 (7), S. 837–849, 2009.
- [LOS06] K. LOCHMANN, L. OGER und D. STOYAN: *Statistical analysis of random sphere packings with variable radius distribution*. Solid State Sciences 8 (12), S. 1397–1413, 2006.
- [LS90] B. D. LUBACHEVSKY und F. H. STILLINGER: *Geometric properties of random disk packings*. Journal of Statistical Physics 60 (5), S. 561–583, 1990.
- [LS94a] F. DE LARRARD und T. SEDRAN: *Optimization of ultra-high-performance concrete by the use of a packing model*. Cement and Concrete Research 24 (6), S. 997–1009, 1994.
- [LS94b] G. Q. LU und X. SHI: *Computer simulation of isostatic powder compaction by random packing of monosized particles*. Journal of Materials Science Letters 13 (23), S. 1709–1711, 1994.
- [LSP91] B. D. LUBACHEVSKY, F. H. STILLINGER und E. N. PINSON: *Disks vs. spheres: Contrasting properties of random packings*. Journal of Statistical Physics 64 (3), S. 501–524, 1991.
- [LT00] G. LIU und K. E. THOMPSON: *Influence of computational domain boundaries on internal structure in low-porosity sphere packings*. Powder Technology 113 (1), S. 185–196, 2000.
- [LV07] G. LUMAY und N. VANDEWALLE: *Tunable random packings*. New Journal of Physics 9 (11), S. 406, 2007.

- [LY00] L. LIU und Y. YUAN: *Dynamic simulation of powder compact by random packing of monosized and polydisperse particles*. Journal of Materials Science Letters 19 (10), S. 841–843, 2000.
- [LZZ08] S.-X. LI, J. ZHAO und X. ZHOU: *Numerical Simulation of Random Close Packing with Tetrahedra*. Chinese Physics Letters 25 (5), S. 1724–1726, 2008.
- [Mat60] B. MATÉRN: *Spatial variation: Stochastic models and their application to some problems in forest surveys and other sampling investigations*, Bd. 49 (5) von *Meddelanden Från Statens Skogsforskningsinstitut*. Statens Skogsforskningsinstitut, Stockholm, 1960.
- [Mat63] G. MATHERON: *Principles of geostatistics*. Economic Geology 58, S. 1246–1266, 1963.
- [Mat68] G. MATHERON: *Schéma booléen séquentiel de partition aléatoire*. Techn. Ber. N-83, Centre de Morphologie Mathématique, Paris School of Mines, 1968.
- [Mat74] A. J. MATHESON: *Computation of a random packing of hard spheres*. Journal of Physics C: Solid State Physics 7 (15), S. 2569–2576, 1974.
- [Mat86] B. MATÉRN: *Spatial variation*, Bd. 36 von *Lecture Notes in Statistics*. 2. Aufl. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [MB05] R. MAHMOODI BARAM: *Polydisperse Granular Packings and Bearings*. Dissertation, Universität Stuttgart, Institut für Computeranwendungen 1, 2005.
- [MBH04] R. MAHMOODI BARAM und H. J. HERRMANN: *Self-similar space-filling packings of spheres*. Fractals 12 (3), S. 293–301, 2004.
- [MC02] J. A. MESEJO CHIONG: *Lagenbilderstellung für Rapportstoffe*. Dissertation, Universität Bremen, Fachbereich Mathematik/Informatik, 2002.
- [MDS⁺05] W. MAN, A. DONEV, F. H. STILLINGER, M. T. SULLIVAN, W. B. RUSSEL, D. HEEGER, S. INATI, S. TORQUATO und P. M. CHAIKIN: *Experiments on Random Packings of Ellipsoids*. Physical Review Letters 94 (19), S. 198001, 2005.
- [Mea82] D. MEAGHER: *Geometric modeling using octree encoding*. Computer Graphics and Image Processing 19 (2), S. 129–147, 1982.
