

Simulation von stark polydispersen zufällig dichten Kugelpackungen

Dipl.-Inf. Stephan Mock, Prof. Dr. M. Kolonko – Institut für Angewandte Stochastik und Operations Research

Problemstellung

Beton ist einer der vielseitigsten und leistungsfähigsten Baustoffe. Aktuell wird an sogenannten ultrahofesten Betonen (engl. Ultra High Performance Concrete) geforscht, die eine Druckfestigkeit erreichen können, die dem von Stahl nahe kommt. Diese Eigenschaften erreicht man durch Mischungen, deren Partikel im trockenen Zustand eine möglichst hohe Packungsdichte aufweisen. Der experimentelle Aufwand zur Entwicklung solcher Rezepturen ist hoch, doch er kann mit Methoden der Mathematik und Informatik erheblich verringert werden. Dank ausgefeilter Simulationen können die Eigenschaften von Partikelpackungen virtuell am Computer ermittelt werden.

Modellierung

Für die Simulation beschränken wir uns darauf, alle Partikel der Mischung als Kugeln darzustellen, eine Rezeptur besteht dann nur noch aus einer Korngrößenverteilung. Um aus den Kugeln eine Packung wie in Abbildung 1 zu erzeugen, wird ein so genannter Collective-Rearrangement Algorithmus eingesetzt. Aus Vergleichen mit realen Glaskugelpackungen ist bekannt, dass dieser Algorithmus Kugelpackungen sehr realistisch simulieren kann. Die Korngrößenverteilungen von Betonmischungen werfen jedoch einige Probleme auf, die in der Simulation berücksichtigt werden müssen.

Fraktionierung

Die Partikelgrößen in Betonmischungen variieren zwischen weniger als $1\mu\text{m}$ bis hin zu 3cm , wobei die relative Häufigkeit der Partikel mit zunehmender Größe abnimmt. Bei so extremen Korngrößenverteilungen kann eine repräsentative Stichprobe leicht mehr als 10^{15} Partikel umfassen und würde damit die Möglichkeiten aktueller Hardware überfordern. Die Lösung liegt in der Unterteilung der Korngrößenverteilung in mehrere kleine Fraktionen, die dann unabhängig voneinander simuliert werden können.

