

## Simulation und Optimierung

# Simulation und Optimierung der Raumaufüllung von Korngrößenverteilungen

S. Raschdorf, D. Wäsch

### Problemstellung:

## Hohe Raumaufüllung eines Partikelgemischs

Viele moderne Baustoffe wie etwa Ultra-Hochleistungsbeton bieten eine enorme Festigkeit, die nicht zuletzt auf die gute Raumaufüllung aller Ausgangsstoffe zurückzuführen ist. So wird insbesondere dann eine hohe Packungsdichte erzielt, wenn kleinere Körner die Lücken zwischen größeren Partikeln ausfüllen, ohne diese jedoch zu weit auseinanderzuschieben.

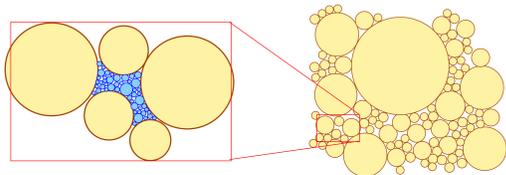


Abbildung 1: Lückenausfüllung.

Ziel ist es, eine Korngrößenverteilung zu ermitteln, die möglichst hohe Raumaufüllung gewährleistet. Dabei wird zur Vereinfachung zunächst von kugelförmigen Partikeln ausgegangen, so dass das Ziel darin besteht, eine Kugelradien-Häufigkeitsverteilung zu ermitteln, die bei zufälliger Anordnung der Kugeln eine möglichst hohe Packungsdichte erlaubt.

### Modellierung:

## Simulation des Packungsdichte

Ein erster Schritt zur computergestützten Optimierung der Betonzusammensetzung ist die schnelle und zuverlässige Bestimmung der Packungseigenschaften wie Dichte oder Kontaktzahl der Partikel zu einer gegebenen Korngrößenverteilung. Eine Optimierung der Verteilung kann dann mit Hilfe moderner heuristischer Suchmethoden erfolgen.

Haben alle Kugeln identischen Durchmesser (monodispers), so erlaubt die stochastische Geometrie Aussagen zur Packungsdichte einer sehr großen Anzahl von Kugeln. Für den Fall unterschiedlicher Kugelradien ist man auf Experimente oder Simulation angewiesen. Ein Simulationsprogramm muss dazu folgende Anforderungen erfüllen:

- Beherrschung sehr großer Partikelmen-gen (> 100.000),
- Handhabung enormer Größenunterschiede der Partikel (von Hundertstel Mikrometern bis wenigen Zentimetern),
- eine schnelle Kollisionserkennung,
- periodische Randbedingungen,
- Visualisierung der Ergebnisse.

Zu diesem Zweck ist ein Simulationsprogramm entstanden, das die Raumaufüllung einer gegebenen Kugelradienverteilung in einem würfelförmigen Container nachbildet. Die so ermittelten Werte können als eine erste Annäherung an Werte realer Mischungen angesehen werden.