- [Mea85] P. MEAKIN: *The structure of two-dimensional Witten-Sander aggregates*. Journal of Physics A: Mathematical and General 18 (11), S. L661–L666, 1985.
- [Mea95] P. MEAKIN: *Progress in DLA research*. Physica D: Nonlinear Phenomena 86 (1–2), S. 104–112, 1995.

- [MKNT01] I. MARUYAMA, M. KANEMATSU, T. NOGUCHI und F. TOMOSAWA: *Optimization of mix proportion of concrete under various severe conditions by applying the genetic algorithm*. In *CONSEC '01: Third International Conference on Concrete Under Severe Conditions*, S. 1400–1407. Vancouver, BC, Canada, 2001.
- [MKS08] H. A. MEIER, E. KUHL und P. STEINMANN: *A note on the generation of periodic granular microstructures based on grain size distributions*. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 32 (5), S. 509–522, 2008.
- [MLH00] H. G. MATUTTIS, S. LUDING und H. J. HERRMANN: *Discrete element simulations of dense packings and heaps made of spherical and non-spherical particles*. *Powder Technology* 109 (1-3), S. 278–292, 2000.
- [MM44] W. G. MADOW und L. H. MADOW: *On the Theory of Systematic Sampling, I*. *The Annals of Mathematical Statistics* 15 (1), S. 1–24, 1944.
- [MR02] M. MÅNSSON und M. RUDEMO: *Random Patterns of Nonoverlapping Convex Grains*. *Advances in Applied Probability* 34 (4), S. 718–738, 2002.
- [MW04] J. MØLLER und R. P. WAAGEPETERSEN: *Statistical Inference and Simulation for Spatial Point Processes*, Bd. 100 von *Monographs on Statistics and Applied Probability*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2004.
- [NBK⁺07] C. NIEDEREGGER, C. BRUSCHEK, M. KOPPI, H. P. SCHRÖCKER und D. WAGNER: *Verbesserung von Frisch- und Festbetoneigenschaften durch Minimierung der Haufwerksporosität von Zementen mittels Approximation der Fullerkurve*. *beton* 5, S. 220–222, 2007.
- [NDT09] *NDT Education Resource Center*. Iowa State University; Ames, Iowa, 2009.
URL: www.ndt-ed.org/EducationResources/CommunityCollege/Materials/Structure/fcc_hcp.htm.
- [NK92] G. T. NOLAN und P. E. KAVANAGH: *Computer simulation of random packing of hard spheres*. *Powder Technology* 72 (2), S. 149–155, 1992.
- [Pal06] S. PALM: *Messung der Raumauffüllung von trockenen dispersen Systemen*. Diplomarbeit, TU Clausthal, Institut für Nichtmetallische Werkstoffe, 2006.
- [Pal09] S. PALM: *Optimierung der Raumauffüllung und der Komponentenverteilung von Multikompositzementen*. Dissertation, TU Clausthal, 2009.
- [PBP94] R. PEIKERT, M. BORKOVEC und W. DE PARIS: *The Fractal Dimension of the Apollonian Sphere Packing*. *Fractals* 2 (4), S. 521–526, 1994.

- [PFC08] *PFC^{3D} 4.0*. Itasca, 2008.
URL: www.itascacg.com/pfc3d.
- [Pov04] *Persistence of VisionTM Raytracer*. Persistence of Vision Pty. Ltd., 2004.
URL: www.povray.org.
- [Pow80] M. J. POWELL: *Anisotropy in Simulated Random Packing of Equal Spheres*. Powder Technology 25 (1), S. 45–52, 1980.
- [Pöp04] C. PÖPPE: *Die Getriebe des Teufels*. Spektrum der Wissenschaft 9, S. 106–109, 2004.
- [Pun02] W. PUNTKE: *Wasseranspruch von feinen Kornhaufwerken*. beton 5, S. 242–248, 2002.
- [Ras06] S. RASCHDORF: *Simulation der Raumauffüllung von Beton mit vorgegebener Korngrößenverteilung*. Diplomarbeit, TU Clausthal, Institut für Mathematik, 2006.
