

1.1 RaSim: Bestimmung der Raumausfüllung von Partikelmischungen unter Einbeziehung von Agglomeration

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

Darstellung des Projekts

Granulare Medien sind in zahlreichen Forschungsgebieten und in der Industrie von hohem Interesse, sei es die Tablettierung in der Pharmazeutik, das Kollektivverhalten der Partikel in Gerölllawinen, oder die Herstellung leistungsfähiger Werkstoffe aus metallischen Rohstoffen, keramischen Pulvern und natürlichen Baustoffen in den Materialwissenschaften. So sind gerade die Bindemittelsysteme ein Beispiel für komplexe Zusammenhänge zwischen der Komposition der Ausgangsmaterialien und den Kenngrößen des Endprodukts [1]. Die vereinfachte Grundannahme lautet: Je dichter sich die Partikel in einer gemischten granularen Schüttung anordnen lassen, desto höher kann die Festigkeit des fertigen Baustoffs (Gips, Mörtel, Beton) getrieben werden.

Die Entwicklung solcher Mischungen ist bisher mit erheblichem experimentellen Aufwand verbunden, da verschiedene Mischungen hergestellt und im Labor auf ihre Raumausfüllung



Abbildung 1: Polydisperse Packung mit 1 Million Kugeln. (Alle Packungsbilder erstellt mit einer modifizierten Version von QuteMol [2].)

hin untersucht werden müssen. Daher ist man bestrebt, durch den Einsatz von Simulations- und Optimierungstechniken einen möglichst großen Teil dieser Arbeiten auf den Rechner zu verlagern. Gleichzeitig wird man dadurch in die Lage versetzt, einen wesentlichen größeren Raum möglicher Mischungen aus gegebene Stoffen abzusuchen. Im Idealfall sollten nach Abschluss der Simulation und Optimierung lediglich wenige experimentelle Überprüfungen der besten gefundenen Mischungen erforderlich sein.

Stand der Forschung

Zur Bestimmung der Packungsdichte einer Partikelmischung mit bekannter Korngrößenverteilung existieren zwei grundsätzlich verschiedene Ansätze: Die ältere Methode der analytisch-empirischen Packmodelle betrachtet die Mischung als Kontinuum, um aus repräsentativer Korngröße sowie Eigenpackungsdichte einer jeden Komponente eine (rekursive) Formel für die Packungsdichte der Gesamtmischung herzuleiten. Durch sukzessive Hinzunahme von Komponenten können prinzipiell beliebig komplexe Mischungen untersucht werden, wobei die Interaktion zwischen Partikeln unterschiedlicher Kornfraktionen durch zuvor empirisch bestimmte Variablen abgebildet wird. Diese Faktoren sind für jedes Stoffsysteem individuell zu bestimmen, sodass eine Einsparung bezüglich der experimentellen Laborarbeit nur dann erfolgen kann, wenn die Komponenten der Zielmischung feststehen und lediglich deren Anteilsverhältnisse an der Mischung variieren können.

Eine Alternative hierzu stellen die mit zunehmender Leistungsfähigkeit der Rechner populärer gewordenen Partikelsimulationen dar. Hier wird die Mischung nicht als Kontinuum betrachtet, sondern als Zusammenspiel einer Vielzahl von eigenständigen Objekten, den Partikeln. 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 und überproportional von der Anzahl der verwendeten Partikel abhängt. Um diese zu beherrschen wird daher meist auf die sonst in DEM-Simulationen übliche Berücksichtigung interpartikulärer Kräfte verzichtet und lediglich die geometrische Anordnung simuliert; eine weitere Vereinfachung ist die Approximation der Partikelform durch eine

Kugel. Die am häufigsten verwendeten Verfahren sind Random Sequential Addition (RSA) und Collective Rearrangement (CR). RSA-Algorithmen zeichnen sich durch eine sequentielle Abarbeitung der Kugeln aus. Eine einmal in der Packung 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 validen, d.h. überlappungsfreien, Zustand befindet.

