

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

Steffen Raschdorf

14. Dezember 2009

Eine beständige Herausforderung für die Betonhersteller sind die wachsenden Erfordernisse an die Festigkeit des Baumaterials. Verbesserungen werden hier speziell durch fein abgestimmte Korngrößenverteilungen erzielt, die sich typischerweise durch eine hohe Polydispersität auszeichnen. Die Bestimmung optimaler Verteilungen ist mit hohem labortechnischen Aufwand verbunden; die vorliegende Arbeit stellt daher Methoden vor, die diesen Aufwand mittels automatischer Simulation umgehen.

Eine dichte granulare Packung kann neben der Behandlung als Kontinuum insbesondere auch durch diskrete Partikel modelliert werden. In der stochastischen Geometrie lassen sich hierzu verschiedene Punktprozesse analysieren, die jedoch bei genauer Betrachtung für praxisrelevante Packungsdichten ungeeignet scheinen. Stattdessen konnten sich in den letzten Jahrzehnten gerade in der Baustoffforschung empirische Modelle durchsetzen, die aufbauend auf einer analytischen Methodik Formeln zur Abschätzung der Packungsdichte beliebiger Stoffmischungen entwickeln. Die Essenz einer solchen Formel besteht in der Regel aus den Erkenntnissen unzähliger Versuchsreihen im Labor, da nur durch die Einbeziehung möglichst umfassender Daten auf die Eigenschaften noch unbekannter Mischungen geschlossen werden kann.

Zur Umgehung dieses Arbeitsaufwands wird daher ein hierarchisches Modell präsentiert, das die zu analysierende Korngrößenverteilung in Fraktionen einteilt, um deren Packungsdichten sequenziell per Simulation zu bestimmen. Basierend auf der Unterscheidung, ob das Packungsskelett einer Fraktion genügend Lücken für die Aufnahme aller Fraktionen feinerer Korngrößen aufweist oder aber durch diese auseinandergedrückt wird, lässt sich rekursiv die Raumausfüllung der Gesamtpackung berechnen.

Trotz der „Divide-and-Conquer“-Strategie stellt die noch immer hohe Polydispersität der einzelnen Fraktionen hohe Anforderungen an die Simulation, weshalb die Partikel vereinfachend durch Kugeln modelliert werden; die jeweilige Packung begrenzt ein würfelförmiger Container. Eine eingehende Untersuchung verschiedener Simulationsansätze zeigt anschließend die Tauglichkeit einer „Collective Rearrangement“ genannten Klasse von Verfahren, bei denen initial überlappende Kugeln durch einen Abstoßungsprozess in eine dichte Anordnung überführt werden.

Es stellt sich jedoch ein hoher Berechnungsaufwand heraus, der mehrheitlich auf den Flaschenhals der Ermittlung benachbarter Kugeln zurückzuführen ist. Der „Loose Octree“ erweist sich im folgenden Vergleich mehrerer Datenstrukturen als ideal für die räumliche Verwaltung der Kugeln. Flankiert wird er von sogenannten „Verletlisten“, die als Cache wirken und so den Schnelzugriff auf die gesuchten Kugeln ermöglichen.

In zusätzlichen Kapiteln widmet sich diese Arbeit der Bestimmung weiterer Packungseigenschaften wie der Ortsabhängigkeit der Packungsdichte in der Nähe der Containerwand, beschreibt in einer Literaturübersicht einen Querschnitt der Modellierung komplexer, von der Kugelgestalt abweichender Partikelformen und schlägt verschiedenste Lösungsansätze vor, um die Problematik der agglomerierenden und somit die Raumausfüllung mindernden Feinstpartikel in der Simulation abzubilden.

Als maßgeblicher Teil einer Bewertungsfunktion ermöglicht die zukünftig automatisierte Bestimmung der Raumausfüllung mit Hilfe der hervorgebrachten Simulationssoftware schließlich eine extensive Optimierung von Partikelmischungen. Auf diese Weise kann auch die für die Baustoffindustrie allgegenwärtige Reduktion der CO<sub>2</sub>-Emission durch Klinkersubstitution adressiert werden.