- [Res01] T. RESCHKE: *Der Einfluss der Granulometrie der Feinstoffe auf die Gefügeentwicklung und die Festigkeit von Beton*. Dissertation, Bauhaus-Universität Weimar, 2001.
- [RK09] S. RASCHDORF und M. KOLONKO: *A comparison of data structures for the simulation of polydisperse particle packings*, 2009. Zur Veröffentlichung eingereicht.
- [RMT90] L. ROUILLE, J. M. MISSIAEN und G. THOMAS: *Collective random packing of disks in a plane under the influence of a weak central force*. Journal of Physics: Condensed Matter 2 (13), S. 3041–3051, 1990.
- [RR33] P. ROSIN und E. RAMMLER: *The laws governing the fineness of powdered coal*. Journal of the Institute of Fuel 7, S. 29–33, 1933.
- [RRS33] P. O. ROSIN, E. RAMMLER und K. SPERLING: *Korngrößenprobleme des Kohlenstaubes und ihre Bedeutung für die Vermahlung*. Techn. Ber. C52, Berichte d. techn.-wirtschaftl. Sachverständigenausschüsse d. Reichskohlenrates, 1933.
- [RVC08] N. REBOUL, E. VINCENS und B. CAMBOU: *A statistical analysis of void size distribution in a simulated narrowly graded packing of spheres*. Granular Matter 10 (6), S. 457–468, 2008.
- [SA04a] K. SOBOLEV und A. AMIRJANOV: *A simulation model of the dense packing of particulate materials*. Advanced Powder Technology 15 (3), S. 365–376, 2004.
- [SA04b] K. SOBOLEV und A. AMIRJANOV: *The development of a simulation model of the dense packing of large particulate assemblies*. Powder Technology 141 (1–2), S. 155–160, 2004.

- [SAHL04] K. SOBOLEV, A. AMIRJANOV, R. HERMOSILLO und F. C. LOZANO: *The Modeling of dense Packing of Aggregates as an Approach to Optimizing the Proportioning of Concrete Mixtures*. In *Asphalt Concrete, Portland Cement Concrete, Bases, and Fines – ICAR/AFTRE/NSSGA Symposium*. Denver, Colorado, 2004.
- [SCDS97] S. SASTRY, D. S. CORTI, P. G. DEBENEDETTI und F. H. STILLINGER: *Statistical geometry of particle packings. I. Algorithm for exact determination of connectivity, volume, and surface areas of void space in monodisperse and polydisperse sphere packings*. *Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* 56 (5), S. 5524–5532, 1997.
- [Sch56] F. SCHWANDA: *Der Bestwert der Kornzusammensetzung von Betonzuschlagstoffen*. *Der Bauingenieur* 31, S. 41–46, 1956.
- [Sch59] F. SCHWANDA: *Der Hohlraumgehalt von Korngemischen*. *beton* 9 (1), S. 12–19, 1959.
- [Sch02] P. SCHOLL: *Modellieren von Microclustern*. Dissertation, Universität Siegen, Fachbereich Mathematik, 2002.
- [Sch05] S. SCHULER: *Untersuchung granulometrischer Einflussfaktoren auf den Wasseranspruch von Gesteinsmehlkörnungen*. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2005.
- [Sco60] G. D. SCOTT: *Packing of Spheres: Packing of Equal Spheres*. *Nature* 188 (4754), S. 908–909, 1960.
- [SDLB86] T. STOVALL, F. DE LARRARD und M. BUIL: *Linear packing density model of grain mixtures*. *Powder Technology* 48 (1), S. 1–12, 1986.
- [SF03] M. SCHMIDT und E. FEHLING (Hg.): *Ultra-Hochfester Beton - Planung und Bau der ersten Brücke mit UHPC in Europa*, Bd. 2 von *Schriftenreihe Baustoffe und Massivbau*. kassel university press, Kassel, 2003.