Wird die Anordnung der Kugeln in jedem Iterationsschritt eines Algorithmus immer wieder (leicht) verändert, indem mehrere oder alle Kugeln verschoben werden, so handelt es sich um das CR-Verfahren. Im Gegensatz zum RSA-Ansatz kann hier jede Kugel bis zum Ende des Packungsprozesses bewegt werden, wodurch sich die Möglichkeit ergibt, auch zwischenzeitlich auftretende Lücken durch hineindringende Kugeln wieder aufzufüllen. Diese hohe Dynamik erfordert jedoch einen deutlich größeren Rechenaufwand als bei RSA-Verfahren. Typisch für CR-Algorithmen ist außerdem die Relaxation bestimmter Anforderungen der Packung während des Packprozesses; so sind zunächst meist Überlappungen erlaubt, die dann sukzessive abgebaut werden.

Eine der größten Herausforderungen auf dem betrachteten Gebiet der Baustofftechnologie stellt die enorme Polydispersität der Partikel dar, die sich über etliche Größenordnungen vom Submikrometerbereich feinster Zusatzstoffe bis zu zentimetergroßen Kiespartikeln erstreckt. Bereits analytisch-empirische Modelle büßen bei Betrachtung eines solch breiten Intervalls einiges an Genauigkeit ein, doch teilchenbasierte Simulationen stehen vor dem noch gewaltigeren Problem, eine für die größten Partikel ausreichende Simulationsdomäne bereitzustellen, die es dicht aufzufüllen gilt, während gleichzeitig die vorgegebenen Anteile der unterschiedlichen Kornfraktionen an der Gesamtmischung gewahrt bleiben müssen.

Forschungsbeitrag

Im Rahmen der Dissertation Raschdorf [4] wurde das Simulationsystem RaSim zur Simulation der Raumausfüllung von Par-

tikelmischungen entwickelt. Das System wird gegenwärtig in einer Anschlussarbeit um einige wichtige Komponenten erweitert. Im Folgenden werden einige der wesentlichen Aspekte des Systems RaSim geschildert.

Sampling + Hierarchisierung der Fraktionen

Eine geschickte Einteilung des gesamten Korngrößenintervalls einer Mischung in separate, unabhängig voneinander zu simulierende Intervalle, sog. Fraktionen, macht die Komplexität der Simulation beherrschbar. So bilden die Partikel der feinsten Fraktion für sich genommen eine dichte Packung, die wiederum als „Füllmasse“ für die Lücken zwischen den Partikeln der nächstgrößeren Fraktion dient. Um fraktionsübergreifende Modellierung zu unterstützen, wird im Simulationslauf jeder Fraktion eine zusätzliche Selektion größerer Partikel mitgeführt. Diese großen Partikel wirken sich als eine Art innerer Wandbereich auf die Dichte der Packung aus, indem die Raumausfüllung an diesen Rändern abgesenkt wird.

Die simulierten Packungsdichten auf der Ebene der einzelnen Fraktionen werden am Ende zu einer aggregierten Raumausfüllung der Gesamtmasse vereinigt. Der iterative Prozess eignet sich zur Umsetzung auf parallelen Rechnerarchitekturen; darüber hinaus kann durch Prüfen von Abbruchbedingungen ein schnellerer Simulationserfolg erzielt werden, ohne sämtliche Fraktionen explizit simulieren zu müssen.

Die Auswahl der in einer Fraktion zu verwendenden Partikel-durchmesser kann durch verschiedenste Samplingalgorithmen umgesetzt werden, solange die Repräsentativität der Stichprobe sichergestellt wird. Deren Kennlinie sollte möglichst stark dem Ausschnitt der Original-Korngrößenverteilung ähneln. Nach diversen Tests hat sich ein deterministisches Samplingverfahren als schnell und von ausreichender Güte erwiesen.