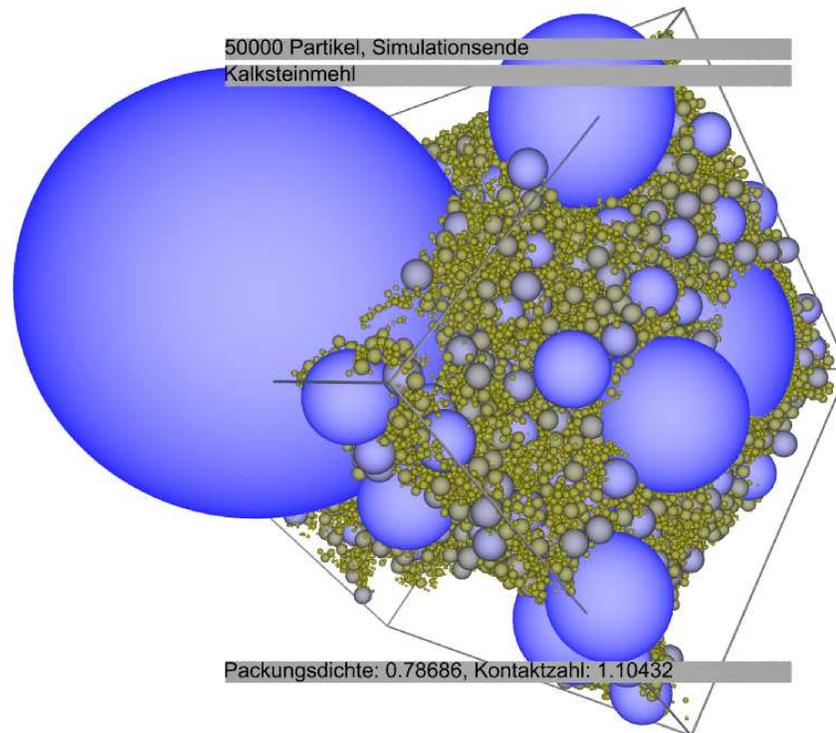


Abbildung 2: Polydisperse Mischung

### Umsetzung:

## Collective Rearrangement

Zunächst werden die Kugeln durch einen schnellen **Random Sequential Adsorption**-Algorithmus zufällig in einem Container platziert. Dieser bietet (absichtlich) zu wenig Platz, sodass sich die Kugeln überlappen. Durch mehrere Platzierungsversuche pro Kugel und Auswahl derjenigen Position mit der wenigsten Überlappung werden bereits an dieser Stelle die stärksten Überlappungen beseitigt. Die Kugelmenge unterzieht sich nun einem **Collective Rearrangement**-Algorithmus, d. h. sämtliche Kugeln werden immer wieder neu angeordnet. Die vorhandenen Überschneidungen der Kugeln dienen dabei als Kräfte in einem Abstoßungsvorgang und werden nach und nach aufgelöst, bis die Überlappungsrate unter einen vorgegebenen Schwellwert sinkt, vgl. Abb. 3.

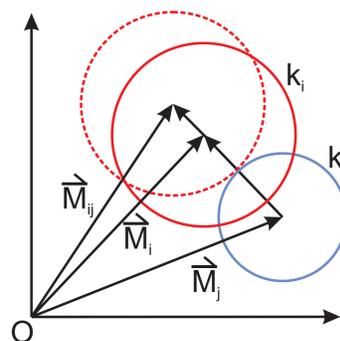


Abbildung 3: Auflösen einer Überlappung durch Abstoßung der roten Kugel.

Zusätzlich wird der Container nach einiger Zeit vergrößert, damit ein weiterer Abbau der Überlappung möglich wird. Die Schrittweite der Vergrößerung passt sich dynamisch der aktuellen Überlappungsrate an. Dieser allmähliche Abbau der Überlappung führt zu einer besonders gleichmäßigen Verteilung der Leerräume zwischen den Kugeln.

## Hierarchische Simulation mehrerer Fraktionen

Um die starken Unterschiede der Korngrößen und -anteile in der Simulation nachzubilden, müssten für jede große Kugel Millionen kleinster Kugeln in der Kugelmengenge enthalten sein. Um die Laufzeit der Simulation zu begrenzen, wird die Gesamtkugelmengenge in mehrere Kornfraktionen aufgeteilt, die getrennt simuliert werden. Begonnen wird mit den kleinsten Kugeln. Für jede anschließende Fraktion müssen die vorherigen Fraktionen berücksichtigt werden. Dies geschieht, indem deren Raumaufüllung auf den Porenraum der aktuellen Fraktion angerechnet wird.

## Abgleich mit Experimenten

Parallel zur virtuellen Anordnung der Kugelpackung werden reale Gemische (z. B. Glas-kugeln in 5 Größen) im Labor vermessen, um die Simulation zu „kalibrieren“. Es können jetzt Vorhersagen für die Raumaufüllung einfacher Gemische gemacht werden, die nur wenige Prozent von den realen Werten abweichen.

### Kooperationen:

## Werkstoffwissenschaften

Diese Arbeit ist Teil des Projekts „Kombinierte Korngrößen- und Phasenoptimierung von Hochleistungsbindemitteln“, das zusammen mit dem Institut für Nichtmetallische Werkstoffe (Prof. Dr. A. Wolter) durchgeführt und von der Dyckerhoff-Stiftung mit zwei Forschungsstipendien gefördert wird. Im Bereich der Visualisierung werden die Arbeiten vom Institut für Informatik der TU Clausthal unterstützt.