- [SFG04] M. SCHMIDT, E. FEHLING und C. GEISENHANSLÜKE (Hg.): *Ultra High Performance Concrete (UHPC) – Proceedings of the International Symposium on UHPC*, Bd. 3 von *Schriftenreihe Baustoffe und Massivbau*. kassel university press, Kassel, 2004.
- [SG05] M. SCHMIDT und C. GEISENHANSLÜKE: *Optimierung der Zusammensetzung des Feinstkorns von Ultra-Hochleistungs- und von Selbstverdichtendem Beton*. *beton* 5, S. 224–235, 2005.
- [She97] J. D. SHERWOOD: *Packing of spheroids in three-dimensional space by random sequential addition*. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 30 (24), S. L839–L843, 1997.

- [SK69] G. D. SCOTT und D. M. KILGOUR: *The density of random close packing of spheres*. Journal of Physics D: Applied Physics 2 (6), S. 863–866, 1969.
- [SKM95] D. STOYAN, W. S. KENDALL und J. MECKE: *Stochastic Geometry and its Applications*. 2. Aufl. John Wiley & Sons, Chichester, 1995.
- [Slo84] N. J. A. SLOANE: *The Packing of Spheres*. Scientific American 250, S. 116–125, 1984.
- [SMC⁺07] P. SZABÓ, M. MARKÓT, T. CSENDES, E. SPECHT, L. CASADO und I. GARCÍA: *New Approaches to Circle Packing in a Square*, Bd. 6 von *Springer Optimization and Its Applications*. Springer-Verlag New York, Secaucus, NJ, USA, 2007.
- [SPGT98] S. SACHDEV, C. J. J. PAREDIS, S. K. GUPTA und S. N. TALUKDAR: *3D Spatial Layouts Using A-Teams*. In *Proceedings of 1998 ASME Design Engineering Technical Conferences*. DETC98/DAC-5628, Atlanta, Georgia, 1998.
- [SS94] D. STOYAN und H. STOYAN: *Fractals, Random Shapes and Point Fields*. John Wiley & Sons, Chichester, 1994.
- [SS95] P. L. SPEDDING und R. M. SPENCER: *Simulation of packing density and liquid flow in fixed beds*. Computers & Chemical Engineering 19 (1), S. 43–73, 1995.
- [SS00] D. STOYAN und M. SCHLATHER: *Random Sequential Adsorption: Relationship to Dead Leaves and Characterization of Variability*. Journal of Statistical Physics 100 (5), S. 969–979, 2000.
- [Sti82] H. STIENEN: *Die Vergrößerung von Karbiden in reinen Eisen-Kohlenstoff Stählen*. Dissertation, RWTH Aachen, 1982.
- [Sto02] D. STOYAN: *Simulation and Characterization of Random Systems of Hard Particles*. Image Analysis & Stereology 21 (1), S. 41–48, 2002.
- [SY07] S. SHIRIÄ und J. YLIRUUSI: *Particle packing simulations based on Newtonian mechanics*. Powder Technology 174 (3), S. 82–92, 2007.
- [SYS03] Y. STOYAN, G. YASKOV und G. SCHEITHAUER: *Packing of various radii solid spheres into a parallelepiped*. Central European Journal of Operational Research 11 (4), S. 389–408, 2003.
- [TBK76] W. TOUFAR, M. BORN und E. KLOSE: *Beitrag zur Optimierung der Packungsdichte polydisperser körniger Systeme*. Freiburger Forschungsheft 558, S. 29–44, 1976.
- [TCM06] M. TARINI, P. CIGNONI und C. MONTANI: *Ambient occlusion and edge cueing for enhancing real time molecular visualization*. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 12 (5), S. 1237–1244, 2006.

- [TCW68] E. M. TORY, N. A. COCHRANE und S. R. WADDELL: *Anisotropy in Simulated Random Packing of Equal Spheres*. Nature 220 (5171), S. 1023–1024, 1968.