CR-Simulation mit dynamischer Containergröße

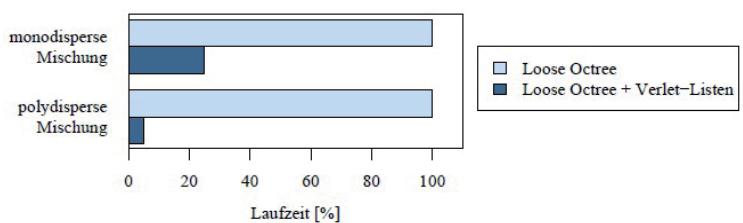
Die Simulation einer Partikelpackung auf Fraktionsebene erfolgt auf Basis eines CR-Algorithmus [3], bei dem die Kugeln initial in einem kleinen Container überlappend platziert werden. Bereits während der Platzierungsphase wird auf eine gleich-

mäßige Verteilung der Kugelüberlappungen geachtet, was die folgenden Iterationsschritte deutlich beschleunigt. Diese entfernen sukzessiv alle Überlappungen und lassen die Kugeln die noch freien Lücken im Container explorieren. Gleichzeitig sorgt eine Ablaufsteuerung unter Berücksichtigung des aktuellen Fortschritts für eine schrittweise Vergrößerung des Containers. Hier ist ein sensibles Vorgehen gefragt, sorgen große Schritte doch für eine schnellere Konvergenz, während kleine Schritte hingegen eine dichtere Packung erzeugen können. Einen guten Kompromiss unter Beibehaltung einer adäquaten Schrittweite bietet die Option der erneuten Containerverkleinerung, sobald eine überlappungsfreie Packung erreicht wurde. So wird der CR-Prozess im Prinzip neu angestoßen, nur mit einer „vorverdichteten“ Kugelanordnung, die sehr gleichmäßige Überlappungen enthält. Diese Schleife kann abhängig vom Ressourceneinsatz beliebig oft wiederholt werden.

Loose Octree + Verlet-Listen

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. Der Loose Octree erwies sich letztendlich als geeignete Wahl, um den Anforderungen extrem polydisperser Mischungen gerecht zu werden: Er partitioniert die Simulationsdomäne auf hierarchische Weise in Würfel unterschiedlicher Größe. Diese sind als Knoten in einer Baumstruktur organisiert, von denen jeder nur seinen Vater- sowie seine 8 Kindknoten kennt und zudem auf die jeweils enthaltenen Kugeln referenziert. Diese Hierarchie über mehrere Größenordnungen korrespondiert sehr gut mit der Polydispersität der betrachteten Partikelmischungen, was die deutlichen Geschwindigkeitsvorteile gegenüber der Benutzung regulärer Gitter (wie sie etwa in der Molekulardynamik verwendet werden) begründet.

Abbildung 2: Performance-Gewinn durch Benutzung von Verlet-Listen, betrachtet für eine mono- und eine polydisperse Mischung aus jeweils 10.000 Kugeln.



Die Effizienz der Simulation ließ sich durch den Einsatz von Verlet-Listen noch weiter steigern. Diese wirken wie ein Cache und speichern die lokale Nachbarschaft einer jeden Kugel. Deren zeitliche und räumliche Kohärenz während der CR-Simulation ermöglichte es außerdem, ein bewegungsabhängiges Aktualisierungsintervall für die Verlet-Listen zu implementieren, so dass diese immer eine Obermenge der tatsächlich in Kontakt stehenden Kugeln enthalten.

Alternative Partikelformen

Während das Kugelmodell für einige wenige Stoffe (z. B. Flugasche) eine gute Approximation darstellt, so gibt es viele weitere Materialien, deren Partikel eine von der Kugelform mehr oder weniger deutlich abweichende Gestalt besitzen. Die Annäherung dieser Form erfolgt im Simulationsprogramm nach einem konstruktiven Ansatz, bei dem mehrere Kugeln zu einem Kugelcluster zusammengefasst werden und so gemeinsam ein Partikel bilden. Ein wichtiger Aspekt ist dabei die Fähigkeit zur Bildung beliebiger Partikelformen, zugleich mussten jedoch Konzepte wie Nachbarschaft und überlappungsbasierte Verschiebung der Cluster adaptiert werden.

Die Positionen der Kugeln innerhalb eines Partikels sind im entstandenen 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. 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.

Neben der Translation sind die zusammengesetzten Partikel auch der Rotation ausgesetzt. Hier wird jedes Partikel um seinen eigenen Mittelpunkt gedreht, wobei die Rotation ein Resultat der Drehmomente ist, denen das Partikel durch äußere Überlappungen seiner Kugeln mit anderen Partikeln ausgesetzt ist.