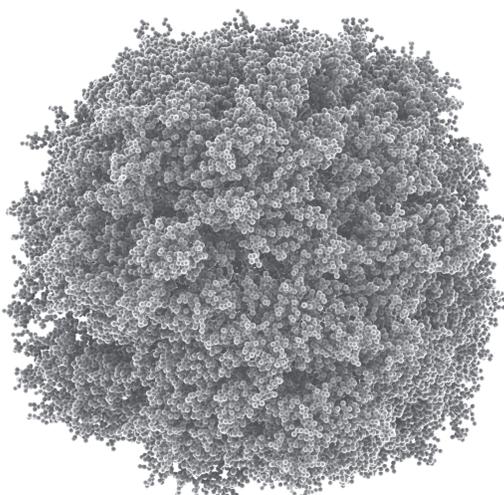


Abbildung 3: Vergleich DLA-Cluster aus 100.000 Kugeln und Mikrosilika-Agglomerat

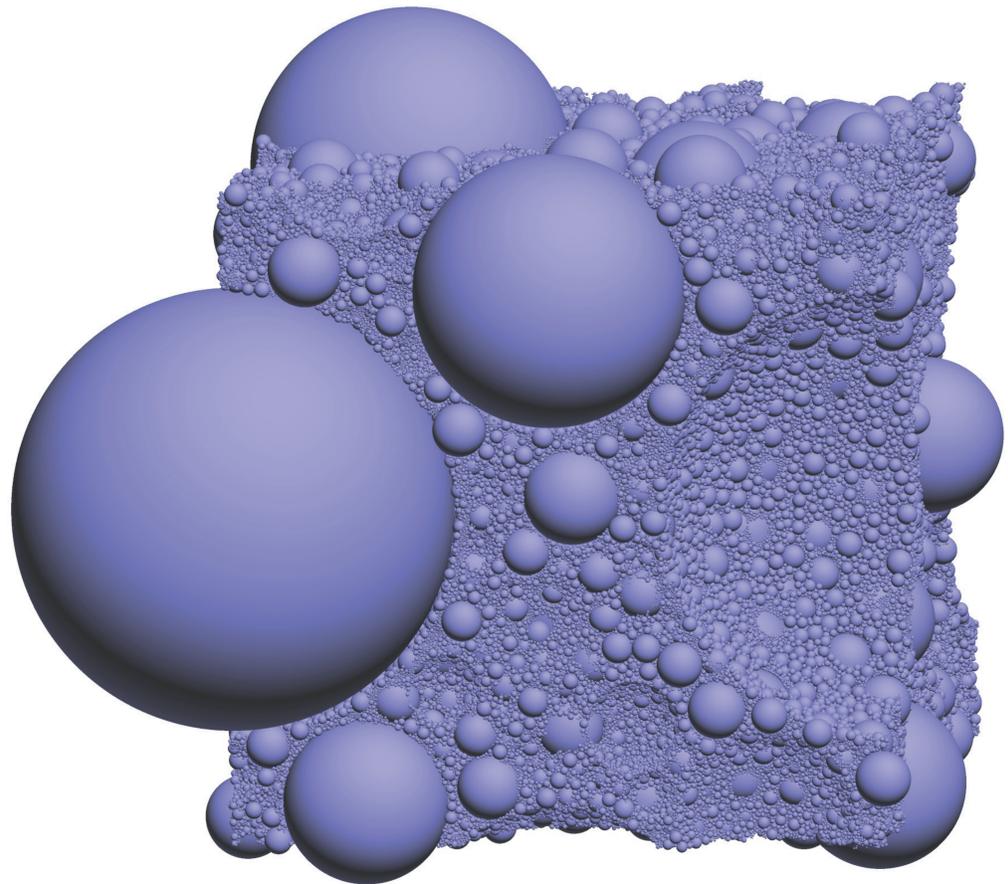


Abbildung 1: Packung aus 1 Mio. Kugeln (Packungsdichte: 0,86)

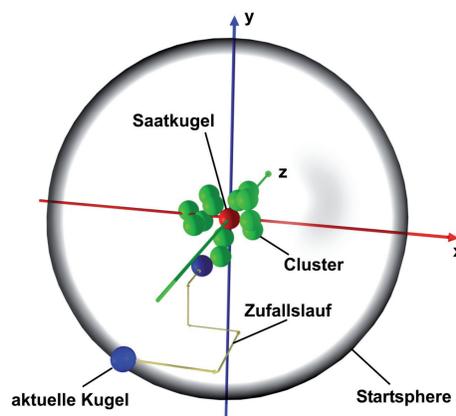
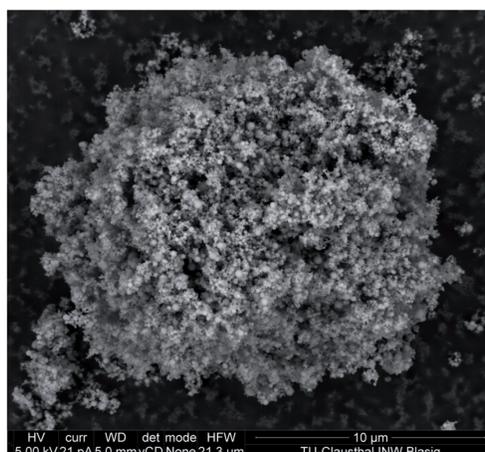


Abbildung 2: Prinzip des DLA-Algorithmus



Die Interaktionen zwischen den einzelnen Fraktionen werden durch so genannte Randkugeln gewährleistet, die jeder Fraktion zugesetzt werden. Aus den einzelnen Simulationsergebnissen kann zum Schluss die Gesamtpackungsdichte ermittelt werden.

Agglomeration

Ein weitere Besonderheit der Korngrößenverteilungen von Betonmischungen ist die Agglomeration, bei der sich feine Partikel durch Anziehungskräfte zu größeren Aggregaten zusammenschließen. Dabei können stark verzweigte, fraktalartige Strukturen entstehen. Um die Eigenschaften solcher Strukturen und ihre Wirkung innerhalb der Packung untersuchen zu können, müssen sie virtuell nachgebaut werden. Dies kann mit Hilfe der Diffusion-Limited-Aggregation Algorithmen geschehen, deren Wirkungsweise in Abbildung 2 illustriert wird. Sie erzeugen Partikelcluster wie in Abbildung 3, die - genau wie reale Agglomerate - eine sehr geringe innere Dichte aufweisen.

Kooperation

Dieses Projekt wird in Kooperation mit dem Institut für nichtmetallische Werkstoffe, mit den Mitarbeitern Prof. A. Wolter und Dipl. Chem. Th. Bohne, durchgeführt. Die Finanzierung erfolgt über Stipendien, die von der Dyckerhoff-Stiftung vergeben werden.