- [TJ09] S. TORQUATO und Y. JIAO: *Dense packings of the Platonic and Archimedean solids*. Nature 460 (7257), S. 876–879, 2009.
- [TKB77] W. TOUFAR, E. KLOSE und M. BORN: *Berechnung der Packungsdichte von Korngemischen*. Aufbereitungs-Technik 11, S. 603–608, 1977.
- [Tok05] Y. C. TOKLU: *Aggregate Blending Using Genetic Algorithms*. Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering 20 (6), S. 450–460, 2005.
- [Tor06] S. TORQUATO: *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*, Bd. 16 von *Interdisciplinary Applied Mathematics*. 2. Aufl. Springer, New York, 2006.
- [TTD00] S. TORQUATO, T. M. TRUSKETT und P. G. DEBENEDETTI: *Is random close packing of spheres well defined?* Physical Review Letters 84 (10), S. 2064–2067, 2000.
- [Ulr00] T. ULRICH: *Loose Octrees*. In M. DELOURA (Hg.), *Game Programming Gems*, Bd. 1, Kap. 4.11, S. 444–453. Charles River Media, Boston, Massachusetts, 2000.
- [UWA⁺06] L. URI, T. WALMANN, L. ALBERTS, D. K. DYSTHE und J. FEDER: *Structure of plastically compacting granular packings*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 73 (5), S. 051301, 2006.
- [VB72] W. M. VISSCHER und M. BOLSTERLI: *Random Packing of Equal and Unequal Spheres in Two and Three Dimensions*. Nature 239, S. 504–507, 1972.
- [VC06] J. M. VALVERDE und A. CASTELLANOS: *Random loose packing of cohesive granular materials*. EPL (Europhysics Letters) 75 (6), S. 985–991, 2006.
- [VC07a] J. M. VALVERDE und A. CASTELLANOS: *Compaction of fine powders: from fluidized agglomerates to primary particles*. Granular Matter 9 (1), S. 19–24, 2007.
- [VC07b] J. S. VENETILLO und W. CELES: *GPU-based particle simulation with inter-collisions*. The Visual Computer 23 (9), S. 851–860, 2007.
- [vdz08] *Monitoring-Bericht 2004 - 2007: Verminderung der CO₂-Emissionen - Beitrag der deutschen Zementindustrie*. Verein Deutscher Zementwerke e.V., 2008.
- [Ver67] L. VERLET: *Computer „Experiments“ on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules*. Physical Review 159 (1), S. 98, 1967.

- [Wac06] M. WACKENHUT: *Fast Algorithms to simulate extremely polydisperse media*. Dissertation, Universität Stuttgart, Institut für Computerphysik, Fakultät Mathematik und Physik, 2006.
- [Wei98] J. R. WEIMAR: *Simulation with Cellular Automata*. Logos-Verlag, Berlin, 1998.
- [Wei04] D. A. WEITZ: *PHYSICS. Packing in the spheres*. Science 303 (5660), S. 968–969, 2004.
- [WFL03] Y. WU, Z. FAN und Y. LU: *Bulk and interior packing densities of random close packing of hard spheres*. Journal of Materials Science 38 (9), S. 2019–2025, 2003.
- [WL03] K.-E. WIRTH und M. LINSENBUHLER: *Elektrostatistisch unterstütztes Mischen feinkörniger Partikel*. Chemie Ingenieur Technik 75 (6), S. 701–704, 2003.
- [WP03] S. R. WILLIAMS und A. P. PHILIPSE: *Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 67 (5), S. 051301, 2003.
- [WP06] A. WOUTERSE und A. P. PHILIPSE: *Geometrical cluster ensemble analysis of random sphere packings*. The Journal of Chemical Physics 125 (19), S. 194709, 2006.
- [WZ09] R. WELLER und G. ZACHMANN: *Inner sphere trees for proximity and penetration queries*. In *Proceedings of Robotics: Science and Systems*. Seattle, USA, 2009.