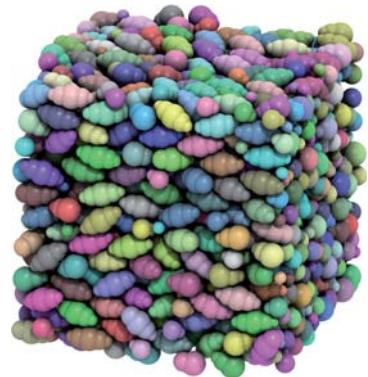


Abbildung 3: Periodische Randbedingungen: Ellipsoide gleichen ihre Achsenausrichtung einander an.



Abbildung 4: Packung aus Würfeln, die sich an den Containerwänden ausrichten.

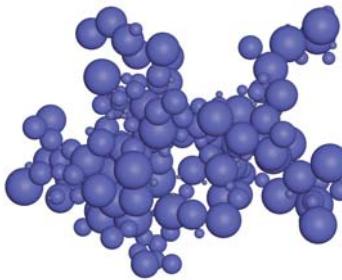


Abbildung 5: Ein mittels DLA-Algorithmus erzeugter Kugel-Cluster aus 200 Partikeln

Agglomeration

Die Agglomeration ist eine Zusammenfassung aller Prozesse, bei denen eine Verschiebung der Korngrößenverteilung von den feinen hin zu den größeren Partikelgrößen stattfindet. Ausgelöst wird dies durch interpartikuläre Kräfte, die zu einem Anhaften kleinerer Partikel und so zur Bildung größerer Strukturen führt. In der Verfahrenstechnik wird die Agglomeration unter anderem benutzt, um den Transport und die Lagerung von feinen granularen Stoffen zu erleichtern. Beispiele dafür sind das Tablettieren, Brikettieren oder Pelletieren. Bei der Entwicklung von Baustoffen ist die Bildung von Agglomeraten aber in der Regel unerwünscht, da sie der angestrebten hohen Raumausfüllung entgegenwirkt. Feine Partikel stehen nicht mehr als Füllmaterial für die Lücken zwischen den größeren Partikeln zur Verfügung, wenn sie zu Agglomeraten verbunden sind. Außerdem können Agglomerate aufgrund eines fraktal-artigen Aufbaus eine sehr geringe innere Raumausfüllung haben, was auch die Raumausfüllung der gesamten Mischung herabsetzt. Um auch die Bestimmung der Raumausfüllung von Mischungen mit sehr feinen Korngrößenbereichen zu ermöglichen, muss das Simulationsprogramm daher die Auswirkungen der Agglomeration in geeigneter Weise berücksichtigen.

Eine naheliegende Methode ist die Einführung eines Faktors, der das ermittelte Simulationsergebnis, abhängig vom in der Mischung enthaltenen Feinkornanteil, korrigiert. Der verwendete Packungsalgorithmus muss dafür nicht verändert werden. Die Schwierigkeit liegt in der Ermittlung dieses Faktors, er kann durch Regression aus einer Messreihe für eine bestimmte Mischung errechnet werden. Da aber jeder Stoff anders agglomiert, können die Ergebnisse nicht auf andere Mischungen übertragen werden.

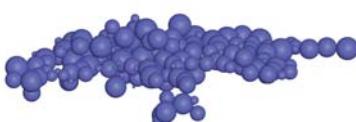


Abbildung 6: Ein mittels DLA-Algorithmus erzeugter, scheibenförmiger Kugel-Cluster

Eine andere Möglichkeit ist die Einbeziehung der Agglomeration in die Simulation. Die Verschiebung der Korngrößenverteilung kann in der Kugelpackung dadurch erreicht werden, dass kleinere, agglomerierende Kugeln gelöscht und durch größere Kugeln – die Agglomerate – ersetzt werden. Die geringere innere Raumausfüllung der Agglomerate kann entweder als zusätzliche Eigenschaft der Kugeln gespeichert

werden oder durch zusätzliche Kugeln, die als Hohlräume fungieren, dargestellt werden. Auch hier muss der Simulationsprozess selbst kaum verändert werden, es müssen lediglich unterschiedliche Arten von Kugeln verwaltet werden. Allerdings besteht auch hier das Problem, für einen gegebenen Stoff die Veränderung der Korngrößenverteilung genau zu bestimmen.

Eine weitere, realitätsnähtere Möglichkeit ist die Simulation der Agglomerate durch Kugelcluster. Dies erfordert einen höheren Aufwand, ermöglicht aber den direkten Vergleich mit der Mikrostruktur einer realen Packung. Da das Simulationsprogramm bereits in der Lage ist, von der Kugelform abweichende Partikel als Kugel-Cluster zu simulieren, können auch Agglomerate auf diese Weise behandelt werden. Um Kugel-Cluster mit den erforderlichen Eigenschaften zu generieren, wurde eine auf einem DLA-Algorithmus (diffusion limited aggregation) [7] basierende Software entwickelt. Dieser Algorithmus baut sequentiell ein Cluster auf, indem eine erste sogenannte Saatkugel im Koordinatenursprung platziert wird. Weitere Kugeln werden auf einer, den Cluster in ausreichendem Abstand umgebenden Startssphäre zufällig positioniert. Von dort aus vollführen sie einen Zufallslauf, der einen Diffusionsprozess simuliert, bis sie den Cluster berühren. Auf diese Weise entstehen fraktale Kugel-Cluster mit einer sehr geringen inneren Raumausfüllung. Neben der Einstellung der Anzahl an Kugeln, bietet die Software auch vielfältige Möglichkeiten weitere Parameter zu beeinflussen. Durch eine Änderung der Zufallsverteilung bei der Positionierung der Kugeln auf der Startssphäre, können z.B. Kugel-Cluster mit unterschiedlicher äußerer Form erzeugt werden (vgl. Abb. 7 und Abb. 8).

Ein Problem bei der Einfügung derartiger Agglomerate in das bestehende RaSim-System bildet gegenwärtig noch die Bewegung der Cluster während des Überlappungsabbaus. Die mit dem DLA-Algorithmus erzeugten fraktal-artigen Cluster haben die Neigung, sich mit ihren ‘Armen’ zu verhaken. Hier wird an einem hierarchischen Konzept gearbeitet, das zunächst grobe Bewegungen ohne Berücksichtigung der Feinstruktur des Agglomerats erlaubt und dann eine genauere lokale Bewegung vornimmt.

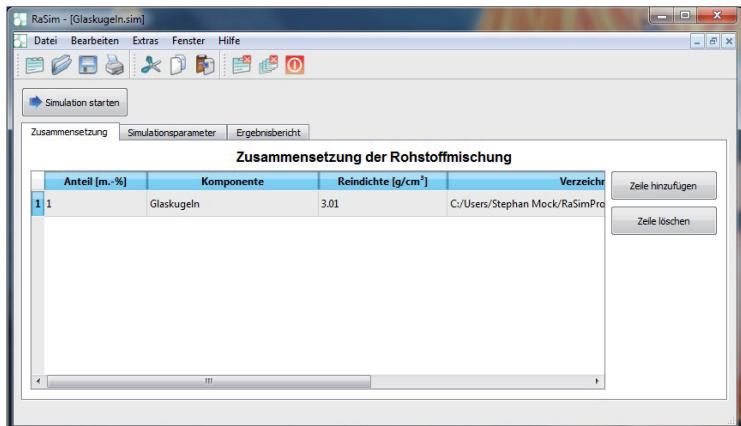


Abbildung 7: Grafische Benutzeroberfläche „RaSim“

Grafische Benutzeroberfläche

Im Rahmen der Weiterführung dieses Projektes wurde eine grafische Oberfläche für RaSim entwickelt. Dies stellt einen ersten Schritt auf dem Weg vom Simulationswerkzeug zum Anwendungsprogramm dar. Wie schon bei der Implementierung des Simulationsprogramms wurde auch hier auf Plattformunabhängigkeit geachtet. Um zukünftige Entwicklungen nicht zu erschweren, ist die grafische Oberfläche als separates Frontend zum eigentlichen Simulationsprogramm entwickelt worden, das weiterhin unabhängig gestartet werden kann. Über die grafische Oberfläche ist es möglich, alle für die Simulation relevanten Daten zu verwalten wie z.B. die Rohdaten der Ausgangsstoffe, die Parametereinstellungen für die Simulation und die Simulationsergebnisse. Ferner können Profile für verschiedene Personen oder Arbeitsbereiche angelegt werden und die Anzahl der benötigten Fraktionen können automatisch berechnet werden.