- [XZ07] A. XI-ZHONG: *Discrete Element Method Numerical Modelling on Crystallization of Smooth Hard Spheres under Mechanical Vibration*. Chinese Physics Letters 24 (7), S. 2032–2035, 2007.
- [XZY04] J. Q. XU, R. P. ZOU und A. B. YU: *Packing structure of cohesive spheres*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 69 (3), S. 032301, 2004.
- [XZY07] J. Q. XU, R. P. ZOU und A. B. YU: *Analysis of the packing structure of wet spheres by Voronoi-Delaunay tessellation*. Granular Matter 9 (6), S. 455–463, 2007.
- [Yat48] F. YATES: *Systematic Sampling*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 241 (834), S. 345–377, 1948.
- [YFZY03] A. B. YU, C. L. FENG, R. P. ZOU und R. Y. YANG: *On the relationship between porosity and interparticle forces*. Powder Technology 130 (1-3), S. 70–76, 2003.
- [YMT96] A. YANG, C. T. MILLER und L. D. TURCOLIVER: *Simulation of correlated and uncorrelated packing of random size spheres*. Physical

- Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 53 (2), S. 1516–1524, 1996.
- [YS87] A. B. YU und N. STANDISH: *Porosity calculations of multi-component mixtures of spherical particles*. Powder Technology 52 (3), S. 233–241, 1987.
- [YS88] A. B. YU und N. STANDISH: *An analytical-parametric theory of the random packing of particles*. Powder Technology 55 (3), S. 171–186, 1988.
- [YS91] A. B. YU und N. STANDISH: *Estimation of the porosity of particle mixtures by a linear-mixture packing model*. Industrial & Engineering Chemistry Research 30 (6), S. 1372–1385, 1991.
- [YSM93] A.-B. YU, N. STANDISH und A. MCLEAN: *Porosity Calculation of Binary Mixtures of Nonspherical Particles*. Journal of The American Ceramic Society 76 (11), S. 2813–2816, 1993.
- [Yu04] A. B. YU: *Discrete element method: An effective way for particle scale research of particulate matter*. Engineering Computations 21 (2/3/4), S. 205–214, 2004.
- [YWS06] Y.-B. YI, C.-W. WANG und A. M. SASTRY: *Compression of Packed Particulate Systems: Simulations and Experiments in Graphitic Li-ion Anodes*. Journal of Engineering Materials and Technology 128 (1), S. 73–80, 2006.
- [YXBI+08] G. YE, H. XIN, Z. BAO-LIN, M. BAO-GUO und Z. HONG-BO: *Method for calculating packing density of powder particles in paste with continuous particle size distribution*. Powder Technology 187, S. 88–93, 2008.
- [YZS96] A. B. YU, R. P. ZOU und N. STANDISH: *Modifying the Linear Packing Model for Predicting the Porosity of Nonspherical Particle Mixtures*. Industrial & Engineering Chemistry Research 35 (10), S. 3730–3741, 1996.
- [YZY00] R. Y. YANG, R. P. ZOU und A. B. YU: *Computer simulation of the packing of fine particles*. Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 62 (3), S. 3900–3908, 2000.
- [YZY03] R. Y. YANG, R. P. ZOU und A. B. YU: *Effect of material properties on the packing of fine particles*. Journal of Applied Physics 94 (5), S. 3025–3034, 2003.
- [YZYC06] R. Y. YANG, R. P. ZOU, A. B. YU und S. K. CHOI: *Pore structure of the packing of fine particles*. Journal of Colloid and Interface Science 299 (2), S. 719–725, 2006.
- [Zha06] W. ZHANG: *Experimental and Computational Analysis of Random Cylinder Packings with Applications*. Dissertation, Louisiana State Uni-

versity and Agricultural and Mechanical College, The Cain Department of Chemical Engineering, 2006.

- [ZL08] J. ZHAO und S.-X. LI: *Numerical Simulation of Random Close Packings in Particle Deformation from Spheres to Cubes*. Chinese Physics Letters 25 (11), S. 4034–4037, 2008.