Über diese Programmversion ist es erstmals möglich, Simulationen durchzuführen ohne genauere Kenntnisse des Simulationsprogramms. Das Programm befindet sich bereits im Institut für Nichtmetallische Werkstoffe im Einsatz.

Fazit und Ausblick

Von der Modellierung bis zur Implementierung wurde in der aus dem Projekt entstandenen Dissertation [4] auf eine univer-

selle 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 die Raumausfüllungen beliebiger granularer Medien bestimmt werden können.

Die Einbeziehung nicht-kugelförmiger Partikel und von Partikel-Agglomeraten ist im Prinzip bereits jetzt möglich, hier ist jedoch noch einiges an Modellierungs- und Anpassungsarbeit zu leisten, um realitätsnahe Simulationen beliebiger Korngrößenverteilungen zu ermöglichen.

Die schnelle und genaue Simulation einer gegebene Korngrößenverteilung ist wiederum die Voraussetzung für die rechnergestützte Suche nach Partikelmischungen mit vorgegebener oder möglichst hoher Raumausfüllung. Diese Such- und Optimierungskomponente soll mit naturanalogen Verfahren wie genetischen Algorithmen arbeiten.

Beteiligte Partner

Dieses Projekt wird in enger Zusammenarbeit mit dem Institut für Nichtmetallische Werkstoffe (Prof. Dr. Wolter) und dem Institut für Informatik (Prof. Dr. G. Zachmann) an der TU Clausthal betrieben. Finanziert wird es durch mehrere Promotionsstipendien und weitere Fördermittel der Dyckerhoff-Siftung (Projekt-nummer T218/15631/2006).

Partikelpackungen, die mit dem hier vorgestellten Simulationsprogramm erzeugt wurden, befinden sich auch am Institut für Technische Mechanik sowie am Institut für Polymerwerkstoffe und Kunststofftechnik als Ausgangssituation für weitergehende Simulationen (Strömungsmechanik, FEM) im Einsatz.

Literatur

- [1] S. Palm: Optimierung der Raumausfüllung und der Komponentenverteilung von Multikompositzementen, Dissertation TU Clausthal, 2009.
- [2] M. Tarini, P. Cignoni, C. Montani: Ambient Occlusion and Edge Cueing for Enhancing Real Time Molecular Visuali-

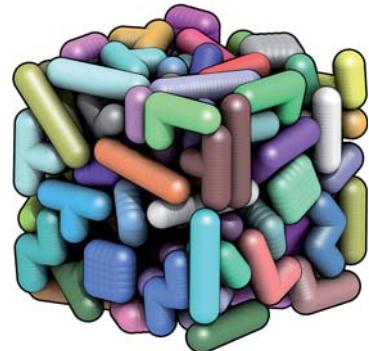


Abbildung 8: Tetris-artige Partikelformen demonstrieren die Möglichkeiten heteromerphrer Packungen.

- zation, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 12(5):1237-1244, 2006.
- [3] D. He, N. N. Ekere, L. Cai: Computer Simulation of random packing of unequal particles, Physical Review E, 60(6):7098-7104, 1999.
 - [4] S. Raschdorf: Bestimmung der Raumausfüllung von Partikelmischungen – Modelle und Datenstrukturen für die Simulation durch Kugelpackungen, Dissertation TU Clausthal, 2010.
 - [5] M. Kolonko, S. Raschdorf, D. Wäsch: A hierarchical approach to simulate the packing density of particle mixtures on a computer, Granular Matter, 12(6):629-643, 2010. Web: <http://dx.doi.org/10.1007/s10035-010-0216-5>
 - [6] S. Raschdorf, M. Kolonko: A comparison of data structures for the simulation of polydisperse particle packings, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 85(5):625-639, 2011. Web: <http://dx.doi.org/10.1002/nme.2988>
 - [7] P. Meakin: Progress in DLA research, Physica D, 86:104-112, 1995